

wwPDB NMR Structure Validation Summary Report (i)

Apr 2, 2020 – 11:20 AM CDT

PDB ID : 2KZN

Title : Solution NMR Structure of Peptide methionine sulfoxide reductase msrB from

Bacillus subtilis, Northeast Structural Genomics Consortium Target SR10

Authors: Ertekin, A.; Maglaqui, M.; Janjua, H.; Cooper, B.; Ciccosanti, C.; Rost,

B.; Acton, T.B.; Xiao, R.; Everett, J.K.; Prestegard, J.; Lee, H.; Aramini, J.M.; Rossi, P.; Montelione, G.T.; Northeast Structural Genomics Consortium

(NESG)

Deposited on : 2010-06-18

This is a wwPDB NMR Structure Validation Summary 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 (i) symbol.

The following versions of software and data (see references (1)) were used in the production of this report:

Cyrange : Kirchner and Güntert (2011)

NmrClust : Kelley et al. (1996)

MolProbity: 4.02b-467

Percentile statistics : 20171227.v01 (using entries in the PDB archive December 27th 2017)

RCI : v 1n 11 5 13 A (Berjanski et al., 2005)

PANAV : Wang et al. (2010)

ShiftChecker : 2.6.dev1

BMRB Restraints Analalysis : v1.2

Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001) Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)

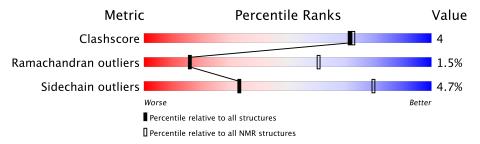
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : 2.6.dev1

1 Overall quality at a glance (i)

The following experimental techniques were used to determine the structure: $SOLUTION\ NMR$

The overall completeness of chemical shifts assignment is 41%.

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 $(\# \mathrm{Entries})$	$egin{array}{c} { m NMR \ archive} \ (\#{ m Entries}) \end{array}$
Clashscore	136327	12091
Ramachandran outliers	132723	10835
Sidechain outliers	132532	10811

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 <=5%

Mol	Chain	Length	Quality of chain			
1	A	151	78%	7%	13%	•



2 Ensemble composition and analysis (i)

This entry contains 20 models. Model 8 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	Well-defined core Residue range (total) Backbone RMSD (Å) Medoid model					
1 A:6-A:27, A:37-A:142 (128) 0.98 8						

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

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

The models can be grouped into 3 clusters and 4 single-model clusters were found.

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



3 Entry composition (i)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 2363 atoms, of which 1156 are hydrogens and 0 are deuteriums.

• Molecule 1 is a protein called Peptide methionine sulfoxide reductase msrB.

Mol	Chain	Residues		Atoms				Trace	
1	Λ	147	Total	С	Н	N	О	S	0
1	A	141	2363	761	1156	209	232	5	U

There are 8 discrepancies between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	144	LEU	-	EXPRESSION TAG	UNP P54155
A	145	GLU	-	EXPRESSION TAG	UNP P54155
A	146	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP P54155
A	147	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP P54155
A	148	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP P54155
A	149	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP P54155
A	150	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP P54155
A	151	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP P54155



4 Residue-property plots (i)

4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

These plots are provided for all protein, RNA and DNA 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: Peptide methionine sulfoxide reductase msrB



4.2 Residue scores for the representative (medoid) model from the NMR ensemble

The representative model is number 8. Colouring as in section 4.1 above.

• Molecule 1: Peptide methionine sulfoxide reductase msrB





tion.

5 Refinement protocol and experimental data overview (i)



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

Of the 100 calculated structures, 20 were deposited, based on the following criterion: target func-

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

Software name	Classification	Version
CYANA	structure solution	3.0
CYANA	geometry optimization	3.0
TALOS+	geometry optimization	
PALES	geometry optimization	
CYANA	refinement	3.0

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)	2kzn_nmr.cif
Number of chemical shift lists	1
Total number of shifts	869
Number of shifts mapped to atoms	732
Number of unparsed shifts	82
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	55
Assignment completeness (well-defined parts)	41%

No validations of the models with respect to experimental NMR restraints is performed at this time.



6 Model quality (i)

6.1 Standard geometry (i)

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

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

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

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

All unique planar outliers are listed below.

Mol	Chain	Res	Type	Group	Models (Total)
1	A	97	SER	Peptide	1

6.2 Too-close contacts (i)

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	1031	999	994	8±2
All	All	20620	19980	19880	154

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 4.

5 of 69 unique clashes are listed below, sorted by their clash magnitude.

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	$Distance(\mathring{A})$	Models	
Atom-1	Atom-2	Atom-2 Clash(A)		Worst	Total
1:A:102:VAL:HG12	1:A:114:TYR:HA	0.69	1.65	16	20
1:A:45:ILE:HG12	1:A:122:ARG:HB2	0.66	1.66	4	10



Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	$Distance(\mathring{A})$	Mod	dels
Atom-1	Atom-2	Clash(A)	Distance(A)	Worst	Total
1:A:49:LYS:HB2	1:A:49:LYS:HZ2	0.65	1.52	7	1
1:A:92:SER:HB3	1:A:96:ASP:HB2	0.65	1.67	9	7
1:A:106:GLY:HA3	1:A:113:ARG:HB2	0.64	1.69	5	5

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	128/151 (85%)	116±3 (90±2%)	10±3 (8±2%)	2±1 (1±1%)	16 61
All	All	2560/3020 (85%)	2315 (90%)	207 (8%)	38 (1%)	16 61

5 of 15 unique Ramachandran outliers are listed below. They are sorted by the frequency of occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	99	LEU	12
1	A	134	TYR	9
1	A	96	ASP	3
1	A	142	ASN	3
1	A	71	ILE	1

6.3.2 Protein sidechains (i)

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

Mol	Chain	hain Analysed Rotan		Outliers	Perce	ntiles
1	A	115/137 (84%)	110±2 (95±2%)	5±2 (5±2%)	33	80
All	All	2300/2740 (84%)	2192 (95%)	108 (5%)	33	80

5 of 45 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	13	ASN	15
1	A	77	GLU	6
1	A	87	ARG	5
1	A	57	LYS	5
1	A	42	TYR	4

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 carbohydrates 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 41% for the well-defined parts and 39% for the entire structure.

7.1 Chemical shift list 1

File name: 2kzn nmr.cif

Chemical shift list name: nef_chemical_shift_list_2kzn.mr

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	869
Number of shifts mapped to atoms	732
Number of unparsed shifts	82
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	55
Number of shift outliers (ShiftChecker)	2

The following errors were found when reading this chemical shift list.

• Chemical shift has been reported more than once. First 5 (of 82) occurrences are reported below.

Shift ID	Chain	Res	Tune	Atom	Shift Data		
	Chain	nes	Type	Atom	Value	Uncertainty	Ambiguity
31	A	9	ILE	HD1%	0.822	0.030	1
32	A	9	ILE	HD1%	0.822	0.030	1
50	A	12	LEU	HD1%	0.822	0.030	1
51	A	12	LEU	HD1%	0.822	0.030	1
53	A	12	LEU	HD2%	0.744	0.030	1

The following assigned chemical shifts were not mapped to the molecules present in the coordinate file.

• No matching atoms found in structure. First 5 (of 55) occurrences are reported below.

Chain	Dog	Type	Atom		Shift Dat	a
Chain	nes	Type	Atom	Value	Shift Dat Uncertainty	Ambiguity
A	16	GLN	HE2y	7.862	0.03	2
A	22	ASN	HD2y	6.892	0.03	2



Continued from previous page...

	Chain	Dag	Type	Atom		Shift Dat	a
	Chain	nes	Type	Atom	Value	Shift Dat Uncertainty	Ambiguity
	A	121	LEU	HD1%	0.626	0.03	1
	A	129	LEU	HD2%	0.431	0.03	1
ĺ	A	99	LEU	HD1%	0.723	0.03	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
$^{13}\mathrm{C}_{\alpha}$	142	-0.18 ± 0.18	None needed ($< 0.5 \text{ ppm}$)
$^{13}C_{\beta}$	132	0.47 ± 0.23	None needed ($< 0.5 \text{ ppm}$)
¹³ C′	141	-0.49 ± 0.18	None needed ($< 0.5 \text{ ppm}$)
^{15}N	131	1.13 ± 0.45	Should be applied

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 41%, i.e. 654 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 1608. 17 out of 17 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	$^{1}\mathrm{H}$	$^{13}\mathbf{C}$	$^{15}{ m N}$
Backbone	489/626 (78%)	118/249 (47%)	$253/256 \ (99\%)$	118/121 (98%)
Sidechain	163/836 (19%)	0/495~(0%)	156/302 (52%)	7/39 (18%)
Aromatic	2/146 (1%)	1/76 (1%)	0/59 (0%)	1/11 (9%)
Overall	654/1608 (41%)	119/820 (15%)	409/617 (66%)	126/171 (74%)

7.1.4 Statistically unusual chemical shifts (i)

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

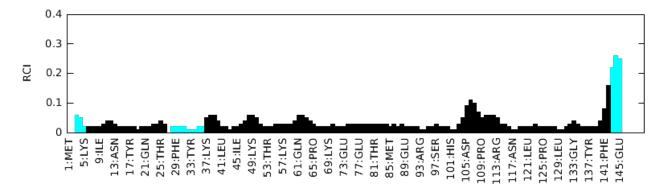
Mol	Chain	Res	Type	Atom	Shift, ppm	Expected range, ppm	Z-score
1	A	118	SER	Н	13.13	11.23 - 5.33	8.2
1	A	38	GLU	Н	5.26	11.34 - 5.34	-5.1



7.1.5 Random Coil Index (RCI) plots (i)

The image below reports random coil index values for the protein chains in the structure. The height of each bar gives a probability of a given residue to be disordered, as predicted from the available chemical shifts and the amino acid sequence. A value above 0.2 is an indication of significant predicted disorder. The colour of the bar shows whether the residue is in the well-defined core (black) or in the ill-defined residue ranges (cyan), as described in section 2 on ensemble composition.

Random coil index (RCI) for chain A:





8 Distance restraints analysis

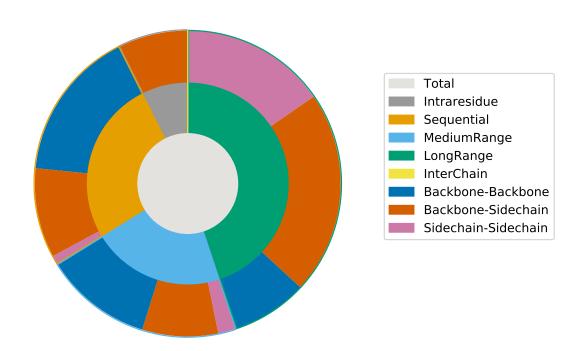
8.1 Distance restraints summary

Restraints are counted in different categories based on the atoms involved in each restraint.

Dogtrointa turo	D D1(II4)	$\mathbf{B} ext{-}\mathbf{S}^2(\mathbf{H}^4)$	C C3(TT4)	\mathbf{T}	otal	
Restraints type	$\mathbf{B}\text{-}\mathbf{B}^1(\mathbf{H}^4)$	D-8-(II-)	$S-S^3(H^4)$	$Total(H^4)$	RR^5	$\%^6$
Intraresidue ($ i-j =0$)	0(0)	46(0)	0(0)	46(0)	0.3	7.4
Sequential (i-j =1)	100(0)	59(0)	6(0)	165(0)	1.2	26.4
Medium range ($ i-j >1$ and $ i-j <5$)	71(0)	50(0)	12(0)	133(0)	0.9	21.3
Long range (i-j ≥5)	50(0)	134(0)	96(0)	280(0)	2.0	44.9
Inter chain	0(0)	0(0)	0(0)	0(0)	0.0	0.0
Total	221(0)	289(0)	114(0)	624(0)	4.4	100.0

¹number of backbone to backbone restraints, ²number of backbone to sidechain restraints, ³number of sidechain to sidechain restraints, ⁴number of hydrogen bonds in that category, ⁵number of restraints per residue, ⁶percentage of restraints in that category. There are 0 unmapped restraints

8.1.1 Pie chart: Distance restraints summary





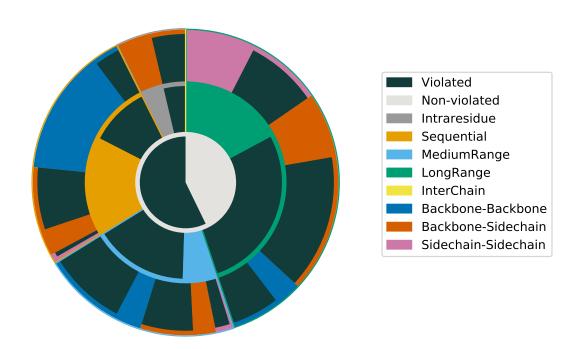
8.2 Distance violations summary

The following table provides the summary of violated restraints. Restraints that are violated at least in one model are counted as violated.

Dogtroints type	$B-B^1(\%^4)$	$B-S^2(\%^4)$	$S-S^3(\%^4)$	Total			
Restraints type	D-D (%)	D-3 (%)	S-S'(%)	$Total(\%^4)$	RR^5	$\%^6$	
Intraresidue (i-j =0)	0(0.0)	23(50.0)	0(0.0)	23(50.0)	0.2	6.4	
Sequential (i-j =1)	18(18.0)	42(71.2)	3(50.0)	63(38.2)	0.4	17.6	
Medium range ($ i-j >1$ and $ i-j <5$)	53(74.6)	35(70.0)	10(83.3)	98(73.7)	0.7	27.5	
Long range (i-j ≥5)	33(66.0)	91(67.9)	49(51.0)	173(61.8)	1.2	48.5	
Inter chain	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0.0	0.0	
Total	104(47.1)	191(66.1)	62(54.4)	357(57.2)	2.5	100.0	

¹number of backbone to backbone restraints, ²number of backbone to sidechain restraints, ³number of sidechain to sidechain restraints, ⁴percentage of violations with respect to total restrains in that category, ⁵number of restraints per residue, ⁶percentage of violation with respect to total violations.

8.2.1 Pie-chart: Distance violations summary





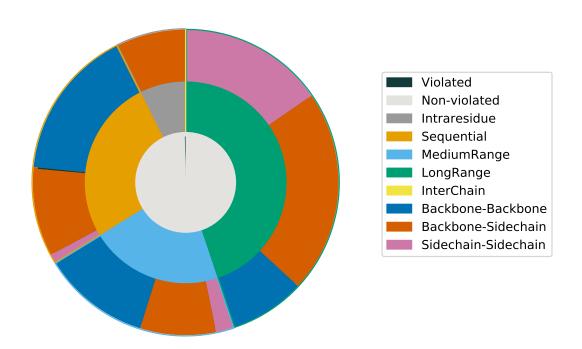
8.3 Consistent distance violations summary

The following table provides the summary of consistently violated restraints. Restraints that are violated in all models are counted as consistently violated.

Dogtroints type	$B-B^{1}(\%^{4})$	$B-S^2(\%^4)$	$S-S^3(\%^4)$	T	otal	
Restraints type	D-D (%)	D-3 (%)	S-S'(%)	$Total(\%^4)$	RR^5	$\%^6$
Intraresidue ($ i-j =0$)	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0.0	0.0
Sequential (i-j =1)	0(0.0)	1(1.7)	0(0.0)	1(0.6)	0.0	50.0
Medium range ($ i-j >1$ and $ i-j <5$)	1(1.4)	0(0.0)	0(0.0)	1(0.8)	0.0	50.0
Long range (i-j ≥5)	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0.0	0.0
Inter chain	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0.0	0.0
Total	1(0.5)	1(0.3)	0(0.0)	2(0.3)	0.0	100.0

¹number of backbone to backbone restraints, ²number of backbone to sidechain restraints, ³number of sidechain to sidechain restraints, ⁴percentage of violations with respect to total restrains in that category, ⁵number of restraints per residue, ⁶percentage of violation with respect to total violations

8.3.1 Pie-chart: Consistent distance violations





8.4 Residual distance violations

Violation are counted in different bin sizes and listed below

Range (Å)	Avg. No. of violated restraints per model	Max violation (Å)
0-0.2	98.7	0.2
0.2-0.5	8.9	0.48
0.5-1.0	0.1	0.58
1.0-2.0	0.3	1.85
2.0-5.0	None	None
5.0<	None	None

8.5 Distance violations in ensemble

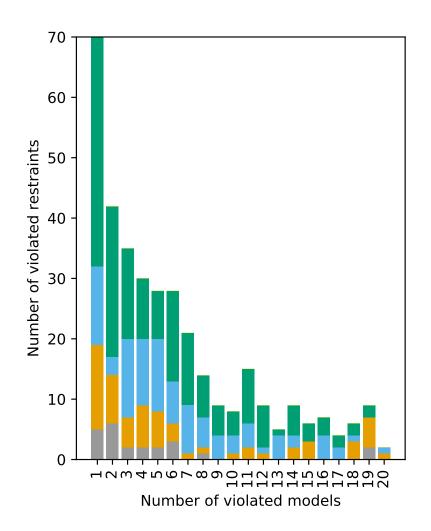
The restraints are grouped based on the number of violated models and listed here.

I	No. of	f violat	ted re	strair	nts	No. of violated models
IR^1	SQ^2	MR^3	LR^4	IC^5	Total	No. of violated models
5	14	13	38	0	70	1
6	8	3	25	0	42	2
2	5	13	15	0	35	3
2	7	11	10	0	30	4
2	6	12	8	0	28	5
3	3	7	15	0	28	6
0	1	8	12	0	21	7
1	1	5	7	0	14	8
0	0	4	5	0	9	9
0	1	3	4	0	8	10
0	2	4	9	0	15	11
0	1	1	7	0	9	12
0	0	4	1	0	5	13
0	2	2	5	0	9	14
0	3	0	3	0	6	15
0	0	4	3	0	7	16
0	0	2	2	0	4	17
0	3	1	2	0	6	18
2	5	0	2	0	9	19
0	1	1	0	0	2	20

 $^{^1 \}rm intraresidue$ restraints, $^2 \rm sequential$ restraints, $^3 \rm medium$ range restraints, $^4 \rm long$ range restraints, $^5 \rm inter$ chain restraints



8.5.1 Bar graph: No. of models vs No. of violations





23 intraresidue restraints, 102 sequential restraints, 35 medium range restraints,107 long range restraints and 0 inter chain restraints are not violated. In total, 267 restraints are not violated in any of the models

8.6 Violations in each model

The following table lists the violation count in each model in the ensemble

Model ID		N	o. of v	riolati	Mean (Å)	Max (Å)		
Model ID	IR^1	SQ^2	$ m MR^3$	LR^4	IC^5	Total	Mean (A)	Max (A)
1	4	26	27	42	0	99	0.1	0.28
2	6	26	30	49	0	111	0.08	0.28
3	3	14	32	49	0	98	0.11	1.39
4	6	21	37	50	0	114	0.09	0.34
5	6	17	32	56	0	111	0.09	0.41



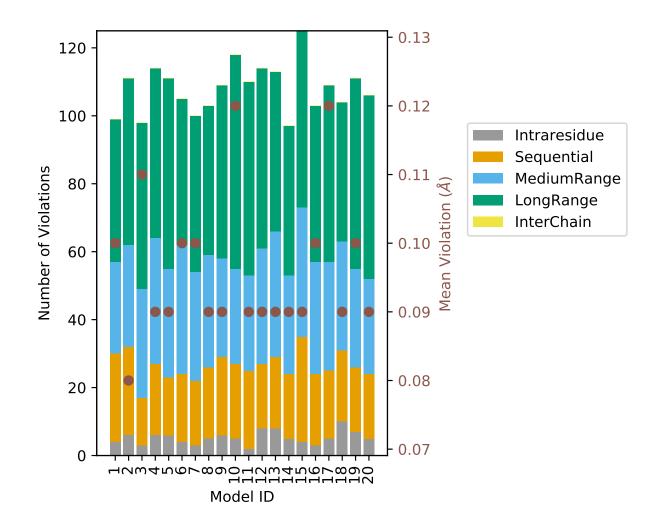
Continued from previous page...

Model ID		N	o. of v	violati	ons		Mean (Å)	Max (Å)
Wiodei 1D	IR^1	SQ^2	MR^3	LR^4	IC^5	Total	Mean (A)	Max (A)
6	4	20	38	43	0	105	0.1	0.35
7	3	19	32	46	0	100	0.1	0.42
8	5	21	33	44	0	103	0.09	0.48
9	6	23	29	51	0	109	0.09	0.37
10	5	22	28	63	0	118	0.12	1.82
11	2	23	28	57	0	110	0.09	0.36
12	8	19	34	53	0	114	0.09	0.58
13	8	21	37	47	0	113	0.09	0.35
14	5	19	29	44	0	97	0.09	0.32
15	4	31	38	52	0	125	0.09	1.04
16	3	21	33	46	0	103	0.1	0.33
17	5	20	32	52	0	109	0.12	1.85
18	10	21	32	41	0	104	0.09	0.39
19	7	19	29	56	0	111	0.1	1.2
20	5	19	28	54	0	106	0.09	0.37

 $^{^1}$ intraresidue restraints, 2 iequential restraints, 3 iedium range restraints, 4 long range restraints, 5 inter chain restraints



8.6.1 Bar graph: Violations in each model

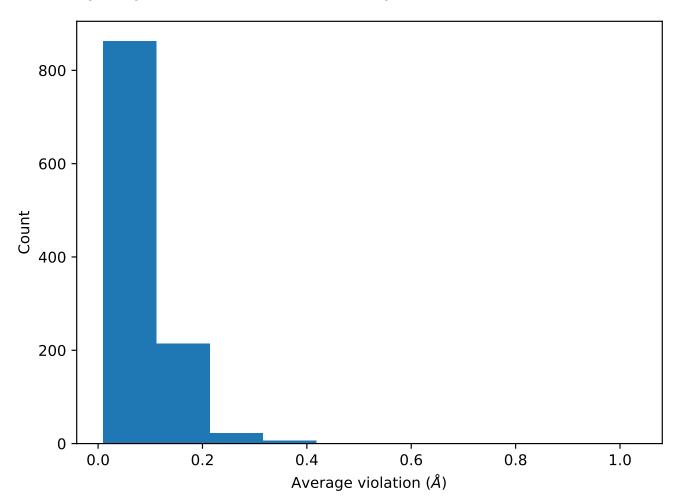




8.7 Most violated distance restraints

8.7.1 Histogram : Distribution of mean distance violations

The following histogram shows the distribution of average violations of each restraint.



8.7.2 Table: Most violated distance restraints

The following tale lists the average violation of each restraint sorted by number of violated models

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,266)	1:A:19:VAL:H	1:A:21:GLN:H	20	0.11	0.18
(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD11	20	0.13	0.23
(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD12	20	0.13	0.23
(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD13	20	0.13	0.23
(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG11	19	0.15	0.25
(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG12	19	0.15	0.25



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG13	19	0.15	0.25
(1,571)	1:A:140:LEU:HD11	1:A:141:PHE:H	19	0.08	0.22
(1,571)	1:A:140:LEU:HD12	1:A:141:PHE:H	19	0.08	0.22
(1,571)	1:A:140:LEU:HD13	1:A:141:PHE:H	19	0.08	0.22
(1,505)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:76:GLU:H	19	0.08	0.21
(1,505)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:76:GLU:H	19	0.08	0.21
(1,505)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:76:GLU:H	19	0.08	0.21
(1,493)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:52:PHE:H	19	0.15	0.32
(1,493)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:52:PHE:H	19	0.15	0.32
(1,493)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:52:PHE:H	19	0.15	0.32
(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD11	19	0.08	0.18
(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD12	19	0.08	0.18
(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD13	19	0.08	0.18
(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD21	19	0.06	0.1
(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD22	19	0.06	0.1
(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD23	19	0.06	0.1
(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD21	19	0.19	0.29
(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD22	19	0.19	0.29
(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD23	19	0.19	0.29
(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD21	19	0.19	0.29
(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD22	19	0.19	0.29
(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD23	19	0.19	0.29
(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD21	19	0.19	0.29
(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD22	19	0.19	0.29
(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD23	19	0.19	0.29
(1,247)	1:A:121:LEU:HD11	1:A:122:ARG:H	19	0.14	0.28
(1,247)	1:A:121:LEU:HD12	1:A:122:ARG:H	19	0.14	0.28
(1,247)	1:A:121:LEU:HD13	1:A:122:ARG:H	19	0.14	0.28
(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD21	19	0.14	0.24
(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD22	19	0.14	0.24
(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD23	19	0.14	0.24
(1,458)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:10:LYS:H	18	0.07	0.13
(1,458)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:10:LYS:H	18	0.07	0.13
(1,458)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:10:LYS:H	18	0.07	0.13
(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD21	18	0.18	0.37
(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD22	18	0.18	0.37
(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD23	18	0.18	0.37
(1,259)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD11	18	0.12	0.24
(1,259)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD12	18	0.12	0.24
(1,259)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD13	18	0.12	0.24
(1,259)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD11	18	0.12	0.24
(1,259)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD12	18	0.12	0.24



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,259)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD13	18	0.12	0.24
(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD11	18	0.12	0.24
(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD12	18	0.12	0.24
(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD13	18	0.12	0.24
(1,248)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD11	18	0.16	0.31
(1,248)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD12	18	0.16	0.31
(1,248)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD13	18	0.16	0.31
(1,192)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:H	18	0.13	0.22
(1,192)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:H	18	0.13	0.22
(1,192)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:H	18	0.13	0.22
(1,131)	1:A:17:TYR:H	1:A:19:VAL:H	18	0.12	0.23
(1,468)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:23:ASN:H	17	0.12	0.27
(1,468)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:23:ASN:H	17	0.12	0.27
(1,468)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:23:ASN:H	17	0.12	0.27
(1,451)	1:A:75:VAL:HG11	1:A:91:ARG:H	17	0.13	0.37
(1,451)	1:A:75:VAL:HG12	1:A:91:ARG:H	17	0.13	0.37
(1,451)	1:A:75:VAL:HG13	1:A:91:ARG:H	17	0.13	0.37
(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD11	17	0.23	0.58
(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD12	17	0.23	0.58
(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD13	17	0.23	0.58
(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD11	17	0.23	0.58
(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD12	17	0.23	0.58
(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD13	17	0.23	0.58
(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD11	17	0.23	0.58
(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD12	17	0.23	0.58
(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD13	17	0.23	0.58
(1,267)	1:A:21:GLN:H	1:A:24:GLY:H	17	0.08	0.16
(1,84)	1:A:10:LYS:H	1:A:12:LEU:H	16	0.14	0.25
(1,616)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD21	16	0.16	0.29
(1,616)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD22	16	0.16	0.29
(1,616)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD23	16	0.16	0.29
(1,616)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD21	16	0.16	0.29
(1,616)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD22	16	0.16	0.29
(1,616)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD23	16	0.16	0.29
(1,616)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD21	16	0.16	0.29
(1,616)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD22	16	0.16	0.29
(1,616)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD23	16	0.16	0.29
(1,453)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG21	16	0.12	0.35
(1,453)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG22	16	0.12	0.35
(1,453)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG23	16	0.12	0.35
(1,445)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:113:ARG:H	16	0.1	0.22
(1,445)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:113:ARG:H	16	0.1	0.22



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,445)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:113:ARG:H	16	0.1	0.22
(1,329)	1:A:79:LEU:H	1:A:89:GLU:H	16	0.12	0.22
(1,299)	1:A:15:MET:H	1:A:18:GLU:H	16	0.09	0.24
(1,298)	1:A:14:ARG:H	1:A:17:TYR:H	16	0.11	0.19
(1,8)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:42:TYR:H	15	0.1	0.28
(1,8)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:42:TYR:H	15	0.1	0.28
(1,8)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:42:TYR:H	15	0.1	0.28
(1,623)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD11	15	0.13	0.31
(1,623)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD12	15	0.13	0.31
(1,623)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD13	15	0.13	0.31
(1,609)	1:A:102:VAL:H	1:A:88:THR:H	15	0.11	0.28
(1,57)	1:A:112:LEU:HD11	1:A:113:ARG:H	15	0.09	0.16
(1,57)	1:A:112:LEU:HD12	1:A:113:ARG:H	15	0.09	0.16
(1,57)	1:A:112:LEU:HD13	1:A:113:ARG:H	15	0.09	0.16
(1,518)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD11	15	0.05	0.12
(1,518)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD12	15	0.05	0.12
(1,518)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD13	15	0.05	0.12
(1,115)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:H	15	0.09	0.22
(1,610)	1:A:115:CYS:H	1:A:101:HIS:H	14	0.11	0.26
(1,562)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD21	14	0.11	0.29
(1,562)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD22	14	0.11	0.29
(1,562)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD23	14	0.11	0.29
(1,550)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG21	14	0.13	0.36
(1,550)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG22	14	0.13	0.36
(1,550)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG23	14	0.13	0.36
(1,536)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:102:VAL:H	14	0.08	0.19
(1,536)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:102:VAL:H	14	0.08	0.19
(1,536)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:102:VAL:H	14	0.08	0.19
(1,462)	1:A:45:ILE:HD11	1:A:46:VAL:H	14	0.07	0.14
(1,462)	1:A:45:ILE:HD12	1:A:46:VAL:H	14	0.07	0.14
(1,462)	1:A:45:ILE:HD13	1:A:46:VAL:H	14	0.07	0.14
(1,4)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:124:VAL:H	14	0.09	0.21
(1,4)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:H	14	0.09	0.21
(1,4)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:H	14	0.09	0.21
(1,24)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:134:TYR:H	14	0.14	0.25
(1,24)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:134:TYR:H	14	0.14	0.25
(1,24)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:134:TYR:H	14	0.14	0.25
(1,19)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:127:HIS:H	14	0.08	0.17
(1,19)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:127:HIS:H	14	0.08	0.17
(1,19)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:127:HIS:H	14	0.08	0.17
(1,171)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG11	14	0.07	0.26
(1,171)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG12	14	0.07	0.26



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,171)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG13	14	0.07	0.26
(1,63)	1:A:54:SER:HG	1:A:57:LYS:H	13	0.09	0.29
(1,512)	1:A:79:LEU:HD21	1:A:87:ARG:H	13	0.09	0.17
(1,512)	1:A:79:LEU:HD22	1:A:87:ARG:H	13	0.09	0.17
(1,512)	1:A:79:LEU:HD23	1:A:87:ARG:H	13	0.09	0.17
(1,375)	1:A:131:GLU:H	1:A:133:GLY:H	13	0.09	0.18
(1,147)	1:A:130:LYS:H	1:A:134:TYR:H	13	0.15	0.28
(1,14)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD21	13	0.06	0.14
(1,14)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD22	13	0.06	0.14
(1,14)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD23	13	0.06	0.14
(1,488)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:51:LEU:H	12	0.06	0.14
(1,488)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:51:LEU:H	12	0.06	0.14
(1,488)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:51:LEU:H	12	0.06	0.14
(1,473)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD11	12	0.07	0.19
(1,473)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD12	12	0.07	0.19
(1,473)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD13	12	0.07	0.19
(1,47)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:115:CYS:H	12	0.13	0.22
(1,47)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:115:CYS:H	12	0.13	0.22
(1,47)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:115:CYS:H	12	0.13	0.22
(1,465)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG11	12	0.13	0.26
(1,465)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG12	12	0.13	0.26
(1,465)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG13	12	0.13	0.26
(1,431)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:103:PHE:H	12	0.11	0.21
(1,431)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:103:PHE:H	12	0.11	0.21
(1,431)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:103:PHE:H	12	0.11	0.21
(1,387)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:90:VAL:HG21	12	0.06	0.17
(1,387)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:90:VAL:HG22	12	0.06	0.17
(1,387)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:90:VAL:HG23	12	0.06	0.17
(1,387)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:90:VAL:HG21	12	0.06	0.17
(1,387)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:90:VAL:HG22	12	0.06	0.17
(1,387)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:90:VAL:HG23	12	0.06	0.17
(1,387)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG21	12	0.06	0.17
(1,387)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG22	12	0.06	0.17
(1,387)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG23	12	0.06	0.17
(1,374)	1:A:132:GLU:H	1:A:134:TYR:H	12	0.1	0.22
(1,256)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD11	12	0.15	0.29
(1,256)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD12	12	0.15	0.29
(1,256)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD13	12	0.15	0.29
(1,256)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD11	12	0.15	0.29
(1,256)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD12	12	0.15	0.29
(1,256)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD13	12	0.15	0.29
(1,256)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD11	12	0.15	0.29



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,256)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD12	12	0.15	0.29
(1,256)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD13	12	0.15	0.29
(1,148)	1:A:44:ASP:H	1:A:122:ARG:H	12	0.07	0.21
(1,608)	1:A:100:GLY:H	1:A:90:VAL:H	11	0.09	0.2
(1,565)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:H	11	0.09	0.19
(1,565)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:H	11	0.09	0.19
(1,565)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:H	11	0.09	0.19
(1,564)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:137:TYR:H	11	0.07	0.13
(1,564)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:137:TYR:H	11	0.07	0.13
(1,564)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:137:TYR:H	11	0.07	0.13
(1,542)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD21	11	0.08	0.16
(1,542)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD22	11	0.08	0.16
(1,542)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD23	11	0.08	0.16
(1,53)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD21	11	0.15	0.33
(1,53)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD22	11	0.15	0.33
(1,53)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD23	11	0.15	0.33
(1,472)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:42:TYR:H	11	0.07	0.17
(1,472)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:42:TYR:H	11	0.07	0.17
(1,472)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:42:TYR:H	11	0.07	0.17
(1,469)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:24:GLY:H	11	0.1	0.19
(1,469)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:24:GLY:H	11	0.1	0.19
(1,469)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:24:GLY:H	11	0.1	0.19
(1,452)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG21	11	0.07	0.23
(1,452)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG22	11	0.07	0.23
(1,452)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG23	11	0.07	0.23
(1,440)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:100:GLY:H	11	0.08	0.14
(1,440)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:100:GLY:H	11	0.08	0.14
(1,440)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:100:GLY:H	11	0.08	0.14
(1,438)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:120:ALA:H	11	0.1	0.21
(1,438)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:120:ALA:H	11	0.1	0.21
(1,438)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:120:ALA:H	11	0.1	0.21
(1,303)	1:A:18:GLU:H	1:A:20:THR:H	11	0.08	0.18
(1,219)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:74:GLU:H	11	0.12	0.26
(1,219)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:74:GLU:H	11	0.12	0.26
(1,219)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:74:GLU:H	11	0.12	0.26
(1,172)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:20:THR:H	11	0.04	0.13
(1,172)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:20:THR:H	11	0.04	0.13
(1,172)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:20:THR:H	11	0.04	0.13
(1,17)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD21	11	0.06	0.13
(1,17)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD22	11	0.06	0.13
(1,17)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD23	11	0.06	0.13
(1,13)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:131:GLU:H	11	0.11	0.26



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,13)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:131:GLU:H	11	0.11	0.26
(1,13)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:131:GLU:H	11	0.11	0.26
(1,81)	1:A:47:SER:H	1:A:48:GLY:H	10	0.04	0.1
(1,443)	1:A:90:VAL:HG21	1:A:101:HIS:H	10	0.08	0.17
(1,443)	1:A:90:VAL:HG22	1:A:101:HIS:H	10	0.08	0.17
(1,443)	1:A:90:VAL:HG23	1:A:101:HIS:H	10	0.08	0.17
(1,435)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:26:GLU:H	10	0.1	0.2
(1,435)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:26:GLU:H	10	0.1	0.2
(1,435)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:26:GLU:H	10	0.1	0.2
(1,368)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:H	10	0.07	0.23
(1,361)	1:A:45:ILE:H	1:A:122:ARG:H	10	0.08	0.21
(1,176)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:45:ILE:HD11	10	0.11	0.27
(1,176)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:45:ILE:HD12	10	0.11	0.27
(1,176)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:45:ILE:HD13	10	0.11	0.27
(1,176)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:45:ILE:HD11	10	0.11	0.27
(1,176)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:45:ILE:HD12	10	0.11	0.27
(1,176)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:45:ILE:HD13	10	0.11	0.27
(1,176)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:45:ILE:HD11	10	0.11	0.27
(1,176)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:45:ILE:HD12	10	0.11	0.27
(1,176)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:45:ILE:HD13	10	0.11	0.27
(1,15)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG11	10	0.07	0.17
(1,15)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG12	10	0.07	0.17
(1,15)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG13	10	0.07	0.17
(1,139)	1:A:46:VAL:H	1:A:48:GLY:H	10	0.05	0.17
(1,83)	1:A:9:ILE:H	1:A:12:LEU:H	9	0.08	0.17
(1,70)	1:A:16:GLN:HE21	1:A:46:VAL:H	9	0.1	0.19
(1,497)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:H	9	0.12	0.31
(1,497)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:H	9	0.12	0.31
(1,497)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:H	9	0.12	0.31
(1,44)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:48:GLY:H	9	0.06	0.1
(1,44)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:48:GLY:H	9	0.06	0.1
(1,44)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:48:GLY:H	9	0.06	0.1
(1,407)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:46:VAL:HG21	9	0.1	0.21
(1,407)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:46:VAL:HG22	9	0.1	0.21
(1,407)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:46:VAL:HG23	9	0.1	0.21
(1,407)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:46:VAL:HG21	9	0.1	0.21
(1,407)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:46:VAL:HG22	9	0.1	0.21
(1,407)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:46:VAL:HG23	9	0.1	0.21
(1,407)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:46:VAL:HG21	9	0.1	0.21
(1,407)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:46:VAL:HG22	9	0.1	0.21
(1,407)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:46:VAL:HG23	9	0.1	0.21
(1,337)	1:A:76:GLU:H	1:A:91:ARG:H	9	0.08	0.21



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,308)	1:A:30:GLN:H	1:A:34:TRP:HE1	9	0.06	0.15
(1,184)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:112:LEU:HD11	9	0.04	0.07
(1,184)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:112:LEU:HD12	9	0.04	0.07
(1,184)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:112:LEU:HD13	9	0.04	0.07
(1,184)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:112:LEU:HD11	9	0.04	0.07
(1,184)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:112:LEU:HD12	9	0.04	0.07
(1,184)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:112:LEU:HD13	9	0.04	0.07
(1,184)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:112:LEU:HD11	9	0.04	0.07
(1,184)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:112:LEU:HD12	9	0.04	0.07
(1,184)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:112:LEU:HD13	9	0.04	0.07
(1,161)	1:A:133:GLY:H	1:A:135:GLU:H	9	0.1	0.24
(1,60)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD11	8	0.08	0.14
(1,60)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD12	8	0.08	0.14
(1,60)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD13	8	0.08	0.14
(1,572)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:141:PHE:H	8	0.19	0.48
(1,572)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:141:PHE:H	8	0.19	0.48
(1,572)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:141:PHE:H	8	0.19	0.48
(1,549)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD21	8	0.12	0.22
(1,549)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD22	8	0.12	0.22
(1,549)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD23	8	0.12	0.22
(1,513)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:87:ARG:H	8	0.11	0.27
(1,513)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:87:ARG:H	8	0.11	0.27
(1,513)	1:A:79:LEU:HD13	1:A:87:ARG:H	8	0.11	0.27
(1,437)	1:A:46:VAL:HG11	1:A:48:GLY:H	8	0.05	0.13
(1,437)	1:A:46:VAL:HG12	1:A:48:GLY:H	8	0.05	0.13
(1,437)	1:A:46:VAL:HG13	1:A:48:GLY:H	8	0.05	0.13
(1,41)	1:A:45:ILE:H	1:A:46:VAL:HG21	8	0.06	0.11
(1,41)	1:A:45:ILE:H	1:A:46:VAL:HG22	8	0.06	0.11
(1,41)	1:A:45:ILE:H	1:A:46:VAL:HG23	8	0.06	0.11
(1,40)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:97:SER:H	8	0.19	0.37
(1,40)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:97:SER:H	8	0.19	0.37
(1,40)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:97:SER:H	8	0.19	0.37
(1,32)	1:A:103:PHE:H	1:A:112:LEU:HD21	8	0.05	0.15
(1,32)	1:A:103:PHE:H	1:A:112:LEU:HD22	8	0.05	0.15
(1,32)	1:A:103:PHE:H	1:A:112:LEU:HD23	8	0.05	0.15
(1,283)	1:A:131:GLU:H	1:A:134:TYR:H	8	0.13	0.21
(1,279)	1:A:26:GLU:H	1:A:64:TRP:HE1	8	0.08	0.17
(1,225)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:71:ILE:HD11	8	0.08	0.12
(1,225)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:71:ILE:HD12	8	0.08	0.12
(1,225)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:71:ILE:HD13	8	0.08	0.12
(1,225)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:71:ILE:HD11	8	0.08	0.12
(1,225)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:71:ILE:HD12	8	0.08	0.12



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,225)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:71:ILE:HD13	8	0.08	0.12
(1,225)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:71:ILE:HD11	8	0.08	0.12
(1,225)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:71:ILE:HD12	8	0.08	0.12
(1,225)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:71:ILE:HD13	8	0.08	0.12
(1,162)	1:A:92:SER:H	1:A:96:ASP:H	8	0.28	1.04
(1,16)	1:A:102:VAL:H	1:A:102:VAL:HG11	8	0.04	0.05
(1,16)	1:A:102:VAL:H	1:A:102:VAL:HG12	8	0.04	0.05
(1,16)	1:A:102:VAL:H	1:A:102:VAL:HG13	8	0.04	0.05
(1,127)	1:A:21:GLN:H	1:A:23:ASN:H	8	0.06	0.13
(1,99)	1:A:20:THR:H	1:A:23:ASN:H	7	0.07	0.11
(1,9)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:138:LEU:H	7	0.12	0.18
(1,9)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:138:LEU:H	7	0.12	0.18
(1,9)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:138:LEU:H	7	0.12	0.18
(1,89)	1:A:55:LYS:H	1:A:57:LYS:H	7	0.07	0.14
(1,581)	1:A:102:VAL:HG11	1:A:113:ARG:H	7	0.05	0.11
(1,581)	1:A:102:VAL:HG12	1:A:113:ARG:H	7	0.05	0.11
(1,581)	1:A:102:VAL:HG13	1:A:113:ARG:H	7	0.05	0.11
(1,544)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:120:ALA:H	7	0.1	0.15
(1,544)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:120:ALA:H	7	0.1	0.15
(1,544)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:120:ALA:H	7	0.1	0.15
(1,517)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:HG21	7	0.08	0.11
(1,517)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:HG22	7	0.08	0.11
(1,517)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:HG23	7	0.08	0.11
(1,503)	1:A:76:GLU:H	1:A:99:LEU:HD21	7	0.08	0.23
(1,503)	1:A:76:GLU:H	1:A:99:LEU:HD22	7	0.08	0.23
(1,503)	1:A:76:GLU:H	1:A:99:LEU:HD23	7	0.08	0.23
(1,464)	1:A:16:GLN:H	1:A:46:VAL:HG11	7	0.11	0.22
(1,464)	1:A:16:GLN:H	1:A:46:VAL:HG12	7	0.11	0.22
(1,464)	1:A:16:GLN:H	1:A:46:VAL:HG13	7	0.11	0.22
(1,456)	1:A:9:ILE:H	1:A:12:LEU:HD21	7	0.05	0.15
(1,456)	1:A:9:ILE:H	1:A:12:LEU:HD22	7	0.05	0.15
(1,456)	1:A:9:ILE:H	1:A:12:LEU:HD23	7	0.05	0.15
(1,455)	1:A:8:LYS:H	1:A:9:ILE:HD11	7	0.06	0.13
(1,455)	1:A:8:LYS:H	1:A:9:ILE:HD12	7	0.06	0.13
(1,455)	1:A:8:LYS:H	1:A:9:ILE:HD13	7	0.06	0.13
(1,454)	1:A:134:TYR:H	1:A:138:LEU:HD21	7	0.17	0.32
(1,454)	1:A:134:TYR:H	1:A:138:LEU:HD22	7	0.17	0.32
(1,454)	1:A:134:TYR:H	1:A:138:LEU:HD23	7	0.17	0.32
(1,393)	1:A:12:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HG11	7	0.14	0.26
(1,393)	1:A:12:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HG12	7	0.14	0.26
(1,393)	1:A:12:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HG13	7	0.14	0.26
(1,393)	1:A:12:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HG11	7	0.14	0.26



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,393)	1:A:12:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HG12	7	0.14	0.26
(1,393)	1:A:12:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HG13	7	0.14	0.26
(1,393)	1:A:12:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HG11	7	0.14	0.26
(1,393)	1:A:12:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HG12	7	0.14	0.26
(1,393)	1:A:12:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HG13	7	0.14	0.26
(1,384)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:99:LEU:HD21	7	0.12	0.29
(1,384)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:99:LEU:HD22	7	0.12	0.29
(1,384)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:99:LEU:HD23	7	0.12	0.29
(1,384)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:99:LEU:HD21	7	0.12	0.29
(1,384)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:99:LEU:HD22	7	0.12	0.29
(1,384)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:99:LEU:HD23	7	0.12	0.29
(1,384)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:99:LEU:HD21	7	0.12	0.29
(1,384)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:99:LEU:HD22	7	0.12	0.29
(1,384)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:99:LEU:HD23	7	0.12	0.29
(1,331)	1:A:80:ASP:H	1:A:88:THR:H	7	0.04	0.07
(1,31)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:49:LYS:H	7	0.06	0.11
(1,31)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:49:LYS:H	7	0.06	0.11
(1,31)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:49:LYS:H	7	0.06	0.11
(1,285)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:H	7	0.05	0.12
(1,25)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:123:PHE:H	7	0.11	0.22
(1,25)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:123:PHE:H	7	0.11	0.22
(1,25)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:123:PHE:H	7	0.11	0.22
(1,21)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD11	7	0.04	0.08
(1,21)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD12	7	0.04	0.08
(1,21)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD13	7	0.04	0.08
(1,163)	1:A:15:MET:H	1:A:17:TYR:H	7	0.05	0.08
(1,146)	1:A:130:LYS:H	1:A:132:GLU:H	7	0.06	0.12
(1,119)	1:A:88:THR:H	1:A:102:VAL:H	7	0.07	0.17
(1,78)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:H	6	0.06	0.13
(1,7)	1:A:41:LEU:H	1:A:41:LEU:HD11	6	0.04	0.07
(1,7)	1:A:41:LEU:H	1:A:41:LEU:HD12	6	0.04	0.07
(1,7)	1:A:41:LEU:H	1:A:41:LEU:HD13	6	0.04	0.07
(1,68)	1:A:34:TRP:H	1:A:36:HIS:H	6	0.12	0.19
(1,561)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:134:TYR:H	6	0.08	0.17
(1,561)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:134:TYR:H	6	0.08	0.17
(1,561)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:134:TYR:H	6	0.08	0.17
(1,558)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:132:GLU:H	6	0.1	0.25
(1,558)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:132:GLU:H	6	0.1	0.25
(1,558)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:132:GLU:H	6	0.1	0.25
(1,556)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD11	6	0.06	0.14
(1,556)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD12	6	0.06	0.14
(1,556)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD13	6	0.06	0.14



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,551)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD11	6	0.08	0.12
(1,551)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD12	6	0.08	0.12
(1,551)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD13	6	0.08	0.12
(1,548)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD11	6	0.11	0.21
(1,548)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD12	6	0.11	0.21
(1,548)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD13	6	0.11	0.21
(1,499)	1:A:71:ILE:H	1:A:71:ILE:HD11	6	0.06	0.09
(1,499)	1:A:71:ILE:H	1:A:71:ILE:HD12	6	0.06	0.09
(1,499)	1:A:71:ILE:H	1:A:71:ILE:HD13	6	0.06	0.09
(1,491)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:52:PHE:H	6	0.06	0.1
(1,491)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:52:PHE:H	6	0.06	0.1
(1,491)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:52:PHE:H	6	0.06	0.1
(1,483)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:49:LYS:H	6	0.13	0.24
(1,483)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:49:LYS:H	6	0.13	0.24
(1,483)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:49:LYS:H	6	0.13	0.24
(1,430)	1:A:46:VAL:HG11	1:A:47:SER:H	6	0.06	0.14
(1,430)	1:A:46:VAL:HG12	1:A:47:SER:H	6	0.06	0.14
(1,430)	1:A:46:VAL:HG13	1:A:47:SER:H	6	0.06	0.14
(1,416)	1:A:86:ILE:H	1:A:86:ILE:HD11	6	0.12	0.19
(1,416)	1:A:86:ILE:H	1:A:86:ILE:HD12	6	0.12	0.19
(1,416)	1:A:86:ILE:H	1:A:86:ILE:HD13	6	0.12	0.19
(1,37)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:13:ASN:HD21	6	0.14	0.27
(1,37)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:13:ASN:HD21	6	0.14	0.27
(1,37)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:13:ASN:HD21	6	0.14	0.27
(1,366)	1:A:41:LEU:H	1:A:126:LYS:H	6	0.1	0.14
(1,355)	1:A:67:PHE:H	1:A:114:TYR:H	6	0.07	0.16
(1,33)	1:A:92:SER:H	1:A:99:LEU:HD11	6	0.39	1.2
(1,33)	1:A:92:SER:H	1:A:99:LEU:HD12	6	0.39	1.2
(1,33)	1:A:92:SER:H	1:A:99:LEU:HD13	6	0.39	1.2
(1,327)	1:A:78:LYS:H	1:A:89:GLU:H	6	0.06	0.1
(1,312)	1:A:41:LEU:H	1:A:124:VAL:H	6	0.06	0.12
(1,307)	1:A:32:GLU:H	1:A:34:TRP:H	6	0.09	0.24
(1,30)	1:A:106:GLY:H	1:A:112:LEU:HD21	6	0.06	0.11
(1,30)	1:A:106:GLY:H	1:A:112:LEU:HD22	6	0.06	0.11
(1,30)	1:A:106:GLY:H	1:A:112:LEU:HD23	6	0.06	0.11
(1,235)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:13:ASN:HD21	6	0.11	0.36
(1,235)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:13:ASN:HD21	6	0.11	0.36
(1,235)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:13:ASN:HD21	6	0.11	0.36
(1,211)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:138:LEU:HD11	6	0.09	0.23
(1,211)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:138:LEU:HD12	6	0.09	0.23
(1,211)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:138:LEU:HD13	6	0.09	0.23
(1,211)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:138:LEU:HD11	6	0.09	0.23



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,211)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:138:LEU:HD12	6	0.09	0.23
(1,211)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:138:LEU:HD13	6	0.09	0.23
(1,211)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:138:LEU:HD11	6	0.09	0.23
(1,211)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:138:LEU:HD12	6	0.09	0.23
(1,211)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:138:LEU:HD13	6	0.09	0.23
(1,201)	1:A:88:THR:H	1:A:102:VAL:HG11	6	0.08	0.19
(1,201)	1:A:88:THR:H	1:A:102:VAL:HG12	6	0.08	0.19
(1,201)	1:A:88:THR:H	1:A:102:VAL:HG13	6	0.08	0.19
(1,194)	1:A:42:TYR:H	1:A:43:VAL:HG11	6	0.06	0.11
(1,194)	1:A:42:TYR:H	1:A:43:VAL:HG12	6	0.06	0.11
(1,194)	1:A:42:TYR:H	1:A:43:VAL:HG13	6	0.06	0.11
(1,160)	1:A:54:SER:H	1:A:56:ASP:H	6	0.06	0.13
(1,111)	1:A:92:SER:H	1:A:97:SER:H	6	1.03	1.85
(1,106)	1:A:105:ASP:H	1:A:113:ARG:H	6	0.09	0.2
(1,98)	1:A:31:ASN:H	1:A:34:TRP:H	5	0.15	0.3
(1,64)	1:A:47:SER:HG	1:A:49:LYS:H	5	0.04	0.07
(1,59)	1:A:132:GLU:H	1:A:138:LEU:HD11	5	0.06	0.11
(1,59)	1:A:132:GLU:H	1:A:138:LEU:HD12	5	0.06	0.11
(1,59)	1:A:132:GLU:H	1:A:138:LEU:HD13	5	0.06	0.11
(1,584)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD11	5	0.08	0.11
(1,584)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD12	5	0.08	0.11
(1,584)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD13	5	0.08	0.11
(1,577)	1:A:111:GLY:H	1:A:112:LEU:HD21	5	0.07	0.12
(1,577)	1:A:111:GLY:H	1:A:112:LEU:HD22	5	0.07	0.12
(1,577)	1:A:111:GLY:H	1:A:112:LEU:HD23	5	0.07	0.12
(1,507)	1:A:75:VAL:HG11	1:A:77:GLU:H	5	0.07	0.18
(1,507)	1:A:75:VAL:HG12	1:A:77:GLU:H	5	0.07	0.18
(1,507)	1:A:75:VAL:HG13	1:A:77:GLU:H	5	0.07	0.18
(1,501)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG21	5	0.05	0.09
(1,501)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG22	5	0.05	0.09
(1,501)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG23	5	0.05	0.09
(1,496)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:54:SER:H	5	0.05	0.08
(1,496)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:54:SER:H	5	0.05	0.08
(1,496)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:54:SER:H	5	0.05	0.08
(1,448)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:89:GLU:H	5	0.05	0.07
(1,448)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:89:GLU:H	5	0.05	0.07
(1,448)	1:A:79:LEU:HD13	1:A:89:GLU:H	5	0.05	0.07
(1,447)	1:A:41:LEU:H	1:A:124:VAL:HG21	5	0.06	0.09
(1,447)	1:A:41:LEU:H	1:A:124:VAL:HG22	5	0.06	0.09
(1,447)	1:A:41:LEU:H	1:A:124:VAL:HG23	5	0.06	0.09
(1,420)	1:A:19:VAL:H	1:A:19:VAL:HG11	5	0.02	0.04
(1,420)	1:A:19:VAL:H	1:A:19:VAL:HG12	5	0.02	0.04



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,420)	1:A:19:VAL:H	1:A:19:VAL:HG13	5	0.02	0.04
(1,39)	1:A:140:LEU:H	1:A:140:LEU:HD11	5	0.04	0.08
(1,39)	1:A:140:LEU:H	1:A:140:LEU:HD12	5	0.04	0.08
(1,39)	1:A:140:LEU:H	1:A:140:LEU:HD13	5	0.04	0.08
(1,379)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:H	5	0.07	0.17
(1,357)	1:A:119:ALA:H	1:A:121:LEU:H	5	0.03	0.06
(1,351)	1:A:108:GLY:H	1:A:112:LEU:H	5	0.06	0.07
(1,341)	1:A:99:LEU:H	1:A:100:GLY:H	5	0.03	0.07
(1,339)	1:A:92:SER:H	1:A:98:HIS:H	5	0.15	0.29
(1,332)	1:A:85:MET:H	1:A:86:ILE:H	5	0.06	0.1
(1,305)	1:A:25:THR:H	1:A:26:GLU:H	5	0.04	0.07
(1,281)	1:A:110:ASN:HD22	1:A:112:LEU:H	5	0.1	0.2
(1,274)	1:A:80:ASP:H	1:A:89:GLU:H	5	0.07	0.09
(1,244)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:130:LYS:H	5	0.03	0.05
(1,244)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:130:LYS:H	5	0.03	0.05
(1,244)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:130:LYS:H	5	0.03	0.05
(1,22)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:137:TYR:H	5	0.05	0.11
(1,22)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:137:TYR:H	5	0.05	0.11
(1,22)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:137:TYR:H	5	0.05	0.11
(1,212)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:129:LEU:HD11	5	0.07	0.1
(1,212)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:129:LEU:HD12	5	0.07	0.1
(1,212)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:129:LEU:HD13	5	0.07	0.1
(1,212)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:129:LEU:HD11	5	0.07	0.1
(1,212)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:129:LEU:HD12	5	0.07	0.1
(1,212)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:129:LEU:HD13	5	0.07	0.1
(1,212)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:129:LEU:HD11	5	0.07	0.1
(1,212)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:129:LEU:HD12	5	0.07	0.1
(1,212)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:129:LEU:HD13	5	0.07	0.1
(1,145)	1:A:128:LYS:H	1:A:130:LYS:H	5	0.06	0.18
(1,132)	1:A:16:GLN:H	1:A:19:VAL:H	5	0.07	0.14
(1,114)	1:A:29:PHE:H	1:A:31:ASN:H	5	0.11	0.28
(1,104)	1:A:73:GLU:H	1:A:75:VAL:H	5	0.02	0.04
(1,87)	1:A:31:ASN:H	1:A:34:TRP:HE1	4	0.06	0.15
(1,65)	1:A:118:SER:HG	1:A:119:ALA:H	4	0.04	0.09
(1,614)	1:A:86:ILE:HD11	1:A:80:ASP:H	4	0.04	0.08
(1,614)	1:A:86:ILE:HD12	1:A:80:ASP:H	4	0.04	0.08
(1,614)	1:A:86:ILE:HD13	1:A:80:ASP:H	4	0.04	0.08
(1,601)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD11	4	0.09	0.19
(1,601)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD12	4	0.09	0.19
(1,601)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD13	4	0.09	0.19
(1,601)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD21	4	0.09	0.19
(1,601)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD22	4	0.09	0.19



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,601)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD23	4	0.09	0.19
(1,601)	1:A:142:ASN:HD22	1:A:144:LEU:HD11	4	0.09	0.19
(1,601)	1:A:142:ASN:HD22	1:A:144:LEU:HD12	4	0.09	0.19
(1,601)	1:A:142:ASN:HD22	1:A:144:LEU:HD13	4	0.09	0.19
(1,601)	1:A:142:ASN:HD22	1:A:144:LEU:HD21	4	0.09	0.19
(1,601)	1:A:142:ASN:HD22	1:A:144:LEU:HD22	4	0.09	0.19
(1,601)	1:A:142:ASN:HD22	1:A:144:LEU:HD23	4	0.09	0.19
(1,595)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD11	4	0.05	0.07
(1,595)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD12	4	0.05	0.07
(1,595)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD13	4	0.05	0.07
(1,595)	1:A:104:ASN:HD22	1:A:112:LEU:HD11	4	0.05	0.07
(1,595)	1:A:104:ASN:HD22	1:A:112:LEU:HD12	4	0.05	0.07
(1,595)	1:A:104:ASN:HD22	1:A:112:LEU:HD13	4	0.05	0.07
(1,588)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:22:ASN:H	4	0.11	0.19
(1,588)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:22:ASN:H	4	0.11	0.19
(1,588)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:22:ASN:H	4	0.11	0.19
(1,583)	1:A:90:VAL:H	1:A:102:VAL:HG21	4	0.07	0.16
(1,583)	1:A:90:VAL:H	1:A:102:VAL:HG22	4	0.07	0.16
(1,583)	1:A:90:VAL:H	1:A:102:VAL:HG23	4	0.07	0.16
(1,552)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD21	4	0.03	0.07
(1,552)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD22	4	0.03	0.07
(1,552)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD23	4	0.03	0.07
(1,534)	1:A:101:HIS:H	1:A:102:VAL:HG11	4	0.06	0.09
(1,534)	1:A:101:HIS:H	1:A:102:VAL:HG12	4	0.06	0.09
(1,534)	1:A:101:HIS:H	1:A:102:VAL:HG13	4	0.06	0.09
(1,500)	1:A:73:GLU:H	1:A:75:VAL:HG21	4	0.02	0.03
(1,500)	1:A:73:GLU:H	1:A:75:VAL:HG22	4	0.02	0.03
(1,500)	1:A:73:GLU:H	1:A:75:VAL:HG23	4	0.02	0.03
(1,50)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:64:TRP:HE1	4	0.04	0.08
(1,50)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:64:TRP:HE1	4	0.04	0.08
(1,50)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:64:TRP:HE1	4	0.04	0.08
(1,49)	1:A:78:LYS:H	1:A:90:VAL:HG11	4	0.06	0.11
(1,49)	1:A:78:LYS:H	1:A:90:VAL:HG12	4	0.06	0.11
(1,49)	1:A:78:LYS:H	1:A:90:VAL:HG13	4	0.06	0.11
(1,48)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:88:THR:H	4	0.08	0.17
(1,48)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:88:THR:H	4	0.08	0.17
(1,48)	1:A:79:LEU:HD13	1:A:88:THR:H	4	0.08	0.17
(1,442)	1:A:71:ILE:H	1:A:75:VAL:HG11	4	0.06	0.14
(1,442)	1:A:71:ILE:H	1:A:75:VAL:HG12	4	0.06	0.14
(1,442)	1:A:71:ILE:H	1:A:75:VAL:HG13	4	0.06	0.14
(1,421)	1:A:43:VAL:H	1:A:43:VAL:HG11	4	0.03	0.05
(1,421)	1:A:43:VAL:H	1:A:43:VAL:HG12	4	0.03	0.05



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,421)	1:A:43:VAL:H	1:A:43:VAL:HG13	4	0.03	0.05
(1,414)	1:A:12:LEU:H	1:A:12:LEU:HD21	4	0.03	0.06
(1,414)	1:A:12:LEU:H	1:A:12:LEU:HD22	4	0.03	0.06
(1,414)	1:A:12:LEU:H	1:A:12:LEU:HD23	4	0.03	0.06
(1,377)	1:A:134:TYR:H	1:A:135:GLU:H	4	0.14	0.31
(1,365)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:H	4	0.03	0.06
(1,353)	1:A:104:ASN:H	1:A:106:GLY:H	4	0.14	0.3
(1,345)	1:A:103:PHE:H	1:A:105:ASP:H	4	0.09	0.13
(1,322)	1:A:54:SER:H	1:A:57:LYS:H	4	0.09	0.15
(1,284)	1:A:6:GLU:H	1:A:8:LYS:H	4	0.1	0.24
(1,269)	1:A:22:ASN:HD22	1:A:24:GLY:H	4	0.04	0.04
(1,207)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:124:VAL:HG11	4	0.03	0.04
(1,207)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:124:VAL:HG12	4	0.03	0.04
(1,207)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:124:VAL:HG13	4	0.03	0.04
(1,207)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:124:VAL:HG11	4	0.03	0.04
(1,207)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:124:VAL:HG12	4	0.03	0.04
(1,207)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:124:VAL:HG13	4	0.03	0.04
(1,207)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:124:VAL:HG11	4	0.03	0.04
(1,207)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:124:VAL:HG12	4	0.03	0.04
(1,207)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:124:VAL:HG13	4	0.03	0.04
(1,2)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:114:TYR:H	4	0.08	0.12
(1,2)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:114:TYR:H	4	0.08	0.12
(1,2)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:114:TYR:H	4	0.08	0.12
(1,180)	1:A:90:VAL:HG21	1:A:91:ARG:H	4	0.03	0.05
(1,180)	1:A:90:VAL:HG22	1:A:91:ARG:H	4	0.03	0.05
(1,180)	1:A:90:VAL:HG23	1:A:91:ARG:H	4	0.03	0.05
(1,18)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:128:LYS:H	4	0.03	0.06
(1,18)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:128:LYS:H	4	0.03	0.06
(1,18)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:128:LYS:H	4	0.03	0.06
(1,158)	1:A:77:GLU:H	1:A:78:LYS:H	4	0.02	0.04
(1,150)	1:A:81:THR:H	1:A:82:SER:H	4	0.03	0.05
(1,102)	1:A:52:PHE:H	1:A:71:ILE:H	4	0.05	0.09
(1,93)	1:A:8:LYS:H	1:A:10:LYS:H	3	0.11	0.16
(1,79)	1:A:45:ILE:H	1:A:47:SER:H	3	0.06	0.08
(1,580)	1:A:112:LEU:HD21	1:A:113:ARG:H	3	0.11	0.19
(1,580)	1:A:112:LEU:HD22	1:A:113:ARG:H	3	0.11	0.19
(1,580)	1:A:112:LEU:HD23	1:A:113:ARG:H	3	0.11	0.19
(1,570)	1:A:140:LEU:H	1:A:140:LEU:HD21	3	0.04	0.06
(1,570)	1:A:140:LEU:H	1:A:140:LEU:HD22	3	0.04	0.06
(1,570)	1:A:140:LEU:H	1:A:140:LEU:HD23	3	0.04	0.06
(1,56)	1:A:110:ASN:HD22	1:A:112:LEU:HD11	3	0.36	1.04
(1,56)	1:A:110:ASN:HD22	1:A:112:LEU:HD12	3	0.36	1.04



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,56)	1:A:110:ASN:HD22	1:A:112:LEU:HD13	3	0.36	1.04
(1,559)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:132:GLU:H	3	0.06	0.12
(1,559)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:132:GLU:H	3	0.06	0.12
(1,559)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:132:GLU:H	3	0.06	0.12
(1,557)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:131:GLU:H	3	0.07	0.11
(1,557)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:131:GLU:H	3	0.07	0.11
(1,557)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:131:GLU:H	3	0.07	0.11
(1,555)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD11	3	0.1	0.12
(1,555)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD12	3	0.1	0.12
(1,555)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD13	3	0.1	0.12
(1,535)	1:A:101:HIS:H	1:A:116:ILE:HD11	3	0.05	0.07
(1,535)	1:A:101:HIS:H	1:A:116:ILE:HD12	3	0.05	0.07
(1,535)	1:A:101:HIS:H	1:A:116:ILE:HD13	3	0.05	0.07
(1,528)	1:A:105:ASP:H	1:A:112:LEU:HD21	3	0.05	0.07
(1,528)	1:A:105:ASP:H	1:A:112:LEU:HD22	3	0.05	0.07
(1,528)	1:A:105:ASP:H	1:A:112:LEU:HD23	3	0.05	0.07
(1,526)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:98:HIS:H	3	0.11	0.15
(1,526)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:98:HIS:H	3	0.11	0.15
(1,526)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:98:HIS:H	3	0.11	0.15
(1,525)	1:A:98:HIS:H	1:A:99:LEU:HD21	3	0.11	0.17
(1,525)	1:A:98:HIS:H	1:A:99:LEU:HD22	3	0.11	0.17
(1,525)	1:A:98:HIS:H	1:A:99:LEU:HD23	3	0.11	0.17
(1,520)	1:A:90:VAL:H	1:A:90:VAL:HG11	3	0.04	0.07
(1,520)	1:A:90:VAL:H	1:A:90:VAL:HG12	3	0.04	0.07
(1,520)	1:A:90:VAL:H	1:A:90:VAL:HG13	3	0.04	0.07
(1,511)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:122:ARG:H	3	0.03	0.05
(1,511)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:122:ARG:H	3	0.03	0.05
(1,511)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:122:ARG:H	3	0.03	0.05
(1,463)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:16:GLN:H	3	0.04	0.07
(1,463)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:16:GLN:H	3	0.04	0.07
(1,463)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:16:GLN:H	3	0.04	0.07
(1,42)	1:A:15:MET:H	1:A:19:VAL:HG21	3	0.07	0.11
(1,42)	1:A:15:MET:H	1:A:19:VAL:HG22	3	0.07	0.11
(1,42)	1:A:15:MET:H	1:A:19:VAL:HG23	3	0.07	0.11
(1,412)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:138:LEU:HD21	3	0.02	0.02
(1,412)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:138:LEU:HD22	3	0.02	0.02
(1,412)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:138:LEU:HD23	3	0.02	0.02
(1,412)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:138:LEU:HD21	3	0.02	0.02
(1,412)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:138:LEU:HD22	3	0.02	0.02
(1,412)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:138:LEU:HD23	3	0.02	0.02
(1,412)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:138:LEU:HD21	3	0.02	0.02
(1,412)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:138:LEU:HD22	3	0.02	0.02



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,412)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:138:LEU:HD23	3	0.02	0.02
(1,399)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:129:LEU:HD21	3	0.09	0.13
(1,399)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:129:LEU:HD22	3	0.09	0.13
(1,399)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:129:LEU:HD23	3	0.09	0.13
(1,399)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:129:LEU:HD21	3	0.09	0.13
(1,399)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:129:LEU:HD22	3	0.09	0.13
(1,399)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:129:LEU:HD23	3	0.09	0.13
(1,399)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:129:LEU:HD21	3	0.09	0.13
(1,399)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:129:LEU:HD22	3	0.09	0.13
(1,399)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:129:LEU:HD23	3	0.09	0.13
(1,381)	1:A:140:LEU:H	1:A:142:ASN:H	3	0.04	0.08
(1,38)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:13:ASN:HD22	3	0.05	0.1
(1,38)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:13:ASN:HD22	3	0.05	0.1
(1,38)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:13:ASN:HD22	3	0.05	0.1
(1,370)	1:A:129:LEU:H	1:A:130:LYS:H	3	0.04	0.05
(1,336)	1:A:90:VAL:H	1:A:101:HIS:H	3	0.09	0.12
(1,334)	1:A:89:GLU:H	1:A:90:VAL:H	3	0.02	0.02
(1,318)	1:A:44:ASP:H	1:A:48:GLY:H	3	0.06	0.08
(1,309)	1:A:33:TYR:H	1:A:36:HIS:H	3	0.17	0.3
(1,29)	1:A:78:LYS:H	1:A:90:VAL:HG21	3	0.03	0.04
(1,29)	1:A:78:LYS:H	1:A:90:VAL:HG22	3	0.03	0.04
(1,29)	1:A:78:LYS:H	1:A:90:VAL:HG23	3	0.03	0.04
(1,250)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:25:THR:H	3	0.07	0.16
(1,250)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:25:THR:H	3	0.07	0.16
(1,250)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:25:THR:H	3	0.07	0.16
(1,236)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:140:LEU:HD11	3	0.02	0.03
(1,236)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:140:LEU:HD12	3	0.02	0.03
(1,236)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:140:LEU:HD13	3	0.02	0.03
(1,236)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:140:LEU:HD11	3	0.02	0.03
(1,236)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:140:LEU:HD12	3	0.02	0.03
(1,236)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:140:LEU:HD13	3	0.02	0.03
(1,236)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:140:LEU:HD11	3	0.02	0.03
(1,236)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:140:LEU:HD12	3	0.02	0.03
(1,236)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:140:LEU:HD13	3	0.02	0.03
(1,222)	1:A:71:ILE:HD11	1:A:140:LEU:HD21	3	0.17	0.24
(1,222)	1:A:71:ILE:HD11	1:A:140:LEU:HD22	3	0.17	0.24
(1,222)	1:A:71:ILE:HD11	1:A:140:LEU:HD23	3	0.17	0.24
(1,222)	1:A:71:ILE:HD12	1:A:140:LEU:HD21	3	0.17	0.24
(1,222)	1:A:71:ILE:HD12	1:A:140:LEU:HD22	3	0.17	0.24
(1,222)	1:A:71:ILE:HD12	1:A:140:LEU:HD23	3	0.17	0.24
(1,222)	1:A:71:ILE:HD13	1:A:140:LEU:HD21	3	0.17	0.24
(1,222)	1:A:71:ILE:HD13	1:A:140:LEU:HD22	3	0.17	0.24



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	ea from previous page. Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,222)	1:A:71:ILE:HD13	1:A:140:LEU:HD23	3	0.17	0.24
(1,221)	1:A:71:ILE:HD11	1:A:140:LEU:HD11	3	0.03	0.04
(1,221)	1:A:71:ILE:HD11	1:A:140:LEU:HD12	3	0.03	0.04
(1,221)	1:A:71:ILE:HD11	1:A:140:LEU:HD13	3	0.03	0.04
(1,221)	1:A:71:ILE:HD12	1:A:140:LEU:HD11	3	0.03	0.04
(1,221)	1:A:71:ILE:HD12	1:A:140:LEU:HD12	3	0.03	0.04
(1,221)	1:A:71:ILE:HD12	1:A:140:LEU:HD13	3	0.03	0.04
(1,221)	1:A:71:ILE:HD13	1:A:140:LEU:HD11	3	0.03	0.04
(1,221)	1:A:71:ILE:HD13	1:A:140:LEU:HD12	3	0.03	0.04
(1,221)	1:A:71:ILE:HD13	1:A:140:LEU:HD13	3	0.03	0.04
(1,213)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:43:VAL:HG11	3	0.02	0.03
(1,213)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:43:VAL:HG12	3	0.02	0.03
(1,213)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:43:VAL:HG13	3	0.02	0.03
(1,213)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:43:VAL:HG11	3	0.02	0.03
(1,213)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:43:VAL:HG12	3	0.02	0.03
(1,213)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:43:VAL:HG13	3	0.02	0.03
(1,213)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:43:VAL:HG11	3	0.02	0.03
(1,213)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:43:VAL:HG12	3	0.02	0.03
(1,213)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:43:VAL:HG13	3	0.02	0.03
(1,189)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:124:VAL:HG21	3	0.07	0.09
(1,189)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:124:VAL:HG22	3	0.07	0.09
(1,189)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:124:VAL:HG23	3	0.07	0.09
(1,189)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:HG21	3	0.07	0.09
(1,189)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:HG22	3	0.07	0.09
(1,189)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:HG23	3	0.07	0.09
(1,189)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:HG21	3	0.07	0.09
(1,189)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:HG22	3	0.07	0.09
(1,189)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:HG23	3	0.07	0.09
(1,164)	1:A:76:GLU:H	1:A:77:GLU:H	3	0.03	0.05
(1,133)	1:A:7:GLU:H	1:A:9:ILE:H	3	0.07	0.1
(1,124)	1:A:5:LYS:H	1:A:7:GLU:H	3	0.07	0.13
(1,75)	1:A:29:PHE:H	1:A:30:GLN:H	2	0.08	0.09
(1,74)	1:A:30:GLN:H	1:A:31:ASN:H	2	0.19	0.27
(1,67)	1:A:117:ASN:H	1:A:117:ASN:HD22	2	0.08	0.13
(1,605)	1:A:54:SER:H	1:A:40:GLY:H	2	0.16	0.18
(1,600)	1:A:142:ASN:H	1:A:142:ASN:HD21	2	0.16	0.18
(1,600)	1:A:142:ASN:H	1:A:142:ASN:HD22	2	0.16	0.18
(1,598)	1:A:110:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD11	2	0.22	0.4
(1,598)	1:A:110:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD12	2	0.22	0.4
(1,598)	1:A:110:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD13	2	0.22	0.4
(1,598)	1:A:110:ASN:HD22	1:A:112:LEU:HD11	2	0.22	0.4
(1,598)	1:A:110:ASN:HD22	1:A:112:LEU:HD12	2	0.22	0.4



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,598)	1:A:110:ASN:HD22	1:A:112:LEU:HD13	2	0.22	0.4
(1,592)	1:A:22:ASN:H	1:A:22:ASN:HD21	2	0.06	0.07
(1,592)	1:A:22:ASN:H	1:A:22:ASN:HD22	2	0.06	0.07
(1,575)	1:A:144:LEU:HD21	1:A:145:GLU:H	2	0.06	0.06
(1,575)	1:A:144:LEU:HD22	1:A:145:GLU:H	2	0.06	0.06
(1,575)	1:A:144:LEU:HD23	1:A:145:GLU:H	2	0.06	0.06
(1,568)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:140:LEU:H	2	0.31	0.33
(1,568)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:140:LEU:H	2	0.31	0.33
(1,568)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:140:LEU:H	2	0.31	0.33
(1,553)	1:A:124:VAL:H	1:A:124:VAL:HG11	2	0.02	0.02
(1,553)	1:A:124:VAL:H	1:A:124:VAL:HG12	2	0.02	0.02
(1,553)	1:A:124:VAL:H	1:A:124:VAL:HG13	2	0.02	0.02
(1,55)	1:A:110:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD11	2	0.05	0.07
(1,55)	1:A:110:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD12	2	0.05	0.07
(1,55)	1:A:110:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD13	2	0.05	0.07
(1,546)	1:A:121:LEU:H	1:A:121:LEU:HD21	2	0.15	0.19
(1,546)	1:A:121:LEU:H	1:A:121:LEU:HD22	2	0.15	0.19
(1,546)	1:A:121:LEU:H	1:A:121:LEU:HD23	2	0.15	0.19
(1,529)	1:A:99:LEU:H	1:A:116:ILE:HD11	2	0.1	0.13
(1,529)	1:A:99:LEU:H	1:A:116:ILE:HD12	2	0.1	0.13
(1,529)	1:A:99:LEU:H	1:A:116:ILE:HD13	2	0.1	0.13
(1,52)	1:A:16:GLN:HE21	1:A:46:VAL:HG11	2	0.07	0.11
(1,52)	1:A:16:GLN:HE21	1:A:46:VAL:HG12	2	0.07	0.11
(1,52)	1:A:16:GLN:HE21	1:A:46:VAL:HG13	2	0.07	0.11
(1,516)	1:A:89:GLU:H	1:A:90:VAL:HG11	2	0.04	0.06
(1,516)	1:A:89:GLU:H	1:A:90:VAL:HG12	2	0.04	0.06
(1,516)	1:A:89:GLU:H	1:A:90:VAL:HG13	2	0.04	0.06
(1,494)	1:A:52:PHE:H	1:A:71:ILE:HD11	2	0.03	0.04
(1,494)	1:A:52:PHE:H	1:A:71:ILE:HD12	2	0.03	0.04
(1,494)	1:A:52:PHE:H	1:A:71:ILE:HD13	2	0.03	0.04
(1,490)	1:A:51:LEU:HD11	1:A:52:PHE:H	2	0.1	0.11
(1,490)	1:A:51:LEU:HD12	1:A:52:PHE:H	2	0.1	0.11
(1,490)	1:A:51:LEU:HD13	1:A:52:PHE:H	2	0.1	0.11
(1,475)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:44:ASP:H	2	0.06	0.08
(1,475)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:44:ASP:H	2	0.06	0.08
(1,475)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:44:ASP:H	2	0.06	0.08
(1,446)	1:A:45:ILE:H	1:A:121:LEU:HD21	2	0.04	0.04
(1,446)	1:A:45:ILE:H	1:A:121:LEU:HD22	2	0.04	0.04
(1,446)	1:A:45:ILE:H	1:A:121:LEU:HD23	2	0.04	0.04
(1,441)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:124:VAL:H	2	0.04	0.06
(1,441)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:124:VAL:H	2	0.04	0.06
(1,441)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:124:VAL:H	2	0.04	0.06



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,428)	1:A:79:LEU:HD21	1:A:80:ASP:H	2	0.03	0.03
(1,428)	1:A:79:LEU:HD22	1:A:80:ASP:H	2	0.03	0.03
(1,428)	1:A:79:LEU:HD23	1:A:80:ASP:H	2	0.03	0.03
(1,424)	1:A:90:VAL:HG21	1:A:115:CYS:H	2	0.04	0.05
(1,424)	1:A:90:VAL:HG22	1:A:115:CYS:H	2	0.04	0.05
(1,424)	1:A:90:VAL:HG23	1:A:115:CYS:H	2	0.04	0.05
(1,413)	1:A:51:LEU:HD11	1:A:121:LEU:HD11	2	0.03	0.06
(1,413)	1:A:51:LEU:HD11	1:A:121:LEU:HD12	2	0.03	0.06
(1,413)	1:A:51:LEU:HD11	1:A:121:LEU:HD13	2	0.03	0.06
(1,413)	1:A:51:LEU:HD12	1:A:121:LEU:HD11	2	0.03	0.06
(1,413)	1:A:51:LEU:HD12	1:A:121:LEU:HD12	2	0.03	0.06
(1,413)	1:A:51:LEU:HD12	1:A:121:LEU:HD13	2	0.03	0.06
(1,413)	1:A:51:LEU:HD13	1:A:121:LEU:HD11	2	0.03	0.06
(1,413)	1:A:51:LEU:HD13	1:A:121:LEU:HD12	2	0.03	0.06
(1,413)	1:A:51:LEU:HD13	1:A:121:LEU:HD13	2	0.03	0.06
(1,360)	1:A:43:VAL:H	1:A:122:ARG:H	2	0.06	0.08
(1,328)	1:A:78:LYS:H	1:A:79:LEU:H	2	0.05	0.08
(1,275)	1:A:92:SER:H	1:A:99:LEU:H	2	0.17	0.24
(1,270)	1:A:42:TYR:H	1:A:54:SER:H	2	0.14	0.23
(1,261)	1:A:99:LEU:HD21	1:A:116:ILE:HD11	2	0.04	0.05
(1,261)	1:A:99:LEU:HD21	1:A:116:ILE:HD12	2	0.04	0.05
(1,261)	1:A:99:LEU:HD21	1:A:116:ILE:HD13	2	0.04	0.05
(1,261)	1:A:99:LEU:HD22	1:A:116:ILE:HD11	2	0.04	0.05
(1,261)	1:A:99:LEU:HD22	1:A:116:ILE:HD12	2	0.04	0.05
(1,261)	1:A:99:LEU:HD22	1:A:116:ILE:HD13	2	0.04	0.05
(1,261)	1:A:99:LEU:HD23	1:A:116:ILE:HD11	2	0.04	0.05
(1,261)	1:A:99:LEU:HD23	1:A:116:ILE:HD12	2	0.04	0.05
(1,261)	1:A:99:LEU:HD23	1:A:116:ILE:HD13	2	0.04	0.05
(1,258)	1:A:51:LEU:HD11	1:A:116:ILE:HD11	2	0.03	0.03
(1,258)	1:A:51:LEU:HD11	1:A:116:ILE:HD12	2	0.03	0.03
(1,258)	1:A:51:LEU:HD11	1:A:116:ILE:HD13	2	0.03	0.03
(1,258)	1:A:51:LEU:HD12	1:A:116:ILE:HD11	2	0.03	0.03
(1,258)	1:A:51:LEU:HD12	1:A:116:ILE:HD12	2	0.03	0.03
(1,258)	1:A:51:LEU:HD12	1:A:116:ILE:HD13	2	0.03	0.03
(1,258)	1:A:51:LEU:HD13	1:A:116:ILE:HD11	2	0.03	0.03
(1,258)	1:A:51:LEU:HD13	1:A:116:ILE:HD12	2	0.03	0.03
(1,258)	1:A:51:LEU:HD13	1:A:116:ILE:HD13	2	0.03	0.03
(1,257)	1:A:51:LEU:HD11	1:A:75:VAL:HG21	2	0.05	0.07
(1,257)	1:A:51:LEU:HD11	1:A:75:VAL:HG22	2	0.05	0.07
(1,257)	1:A:51:LEU:HD11	1:A:75:VAL:HG23	2	0.05	0.07
(1,257)	1:A:51:LEU:HD12	1:A:75:VAL:HG21	2	0.05	0.07
(1,257)	1:A:51:LEU:HD12	1:A:75:VAL:HG22	2	0.05	0.07



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	ea jrom previous page Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,257)	1:A:51:LEU:HD12	1:A:75:VAL:HG23	2	0.05	0.07
(1,257)	1:A:51:LEU:HD13	1:A:75:VAL:HG21	2	0.05	0.07
(1,257)	1:A:51:LEU:HD13	1:A:75:VAL:HG22	2	0.05	0.07
(1,257)	1:A:51:LEU:HD13	1:A:75:VAL:HG23	2	0.05	0.07
(1,252)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:99:LEU:HD11	2	0.05	0.06
(1,252)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:99:LEU:HD12	2	0.05	0.06
(1,252)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:99:LEU:HD13	2	0.05	0.06
(1,252)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:99:LEU:HD11	2	0.05	0.06
(1,252)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:99:LEU:HD12	2	0.05	0.06
(1,252)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:99:LEU:HD13	2	0.05	0.06
(1,252)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:99:LEU:HD11	2	0.05	0.06
(1,252)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:99:LEU:HD12	2	0.05	0.06
(1,252)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:99:LEU:HD13	2	0.05	0.06
(1,240)	1:A:75:VAL:H	1:A:99:LEU:HD11	2	0.11	0.2
(1,240)	1:A:75:VAL:H	1:A:99:LEU:HD12	2	0.11	0.2
(1,240)	1:A:75:VAL:H	1:A:99:LEU:HD13	2	0.11	0.2
(1,237)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:129:LEU:HD11	2	0.14	0.19
(1,237)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:129:LEU:HD12	2	0.14	0.19
(1,237)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:129:LEU:HD13	2	0.14	0.19
(1,237)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:129:LEU:HD11	2	0.14	0.19
(1,237)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:129:LEU:HD12	2	0.14	0.19
(1,237)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:129:LEU:HD13	2	0.14	0.19
(1,237)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:129:LEU:HD11	2	0.14	0.19
(1,237)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:129:LEU:HD12	2	0.14	0.19
(1,237)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:129:LEU:HD13	2	0.14	0.19
(1,230)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:129:LEU:HD21	2	0.01	0.02
(1,230)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:129:LEU:HD22	2	0.01	0.02
(1,230)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:129:LEU:HD23	2	0.01	0.02
(1,230)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:129:LEU:HD21	2	0.01	0.02
(1,230)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:129:LEU:HD22	2	0.01	0.02
(1,230)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:129:LEU:HD23	2	0.01	0.02
(1,230)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:129:LEU:HD21	2	0.01	0.02
(1,230)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:129:LEU:HD22	2	0.01	0.02
(1,230)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:129:LEU:HD23	2	0.01	0.02
(1,226)	1:A:92:SER:H	1:A:99:LEU:HD21	2	0.15	0.27
(1,226)	1:A:92:SER:H	1:A:99:LEU:HD22	2	0.15	0.27
(1,226)	1:A:92:SER:H	1:A:99:LEU:HD23	2	0.15	0.27
(1,220)	1:A:42:TYR:H	1:A:71:ILE:HD11	2	0.03	0.03
(1,220)	1:A:42:TYR:H	1:A:71:ILE:HD12	2	0.03	0.03
(1,220)	1:A:42:TYR:H	1:A:71:ILE:HD13	2	0.03	0.03
(1,210)	1:A:41:LEU:H	1:A:41:LEU:HD21	2	0.05	0.09
(1,210)	1:A:41:LEU:H	1:A:41:LEU:HD22	2	0.05	0.09



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,210)	1:A:41:LEU:H	1:A:41:LEU:HD23	2	0.05	0.09
(1,206)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:124:VAL:HG11	2	0.03	0.04
(1,206)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:124:VAL:HG12	2	0.03	0.04
(1,206)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:124:VAL:HG13	2	0.03	0.04
(1,206)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:HG11	2	0.03	0.04
(1,206)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:HG12	2	0.03	0.04
(1,206)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:HG13	2	0.03	0.04
(1,206)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:HG11	2	0.03	0.04
(1,206)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:HG12	2	0.03	0.04
(1,206)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:HG13	2	0.03	0.04
(1,195)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:124:VAL:HG21	2	0.05	0.06
(1,195)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:124:VAL:HG22	2	0.05	0.06
(1,195)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:124:VAL:HG23	2	0.05	0.06
(1,195)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:124:VAL:HG21	2	0.05	0.06
(1,195)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:124:VAL:HG22	2	0.05	0.06
(1,195)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:124:VAL:HG23	2	0.05	0.06
(1,195)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:124:VAL:HG21	2	0.05	0.06
(1,195)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:124:VAL:HG22	2	0.05	0.06
(1,195)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:124:VAL:HG23	2	0.05	0.06
(1,190)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:26:GLU:H	2	0.06	0.11
(1,190)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:26:GLU:H	2	0.06	0.11
(1,190)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:26:GLU:H	2	0.06	0.11
(1,177)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:43:VAL:HG21	2	0.02	0.03
(1,177)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:43:VAL:HG22	2	0.02	0.03
(1,177)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:43:VAL:HG23	2	0.02	0.03
(1,177)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:43:VAL:HG21	2	0.02	0.03
(1,177)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:43:VAL:HG22	2	0.02	0.03
(1,177)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:43:VAL:HG23	2	0.02	0.03
(1,177)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:43:VAL:HG21	2	0.02	0.03
(1,177)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:43:VAL:HG22	2	0.02	0.03
(1,177)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:43:VAL:HG23	2	0.02	0.03
(1,166)	1:A:40:GLY:H	1:A:54:SER:H	2	0.04	0.05
(1,90)	1:A:63:GLY:H	1:A:64:TRP:H	1	0.04	0.04
(1,82)	1:A:13:ASN:H	1:A:13:ASN:HD21	1	0.01	0.01
(1,72)	1:A:22:ASN:H	1:A:23:ASN:H	1	0.06	0.06
(1,622)	1:A:13:ASN:HD22	1:A:12:LEU:HD11	1	0.03	0.03
(1,622)	1:A:13:ASN:HD22	1:A:12:LEU:HD12	1	0.03	0.03
(1,622)	1:A:13:ASN:HD22	1:A:12:LEU:HD13	1	0.03	0.03
(1,62)	1:A:54:SER:HG	1:A:56:ASP:H	1	0.02	0.02
(1,619)	1:A:34:TRP:HE1	1:A:31:ASN:H	1	0.01	0.01
(1,617)	1:A:116:ILE:HD11	1:A:99:LEU:HD11	1	0.03	0.03
(1,617)	1:A:116:ILE:HD11	1:A:99:LEU:HD12	1	0.03	0.03



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,617)	1:A:116:ILE:HD11	1:A:99:LEU:HD13	1	0.03	0.03
(1,617)	1:A:116:ILE:HD12	1:A:99:LEU:HD11	1	0.03	0.03
(1,617)	1:A:116:ILE:HD12	1:A:99:LEU:HD12	1	0.03	0.03
(1,617)	1:A:116:ILE:HD12	1:A:99:LEU:HD13	1	0.03	0.03
(1,617)	1:A:116:ILE:HD13	1:A:99:LEU:HD11	1	0.03	0.03
(1,617)	1:A:116:ILE:HD13	1:A:99:LEU:HD12	1	0.03	0.03
(1,617)	1:A:116:ILE:HD13	1:A:99:LEU:HD13	1	0.03	0.03
(1,61)	1:A:54:SER:HG	1:A:55:LYS:H	1	0.16	0.16
(1,603)	1:A:144:LEU:HD11	1:A:145:GLU:H	1	0.09	0.09
(1,603)	1:A:144:LEU:HD12	1:A:145:GLU:H	1	0.09	0.09
(1,603)	1:A:144:LEU:HD13	1:A:145:GLU:H	1	0.09	0.09
(1,603)	1:A:144:LEU:HD21	1:A:145:GLU:H	1	0.09	0.09
(1,603)	1:A:144:LEU:HD22	1:A:145:GLU:H	1	0.09	0.09
(1,603)	1:A:144:LEU:HD23	1:A:145:GLU:H	1	0.09	0.09
(1,593)	1:A:22:ASN:HD21	1:A:23:ASN:H	1	0.01	0.01
(1,593)	1:A:22:ASN:HD22	1:A:23:ASN:H	1	0.01	0.01
(1,590)	1:A:16:GLN:HE21	1:A:45:ILE:HD11	1	0.08	0.08
(1,590)	1:A:16:GLN:HE21	1:A:45:ILE:HD12	1	0.08	0.08
(1,590)	1:A:16:GLN:HE21	1:A:45:ILE:HD13	1	0.08	0.08
(1,590)	1:A:16:GLN:HE22	1:A:45:ILE:HD11	1	0.08	0.08
(1,590)	1:A:16:GLN:HE22	1:A:45:ILE:HD12	1	0.08	0.08
(1,590)	1:A:16:GLN:HE22	1:A:45:ILE:HD13	1	0.08	0.08
(1,578)	1:A:112:LEU:H	1:A:112:LEU:HD11	1	0.01	0.01
(1,578)	1:A:112:LEU:H	1:A:112:LEU:HD12	1	0.01	0.01
(1,578)	1:A:112:LEU:H	1:A:112:LEU:HD13	1	0.01	0.01
(1,574)	1:A:144:LEU:HD11	1:A:145:GLU:H	1	0.14	0.14
(1,574)	1:A:144:LEU:HD12	1:A:145:GLU:H	1	0.14	0.14
(1,574)	1:A:144:LEU:HD13	1:A:145:GLU:H	1	0.14	0.14
(1,567)	1:A:138:LEU:H	1:A:138:LEU:HD21	1	0.02	0.02
(1,567)	1:A:138:LEU:H	1:A:138:LEU:HD22	1	0.02	0.02
(1,567)	1:A:138:LEU:H	1:A:138:LEU:HD23	1	0.02	0.02
(1,563)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:137:TYR:H	1	0.08	0.08
(1,563)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:137:TYR:H	1	0.08	0.08
(1,563)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:137:TYR:H	1	0.08	0.08
(1,560)	1:A:134:TYR:H	1:A:138:LEU:HD11	1	0.13	0.13
(1,560)	1:A:134:TYR:H	1:A:138:LEU:HD12	1	0.13	0.13
(1,560)	1:A:134:TYR:H	1:A:138:LEU:HD13	1	0.13	0.13
(1,547)	1:A:45:ILE:HD11	1:A:121:LEU:H	1	0.03	0.03
(1,547)	1:A:45:ILE:HD12	1:A:121:LEU:H	1	0.03	0.03
(1,547)	1:A:45:ILE:HD13	1:A:121:LEU:H	1	0.03	0.03
(1,545)	1:A:121:LEU:H	1:A:121:LEU:HD11	1	0.02	0.02
(1,545)	1:A:121:LEU:H	1:A:121:LEU:HD12	1	0.02	0.02



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,545)	1:A:121:LEU:H	1:A:121:LEU:HD13	1	0.02	0.02
(1,531)	1:A:99:LEU:HD21	1:A:100:GLY:H	1	0.02	0.02
(1,531)	1:A:99:LEU:HD22	1:A:100:GLY:H	1	0.02	0.02
(1,531)	1:A:99:LEU:HD23	1:A:100:GLY:H	1	0.02	0.02
(1,524)	1:A:91:ARG:H	1:A:99:LEU:HD11	1	0.25	0.25
(1,524)	1:A:91:ARG:H	1:A:99:LEU:HD12	1	0.25	0.25
(1,524)	1:A:91:ARG:H	1:A:99:LEU:HD13	1	0.25	0.25
(1,514)	1:A:86:ILE:HD11	1:A:87:ARG:H	1	0.17	0.17
(1,514)	1:A:86:ILE:HD12	1:A:87:ARG:H	1	0.17	0.17
(1,514)	1:A:86:ILE:HD13	1:A:87:ARG:H	1	0.17	0.17
(1,508)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG21	1	0.03	0.03
(1,508)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG22	1	0.03	0.03
(1,508)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG23	1	0.03	0.03
(1,498)	1:A:71:ILE:H	1:A:75:VAL:HG21	1	0.02	0.02
(1,498)	1:A:71:ILE:H	1:A:75:VAL:HG22	1	0.02	0.02
(1,498)	1:A:71:ILE:H	1:A:75:VAL:HG23	1	0.02	0.02
(1,489)	1:A:51:LEU:H	1:A:71:ILE:HD11	1	0.03	0.03
(1,489)	1:A:51:LEU:H	1:A:71:ILE:HD12	1	0.03	0.03
(1,489)	1:A:51:LEU:H	1:A:71:ILE:HD13	1	0.03	0.03
(1,480)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:48:GLY:H	1	0.02	0.02
(1,480)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:48:GLY:H	1	0.02	0.02
(1,480)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:48:GLY:H	1	0.02	0.02
(1,476)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:44:ASP:H	1	0.04	0.04
(1,476)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:44:ASP:H	1	0.04	0.04
(1,476)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:44:ASP:H	1	0.04	0.04
(1,471)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:25:THR:H	1	0.04	0.04
(1,471)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:25:THR:H	1	0.04	0.04
(1,471)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:25:THR:H	1	0.04	0.04
(1,470)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:24:GLY:H	1	0.09	0.09
(1,470)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:24:GLY:H	1	0.09	0.09
(1,470)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:24:GLY:H	1	0.09	0.09
(1,459)	1:A:12:LEU:H	1:A:12:LEU:HD11	1	0.01	0.01
(1,459)	1:A:12:LEU:H	1:A:12:LEU:HD12	1	0.01	0.01
(1,459)	1:A:12:LEU:H	1:A:12:LEU:HD13	1	0.01	0.01
(1,436)	1:A:13:ASN:HD22	1:A:46:VAL:HG11	1	0.05	0.05
(1,436)	1:A:13:ASN:HD22	1:A:46:VAL:HG12	1	0.05	0.05
(1,436)	1:A:13:ASN:HD22	1:A:46:VAL:HG13	1	0.05	0.05
(1,426)	1:A:12:LEU:HD21	1:A:13:ASN:H	1	0.04	0.04
(1,426)	1:A:12:LEU:HD22	1:A:13:ASN:H	1	0.04	0.04
(1,426)	1:A:12:LEU:HD23	1:A:13:ASN:H	1	0.04	0.04
(1,425)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:119:ALA:H	1	0.15	0.15
(1,425)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:119:ALA:H	1	0.15	0.15



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,425)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:119:ALA:H	1	0.15	0.15
(1,404)	1:A:102:VAL:HG11	1:A:112:LEU:HD21	1	0.11	0.11
(1,404)	1:A:102:VAL:HG11	1:A:112:LEU:HD22	1	0.11	0.11
(1,404)	1:A:102:VAL:HG11	1:A:112:LEU:HD23	1	0.11	0.11
(1,404)	1:A:102:VAL:HG12	1:A:112:LEU:HD21	1	0.11	0.11
(1,404)	1:A:102:VAL:HG12	1:A:112:LEU:HD22	1	0.11	0.11
(1,404)	1:A:102:VAL:HG12	1:A:112:LEU:HD23	1	0.11	0.11
(1,404)	1:A:102:VAL:HG13	1:A:112:LEU:HD21	1	0.11	0.11
(1,404)	1:A:102:VAL:HG13	1:A:112:LEU:HD22	1	0.11	0.11
(1,404)	1:A:102:VAL:HG13	1:A:112:LEU:HD23	1	0.11	0.11
(1,398)	1:A:12:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HG21	1	0.01	0.01
(1,398)	1:A:12:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HG22	1	0.01	0.01
(1,398)	1:A:12:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HG23	1	0.01	0.01
(1,398)	1:A:12:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HG21	1	0.01	0.01
(1,398)	1:A:12:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HG22	1	0.01	0.01
(1,398)	1:A:12:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HG23	1	0.01	0.01
(1,398)	1:A:12:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HG21	1	0.01	0.01
(1,398)	1:A:12:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HG22	1	0.01	0.01
(1,398)	1:A:12:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HG23	1	0.01	0.01
(1,397)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:12:LEU:HD21	1	0.04	0.04
(1,397)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:12:LEU:HD22	1	0.04	0.04
(1,397)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:12:LEU:HD23	1	0.04	0.04
(1,397)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:12:LEU:HD21	1	0.04	0.04
(1,397)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:12:LEU:HD22	1	0.04	0.04
(1,397)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:12:LEU:HD23	1	0.04	0.04
(1,397)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:12:LEU:HD21	1	0.04	0.04
(1,397)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:12:LEU:HD22	1	0.04	0.04
(1,397)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:12:LEU:HD23	1	0.04	0.04
(1,364)	1:A:43:VAL:H	1:A:124:VAL:H	1	0.09	0.09
(1,36)	1:A:12:LEU:HD21	1:A:47:SER:H	1	0.07	0.07
(1,36)	1:A:12:LEU:HD22	1:A:47:SER:H	1	0.07	0.07
(1,36)	1:A:12:LEU:HD23	1:A:47:SER:H	1	0.07	0.07
(1,352)	1:A:104:ASN:H	1:A:113:ARG:H	1	0.02	0.02
(1,350)	1:A:108:GLY:H	1:A:111:GLY:H	1	0.09	0.09
(1,349)	1:A:106:GLY:H	1:A:113:ARG:H	1	0.07	0.07
(1,347)	1:A:103:PHE:H	1:A:114:TYR:H	1	0.13	0.13
(1,34)	1:A:104:ASN:HD22	1:A:112:LEU:HD21	1	0.15	0.15
(1,34)	1:A:104:ASN:HD22	1:A:112:LEU:HD22	1	0.15	0.15
(1,34)	1:A:104:ASN:HD22	1:A:112:LEU:HD23	1	0.15	0.15
(1,335)	1:A:90:VAL:H	1:A:100:GLY:H	1	0.01	0.01
(1,330)	1:A:80:ASP:H	1:A:87:ARG:H	1	0.03	0.03
(1,319)	1:A:45:ILE:H	1:A:48:GLY:H	1	0.02	0.02



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,317)	1:A:46:VAL:H	1:A:49:LYS:H	1	0.06	0.06
(1,306)	1:A:31:ASN:H	1:A:32:GLU:H	1	0.05	0.05
(1,302)	1:A:17:TYR:H	1:A:20:THR:H	1	0.02	0.02
(1,291)	1:A:8:LYS:H	1:A:11:SER:H	1	0.14	0.14
(1,290)	1:A:10:LYS:H	1:A:13:ASN:H	1	0.13	0.13
(1,277)	1:A:103:PHE:H	1:A:106:GLY:H	1	0.21	0.21
(1,273)	1:A:78:LYS:H	1:A:91:ARG:H	1	0.02	0.02
(1,260)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:99:LEU:HD21	1	0.06	0.06
(1,260)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:99:LEU:HD22	1	0.06	0.06
(1,260)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:99:LEU:HD23	1	0.06	0.06
(1,260)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:99:LEU:HD21	1	0.06	0.06
(1,260)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:99:LEU:HD22	1	0.06	0.06
(1,260)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:99:LEU:HD23	1	0.06	0.06
(1,260)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:99:LEU:HD21	1	0.06	0.06
(1,260)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:99:LEU:HD22	1	0.06	0.06
(1,260)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:99:LEU:HD23	1	0.06	0.06
(1,254)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:46:VAL:HG11	1	0.08	0.08
(1,254)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:46:VAL:HG12	1	0.08	0.08
(1,254)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:46:VAL:HG13	1	0.08	0.08
(1,254)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:46:VAL:HG11	1	0.08	0.08
(1,254)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:46:VAL:HG12	1	0.08	0.08
(1,254)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:46:VAL:HG13	1	0.08	0.08
(1,254)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:46:VAL:HG11	1	0.08	0.08
(1,254)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:46:VAL:HG12	1	0.08	0.08
(1,254)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:46:VAL:HG13	1	0.08	0.08
(1,245)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:129:LEU:HD11	1	0.02	0.02
(1,245)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:129:LEU:HD12	1	0.02	0.02
(1,245)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:129:LEU:HD13	1	0.02	0.02
(1,245)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:129:LEU:HD11	1	0.02	0.02
(1,245)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:129:LEU:HD12	1	0.02	0.02
(1,245)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:129:LEU:HD13	1	0.02	0.02
(1,245)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:129:LEU:HD11	1	0.02	0.02
(1,245)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:129:LEU:HD12	1	0.02	0.02
(1,245)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:129:LEU:HD13	1	0.02	0.02
(1,239)	1:A:51:LEU:HD11	1:A:99:LEU:HD21	1	0.01	0.01
(1,239)	1:A:51:LEU:HD11	1:A:99:LEU:HD22	1	0.01	0.01
(1,239)	1:A:51:LEU:HD11	1:A:99:LEU:HD23	1	0.01	0.01
(1,239)	1:A:51:LEU:HD12	1:A:99:LEU:HD21	1	0.01	0.01
(1,239)	1:A:51:LEU:HD12	1:A:99:LEU:HD22	1	0.01	0.01
(1,239)	1:A:51:LEU:HD12	1:A:99:LEU:HD23	1	0.01	0.01
(1,239)	1:A:51:LEU:HD13	1:A:99:LEU:HD21	1	0.01	0.01
(1,239)	1:A:51:LEU:HD13	1:A:99:LEU:HD22	1	0.01	0.01



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	ea jrom previous page Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,239)	1:A:51:LEU:HD13	1:A:99:LEU:HD23	1	0.01	0.01
(1,232)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:13:ASN:HD22	1	0.17	0.17
(1,232)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:13:ASN:HD22	1	0.17	0.17
(1,232)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:13:ASN:HD22	1	0.17	0.17
(1,215)	1:A:16:GLN:HE21	1:A:45:ILE:HD11	1	0.03	0.03
(1,215)	1:A:16:GLN:HE21	1:A:45:ILE:HD12	1	0.03	0.03
(1,215)	1:A:16:GLN:HE21	1:A:45:ILE:HD13	1	0.03	0.03
(1,214)	1:A:16:GLN:HE22	1:A:45:ILE:HD11	1	0.04	0.04
(1,214)	1:A:16:GLN:HE22	1:A:45:ILE:HD12	1	0.04	0.04
(1,214)	1:A:16:GLN:HE22	1:A:45:ILE:HD13	1	0.04	0.04
(1,200)	1:A:75:VAL:HG11	1:A:102:VAL:HG21	1	0.12	0.12
(1,200)	1:A:75:VAL:HG11	1:A:102:VAL:HG22	1	0.12	0.12
(1,200)	1:A:75:VAL:HG11	1:A:102:VAL:HG23	1	0.12	0.12
(1,200)	1:A:75:VAL:HG12	1:A:102:VAL:HG21	1	0.12	0.12
(1,200)	1:A:75:VAL:HG12	1:A:102:VAL:HG22	1	0.12	0.12
(1,200)	1:A:75:VAL:HG12	1:A:102:VAL:HG23	1	0.12	0.12
(1,200)	1:A:75:VAL:HG13	1:A:102:VAL:HG21	1	0.12	0.12
(1,200)	1:A:75:VAL:HG13	1:A:102:VAL:HG22	1	0.12	0.12
(1,200)	1:A:75:VAL:HG13	1:A:102:VAL:HG23	1	0.12	0.12
(1,197)	1:A:13:ASN:HD21	1:A:46:VAL:HG11	1	0.08	0.08
(1,197)	1:A:13:ASN:HD21	1:A:46:VAL:HG12	1	0.08	0.08
(1,197)	1:A:13:ASN:HD21	1:A:46:VAL:HG13	1	0.08	0.08
(1,193)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:HD22	1	0.05	0.05
(1,193)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:HD22	1	0.05	0.05
(1,193)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:HD22	1	0.05	0.05
(1,191)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:HD21	1	0.17	0.17
(1,191)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:HD21	1	0.17	0.17
(1,191)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:HD21	1	0.17	0.17
(1,187)	1:A:42:TYR:H	1:A:124:VAL:HG21	1	0.04	0.04
(1,187)	1:A:42:TYR:H	1:A:124:VAL:HG22	1	0.04	0.04
(1,187)	1:A:42:TYR:H	1:A:124:VAL:HG23	1	0.04	0.04
(1,186)	1:A:43:VAL:H	1:A:124:VAL:HG21	1	0.04	0.04
(1,186)	1:A:43:VAL:H	1:A:124:VAL:HG22	1	0.04	0.04
(1,186)	1:A:43:VAL:H	1:A:124:VAL:HG23	1	0.04	0.04
(1,183)	1:A:90:VAL:HG21	1:A:102:VAL:HG21	1	0.06	0.06
(1,183)	1:A:90:VAL:HG21	1:A:102:VAL:HG22	1	0.06	0.06
(1,183)	1:A:90:VAL:HG21	1:A:102:VAL:HG23	1	0.06	0.06
(1,183)	1:A:90:VAL:HG22	1:A:102:VAL:HG21	1	0.06	0.06
(1,183)	1:A:90:VAL:HG22	1:A:102:VAL:HG22	1	0.06	0.06
(1,183)	1:A:90:VAL:HG22	1:A:102:VAL:HG23	1	0.06	0.06
(1,183)	1:A:90:VAL:HG23	1:A:102:VAL:HG21	1	0.06	0.06
(1,183)	1:A:90:VAL:HG23	1:A:102:VAL:HG22	1	0.06	0.06



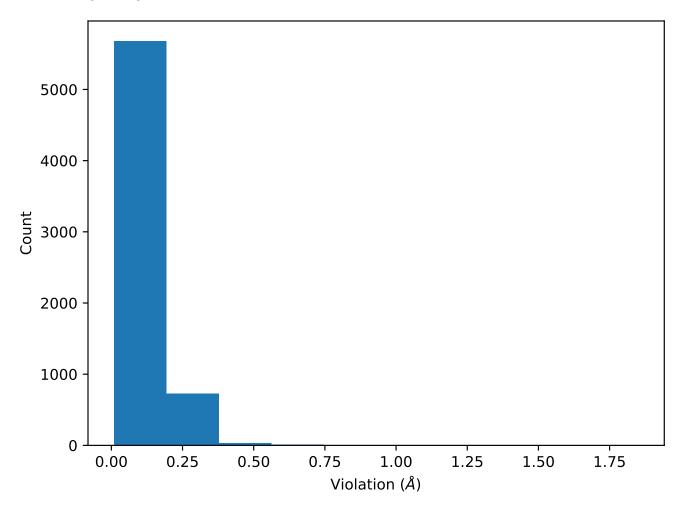
Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,183)	1:A:90:VAL:HG23	1:A:102:VAL:HG23	1	0.06	0.06
(1,182)	1:A:90:VAL:HG21	1:A:99:LEU:H	1	0.18	0.18
(1,182)	1:A:90:VAL:HG22	1:A:99:LEU:H	1	0.18	0.18
(1,182)	1:A:90:VAL:HG23	1:A:99:LEU:H	1	0.18	0.18
(1,167)	1:A:101:HIS:H	1:A:115:CYS:H	1	0.02	0.02
(1,144)	1:A:130:LYS:H	1:A:133:GLY:H	1	0.03	0.03
(1,110)	1:A:95:ALA:H	1:A:96:ASP:H	1	0.04	0.04

8.8 All distance violations

8.8.1 Histogram : Distribution of distance violations

The following histogram shows the distribution of violations in the ensemble.





8.8.2 Table : All distance violations

The following table lists the violations in the ensemble sorted by violation value

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,111)	1:A:92:SER:H	1:A:97:SER:H	17	1.85
(1,111)	1:A:92:SER:H	1:A:97:SER:H	10	1.82
(1,111)	1:A:92:SER:H	1:A:97:SER:H	3	1.39
(1,33)	1:A:92:SER:H	1:A:99:LEU:HD11	19	1.2
(1,33)	1:A:92:SER:H	1:A:99:LEU:HD12	19	1.2
(1,33)	1:A:92:SER:H	1:A:99:LEU:HD13	19	1.2
(1,56)	1:A:110:ASN:HD22	1:A:112:LEU:HD11	15	1.04
(1,56)	1:A:110:ASN:HD22	1:A:112:LEU:HD12	15	1.04
(1,56)	1:A:110:ASN:HD22	1:A:112:LEU:HD13	15	1.04
(1,162)	1:A:92:SER:H	1:A:96:ASP:H	10	1.04
(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD11	12	0.58
(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD12	12	0.58
(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD13	12	0.58
(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD11	12	0.58
(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD12	12	0.58
(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD13	12	0.58
(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD11	12	0.58
(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD12	12	0.58
(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD13	12	0.58
(1,572)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:141:PHE:H	8	0.48
(1,572)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:141:PHE:H	8	0.48
(1,572)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:141:PHE:H	8	0.48
(1,162)	1:A:92:SER:H	1:A:96:ASP:H	17	0.43
(1,111)	1:A:92:SER:H	1:A:97:SER:H	7	0.42
(1,111)	1:A:92:SER:H	1:A:97:SER:H	5	0.41
(1,598)	1:A:110:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD11	15	0.4
(1,598)	1:A:110:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD12	15	0.4
(1,598)	1:A:110:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD13	15	0.4
(1,598)	1:A:110:ASN:HD22	1:A:112:LEU:HD11	15	0.4
(1,598)	1:A:110:ASN:HD22	1:A:112:LEU:HD12	15	0.4
(1,598)	1:A:110:ASN:HD22	1:A:112:LEU:HD13	15	0.4
(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD11	3	0.4
(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD12	3	0.4
(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD13	3	0.4
(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD11	3	0.4
(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD12	3	0.4
(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD13	3	0.4
(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD11	3	0.4
(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD12	3	0.4
(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD13	3	0.4



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	ea jrom previous page Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD11	18	0.39
(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD12	18	0.39
(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD13	18	0.39
(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD11	18	0.39
(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD12	18	0.39
(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD13	18	0.39
(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD11	18	0.39
(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD12	18	0.39
(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD13	18	0.39
(1,572)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:141:PHE:H	9	0.37
(1,572)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:141:PHE:H	9	0.37
(1,572)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:141:PHE:H	9	0.37
(1,451)	1:A:75:VAL:HG11	1:A:91:ARG:H	17	0.37
(1,451)	1:A:75:VAL:HG12	1:A:91:ARG:H	17	0.37
(1,451)	1:A:75:VAL:HG13	1:A:91:ARG:H	17	0.37
(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD21	19	0.37
(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD22	19	0.37
(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD23	19	0.37
(1,40)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:97:SER:H	20	0.37
(1,40)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:97:SER:H	20	0.37
(1,40)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:97:SER:H	20	0.37
(1,550)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG21	11	0.36
(1,550)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG22	11	0.36
(1,550)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG23	11	0.36
(1,235)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:13:ASN:HD21	9	0.36
(1,235)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:13:ASN:HD21	9	0.36
(1,235)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:13:ASN:HD21	9	0.36
(1,453)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG21	6	0.35
(1,453)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG22	6	0.35
(1,453)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG23	6	0.35
(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD11	13	0.35
(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD12	13	0.35
(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD13	13	0.35
(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD11	13	0.35
(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD12	13	0.35
(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD13	13	0.35
(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD11	13	0.35
(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD12	13	0.35
(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD13	13	0.35
(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD11	4	0.34
(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD12	4	0.34
(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD13	4	0.34



 $Continued\ from\ previous\ page...$

(1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD11 4 0.34 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD12 4 0.34 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD13 4 0.34 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD11 4 0.34 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD12 4 0.34 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD13 4 0.34 (1,572) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:141:PHE:H 10 0.33 (1,572) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:141:PHE:H 10 0.33 (1,572) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:140:LEU:H 10 0.33 (1,568) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:140:LEU:H 10 0.33 (1,568) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:140:LEU:H 10 0.33 (1,568) 1:A:129:LEU:H 1:A:138:LEU:HD21 16 0.33 (1,53) 1:A:129:LEU:H 1:A:138:LEU:HD22 16 0.33 (1,53) 1:A:143:A:14:LEU:HD13 <	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD13 4 0.34 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD11 4 0.34 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD12 4 0.34 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD13 4 0.34 (1,572) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:141:PHE:H 10 0.33 (1,572) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:141:PHE:H 10 0.33 (1,572) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:141:PHE:H 10 0.33 (1,568) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:140:LEU:H 10 0.33 (1,568) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD21 16 0.33 (1,568) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:	(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD11	4	0.34
(1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD11 4 0.34 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD12 4 0.34 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD13 4 0.34 (1,572) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:141:PHE:H 10 0.33 (1,572) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:141:PHE:H 10 0.33 (1,572) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:140:LEU:H 10 0.33 (1,568) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:140:LEU:H 10 0.33 (1,568) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:140:LEU:H 10 0.33 (1,568) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:140:LEU:H 10 0.33 (1,568) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:140:LEU:H 10 0.33 (1,568) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:140:LEU:H 10 0.33 (1,558) 1:A:4129:LEU:H 1:A:138:LEU:HD21 16 0.33 (1,53) 1:A:129:LEU:H 1:A:138:LEU:HD22 16 0.33 (1,493) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:52:	(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD12	4	0.34
(1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD12 4 0.34 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD13 4 0.34 (1,572) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:141:PHE:H 10 0.33 (1,572) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:41:PHE:H 10 0.33 (1,572) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:140:LEU:H 10 0.33 (1,568) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:140:LEU:H 10 0.33 (1,568) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:140:LEU:H 10 0.33 (1,530) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:140:LEU:HD121 16 0.33 (1,493) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:138:LEU:HD23 16 0.33 (1,493) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:5	(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD13	4	0.34
(1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD13 4 0.34 (1,572) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:141:PHE:H 10 0.33 (1,572) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:141:PHE:H 10 0.33 (1,572) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:141:PHE:H 10 0.33 (1,568) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:140:LEU:H 10 0.33 (1,568) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:140:LEU:H 10 0.33 (1,568) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:140:LEU:H 10 0.33 (1,530) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:1418:LEU:HD22 16 0.33 (1,493) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:13:13	(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD11	4	0.34
(1,572) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:141:PHE:H 10 0.33 (1,572) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:141:PHE:H 10 0.33 (1,572) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:141:PHE:H 10 0.33 (1,568) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:140:LEU:H 10 0.33 (1,568) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:140:LEU:H 10 0.33 (1,53) 1:A:129:LEU:H 1:A:138:LEU:HD21 16 0.33 (1,53) 1:A:129:LEU:H 1:A:138:LEU:HD22 16 0.33 (1,53) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:52:PHE:H 14 0.32 (1,493) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:52:PHE:H 14 0.32 (1,493) 1:A:34:TYR:H 1:A:138:LEU:HD21 14 0.32 (1,454) 1:A:134:TYR:H 1:A:138:LEU:HD22 <td>(1,408)</td> <td>1:A:41:LEU:HD13</td> <td>1:A:138:LEU:HD12</td> <td>4</td> <td>0.34</td>	(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD12	4	0.34
(1,572) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:141:PHE:H 10 0.33 (1,572) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:141:PHE:H 10 0.33 (1,568) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:140:LEU:H 10 0.33 (1,568) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:140:LEU:H 10 0.33 (1,568) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:140:LEU:H 10 0.33 (1,53) 1:A:129:LEU:H 1:A:138:LEU:HD21 16 0.33 (1,53) 1:A:129:LEU:H 1:A:138:LEU:HD22 16 0.33 (1,53) 1:A:129:LEU:H 1:A:138:LEU:HD23 16 0.33 (1,53) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:52:PHE:H 14 0.32 (1,493) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:52:PHE:H 14 0.32 (1,493) 1:A:34:TYR:H 1:A:138:LEU:HD21 14 0.32 (1,494) 1:A:134:TYR:H 1:A:138:LEU:HD21 14 0.32 (1,454) 1:A:134:TYR:H 1:A:138:LEU:HD22 14 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD13	(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD13	4	0.34
(1,572) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:141:PHE:H 10 0.33 (1,568) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:140:LEU:H 10 0.33 (1,568) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:140:LEU:H 10 0.33 (1,568) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:140:LEU:H 10 0.33 (1,53) 1:A:129:LEU:H 1:A:138:LEU:HD21 16 0.33 (1,53) 1:A:129:LEU:H 1:A:138:LEU:HD22 16 0.33 (1,53) 1:A:129:LEU:H 1:A:138:LEU:HD23 16 0.33 (1,493) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:52:PHE:H 14 0.32 (1,493) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:52:PHE:H 14 0.32 (1,493) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:52:PHE:H 14 0.32 (1,494) 1:A:134:TYR:H 1:A:138:LEU:HD21 14 0.32 (1,454) 1:A:134:TYR:H 1:A:138:LEU:HD22 14 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD11 5 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD	(1,572)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:141:PHE:H	10	0.33
(1,568) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:410:LEU:H 10 0.33 (1,568) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:140:LEU:H 10 0.33 (1,568) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:140:LEU:H 10 0.33 (1,568) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:140:LEU:H 10 0.33 (1,53) 1:A:129:LEU:H 1:A:138:LEU:HD21 16 0.33 (1,53) 1:A:129:LEU:H 1:A:138:LEU:HD23 16 0.33 (1,53) 1:A:129:LEU:H 1:A:138:LEU:HD23 16 0.33 (1,493) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:52:PHE:H 14 0.32 (1,493) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:52:PHE:H 14 0.32 (1,493) 1:A:43:TYR:H 1:A:138:LEU:HD21 14 0.32 (1,494) 1:A:134:TYR:H 1:A:138:LEU:HD21 14 0.32 (1,454) 1:A:134:TYR:H 1:A:138:LEU:HD22 14 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD11 5 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:H	(1,572)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:141:PHE:H	10	0.33
(1,568) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:140:LEU:H 10 0.33 (1,568) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:140:LEU:H 10 0.33 (1,53) 1:A:129:LEU:H 1:A:138:LEU:HD21 16 0.33 (1,53) 1:A:129:LEU:H 1:A:138:LEU:HD22 16 0.33 (1,53) 1:A:129:LEU:H 1:A:138:LEU:HD23 16 0.33 (1,493) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:52:PHE:H 14 0.32 (1,493) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:52:PHE:H 14 0.32 (1,493) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:52:PHE:H 14 0.32 (1,493) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:52:PHE:H 14 0.32 (1,493) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:52:PHE:H 14 0.32 (1,494) 1:A:134:TYR:H 1:A:138:LEU:HD21 14 0.32 (1,454) 1:A:134:TYR:H 1:A:138:LEU:HD22 14 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD13 5 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD13	(1,572)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:141:PHE:H	10	0.33
(1,568) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:140:LEU:H 10 0.33 (1,53) 1:A:129:LEU:H 1:A:138:LEU:HD21 16 0.33 (1,53) 1:A:129:LEU:H 1:A:138:LEU:HD22 16 0.33 (1,53) 1:A:129:LEU:H 1:A:138:LEU:HD23 16 0.33 (1,493) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:52:PHE:H 14 0.32 (1,493) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:52:PHE:H 14 0.32 (1,493) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:52:PHE:H 14 0.32 (1,493) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:52:PHE:H 14 0.32 (1,493) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:52:PHE:H 14 0.32 (1,493) 1:A:43:TYR:H 1:A:138:LEU:HD21 14 0.32 (1,454) 1:A:134:TYR:H 1:A:138:LEU:HD22 14 0.32 (1,454) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD13 5 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD11 5 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD1	(1,568)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:140:LEU:H	10	0.33
(1,53) 1:A:129:LEU:H 1:A:138:LEU:HD21 16 0.33 (1,53) 1:A:129:LEU:H 1:A:138:LEU:HD22 16 0.33 (1,53) 1:A:129:LEU:H 1:A:138:LEU:HD23 16 0.33 (1,493) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:52:PHE:H 14 0.32 (1,493) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:52:PHE:H 14 0.32 (1,493) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:52:PHE:H 14 0.32 (1,494) 1:A:134:TYR:H 1:A:138:LEU:HD21 14 0.32 (1,454) 1:A:134:TYR:H 1:A:138:LEU:HD23 14 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD12 5 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD13 5 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD1	(1,568)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:140:LEU:H	10	0.33
(1,53) 1:A:129:LEU:H 1:A:138:LEU:HD22 16 0.33 (1,53) 1:A:129:LEU:H 1:A:138:LEU:HD23 16 0.33 (1,493) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:52:PHE:H 14 0.32 (1,493) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:52:PHE:H 14 0.32 (1,493) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:52:PHE:H 14 0.32 (1,494) 1:A:134:TYR:H 1:A:138:LEU:HD21 14 0.32 (1,454) 1:A:134:TYR:H 1:A:138:LEU:HD22 14 0.32 (1,454) 1:A:134:TYR:H 1:A:138:LEU:HD23 14 0.32 (1,454) 1:A:134:TYR:H 1:A:138:LEU:HD23 14 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD12 5 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD13 5 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD13 5 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD13 5 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:13	(1,568)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:140:LEU:H	10	0.33
(1,53) 1:A:129:LEU:H 1:A:138:LEU:HD23 16 0.33 (1,493) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:52:PHE:H 14 0.32 (1,493) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:52:PHE:H 14 0.32 (1,493) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:52:PHE:H 14 0.32 (1,493) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:52:PHE:H 14 0.32 (1,493) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:52:PHE:H 14 0.32 (1,494) 1:A:134:TYR:H 1:A:138:LEU:HD21 14 0.32 (1,454) 1:A:134:TYR:H 1:A:138:LEU:HD22 14 0.32 (1,454) 1:A:134:TYR:H 1:A:138:LEU:HD13 14 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD12 5 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD13 5 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD12 5 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD13 5 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:L	(1,53)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD21	16	0.33
(1,493) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:52:PHE:H 14 0.32 (1,493) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:52:PHE:H 14 0.32 (1,493) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:52:PHE:H 14 0.32 (1,494) 1:A:134:TYR:H 1:A:138:LEU:HD21 14 0.32 (1,454) 1:A:134:TYR:H 1:A:138:LEU:HD22 14 0.32 (1,454) 1:A:134:TYR:H 1:A:138:LEU:HD23 14 0.32 (1,454) 1:A:134:TYR:H 1:A:138:LEU:HD13 5 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD11 5 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD13 5 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD13 5 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD13 5 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD13 5 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD13 5 0.32 (1,408) 1:A:49:SER:H 1:A:99	(1,53)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD22	16	0.33
(1,493) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:52:PHE:H 14 0.32 (1,493) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:52:PHE:H 14 0.32 (1,493) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:52:PHE:H 14 0.32 (1,454) 1:A:134:TYR:H 1:A:138:LEU:HD21 14 0.32 (1,454) 1:A:134:TYR:H 1:A:138:LEU:HD22 14 0.32 (1,454) 1:A:134:TYR:H 1:A:138:LEU:HD23 14 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD13 5 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD13 5 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD13 5 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD13 5 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD13 5 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD13 5 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD13 5 0.32 (1,408) 1:A:49:SER:H 1:A:		1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD23	16	0.33
(1,493) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:52:PHE:H 14 0.32 (1,454) 1:A:134:TYR:H 1:A:138:LEU:HD21 14 0.32 (1,454) 1:A:134:TYR:H 1:A:138:LEU:HD22 14 0.32 (1,454) 1:A:134:TYR:H 1:A:138:LEU:HD23 14 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD11 5 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD12 5 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD11 5 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD12 5 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD13 5 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD11 5 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD11 5 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD11 5 0.32 (1,308) 1:A:49:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD11 17 0.32 (1,408) 1:A:49:LEU:HD13		1:A:43:VAL:HG11	1:A:52:PHE:H	14	0.32
(1,454) 1:A:134:TYR:H 1:A:138:LEU:HD21 14 0.32 (1,454) 1:A:134:TYR:H 1:A:138:LEU:HD22 14 0.32 (1,454) 1:A:134:TYR:H 1:A:138:LEU:HD23 14 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD11 5 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD12 5 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD11 5 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD12 5 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD13 5 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD11 5 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD11 5 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD12 5 0.32 (1,308) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD12 5 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD12 5 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13	(1,493)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:52:PHE:H	14	0.32
(1,454) 1:A:134:TYR:H 1:A:138:LEU:HD22 14 0.32 (1,454) 1:A:134:TYR:H 1:A:138:LEU:HD23 14 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD11 5 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD12 5 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD11 5 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD12 5 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD13 5 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD13 5 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD11 5 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD12 5 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD11 7 0.32 (1,33) 1:A:92:SER:H 1:A:99:LEU:HD11 17 0.32 (1,33) 1:A:92:SER:H 1:A:99:LEU:HD13 17 0.32 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:	· · /	1:A:43:VAL:HG13	1:A:52:PHE:H	14	0.32
(1,454) 1:A:134:TYR:H 1:A:138:LEU:HD22 14 0.32 (1,454) 1:A:134:TYR:H 1:A:138:LEU:HD23 14 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD11 5 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD12 5 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD11 5 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD12 5 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD13 5 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD11 5 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD12 5 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD12 5 0.32 (1,30) 1:A:92:SER:H 1:A:99:LEU:HD11 17 0.32 (1,33) 1:A:92:SER:H 1:A:99:LEU:HD12 17 0.32 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 20 0.31	(1,454)	1:A:134:TYR:H	1:A:138:LEU:HD21	14	0.32
(1,408) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD12 5 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD12 5 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD13 5 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD11 5 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD13 5 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD11 5 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD12 5 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD12 5 0.32 (1,308) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD13 5 0.32 (1,33) 1:A:92:SER:H 1:A:99:LEU:HD11 17 0.32 (1,33) 1:A:92:SER:H 1:A:99:LEU:HD13 17 0.32 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 20 0.31		1:A:134:TYR:H	1:A:138:LEU:HD22	14	0.32
(1,408) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD12 5 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD13 5 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD11 5 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD13 5 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD11 5 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD12 5 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD12 5 0.32 (1,33) 1:A:92:SER:H 1:A:99:LEU:HD11 17 0.32 (1,33) 1:A:92:SER:H 1:A:99:LEU:HD12 17 0.32 (1,33) 1:A:92:SER:H 1:A:99:LEU:HD13 17 0.32 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 20 0.31	(1,454)	1:A:134:TYR:H	1:A:138:LEU:HD23	14	0.32
(1,408) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD13 5 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD11 5 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD12 5 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD13 5 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD11 5 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD12 5 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD13 5 0.32 (1,33) 1:A:92:SER:H 1:A:99:LEU:HD11 17 0.32 (1,33) 1:A:92:SER:H 1:A:99:LEU:HD12 17 0.32 (1,33) 1:A:92:SER:H 1:A:99:LEU:HD13 17 0.32 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 20 0.31	(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD11	5	0.32
(1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD11 5 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD12 5 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD13 5 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD11 5 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD12 5 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD13 5 0.32 (1,33) 1:A:92:SER:H 1:A:99:LEU:HD11 17 0.32 (1,33) 1:A:92:SER:H 1:A:99:LEU:HD12 17 0.32 (1,33) 1:A:92:SER:H 1:A:99:LEU:HD13 17 0.32 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 20 0.31	(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD12	5	0.32
(1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD12 5 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD13 5 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD11 5 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD12 5 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD13 5 0.32 (1,33) 1:A:92:SER:H 1:A:99:LEU:HD11 17 0.32 (1,33) 1:A:92:SER:H 1:A:99:LEU:HD12 17 0.32 (1,33) 1:A:92:SER:H 1:A:99:LEU:HD13 17 0.32 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 20 0.31	(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD13	5	0.32
(1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD13 5 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD11 5 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD12 5 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD13 5 0.32 (1,33) 1:A:92:SER:H 1:A:99:LEU:HD11 17 0.32 (1,33) 1:A:92:SER:H 1:A:99:LEU:HD12 17 0.32 (1,33) 1:A:92:SER:H 1:A:99:LEU:HD13 17 0.32 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 20 0.31	(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD11	5	0.32
(1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD13 5 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD11 5 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD12 5 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD13 5 0.32 (1,33) 1:A:92:SER:H 1:A:99:LEU:HD11 17 0.32 (1,33) 1:A:92:SER:H 1:A:99:LEU:HD12 17 0.32 (1,33) 1:A:92:SER:H 1:A:99:LEU:HD13 17 0.32 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 20 0.31	(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD12	5	0.32
(1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD12 5 0.32 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD13 5 0.32 (1,33) 1:A:92:SER:H 1:A:99:LEU:HD11 17 0.32 (1,33) 1:A:92:SER:H 1:A:99:LEU:HD12 17 0.32 (1,33) 1:A:92:SER:H 1:A:99:LEU:HD13 17 0.32 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 20 0.31	(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD13	5	0.32
(1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD13 5 0.32 (1,33) 1:A:92:SER:H 1:A:99:LEU:HD11 17 0.32 (1,33) 1:A:92:SER:H 1:A:99:LEU:HD12 17 0.32 (1,33) 1:A:92:SER:H 1:A:99:LEU:HD13 17 0.32 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 20 0.31	(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD11	5	0.32
(1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD13 5 0.32 (1,33) 1:A:92:SER:H 1:A:99:LEU:HD11 17 0.32 (1,33) 1:A:92:SER:H 1:A:99:LEU:HD12 17 0.32 (1,33) 1:A:92:SER:H 1:A:99:LEU:HD13 17 0.32 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 20 0.31	(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD12	5	0.32
(1,33) 1:A:92:SER:H 1:A:99:LEU:HD11 17 0.32 (1,33) 1:A:92:SER:H 1:A:99:LEU:HD12 17 0.32 (1,33) 1:A:92:SER:H 1:A:99:LEU:HD13 17 0.32 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 20 0.31	(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD13	5	
(1,33) 1:A:92:SER:H 1:A:99:LEU:HD13 17 0.32 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 20 0.31		1:A:92:SER:H	1:A:99:LEU:HD11	17	0.32
(1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 20 0.31	(1,33)	1:A:92:SER:H	1:A:99:LEU:HD12	17	0.32
(1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 20 0.31	(1,33)	1:A:92:SER:H	1:A:99:LEU:HD13	17	0.32
		1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD11	20	0.31
<u> </u>		1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD12	20	0.31
(1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 20 0.31	(1,623)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD13	20	0.31
(1,497) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:H 3 0.31	· ' /	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:H	3	0.31
(1,497) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:H 3 0.31		1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:H	3	0.31
(1,497) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:H 3 0.31		1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:H	3	0.31
(1,377) 1:A:134:TYR:H 1:A:135:GLU:H 5 0.31	(1,377)	1:A:134:TYR:H	1:A:135:GLU:H	5	0.31
(1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD11 7 0.31	(1,248)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD11	7	0.31
(1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD12 7 0.31		1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD12	7	0.31



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,248)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD13	7	0.31
(1,98)	1:A:31:ASN:H	1:A:34:TRP:H	6	0.3
(1,493)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:52:PHE:H	6	0.3
(1,493)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:52:PHE:H	6	0.3
(1,493)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:52:PHE:H	6	0.3
(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD21	12	0.3
(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD22	12	0.3
(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD23	12	0.3
(1,353)	1:A:104:ASN:H	1:A:106:GLY:H	15	0.3
(1,309)	1:A:33:TYR:H	1:A:36:HIS:H	6	0.3
(1,63)	1:A:54:SER:HG	1:A:57:LYS:H	11	0.29
(1,616)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD21	17	0.29
(1,616)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD22	17	0.29
(1,616)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD23	17	0.29
(1,616)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD21	17	0.29
(1,616)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD22	17	0.29
(1,616)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD23	17	0.29
(1,616)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD21	17	0.29
(1,616)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD22	17	0.29
(1,616)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD23	17	0.29
(1,562)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD21	13	0.29
(1,562)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD22	13	0.29
(1,562)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD23	13	0.29
(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD21	16	0.29
(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD22	16	0.29
(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD23	16	0.29
(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD21	16	0.29
(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD22	16	0.29
(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD23	16	0.29
(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD21	16	0.29
(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD22	16	0.29
(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD23	16	0.29
(1,384)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:99:LEU:HD21	3	0.29
(1,384)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:99:LEU:HD22	3	0.29
(1,384)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:99:LEU:HD23	3	0.29
(1,384)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:99:LEU:HD21	3	0.29
(1,384)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:99:LEU:HD22	3	0.29
(1,384)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:99:LEU:HD23	3	0.29
(1,384)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:99:LEU:HD21	3	0.29
(1,384)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:99:LEU:HD22	3	0.29
(1,384)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:99:LEU:HD23	3	0.29
(1,339)	1:A:92:SER:H	1:A:98:HIS:H	10	0.29
())	I .			d on next nage



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,256)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD11	18	0.29
(1,256)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD12	18	0.29
(1,256)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD13	18	0.29
(1,256)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD11	18	0.29
(1,256)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD12	18	0.29
(1,256)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD13	18	0.29
(1,256)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD11	18	0.29
(1,256)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD12	18	0.29
(1,256)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD13	18	0.29
(1,8)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:42:TYR:H	2	0.28
(1,8)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:42:TYR:H	2	0.28
(1,8)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:42:TYR:H	2	0.28
(1,616)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD21	14	0.28
(1,616)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD22	14	0.28
(1,616)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD23	14	0.28
(1,616)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD21	14	0.28
(1,616)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD22	14	0.28
(1,616)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD23	14	0.28
(1,616)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD21	14	0.28
(1,616)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD22	14	0.28
(1,616)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD23	14	0.28
(1,609)	1:A:102:VAL:H	1:A:88:THR:H	15	0.28
(1,568)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:140:LEU:H	9	0.28
(1,568)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:140:LEU:H	9	0.28
(1,568)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:140:LEU:H	9	0.28
(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD21	13	0.28
(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD22	13	0.28
(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD23	13	0.28
(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD21	13	0.28
(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD22	13	0.28
(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD23	13	0.28
(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD21	13	0.28
(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD22	13	0.28
(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD23	13	0.28
(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD11	15	0.28
(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD12	15	0.28
(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD13	15	0.28
(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD11	15	0.28
(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD12	15	0.28
(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD13	15	0.28
(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD11	15	0.28
(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD12	15	0.28



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD13	15	0.28
(1,247)	1:A:121:LEU:HD11	1:A:122:ARG:H	6	0.28
(1,247)	1:A:121:LEU:HD12	1:A:122:ARG:H	6	0.28
(1,247)	1:A:121:LEU:HD13	1:A:122:ARG:H	6	0.28
(1,147)	1:A:130:LYS:H	1:A:134:TYR:H	10	0.28
(1,114)	1:A:29:PHE:H	1:A:31:ASN:H	1	0.28
(1,111)	1:A:92:SER:H	1:A:97:SER:H	4	0.28
(1,74)	1:A:30:GLN:H	1:A:31:ASN:H	1	0.27
(1,513)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:87:ARG:H	9	0.27
(1,513)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:87:ARG:H	9	0.27
(1,513)	1:A:79:LEU:HD13	1:A:87:ARG:H	9	0.27
(1,468)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:23:ASN:H	7	0.27
(1,468)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:23:ASN:H	7	0.27
(1,468)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:23:ASN:H	7	0.27
(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD21	5	0.27
(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD22	5	0.27
(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD23	5	0.27
(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD21	5	0.27
(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD22	5	0.27
(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD23	5	0.27
(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD21	5	0.27
(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD22	5	0.27
(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD23	5	0.27
(1,40)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:97:SER:H	2	0.27
(1,40)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:97:SER:H	2	0.27
(1,40)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:97:SER:H	2	0.27
(1,37)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:13:ASN:HD21	7	0.27
(1,37)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:13:ASN:HD21	7	0.27
(1,37)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:13:ASN:HD21	7	0.27
(1,339)	1:A:92:SER:H	1:A:98:HIS:H	17	0.27
(1,248)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD11	4	0.27
(1,248)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD12	4	0.27
(1,248)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD13	4	0.27
(1,226)	1:A:92:SER:H	1:A:99:LEU:HD21	19	0.27
(1,226)	1:A:92:SER:H	1:A:99:LEU:HD22	19	0.27
(1,226)	1:A:92:SER:H	1:A:99:LEU:HD23	19	0.27
(1,176)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:45:ILE:HD11	5	0.27
(1,176)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:45:ILE:HD12	5	0.27
(1,176)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:45:ILE:HD13	5	0.27
(1,176)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:45:ILE:HD11	5	0.27
(1,176)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:45:ILE:HD12	5	0.27
(1,176)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:45:ILE:HD13	5	0.27



 $Continued\ from\ previous\ page...$

(1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD11 5 0.27 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD12 5 0.27 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD13 5 0.27 (1,147) 1:A:130:LYS:H 1:A:134:TYR:H 2 0.27 (1,147) 1:A:130:LYS:H 1:A:134:TYR:H 14 0.27 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 19 0.26 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD12 19 0.26 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD12 19 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD21 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD22 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD22 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD23 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:99:LEU:HD23 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:99:LEU:HD22 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:99:LEU:HD23 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:99:LEU:HD23 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD23 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD21 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD21 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD23 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD23 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD23 6 0.26 (1,417) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:H 7 0.26 (1,497) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:H 7 0.26 (1,497) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:H 7 0.26 (1,497) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:H 7 0.26 (1,497) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:H 7 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22 0 0.26 (1	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD13 5 0.27 (1,147) 1:A:130:IYS:H 1:A:134:TYR:H 2 0.27 (1,147) 1:A:130:IYS:H 1:A:134:TYR:H 14 0.27 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 19 0.26 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 19 0.26 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 19 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD21 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD22 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:99:LEU:HD23 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:99:LEU:HD23 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD23 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD23 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD23 6 0.26 (1,616) 1:A:15:CVS:H 1:A:10:HIE:H	(1,176)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:45:ILE:HD11	5	0.27
(1,147) 1:A:130:LYS:H 1:A:134:TYR:H 2 0.27 (1,147) 1:A:130:LYS:H 1:A:134:TYR:H 14 0.27 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 19 0.26 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD12 19 0.26 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 19 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD21 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD23 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:99:LEU:HD23 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:99:LEU:HD23 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD23 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD22 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD23 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD23 6 0.26 (1,616) 1:A:15:CYS:H 1:A:10:HB:H	(1,176)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:45:ILE:HD12	5	0.27
(1,147) 1:A:130:LYS:H 1:A:134:TYR:H 14 0.27 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 19 0.26 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD12 19 0.26 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 19 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD21 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD22 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:99:LEU:HD23 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:99:LEU:HD22 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD23 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD21 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD22 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD22 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD22 6 0.26 (1,616) 1:A:915:CEU:HD21 1:A:71:ILE	(1,176)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:45:ILE:HD13	5	0.27
(1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 19 0.26 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD12 19 0.26 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 19 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD22 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD22 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD23 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:99:LEU:HD22 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:99:LEU:HD22 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD23 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD22 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD22 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD22 6 0.26 (1,616) 1:A:315:CYS:H 1:A:10:HIS:H 20 0.26 (1,617) 1:A:15:LEU:HD21 1:A:7:ILE:H<	(1,147)	1:A:130:LYS:H	1:A:134:TYR:H	2	0.27
(1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD12 19 0.26 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 19 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD22 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD23 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:99:LEU:HD21 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:99:LEU:HD22 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD23 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD22 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD22 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD22 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD23 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD23 6 0.26 (1,407) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:H 7 0.26 (1,497) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:IL	(1,147)	1:A:130:LYS:H	1:A:134:TYR:H	14	0.27
(1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:29:LEU:HD13 19 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD21 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD22 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD23 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:99:LEU:HD22 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:99:LEU:HD23 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD21 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD22 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD23 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD22 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD22 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:199:LEU:HD23 6 0.26 (1,617) 1:A:15:CYS:H 1:A:10:HIS:H 7 0.26 (1,497) 1:A:35:LEU:HD23 1:A:71:LE	(1,623)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD11	19	0.26
(1,616) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD21 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD22 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD23 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:99:LEU:HD21 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:99:LEU:HD23 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD21 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD22 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD22 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD23 6 0.26 (1,610) 1:A:115:CYS:H 1:A:101:HIS:H 20 0.26 (1,467) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:H 7 0.26 (1,497) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:H 7 0.26 (1,497) 1:A:17:TYR:H 1:A:46:VAL:HG11 8 0.26 (1,465) 1:A:17:TYR:H 1:A:46:VAL:HG12 </td <td>(1,623)</td> <td>1:A:17:TYR:H</td> <td>1:A:12:LEU:HD12</td> <td>19</td> <td>0.26</td>	(1,623)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD12	19	0.26
(1,616) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD22 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD23 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:99:LEU:HD21 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:99:LEU:HD22 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD21 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD22 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD22 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD23 6 0.26 (1,610) 1:A:115:CYS:H 1:A:101:HIS:H 20 0.26 (1,610) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:H 7 0.26 (1,497) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:H 7 0.26 (1,497) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:H 7 0.26 (1,465) 1:A:17:TYR:H 1:A:46:VAL:HG11 8 0.26 (1,465) 1:A:17:TYR:H 1:A:46:VAL:HG13	(1,623)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD13	19	0.26
(1,616) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD23 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:99:LEU:HD21 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:99:LEU:HD22 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD23 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD22 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD23 6 0.26 (1,417) 1:A:15:CYS:H 1:A:71:ILE:H 7 0.26 (1,497) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:H 7 0.26 (1,497) 1:A:13:TYR:H 1:A:46:VAL:HG1	(1,616)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD21	6	0.26
(1,616) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:99:LEU:HD21 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:99:LEU:HD22 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:99:LEU:HD23 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD21 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD22 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD23 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD23 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD23 6 0.26 (1,610) 1:A:115:CYS:H 1:A:10:IHIS:H 20 0.26 (1,497) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:H 7 0.26 (1,497) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:H 7 0.26 (1,497) 1:A:17:TYR:H 1:A:46:VAL:HG11 8 0.26 (1,4465) 1:A:17:TYR:H 1:A:46:VAL:HG13 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD2	(1,616)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD22	6	0.26
(1,616) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:99:LEU:HD22 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:99:LEU:HD23 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD21 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD22 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD23 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD23 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD23 6 0.26 (1,610) 1:A:115:CYS:H 1:A:10!:HIS:H 20 0.26 (1,497) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:H 7 0.26 (1,497) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:H 7 0.26 (1,497) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:TYR:H 1:A:46:VAL:HG11 8 0.26 (1,497) 1:A:17:TYR:H 1:A:46:VAL:HG13 8 0.26 (1,465) 1:A:17:TYR:H 1:A:46:VAL:HG13 8 0.26 (1,411) 1:A:12:129:LEU:HD11<	(1,616)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD23	6	0.26
(1,616) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:99:LEU:HD23 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD21 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD22 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD23 6 0.26 (1,610) 1:A:115:CYS:H 1:A:101:HIS:H 20 0.26 (1,497) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:H 7 0.26 (1,497) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:H 7 0.26 (1,497) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:H 7 0.26 (1,497) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:H 7 0.26 (1,497) 1:A:17:TYR:H 1:A:46:VAL:HG11 8 0.26 (1,465) 1:A:17:TYR:H 1:A:46:VAL:HG13 8 0.26 (1,465) 1:A:17:TYR:H 1:A:46:VAL:HG13 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD21 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD23	(1,616)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD21	6	0.26
(1,616) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD21 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD22 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD23 6 0.26 (1,610) 1:A:115:CYS:H 1:A:101:HIS:H 20 0.26 (1,497) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:H 7 0.26 (1,497) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:H 7 0.26 (1,497) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:H 7 0.26 (1,497) 1:A:61:LEU:HD23 1:A:71:ILE:H 7 0.26 (1,497) 1:A:61:LEU:HD23 1:A:71:ILE:H 7 0.26 (1,497) 1:A:61:LEU:HD23 1:A:46:VAL:HG11 8 0.26 (1,465) 1:A:17:TYR:H 1:A:46:VAL:HG13 8 0.26 (1,465) 1:A:17:TYR:H 1:A:46:VAL:HG13 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD21 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD23	(1,616)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD22	6	0.26
(1,616) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD22 6 0.26 (1,616) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD23 6 0.26 (1,610) 1:A:115:CYS:H 1:A:101:HIS:H 20 0.26 (1,497) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:H 7 0.26 (1,497) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:H 7 0.26 (1,497) 1:A:17:TYR:H 1:A:46:VAL:HG11 8 0.26 (1,465) 1:A:17:TYR:H 1:A:46:VAL:HG12 8 0.26 (1,465) 1:A:17:TYR:H 1:A:46:VAL:HG13 8 0.26 (1,465) 1:A:17:TYR:H 1:A:46:VAL:HG13 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD21 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD23 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD23 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD	(1,616)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD23	6	0.26
(1,616) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD23 6 0.26 (1,610) 1:A:115:CYS:H 1:A:101:HIS:H 20 0.26 (1,497) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:H 7 0.26 (1,497) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:H 7 0.26 (1,497) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:H 7 0.26 (1,465) 1:A:17:TYR:H 1:A:46:VAL:HG11 8 0.26 (1,465) 1:A:17:TYR:H 1:A:46:VAL:HG13 8 0.26 (1,465) 1:A:17:TYR:H 1:A:46:VAL:HG13 8 0.26 (1,465) 1:A:17:TYR:H 1:A:46:VAL:HG13 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD21 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD23 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD23 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD23<	(1,616)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD21	6	0.26
(1,610) 1:A:115:CYS:H 1:A:101:HIS:H 20 0.26 (1,497) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:H 7 0.26 (1,497) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:H 7 0.26 (1,497) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:H 7 0.26 (1,497) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:H 7 0.26 (1,497) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:H 7 0.26 (1,465) 1:A:17:TYR:H 1:A:46:VAL:HG11 8 0.26 (1,465) 1:A:17:TYR:H 1:A:46:VAL:HG13 8 0.26 (1,465) 1:A:17:TYR:H 1:A:46:VAL:HG13 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD21 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD23 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD23 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD23 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD23 <td>(1,616)</td> <td>1:A:90:VAL:HG13</td> <td>1:A:99:LEU:HD22</td> <td>6</td> <td>0.26</td>	(1,616)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD22	6	0.26
(1,497) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:H 7 0.26 (1,497) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:H 7 0.26 (1,497) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:17:TYR:H 1:A:46:VAL:HG11 8 0.26 (1,465) 1:A:17:TYR:H 1:A:46:VAL:HG13 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD21 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD21 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD23 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD21 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD22 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU	(1,616)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD23	6	0.26
(1,497) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:H 7 0.26 (1,497) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:H 7 0.26 (1,465) 1:A:17:TYR:H 1:A:46:VAL:HG11 8 0.26 (1,465) 1:A:17:TYR:H 1:A:46:VAL:HG12 8 0.26 (1,465) 1:A:17:TYR:H 1:A:46:VAL:HG13 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD21 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD23 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD21 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD23 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD21 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD22 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22 0 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11	(1,610)	1:A:115:CYS:H	1:A:101:HIS:H	20	0.26
(1,497) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:H 7 0.26 (1,465) 1:A:17:TYR:H 1:A:46:VAL:HG11 8 0.26 (1,465) 1:A:17:TYR:H 1:A:46:VAL:HG12 8 0.26 (1,465) 1:A:17:TYR:H 1:A:46:VAL:HG13 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD21 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD23 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD22 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD23 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD21 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD22 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD23 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22 0 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11	(1,497)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:H	7	0.26
(1,465) 1:A:17:TYR:H 1:A:46:VAL:HG11 8 0.26 (1,465) 1:A:17:TYR:H 1:A:46:VAL:HG12 8 0.26 (1,465) 1:A:17:TYR:H 1:A:46:VAL:HG13 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD21 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD23 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD21 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD23 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD23 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD21 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD22 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD21 20 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22 20 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12	(1,497)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:H	7	0.26
(1,465) 1:A:17:TYR:H 1:A:46:VAL:HG12 8 0.26 (1,465) 1:A:17:TYR:H 1:A:46:VAL:HG13 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD21 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD23 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD21 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD22 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD23 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD21 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD22 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD23 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22 0 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD23 20 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 </td <td>(1,497)</td> <td>1:A:51:LEU:HD23</td> <td>1:A:71:ILE:H</td> <td>7</td> <td>0.26</td>	(1,497)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:H	7	0.26
(1,465) 1:A:17:TYR:H 1:A:46:VAL:HG13 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD21 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD23 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD21 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD22 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD23 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD21 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD23 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD21 20 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD23 20 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD23 20 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD23 20 0.26 (1,411) 1:A:129:LE	(1,465)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG11	8	0.26
(1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD21 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD23 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD21 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD22 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD23 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD21 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD22 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD23 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22 20 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD23 20 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD21 20 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD22 20 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD22 0.26 (1,411) 1:A	(1,465)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG12	8	0.26
(1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD23 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD21 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD22 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD23 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD21 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD22 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD23 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD21 20 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22 20 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD21 20 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD22 20 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD23 20 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD23 20 0.26 (1,411)	(1,465)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG13	8	0.26
(1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD23 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD21 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD22 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD23 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD21 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD22 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD23 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD21 20 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD23 20 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD21 20 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD22 20 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD23 20 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD23 20 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD22 20 0.26 (1,411	(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD21	8	0.26
(1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD21 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD22 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD23 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD21 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD22 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD23 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD21 20 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD23 20 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD21 20 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD22 20 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD23 20 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD21 20 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD22 20 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD22 20 0.26	(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD22	8	0.26
(1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD22 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD23 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD21 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD22 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD23 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD21 20 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22 20 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD21 20 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD22 20 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD23 20 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD23 20 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD21 20 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD22 20 0.26	(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD23	8	0.26
(1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD23 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD21 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD22 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD23 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD21 20 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22 20 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD23 20 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD21 20 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD22 20 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD23 20 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD21 20 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD22 20 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD22 20 0.26	(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD21	8	0.26
(1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD21 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD22 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD23 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD21 20 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22 20 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD23 20 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD21 20 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD23 20 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD23 20 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD21 20 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD22 20 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD22 20 0.26	(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD22	8	0.26
(1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD22 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD23 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD21 20 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22 20 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD23 20 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD21 20 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD22 20 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD23 20 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD21 20 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD22 20 0.26	(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD23	8	0.26
(1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD23 8 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD21 20 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22 20 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD23 20 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD21 20 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD23 20 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD23 20 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD21 20 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD22 20 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD22 20 0.26	(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD21	8	0.26
(1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD21 20 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22 20 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD23 20 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD21 20 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD22 20 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD23 20 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD21 20 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD22 20 0.26	(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD22	8	0.26
(1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22 20 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD23 20 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD21 20 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD22 20 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD23 20 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD21 20 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD22 20 0.26	(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD23	8	0.26
(1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22 20 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD23 20 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD21 20 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD22 20 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD23 20 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD21 20 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD22 20 0.26	(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD21	20	0.26
(1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD21 20 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD22 20 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD23 20 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD21 20 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD22 20 0.26		1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD22	20	0.26
(1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD22 20 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD23 20 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD21 20 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD22 20 0.26	(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD23	20	0.26
(1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD23 20 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD21 20 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD22 20 0.26		1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD21	20	0.26
(1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD21 20 0.26 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD22 20 0.26	(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD22	20	0.26
(1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD22 20 0.26	(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD23	20	0.26
	(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD21	20	0.26
(1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD23 20 0.26	(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD22	20	0.26
	(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD23	20	0.26



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,393)	1:A:12:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HG11	19	0.26
(1,393)	1:A:12:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HG12	19	0.26
(1,393)	1:A:12:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HG13	19	0.26
(1,393)	1:A:12:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HG11	19	0.26
(1,393)	1:A:12:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HG12	19	0.26
(1,393)	1:A:12:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HG13	19	0.26
(1,393)	1:A:12:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HG11	19	0.26
(1,393)	1:A:12:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HG12	19	0.26
(1,393)	1:A:12:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HG13	19	0.26
(1,256)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD11	1	0.26
(1,256)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD12	1	0.26
(1,256)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD13	1	0.26
(1,256)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD11	1	0.26
(1,256)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD12	1	0.26
(1,256)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD13	1	0.26
(1,256)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD11	1	0.26
(1,256)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD12	1	0.26
(1,256)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD13	1	0.26
(1,219)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:74:GLU:H	16	0.26
(1,219)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:74:GLU:H	16	0.26
(1,219)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:74:GLU:H	16	0.26
(1,171)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG11	5	0.26
(1,171)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG12	5	0.26
(1,171)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG13	5	0.26
(1,13)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:131:GLU:H	17	0.26
(1,13)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:131:GLU:H	17	0.26
(1,13)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:131:GLU:H	17	0.26
(1,84)	1:A:10:LYS:H	1:A:12:LEU:H	18	0.25
(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG11	13	0.25
(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG12	13	0.25
(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG13	13	0.25
(1,562)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD21	16	0.25
(1,562)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD22	16	0.25
(1,562)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD23	16	0.25
(1,558)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:132:GLU:H	2	0.25
(1,558)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:132:GLU:H	2	0.25
(1,558)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:132:GLU:H	2	0.25
(1,524)	1:A:91:ARG:H	1:A:99:LEU:HD11	19	0.25
(1,524)	1:A:91:ARG:H	1:A:99:LEU:HD12	19	0.25
(1,524)	1:A:91:ARG:H	1:A:99:LEU:HD13	19	0.25
(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD21	1	0.25
(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD22	1	0.25



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD23	1	0.25
(1,33)	1:A:92:SER:H	1:A:99:LEU:HD11	10	0.25
(1,33)	1:A:92:SER:H	1:A:99:LEU:HD12	10	0.25
(1,33)	1:A:92:SER:H	1:A:99:LEU:HD13	10	0.25
(1,256)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD11	6	0.25
(1,256)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD12	6	0.25
(1,256)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD13	6	0.25
(1,256)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD11	6	0.25
(1,256)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD12	6	0.25
(1,256)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD13	6	0.25
(1,256)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD11	6	0.25
(1,256)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD12	6	0.25
(1,256)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD13	6	0.25
(1,24)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:134:TYR:H	17	0.25
(1,24)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:134:TYR:H	17	0.25
(1,24)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:134:TYR:H	17	0.25
(1,24)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:134:TYR:H	19	0.25
(1,24)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:134:TYR:H	19	0.25
(1,24)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:134:TYR:H	19	0.25
(1,98)	1:A:31:ASN:H	1:A:34:TRP:H	13	0.24
(1,84)	1:A:10:LYS:H	1:A:12:LEU:H	3	0.24
(1,84)	1:A:10:LYS:H	1:A:12:LEU:H	14	0.24
(1,610)	1:A:115:CYS:H	1:A:101:HIS:H	5	0.24
(1,609)	1:A:102:VAL:H	1:A:88:THR:H	2	0.24
(1,483)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:49:LYS:H	9	0.24
(1,483)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:49:LYS:H	9	0.24
(1,483)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:49:LYS:H	9	0.24
(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD21	8	0.24
(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD22	8	0.24
(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD23	8	0.24
(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD11	9	0.24
(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD12	9	0.24
(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD13	9	0.24
(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD11	9	0.24
(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD12	9	0.24
(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD13	9	0.24
(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD11	9	0.24
(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD12	9	0.24
(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD13	9	0.24
(1,40)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:97:SER:H	10	0.24
(1,40)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:97:SER:H	10	0.24



 $Continued\ from\ previous\ page...$

(1,307) 1:A:32:GLU:H 1:A:34:TRP:H 14 0.24 (1,299) 1:A:15:MET:H 1:A:18:GLU:H 6 0.24 (1,284) 1:A:6:GLU:H 1:A:8:LYS:H 12 0.24 (1,275) 1:A:92:SER:H 1:A:99:LEU:H 17 0.24 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD11 20 0.24 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD12 20 0.24 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD13 20 0.24 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD12 20 0.24 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD13 20 0.24 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD11 20 0.24 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD11<	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,284) 1:A:6:GLU:H 1:A:8:LYS:H 12 0.24 (1,275) 1:A:92:SER:H 1:A:99:LEU:H 17 0.24 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD11 20 0.24 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD12 20 0.24 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD13 20 0.24 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD12 20 0.24 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD13 20 0.24 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 20 0.24 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD11 20 0.24 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD12 20 0.24 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 20 0.24 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD11 10 0.24 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 10 0.24 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:12	(1,307)	1:A:32:GLU:H	1:A:34:TRP:H	14	0.24
(1,275) 1:A:92:SER:H 1:A:99:LEU:H 17 0.24 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD11 20 0.24 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD12 20 0.24 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD13 20 0.24 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD11 20 0.24 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD12 20 0.24 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 20 0.24 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD11 20 0.24 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD12 20 0.24 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 20 0.24 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 20 0.24 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 20 0.24 (1,249) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 10 0.24 (1,248) 1:A:120:AL:H <t< td=""><td>(1,299)</td><td>1:A:15:MET:H</td><td>1:A:18:GLU:H</td><td>6</td><td>0.24</td></t<>	(1,299)	1:A:15:MET:H	1:A:18:GLU:H	6	0.24
(1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD11 20 0.24 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD12 20 0.24 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD13 20 0.24 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD11 20 0.24 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD12 20 0.24 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 20 0.24 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD11 20 0.24 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD12 20 0.24 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 10 0.24 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 11 0.24 (1,248) 1:A:120:ALA:H	(1,284)	1:A:6:GLU:H	1:A:8:LYS:H	12	0.24
(1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD12 20 0.24 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD13 20 0.24 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD11 20 0.24 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD12 20 0.24 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 20 0.24 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD12 20 0.24 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 20 0.24 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD11 11 0.24 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD11 11 0.24 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 11 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11	(1,275)	1:A:92:SER:H	1:A:99:LEU:H	17	0.24
(1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD13 20 0.24 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD11 20 0.24 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD12 20 0.24 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 20 0.24 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD12 20 0.24 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 20 0.24 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 20 0.24 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD11 11 0.24 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD12 11 0.24 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 11 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:121:LEU:HD13 11 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 1 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 16 0.24 (1,247) 1:A:71:ILE:HD11	(1,259)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD11	20	0.24
(1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD11 20 0.24 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD12 20 0.24 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD13 20 0.24 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD11 20 0.24 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 20 0.24 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:71:ILE:HD13 20 0.24 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD11 11 0.24 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 11 0.24 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 11 0.24 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 11 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 1 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 1 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 16 0.24 (1,247) 1:A:71:ILE:HD11	(1,259)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD12	20	0.24
(1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD12 20 0.24 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 20 0.24 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD12 20 0.24 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 20 0.24 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 20 0.24 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD11 11 0.24 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD12 11 0.24 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 11 0.24 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 11 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 1 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 1 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 16 0.24 (1,247) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:122:ARG:H 16 0.24 (1,247) 1:A:71:ILE:HD13	(1,259)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD13	20	0.24
(1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD13 20 0.24 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD11 20 0.24 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD12 20 0.24 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 20 0.24 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD11 11 0.24 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD12 11 0.24 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 11 0.24 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 11 0.24 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 11 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 1 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 1 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 16 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 16 0.24 (1,247) 1:A:71:ILE:HD13	(1,259)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD11	20	0.24
(1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD11 20 0.24 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD12 20 0.24 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 20 0.24 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD11 11 0.24 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD12 11 0.24 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 11 0.24 (1,248) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:121:LEU:HD13 11 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 1 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 1 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 16 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 16 0.24 (1,247) 1:A:71:ILE:HD11 1:A:140:LEU:HD21 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD11 1:A:140:LEU:HD21 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD11	(1,259)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD12	20	0.24
(1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD12 20 0.24 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 20 0.24 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD11 11 0.24 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD12 11 0.24 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 11 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 1 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD12 1:A:122:ARG:H 1 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 1 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 16 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD12 1:A:122:ARG:H 16 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 16 0.24 (1,247) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD21 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD11 1:A:140:LEU:HD22 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD12 <td< td=""><td>(1,259)</td><td>1:A:51:LEU:HD22</td><td>1:A:71:ILE:HD13</td><td>20</td><td>0.24</td></td<>	(1,259)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD13	20	0.24
(1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 20 0.24 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD11 11 0.24 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD12 11 0.24 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 11 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 1 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD12 1:A:122:ARG:H 1 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 1 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 16 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD12 1:A:122:ARG:H 16 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 16 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:140:LEU:HD21 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD11 1:A:140:LEU:HD21 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD12 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD13 <	(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD11	20	0.24
(1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD11 11 0.24 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD12 11 0.24 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 11 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 1 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD12 1:A:122:ARG:H 1 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 16 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 16 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD12 1:A:122:ARG:H 16 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 16 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:140:LEU:HD21 12 0.24 (1,247) 1:A:71:ILE:HD11 1:A:140:LEU:HD22 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD11 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD12 1:A:140:LEU:HD21 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD13	(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD12	20	0.24
(1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD12 11 0.24 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 11 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 1 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD12 1:A:122:ARG:H 1 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 1 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 16 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD12 1:A:122:ARG:H 16 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 16 0.24 (1,247) 1:A:71:ILE:HD11 1:A:140:LEU:HD21 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD11 1:A:140:LEU:HD22 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD11 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD12 1:A:140:LEU:HD21 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD13	(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD13	20	0.24
(1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD12 11 0.24 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 11 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 1 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD12 1:A:122:ARG:H 1 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 1 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 16 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD12 1:A:122:ARG:H 16 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 16 0.24 (1,247) 1:A:71:ILE:HD11 1:A:140:LEU:HD21 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD11 1:A:140:LEU:HD22 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD11 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD12 1:A:140:LEU:HD21 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD13	· · /	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD11	11	0.24
(1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 11 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 1 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD12 1:A:122:ARG:H 1 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 1 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 16 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD12 1:A:122:ARG:H 16 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 16 0.24 (1,247) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD21 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD11 1:A:140:LEU:HD22 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD12 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD12 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD21 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD13	('		1:A:121:LEU:HD12	11	0.24
(1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 1 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD12 1:A:122:ARG:H 1 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 1 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 16 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD12 1:A:122:ARG:H 16 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 16 0.24 (1,247) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD21 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD11 1:A:140:LEU:HD22 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD11 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD12 1:A:140:LEU:HD21 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD12 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,222) 1:A:77:ILE:HD13			1:A:121:LEU:HD13	11	
(1,247) 1:A:121:LEU:HD12 1:A:122:ARG:H 1 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 1 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 16 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD12 1:A:122:ARG:H 16 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 16 0.24 (1,247) 1:A:71:ILE:HD11 1:A:140:LEU:HD21 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD11 1:A:140:LEU:HD22 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD11 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD12 1:A:140:LEU:HD21 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD12 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD21 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD22 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD13	, ,	1:A:121:LEU:HD11	1:A:122:ARG:H	1	0.24
(1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 1 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 16 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD12 1:A:122:ARG:H 16 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 16 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:140:LEU:HD21 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD11 1:A:140:LEU:HD22 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD11 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD12 1:A:140:LEU:HD21 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD12 1:A:140:LEU:HD22 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD21 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD13 </td <td></td> <td>1:A:121:LEU:HD12</td> <td>1:A:122:ARG:H</td> <td>1</td> <td>0.24</td>		1:A:121:LEU:HD12	1:A:122:ARG:H	1	0.24
(1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 16 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD12 1:A:122:ARG:H 16 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 16 0.24 (1,247) 1:A:71:ILE:HD11 1:A:140:LEU:HD21 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD11 1:A:140:LEU:HD22 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD11 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD12 1:A:140:LEU:HD21 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD12 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD21 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD22 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,101) 1:A:133:GLY:H </td <td>(1,247)</td> <td>1:A:121:LEU:HD13</td> <td>1:A:122:ARG:H</td> <td>1</td> <td>0.24</td>	(1,247)	1:A:121:LEU:HD13	1:A:122:ARG:H	1	0.24
(1,247) 1:A:121:LEU:HD12 1:A:122:ARG:H 16 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 16 0.24 (1,247) 1:A:71:ILE:HD11 1:A:140:LEU:HD21 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD11 1:A:140:LEU:HD22 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD11 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD12 1:A:140:LEU:HD21 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD12 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD21 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD22 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,161) 1:A:133:GLY:H 1:A:135:GLU:H 5 0.24 (1,11) 1:A:128:LYS:H	('	1:A:121:LEU:HD11	1:A:122:ARG:H	16	0.24
(1,222) 1:A:71:ILE:HD11 1:A:140:LEU:HD21 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD11 1:A:140:LEU:HD22 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD11 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD12 1:A:140:LEU:HD21 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD12 1:A:140:LEU:HD22 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD12 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD21 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD22 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,161) 1:A:133:GLY:H 1:A:135:GLU:H 5 0.24 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 2 0.24	, ,	1:A:121:LEU:HD12	1:A:122:ARG:H	16	0.24
(1,222) 1:A:71:ILE:HD11 1:A:140:LEU:HD21 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD11 1:A:140:LEU:HD22 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD11 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD12 1:A:140:LEU:HD21 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD12 1:A:140:LEU:HD22 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD21 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD22 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,161) 1:A:133:GLY:H 1:A:135:GLU:H 5 0.24 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 2 0.24	(1,247)	1:A:121:LEU:HD13	1:A:122:ARG:H	16	0.24
(1,222) 1:A:71:ILE:HD11 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD12 1:A:140:LEU:HD21 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD12 1:A:140:LEU:HD22 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD12 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD21 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD22 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,161) 1:A:133:GLY:H 1:A:135:GLU:H 5 0.24 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 2 0.24	(1,222)	1:A:71:ILE:HD11	1:A:140:LEU:HD21	12	0.24
(1,222) 1:A:71:ILE:HD12 1:A:140:LEU:HD21 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD12 1:A:140:LEU:HD22 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD12 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD21 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD22 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,161) 1:A:133:GLY:H 1:A:135:GLU:H 5 0.24 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 2 0.24	(1,222)	1:A:71:ILE:HD11	1:A:140:LEU:HD22	12	0.24
(1,222) 1:A:71:ILE:HD12 1:A:140:LEU:HD22 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD12 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD21 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD22 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,222) 1:A:133:GLY:H 1:A:135:GLU:H 5 0.24 (1,161) 1:A:133:GLY:H 1:A:129:LEU:HD21 2 0.24 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 2 0.24	(1,222)	1:A:71:ILE:HD11	1:A:140:LEU:HD23	12	0.24
(1,222) 1:A:71:ILE:HD12 1:A:140:LEU:HD22 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD12 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD21 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD22 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,161) 1:A:133:GLY:H 1:A:135:GLU:H 5 0.24 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 2 0.24	(1,222)	1:A:71:ILE:HD12	1:A:140:LEU:HD21	12	0.24
(1,222) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD21 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD22 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,161) 1:A:133:GLY:H 1:A:135:GLU:H 5 0.24 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 2 0.24	, ,	1:A:71:ILE:HD12	1:A:140:LEU:HD22	12	0.24
(1,222) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD22 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,161) 1:A:133:GLY:H 1:A:135:GLU:H 5 0.24 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 2 0.24	(1,222)	1:A:71:ILE:HD12	1:A:140:LEU:HD23	12	0.24
(1,222) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD22 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,161) 1:A:133:GLY:H 1:A:135:GLU:H 5 0.24 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 2 0.24	(1,222)	1:A:71:ILE:HD13	1:A:140:LEU:HD21	12	0.24
(1,222) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,161) 1:A:133:GLY:H 1:A:135:GLU:H 5 0.24 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 2 0.24	(1,222)	1:A:71:ILE:HD13	1:A:140:LEU:HD22	12	0.24
(1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 2 0.24	(1,222)	1:A:71:ILE:HD13	1:A:140:LEU:HD23	12	0.24
		1:A:133:GLY:H	1:A:135:GLU:H	5	0.24
(1.11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 2 0.24	(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD21	2	0.24
1 () , 1 =:======= 1:11:120:220:11221 1 0:21	(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD22	2	0.24
(1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 2 0.24	. ,	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD23	2	0.24
(1,8) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:42:TYR:H 11 0.23	(1,8)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:42:TYR:H	11	0.23
(1,8) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:42:TYR:H 11 0.23	,	1:A:41:LEU:HD12	1:A:42:TYR:H	11	0.23
(1,8) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:42:TYR:H 11 0.23		1:A:41:LEU:HD13	1:A:42:TYR:H	11	0.23
(1,616) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD21 18 0.23	· · /	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD21	18	0.23
(1,616) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD22 18 0.23	` '	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD22	18	0.23
(1,616) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD23 18 0.23	(1,616)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD23	18	0.23
(1,616) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:99:LEU:HD21 18 0.23		1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD21	18	0.23



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,616)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD22	18	0.23
(1,616)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD23	18	0.23
(1,616)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD21	18	0.23
(1,616)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD22	18	0.23
(1,616)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD23	18	0.23
(1,503)	1:A:76:GLU:H	1:A:99:LEU:HD21	10	0.23
(1,503)	1:A:76:GLU:H	1:A:99:LEU:HD22	10	0.23
(1,503)	1:A:76:GLU:H	1:A:99:LEU:HD23	10	0.23
(1,483)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:49:LYS:H	6	0.23
(1,483)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:49:LYS:H	6	0.23
(1,483)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:49:LYS:H	6	0.23
(1,454)	1:A:134:TYR:H	1:A:138:LEU:HD21	17	0.23
(1,454)	1:A:134:TYR:H	1:A:138:LEU:HD22	17	0.23
(1,454)	1:A:134:TYR:H	1:A:138:LEU:HD23	17	0.23
(1,452)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG21	5	0.23
(1,452)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG22	5	0.23
(1,452)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG23	5	0.23
(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD21	18	0.23
(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD22	18	0.23
(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD23	18	0.23
(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD21	6	0.23
(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD22	6	0.23
(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD23	6	0.23
(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD21	6	0.23
(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD22	6	0.23
(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD23	6	0.23
(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD21	6	0.23
(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD22	6	0.23
(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD23	6	0.23
(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD21	12	0.23
(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD22	12	0.23
(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD23	12	0.23
(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD21	12	0.23
(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD22	12	0.23
(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD23	12	0.23
(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD21	12	0.23
(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD22	12	0.23
(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD23	12	0.23
(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD21	15	0.23
(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD22	15	0.23
(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD23	15	0.23
(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD21	15	0.23



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD22	15	0.23
(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD23	15	0.23
(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD21	15	0.23
(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD22	15	0.23
(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD23	15	0.23
(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD11	8	0.23
(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD12	8	0.23
(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD13	8	0.23
(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD11	8	0.23
(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD12	8	0.23
(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD13	8	0.23
(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD11	8	0.23
(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD12	8	0.23
(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD13	8	0.23
(1,40)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:97:SER:H	12	0.23
(1,40)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:97:SER:H	12	0.23
(1,40)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:97:SER:H	12	0.23
(1,368)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:H	3	0.23
(1,270)	1:A:42:TYR:H	1:A:54:SER:H	17	0.23
(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD11	16	0.23
(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD12	16	0.23
(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD13	16	0.23
(1,259)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD11	12	0.23
(1,259)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD12	12	0.23
(1,259)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD13	12	0.23
(1,259)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD11	12	0.23
(1,259)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD12	12	0.23
(1,259)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD13	12	0.23
(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD11	12	0.23
(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD12	12	0.23
(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD13	12	0.23
(1,248)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD11	1	0.23
(1,248)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD12	1	0.23
(1,248)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD13	1	0.23
(1,248)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD11	8	0.23
(1,248)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD12	8	0.23
(1,248)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD13	8	0.23
(1,247)	1:A:121:LEU:HD11	1:A:122:ARG:H	17	0.23
(1,247)	1:A:121:LEU:HD12	1:A:122:ARG:H	17	0.23
(1,247)	1:A:121:LEU:HD13	1:A:122:ARG:H	17	0.23
(1,211)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:138:LEU:HD11	2	0.23
	1:A:41:LEU:HD21	1:A:138:LEU:HD12	2	0.23



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,211)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:138:LEU:HD13	2	0.23
(1,211)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:138:LEU:HD11	2	0.23
(1,211)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:138:LEU:HD12	2	0.23
(1,211)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:138:LEU:HD13	2	0.23
(1,211)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:138:LEU:HD11	2	0.23
(1,211)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:138:LEU:HD12	2	0.23
(1,211)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:138:LEU:HD13	2	0.23
(1,131)	1:A:17:TYR:H	1:A:19:VAL:H	8	0.23
(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG11	9	0.22
(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG12	9	0.22
(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG13	9	0.22
(1,571)	1:A:140:LEU:HD11	1:A:141:PHE:H	16	0.22
(1,571)	1:A:140:LEU:HD12	1:A:141:PHE:H	16	0.22
(1,571)	1:A:140:LEU:HD13	1:A:141:PHE:H	16	0.22
(1,549)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD21	11	0.22
(1,549)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD22	11	0.22
(1,549)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD23	11	0.22
(1,53)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD21	11	0.22
(1,53)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD22	11	0.22
(1,53)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD23	11	0.22
(1,47)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:115:CYS:H	15	0.22
(1,47)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:115:CYS:H	15	0.22
(1,47)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:115:CYS:H	15	0.22
(1,468)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:23:ASN:H	15	0.22
(1,468)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:23:ASN:H	15	0.22
(1,468)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:23:ASN:H	15	0.22
(1,464)	1:A:16:GLN:H	1:A:46:VAL:HG11	4	0.22
(1,464)	1:A:16:GLN:H	1:A:46:VAL:HG12	4	0.22
(1,464)	1:A:16:GLN:H	1:A:46:VAL:HG13	4	0.22
(1,453)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG21	8	0.22
(1,453)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG22	8	0.22
(1,453)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG23	8	0.22
(1,445)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:113:ARG:H	14	0.22
(1,445)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:113:ARG:H	14	0.22
(1,445)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:113:ARG:H	14	0.22
(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD21	9	0.22
(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD22	9	0.22
(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD23	9	0.22
(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD21	15	0.22
(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD22	15	0.22
(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD23	15	0.22
(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD11	11	0.22



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD12	11	0.22
(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD13	11	0.22
(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD11	11	0.22
(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD12	11	0.22
(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD13	11	0.22
(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD11	11	0.22
(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD12	11	0.22
(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD13	11	0.22
(1,384)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:99:LEU:HD21	2	0.22
(1,384)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:99:LEU:HD22	2	0.22
(1,384)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:99:LEU:HD23	2	0.22
(1,384)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:99:LEU:HD21	2	0.22
(1,384)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:99:LEU:HD22	2	0.22
(1,384)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:99:LEU:HD23	2	0.22
(1,384)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:99:LEU:HD21	2	0.22
(1,384)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:99:LEU:HD22	2	0.22
(1,384)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:99:LEU:HD23	2	0.22
(1,374)	1:A:132:GLU:H	1:A:134:TYR:H	20	0.22
(1,329)	1:A:79:LEU:H	1:A:89:GLU:H	3	0.22
(1,25)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:123:PHE:H	5	0.22
(1,25)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:123:PHE:H	5	0.22
(1,25)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:123:PHE:H	5	0.22
(1,248)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD11	15	0.22
(1,248)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD12	15	0.22
(1,248)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD13	15	0.22
(1,24)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:134:TYR:H	11	0.22
(1,24)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:134:TYR:H	11	0.22
(1,24)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:134:TYR:H	11	0.22
(1,192)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:H	10	0.22
(1,192)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:H	10	0.22
(1,192)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:H	10	0.22
(1,161)	1:A:133:GLY:H	1:A:135:GLU:H	17	0.22
(1,115)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:H	16	0.22
(1,610)	1:A:115:CYS:H	1:A:101:HIS:H	7	0.21
(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG11	5	0.21
(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG12	5	0.21
(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG13	5	0.21
(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG11	6	0.21
(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG12	6	0.21
(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG13	6	0.21
(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG11	7	0.21
(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG12	7	0.21



 $Continued\ from\ previous\ page...$

(1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 7 0.21 (1,548) 1:A:130:LYS:H 1:A:138:LEU:HD11 4 0.21 (1,548) 1:A:130:LYS:H 1:A:138:LEU:HD12 4 0.21 (1,548) 1:A:130:LYS:H 1:A:138:LEU:HD13 4 0.21 (1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 10 0.21 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 10 0.21 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 10 0.21 (1,493) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:52:PHE:H 16 0.21 (1,493) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:52:PHE:H 16 0.21 (1,468) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:23:ASN:H 19 0.21 (1,468) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:23:ASN:H 19 0.21 (1,468) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:23:ASN:H 19 0.21 (1,468) 1:A:13:A*A*ASP:H 1:A:46:VAL:HG21 16 0.21 (1,453) 1:A:44*ASP:H 1:A:46:VAL:HG23	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,548) 1:A:130:LYS:H 1:A:138:LEU:HD12 4 0.21 (1,548) 1:A:130:LYS:H 1:A:138:LEU:HD13 4 0.21 (1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 10 0.21 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 10 0.21 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 10 0.21 (1,493) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:52:PHE:H 16 0.21 (1,493) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:52:PHE:H 16 0.21 (1,493) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:23:ASN:H 19 0.21 (1,468) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:3:2ASN:H 19 0.21 (1,468) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:23:ASN:H 19 0.21 (1,468) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:23:ASN:H 19 0.21 (1,468) 1:A:10:VAL:HG13 1:A:23:ASN:H 19 0.21 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG21 16 0.21 (1,453) 1:A:10:VAL:HG21 1:A:13:A:13:ARG:H	(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG13	7	0.21
(1,548) 1:A:130:LYS:H 1:A:76:GLU:H 10 0.21 (1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 10 0.21 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 10 0.21 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 10 0.21 (1,493) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:52:PHE:H 16 0.21 (1,493) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:52:PHE:H 16 0.21 (1,493) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:23:ASN:H 19 0.21 (1,468) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:23:ASN:H 19 0.21 (1,468) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:23:ASN:H 19 0.21 (1,468) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:23:ASN:H 19 0.21 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG221 16 0.21 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG22 16 0.21 (1,445) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:113:ARG:H 15 0.21 (1,445) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:13:13:ARG:H	(1,548)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD11	4	0.21
(1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 10 0.21 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 10 0.21 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 10 0.21 (1,493) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:52:PHE:H 16 0.21 (1,493) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:52:PHE:H 16 0.21 (1,493) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:52:PHE:H 16 0.21 (1,468) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:52:PHE:H 16 0.21 (1,468) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:23:ASN:H 19 0.21 (1,468) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:23:ASN:H 19 0.21 (1,468) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:46:VAL:HG21 16 0.21 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG21 16 0.21 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG22 16 0.21 (1,445) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:113:ARG:H 15 0.21 (1,445) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:113:ARG:H	(1,548)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD12	4	0.21
(1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 10 0.21 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 10 0.21 (1,493) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:52:PHE:H 16 0.21 (1,493) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:52:PHE:H 16 0.21 (1,493) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:52:PHE:H 16 0.21 (1,493) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:52:PHE:H 16 0.21 (1,493) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:52:PHE:H 16 0.21 (1,493) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:52:PHE:H 16 0.21 (1,468) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:23:ASN:H 19 0.21 (1,468) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:23:ASN:H 19 0.21 (1,468) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:23:ASN:H 19 0.21 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG21 16 0.21 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG22 16 0.21 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG22 16 0.21 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG23 16 0.21 (1,445) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:113:ARG:H 15 0.21 (1,445) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:113:ARG:H 15 0.21 (1,445) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:13:ARG:H 15 0.21 (1,445) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:13:ARG:H 15 0.21 (1,445) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:13:ARG:H 15 0.21 (1,438) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:13:ARG:H 11 0.21 (1,438) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:13:ARG:H 11 0.21 (1,438) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:103:PHE:H 4 0.21 (1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 10 0.21 (1,431) 1:A:102:VAL:HG	(1,548)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD13	4	0.21
(1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 10 0.21 (1,493) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:52:PHE:H 16 0.21 (1,493) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:52:PHE:H 16 0.21 (1,493) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:52:PHE:H 16 0.21 (1,493) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:23:ASN:H 19 0.21 (1,468) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:23:ASN:H 19 0.21 (1,468) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:23:ASN:H 19 0.21 (1,468) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:23:ASN:H 19 0.21 (1,468) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:23:ASN:H 19 0.21 (1,448) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:46:VAL:HG21 16 0.21 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG21 16 0.21 (1,453) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:13:ARG:H 15 0.21 (1,445) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:113:ARG:H 15 0.21 (1,445) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:121:AA:H	(1,505)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:76:GLU:H	10	0.21
(1,493) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:52:PHE:H 16 0.21 (1,493) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:52:PHE:H 16 0.21 (1,493) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:52:PHE:H 16 0.21 (1,468) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:23:ASN:H 19 0.21 (1,468) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:23:ASN:H 19 0.21 (1,468) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:23:ASN:H 19 0.21 (1,468) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:24:ASP:H 19 0.21 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG21 16 0.21 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG22 16 0.21 (1,453) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:113:ARG:H 15 0.21 (1,445) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:113:ARG:H 15 0.21 (1,445) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:113:ARG:H 15 0.21 (1,445) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:120:ALA:H 11 0.21 (1,438) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:13:A:H	(1,505)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:76:GLU:H	10	0.21
(1,493) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:52:PHE:H 16 0.21 (1,493) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:52:PHE:H 16 0.21 (1,468) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:23:ASN:H 19 0.21 (1,468) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:23:ASN:H 19 0.21 (1,468) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:23:ASN:H 19 0.21 (1,468) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:43:ASN:H 19 0.21 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG21 16 0.21 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG22 16 0.21 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG22 16 0.21 (1,453) 1:A:10:VAL:HG21 1:A:113:ARG:H 15 0.21 (1,445) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:113:ARG:H 15 0.21 (1,445) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:120:ALA:H 11 0.21 (1,438) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:120:ALA:H 11 0.21 (1,438) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:120:ALA:H	(1,505)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:76:GLU:H	10	0.21
(1,493) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:52:PHE:H 16 0.21 (1,468) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:23:ASN:H 19 0.21 (1,468) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:23:ASN:H 19 0.21 (1,468) 1:A:44:ASP:H 1:A:23:ASN:H 19 0.21 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG21 16 0.21 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG22 16 0.21 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG22 16 0.21 (1,453) 1:A:10:VAL:HG21 1:A:13:ARG:H 15 0.21 (1,445) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:113:ARG:H 15 0.21 (1,445) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:113:ARG:H 15 0.21 (1,445) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:120:ALA:H 11 0.21 (1,445) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:120:ALA:H 11 0.21 (1,438) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:120:ALA:H 11 0.21 (1,438) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:120:ALA:H	(1,493)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:52:PHE:H	16	0.21
(1,468) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:23:ASN:H 19 0.21 (1,468) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:23:ASN:H 19 0.21 (1,468) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:23:ASN:H 19 0.21 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG21 16 0.21 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG22 16 0.21 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG22 16 0.21 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG22 16 0.21 (1,453) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:13:ARG:H 15 0.21 (1,445) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:113:ARG:H 15 0.21 (1,445) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:113:ARG:H 15 0.21 (1,445) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:120:ALA:H 11 0.21 (1,438) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:120:ALA:H 11 0.21 (1,438) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 4 0.21 (1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H	(1,493)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:52:PHE:H	16	0.21
(1,468) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:23:ASN:H 19 0.21 (1,468) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:23:ASN:H 19 0.21 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG21 16 0.21 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG22 16 0.21 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG23 16 0.21 (1,453) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:113:ARG:H 15 0.21 (1,445) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:113:ARG:H 15 0.21 (1,445) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:113:ARG:H 15 0.21 (1,445) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:113:ARG:H 15 0.21 (1,445) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:120:ALA:H 11 0.21 (1,448) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:120:ALA:H 11 0.21 (1,438) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:120:ALA:H 11 0.21 (1,438) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:120:ALA:H 11 0.21 (1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H<	(1,493)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:52:PHE:H	16	0.21
(1,468) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:23:ASN:H 19 0.21 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG21 16 0.21 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG22 16 0.21 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG23 16 0.21 (1,445) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:113:ARG:H 15 0.21 (1,445) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:113:ARG:H 15 0.21 (1,445) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:113:ARG:H 15 0.21 (1,445) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:120:ALA:H 11 0.21 (1,445) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:120:ALA:H 11 0.21 (1,438) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:120:ALA:H 11 0.21 (1,438) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:120:ALA:H 11 0.21 (1,438) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 4 0.21 (1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 4 0.21 (1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H<	(1,468)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:23:ASN:H	19	0.21
(1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG21 16 0.21 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG22 16 0.21 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG23 16 0.21 (1,445) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:113:ARG:H 15 0.21 (1,445) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:113:ARG:H 15 0.21 (1,445) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:113:ARG:H 15 0.21 (1,445) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:120:ALA:H 11 0.21 (1,438) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:120:ALA:H 11 0.21 (1,438) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 4 0.21 (1,431) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:103:PHE:H 4 0.21 (1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 4 0.21 (1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 10 0.21 (1,431) 1:A:120:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 10 0.21 (1,431) 1:A:120:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H	(1,468)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:23:ASN:H	19	0.21
(1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG22 16 0.21 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG23 16 0.21 (1,445) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:113:ARG:H 15 0.21 (1,445) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:113:ARG:H 15 0.21 (1,445) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:113:ARG:H 15 0.21 (1,445) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:120:ALA:H 11 0.21 (1,438) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:120:ALA:H 11 0.21 (1,438) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:120:ALA:H 11 0.21 (1,438) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 4 0.21 (1,431) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:103:PHE:H 4 0.21 (1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 4 0.21 (1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 10 0.21 (1,431) 1:A:120:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 10 0.21 (1,431) 1:A:120:VAL:HG23 1:A:103:PHE:	(1,468)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:23:ASN:H	19	0.21
(1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG22 16 0.21 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG23 16 0.21 (1,445) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:113:ARG:H 15 0.21 (1,445) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:113:ARG:H 15 0.21 (1,445) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:113:ARG:H 15 0.21 (1,448) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:120:ALA:H 11 0.21 (1,438) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:120:ALA:H 11 0.21 (1,438) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:120:ALA:H 11 0.21 (1,438) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 4 0.21 (1,431) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:103:PHE:H 4 0.21 (1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 4 0.21 (1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 10 0.21 (1,431) 1:A:120:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 10 0.21 (1,431) 1:A:120:VAL:HG23 1:A:103:PHE:	(1,453)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG21	16	0.21
(1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG23 16 0.21 (1,445) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:113:ARG:H 15 0.21 (1,445) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:113:ARG:H 15 0.21 (1,445) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:113:ARG:H 15 0.21 (1,438) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:120:ALA:H 11 0.21 (1,438) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:120:ALA:H 11 0.21 (1,438) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:103:PHE:H 1 0.21 (1,438) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 4 0.21 (1,431) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:103:PHE:H 4 0.21 (1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 4 0.21 (1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 10 0.21 (1,431) 1:A:120:ALA:HG22 1:A:103:PHE:H 10 0.21 (1,431) 1:A:120:ALA:HG23 1:A:103:PHE:H 10 0.21 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD	· · /	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG22	16	0.21
(1,445) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:113:ARG:H 15 0.21 (1,445) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:113:ARG:H 15 0.21 (1,445) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:113:ARG:H 15 0.21 (1,438) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:120:ALA:H 11 0.21 (1,438) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:120:ALA:H 11 0.21 (1,438) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 4 0.21 (1,431) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:103:PHE:H 4 0.21 (1,431) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:103:PHE:H 4 0.21 (1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 4 0.21 (1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 10 0.21 (1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 10 0.21 (1,431) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:103:PHE:H 10 0.21 (1,431) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:103:PHE:H 10 0.21 (1,431) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:103:		1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG23	16	0.21
(1,445) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:113:ARG:H 15 0.21 (1,445) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:113:ARG:H 15 0.21 (1,438) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:120:ALA:H 11 0.21 (1,438) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:120:ALA:H 11 0.21 (1,438) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:120:ALA:H 11 0.21 (1,431) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:103:PHE:H 4 0.21 (1,431) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:103:PHE:H 4 0.21 (1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 4 0.21 (1,431) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:103:PHE:H 10 0.21 (1,431) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:103:PHE:H 10 0.21 (1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 10 0.21 (1,431) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:103:PHE:H 10 0.21 (1,443) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:103:PHE:H 10 0.21 (1,441) 1:A:120:ALA:H 1:A:103:PH	` ,	1:A:102:VAL:HG21	1:A:113:ARG:H	15	0.21
(1,438) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:120:ALA:H 11 0.21 (1,438) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:120:ALA:H 11 0.21 (1,438) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:120:ALA:H 11 0.21 (1,431) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:103:PHE:H 4 0.21 (1,431) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:103:PHE:H 4 0.21 (1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 4 0.21 (1,431) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:103:PHE:H 10 0.21 (1,431) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:103:PHE:H 10 0.21 (1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 10 0.21 (1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 10 0.21 (1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 10 0.21 (1,449) 1:A:120:ALA:H 1:A:103:PHE:H 10 0.21 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:103:PHE:H 10 0.21 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:103:PHE:H <td>· · /</td> <td>1:A:102:VAL:HG22</td> <td>1:A:113:ARG:H</td> <td>15</td> <td>0.21</td>	· · /	1:A:102:VAL:HG22	1:A:113:ARG:H	15	0.21
(1,438) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:120:ALA:H 11 0.21 (1,438) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:120:ALA:H 11 0.21 (1,438) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:120:ALA:H 11 0.21 (1,431) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:103:PHE:H 4 0.21 (1,431) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:103:PHE:H 4 0.21 (1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 10 0.21 (1,431) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:103:PHE:H 10 0.21 (1,431) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:103:PHE:H 10 0.21 (1,431) 1:A:120:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 10 0.21 (1,431) 1:A:120:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 10 0.21 (1,449) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD21 7 0.21 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD23 7 0.21 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD22 11 0.21 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:138:LEU	(1,445)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:113:ARG:H	15	0.21
(1,438) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:120:ALA:H 11 0.21 (1,431) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:103:PHE:H 4 0.21 (1,431) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:103:PHE:H 4 0.21 (1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 4 0.21 (1,431) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:103:PHE:H 10 0.21 (1,431) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:103:PHE:H 10 0.21 (1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 10 0.21 (1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 10 0.21 (1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 10 0.21 (1,449) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD21 7 0.21 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD23 7 0.21 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD22 11 0.21 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD23 11 0.21 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138	(1,438)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:120:ALA:H	11	0.21
(1,431) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:103:PHE:H 4 0.21 (1,431) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:103:PHE:H 4 0.21 (1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 4 0.21 (1,431) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:103:PHE:H 10 0.21 (1,431) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:103:PHE:H 10 0.21 (1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 10 0.21 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:103:PHE:H 10 0.21 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD21 7 0.21 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD22 11 0.21 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD23 11 0.21 (1,410) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:	(1,438)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:120:ALA:H	11	0.21
(1,431) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:103:PHE:H 4 0.21 (1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 4 0.21 (1,431) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:103:PHE:H 10 0.21 (1,431) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:103:PHE:H 10 0.21 (1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 10 0.21 (1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 10 0.21 (1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 10 0.21 (1,431) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:103:PHE:H 10 0.21 (1,431) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:103:PHE:H 10 0.21 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD22 7 0.21 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD22 11 0.21 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD23 11 0.21 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD21 3 0.21 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:	(1,438)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:120:ALA:H	11	0.21
(1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 4 0.21 (1,431) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:103:PHE:H 10 0.21 (1,431) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:103:PHE:H 10 0.21 (1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 10 0.21 (1,431) 1:A:120:ALA:HG23 1:A:103:PHE:H 10 0.21 (1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 10 0.21 (1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 10 0.21 (1,4419) 1:A:120:ALA:H 1:A:103:PHE:H 10 0.21 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD22 7 0.21 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD22 11 0.21 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD23 11 0.21 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD21 3 0.21 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD21 3 0.21 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1	(1,431)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:103:PHE:H	4	0.21
(1,431) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:103:PHE:H 10 0.21 (1,431) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:103:PHE:H 10 0.21 (1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 10 0.21 (1,431) 1:A:120:ALA:H 1:A:103:PHE:H 10 0.21 (1,431) 1:A:120:ALA:H 1:A:103:PHE:H 10 0.21 (1,431) 1:A:120:ALA:H 1:A:103:PHE:H 10 0.21 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD22 7 0.21 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD22 11 0.21 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD22 11 0.21 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD23 11 0.21 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD21 3 0.21 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD23 3 0.21 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD22 3 0.21 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:1	(1,431)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:103:PHE:H	4	0.21
(1,431) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:103:PHE:H 10 0.21 (1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 10 0.21 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD21 7 0.21 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD22 7 0.21 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD23 7 0.21 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD21 11 0.21 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD22 11 0.21 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD23 11 0.21 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD21 3 0.21 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD23 3 0.21 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD21 3 0.21 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD22 3 0.21 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD22 3 0.21	(1,431)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:103:PHE:H	4	0.21
(1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 10 0.21 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD21 7 0.21 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD22 7 0.21 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD23 7 0.21 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD21 11 0.21 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD22 11 0.21 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD23 11 0.21 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD21 3 0.21 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD23 3 0.21 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD21 3 0.21 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD22 3 0.21 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD22 3 0.21	(1,431)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:103:PHE:H	10	0.21
(1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD21 7 0.21 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD22 7 0.21 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD23 7 0.21 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD21 11 0.21 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD22 11 0.21 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD23 11 0.21 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD21 3 0.21 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD23 3 0.21 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD21 3 0.21 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD22 3 0.21 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD22 3 0.21	(1,431)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:103:PHE:H	10	0.21
(1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD22 7 0.21 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD23 7 0.21 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD21 11 0.21 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD22 11 0.21 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD23 11 0.21 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD21 3 0.21 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD23 3 0.21 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD21 3 0.21 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD21 3 0.21 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD22 3 0.21	(1,431)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:103:PHE:H	10	0.21
(1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD23 7 0.21 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD21 11 0.21 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD22 11 0.21 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD23 11 0.21 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD21 3 0.21 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD23 3 0.21 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD21 3 0.21 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD21 3 0.21 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD22 3 0.21	(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD21	7	0.21
(1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD21 11 0.21 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD22 11 0.21 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD23 11 0.21 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD21 3 0.21 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22 3 0.21 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD23 3 0.21 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD21 3 0.21 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD22 3 0.21	(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD22	7	0.21
(1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD22 11 0.21 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD23 11 0.21 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD21 3 0.21 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22 3 0.21 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD23 3 0.21 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD21 3 0.21 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD22 3 0.21	(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD23	7	0.21
(1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD22 11 0.21 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD23 11 0.21 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD21 3 0.21 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22 3 0.21 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD23 3 0.21 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD21 3 0.21 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD22 3 0.21		1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD21	11	0.21
(1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD23 11 0.21 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD21 3 0.21 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22 3 0.21 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD23 3 0.21 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD21 3 0.21 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD22 3 0.21		1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD22	11	0.21
(1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD21 3 0.21 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22 3 0.21 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD23 3 0.21 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD21 3 0.21 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD22 3 0.21 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD22 3 0.21		1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD23	11	0.21
(1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22 3 0.21 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD23 3 0.21 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD21 3 0.21 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD22 3 0.21		1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD21	3	0.21
(1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD23 3 0.21 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD21 3 0.21 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD22 3 0.21		1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD22	3	0.21
(1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD21 3 0.21 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD22 3 0.21		1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD23	3	0.21
(1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD22 3 0.21	` ′	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD21	3	0.21
	· · /	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD22	3	0.21
(1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD23 3 0.21	(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD23	3	0.21
(1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD21 3 0.21	(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD21	3	0.21
(1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD22 3 0.21		1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD22	3	0.21



 $Continued\ from\ previous\ page...$

(1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD23 3 0.21 (1,407) 1:A:12:LEU:HD11 1:A:46:VAL:HG21 19 0.21 (1,407) 1:A:12:LEU:HD11 1:A:46:VAL:HG22 19 0.21 (1,407) 1:A:12:LEU:HD12 1:A:46:VAL:HG23 19 0.21 (1,407) 1:A:12:LEU:HD12 1:A:46:VAL:HG23 19 0.21 (1,407) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:46:VAL:HG23 19 0.21 (1,407) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:46:VAL:HG21 19 0.21 (1,407) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:46:VAL:HG23 19 0.21 (1,407) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:46:VAL:HG23 19 0.21 (1,407) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:46:VAL:HG23 19 0.21 (1,407) 1:A:12:LEU:HD11 1:A:12:4:VAL:H 20 0.21 (1,4) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:46:VAL:HG23 19 0.21 (1,4) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:46:VAL:HG11 11 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD21	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,407) 1:A:12:LEU:HD11 1:A:46:VAL:HG22 19 0.21 (1,407) 1:A:12:LEU:HD12 1:A:46:VAL:HG23 19 0.21 (1,407) 1:A:12:LEU:HD12 1:A:46:VAL:HG21 19 0.21 (1,407) 1:A:12:LEU:HD12 1:A:46:VAL:HG22 19 0.21 (1,407) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:46:VAL:HG21 19 0.21 (1,407) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:46:VAL:HG21 19 0.21 (1,407) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:46:VAL:HG22 19 0.21 (1,407) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:46:VAL:HG23 19 0.21 (1,407) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:46:VAL:HG23 19 0.21 (1,407) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:46:VAL:HG13 11 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD21	(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD23	3	0.21
(1,407) 1:A:12:LEU:HD11 1:A:46:VAL:HG23 19 0.21 (1,407) 1:A:12:LEU:HD12 1:A:46:VAL:HG21 19 0.21 (1,407) 1:A:12:LEU:HD12 1:A:46:VAL:HG22 19 0.21 (1,407) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:46:VAL:HG23 19 0.21 (1,407) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:46:VAL:HG21 19 0.21 (1,407) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:46:VAL:HG22 19 0.21 (1,407) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:46:VAL:HG23 19 0.21 (1,407) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:46:VAL:HG23 19 0.21 (1,407) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:46:VAL:HG23 19 0.21 (1,407) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:46:VAL:HG23 19 0.21 (1,407) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:46:VAL:HG23 19 0.21 (1,407) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:46:VAL:HG11 11 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:46:VAL:HG11 11 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD22	(1,407)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:46:VAL:HG21	19	0.21
(1,407) 1:A:12:LEU:HD12 1:A:46:VAL:HG21 19 0.21 (1,407) 1:A:12:LEU:HD12 1:A:46:VAL:HG22 19 0.21 (1,407) 1:A:12:LEU:HD12 1:A:46:VAL:HG23 19 0.21 (1,407) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:46:VAL:HG21 19 0.21 (1,407) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:46:VAL:HG22 19 0.21 (1,407) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:46:VAL:HG23 19 0.21 (1,407) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:46:VAL:HG23 19 0.21 (1,4) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:46:VAL:HG23 19 0.21 (1,4) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:46:VAL:H 20 0.21 (1,4) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:46:VAL:HG11 11 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:46:VAL:HG12 11 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG13 11 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG13 11 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD23 <t< td=""><td>(1,407)</td><td>1:A:12:LEU:HD11</td><td>1:A:46:VAL:HG22</td><td>19</td><td>0.21</td></t<>	(1,407)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:46:VAL:HG22	19	0.21
(1,407) 1:A:12:LEU:HD12 1:A:46:VAL:HG22 19 0.21 (1,407) 1:A:12:LEU:HD12 1:A:46:VAL:HG23 19 0.21 (1,407) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:46:VAL:HG21 19 0.21 (1,407) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:46:VAL:HG22 19 0.21 (1,407) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:46:VAL:HG23 19 0.21 (1,407) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:46:VAL:HG23 19 0.21 (1,407) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:46:VAL:HG23 19 0.21 (1,407) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:42:VAL:H 20 0.21 (1,41) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:12:LEU:HD21 1:A:46:VAL:HG11 11 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:46:VAL:HG12 11 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG13 11 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG11 11 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD23 1:A:46:VAL:HG13 11 0.21 (1,393)	(1,407)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:46:VAL:HG23	19	0.21
(1,407) 1:A:12:LEU:HD12 1:A:46:VAL:HG23 19 0.21 (1,407) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:46:VAL:HG21 19 0.21 (1,407) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:46:VAL:HG22 19 0.21 (1,407) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:46:VAL:HG23 19 0.21 (1,407) 1:A:12:LEU:HD11 1:A:46:VAL:H 20 0.21 (1,4) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:124:VAL:H 20 0.21 (1,4) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:H 20 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:46:VAL:HG11 11 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:46:VAL:HG12 11 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG13 11 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG13 11 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG13 11 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD23 1:A:46:VAL:HG13 11 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD22	(1,407)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:46:VAL:HG21	19	0.21
(1,407) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:46:VAL:HG21 19 0.21 (1,407) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:46:VAL:HG22 19 0.21 (1,407) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:46:VAL:HG23 19 0.21 (1,407) 1:A:12:LEU:HD11 1:A:46:VAL:HG23 19 0.21 (1,4) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:124:VAL:H 20 0.21 (1,4) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:H 20 0.21 (1,4) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:H 20 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:46:VAL:HG11 11 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:46:VAL:HG13 11 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG11 11 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD23 1:A:46:VAL:HG13 11 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD23 1:A:46:VAL:HG13 11 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD23 1:A:46:VAL:HG13 11 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD23 1	(1,407)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:46:VAL:HG22	19	0.21
(1,407) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:46:VAL:HG22 19 0.21 (1,407) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:46:VAL:HG23 19 0.21 (1,407) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:46:VAL:HG23 19 0.21 (1,4) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:124:VAL:H 20 0.21 (1,34) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:H 20 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:46:VAL:HG11 11 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:46:VAL:HG12 11 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG11 11 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG12 11 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG13 11 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD23 1:A:46:VAL:HG11 11 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD23 1:A:46:VAL:HG13 11 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD23 1:A:46:VAL:HG13 11 0.21 (1,393) 1:A:12:12:LEU:HD23	(1,407)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:46:VAL:HG23	19	0.21
(1,407) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:46:VAL:HG23 19 0.21 (1,4) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:124:VAL:H 20 0.21 (1,4) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:124:VAL:H 20 0.21 (1,4) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:H 20 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:46:VAL:HG11 11 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:46:VAL:HG13 11 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG13 11 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG12 11 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD23 1:A:46:VAL:HG13 11 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD23 1:A:46:VAL:HG11 11 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD23 1:A:46:VAL:HG13 11 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD23 1:A:46:VAL:HG11 11 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD23 1:A:46:VAL:HG13 11 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD23 1	(1,407)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:46:VAL:HG21	19	0.21
(1,4) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:124:VAL:H 20 0.21 (1,4) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:124:VAL:H 20 0.21 (1,4) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:H 20 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:46:VAL:HG11 11 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:46:VAL:HG13 11 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG13 11 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG12 11 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG13 11 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD23 1	(1,407)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:46:VAL:HG22	19	0.21
(1,4) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:124:VAL:H 20 0.21 (1,4) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:H 20 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:46:VAL:HG11 11 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:46:VAL:HG12 11 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG13 11 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG12 11 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG13 11 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD23 1:A:46:VAL:HG13 11 0.21 (1,361) 1:A:46:LEU:HD23 <	(1,407)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:46:VAL:HG23	19	0.21
(1,4) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:H 20 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:46:VAL:HG11 11 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:46:VAL:HG12 11 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG13 11 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG12 11 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG13 11 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD23 1:A:46:VAL:HG13 11 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD23 1:A:46:VAL:HG12 11 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD23 1:A:46:VAL:HG13 11 0.21 (1,330) 1:A:17:G:GLU:H 1:A:19:LEU:HD13 16 0.21 (1,337) 1:A:79:EER:H <	(1,4)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:124:VAL:H	20	0.21
(1,393) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:46:VAL:HG11 11 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:46:VAL:HG12 11 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:46:VAL:HG13 11 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG11 11 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG13 11 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD23 1:A:46:VAL:HG13 11 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD23 1:A:46:VAL:HG12 11 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD23 1:A:46:VAL:HG13 11 0.21 (1,330) 1:A:17:G:GLU:H 1:A:19:LEU:HD13 16 0.21 (1,337) 1:A:79:EER:H 1:A:99:LEU:HD11 16 0.21 (1,339) 1:A:79:EEU:H	(1,4)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:H	20	0.21
(1,393) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:46:VAL:HG12 11 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:46:VAL:HG13 11 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG11 11 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG12 11 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG13 11 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD23 1:A:46:VAL:HG12 11 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD23 1:A:46:VAL:HG13 11 0.21 (1,330) 1:A:76:GLU:H 1:A:412:LEU:HG13 11 0.21 (1,337) 1:A:79:LEU:H 1:A:99:LEU:HD11 16 0.21 (1,333) 1:A:99:LEU:H <	(1,4)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:H	20	0.21
(1,393) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:46:VAL:HG13 11 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG11 11 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG12 11 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD23 1:A:46:VAL:HG13 11 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD23 1:A:46:VAL:HG12 11 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD23 1:A:46:VAL:HG13 11 0.21 (1,393) 1:A:76:GLU:H 1:A:412:LEU:HG13 11 0.21 (1,337) 1:A:76:GLU:H 1:A:99:LEU:HD11 16 0.21 (1,33) 1:A:99:LEU:H 1:A:99:LEU:HD12 16 0.21 (1,339) 1:A:77:EU:H 1:	(1,393)	1:A:12:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HG11	11	0.21
(1,393) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG11 11 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG12 11 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD23 1:A:46:VAL:HG13 11 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD23 1:A:46:VAL:HG11 11 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD23 1:A:46:VAL:HG12 11 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD23 1:A:46:VAL:HG13 11 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD23 1:A:46:VAL:HG13 11 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD23 1:A:46:VAL:HG13 11 0.21 (1,393) 1:A:76:GLU:H 1:A:49:LAG:HG13 11 0.21 (1,337) 1:A:76:GLU:H 1:A:99:LAG:H 16 0.21 (1,33) 1:A:92:SER:H 1:A:99:LEU:HD11 16 0.21 (1,33) 1:A:92:SER:H 1:A:89:LU:HD13 16 0.21 (1,339) 1:A:79:LEU:H 1:A:89:GLU:H 10 0.21 (1,299) 1:A:13:GLU:H 1:A:13:GLU:H <td>(1,393)</td> <td>1:A:12:LEU:HD21</td> <td>1:A:46:VAL:HG12</td> <td>11</td> <td>0.21</td>	(1,393)	1:A:12:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HG12	11	0.21
(1,393) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG12 11 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD23 1:A:46:VAL:HG13 11 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD23 1:A:46:VAL:HG11 11 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD23 1:A:46:VAL:HG12 11 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD23 1:A:46:VAL:HG13 11 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD23 1:A:46:VAL:HG13 11 0.21 (1,361) 1:A:45:ILE:H 1:A:42:2:ARG:H 15 0.21 (1,361) 1:A:76:GLU:H 1:A:91:ARG:H 16 0.21 (1,337) 1:A:76:GLU:H 1:A:99:LEU:HD11 16 0.21 (1,33) 1:A:92:SER:H 1:A:99:LEU:HD12 16 0.21 (1,33) 1:A:92:SER:H 1:A:99:LEU:HD13 16 0.21 (1,329) 1:A:79:LEU:H 1:A:88:GLU:H 19 0.21 (1,299) 1:A:131:GLU:H 1:A:14:134:TYR:H 8 0.21 (1,283) 1:A:130:PHE:H 1:A:120:GEU:HD11 <td>(1,393)</td> <td>1:A:12:LEU:HD21</td> <td>1:A:46:VAL:HG13</td> <td>11</td> <td>0.21</td>	(1,393)	1:A:12:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HG13	11	0.21
(1,393) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG13 11 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD23 1:A:46:VAL:HG11 11 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD23 1:A:46:VAL:HG12 11 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD23 1:A:46:VAL:HG13 11 0.21 (1,393) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG13 11 0.21 (1,361) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG13 11 0.21 (1,337) 1:A:45:ILE:H 1:A:49:LEU:HD11 16 0.21 (1,33) 1:A:49:LEU:H 1:A:499:LEU:HD13 16 0.21 (1,33) 1:A:79:LEU:H 1:A:198:LEU:H	(1,393)	1:A:12:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HG11	11	0.21
(1,393) 1:A:12:LEU:HD23 1:A:46:VAL:HG11 11 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD23 1:A:46:VAL:HG12 11 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD23 1:A:46:VAL:HG13 11 0.21 (1,393) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG13 11 0.21 (1,361) 1:A:45:ILE:H 1:A:122:ARG:H 15 0.21 (1,337) 1:A:76:GLU:H 1:A:91:ARG:H 16 0.21 (1,33) 1:A:92:SER:H 1:A:99:LEU:HD11 16 0.21 (1,33) 1:A:92:SER:H 1:A:99:LEU:HD12 16 0.21 (1,33) 1:A:92:SER:H 1:A:99:LEU:HD13 16 0.21 (1,33) 1:A:79:LEU:H 1:A:89:LEU:HD13 16 0.21 (1,329) 1:A:71:IC:HD14 1:A:18:GLU:H 19 0.21 (1,299) 1:A:15:MET:H 1:A:18:GLU:H 19 0.21 (1,283) 1:A:131:GLU:H 1:A:134:TYR:H 8 0.21 (1,277) 1:A:103:PHE:H 1:A:129:LEU:HD11 10	(1,393)	1:A:12:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HG12	11	0.21
(1,393) 1:A:12:LEU:HD23 1:A:46:VAL:HG12 11 0.21 (1,393) 1:A:12:LEU:HD23 1:A:46:VAL:HG13 11 0.21 (1,361) 1:A:45:ILE:H 1:A:122:ARG:H 15 0.21 (1,337) 1:A:76:GLU:H 1:A:91:ARG:H 16 0.21 (1,33) 1:A:92:SER:H 1:A:99:LEU:HD11 16 0.21 (1,33) 1:A:92:SER:H 1:A:99:LEU:HD12 16 0.21 (1,33) 1:A:92:SER:H 1:A:99:LEU:HD13 16 0.21 (1,329) 1:A:79:LEU:H 1:A:89:GLU:H 10 0.21 (1,299) 1:A:15:MET:H 1:A:18:GLU:H 19 0.21 (1,283) 1:A:131:GLU:H 1:A:134:TYR:H 8 0.21 (1,283) 1:A:131:GLU:H 1:A:106:GLY:H 15 0.21 (1,266) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD11 10 0.21 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD12 10 0.21 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD11 9 </td <td>(1,393)</td> <td>1:A:12:LEU:HD22</td> <td>1:A:46:VAL:HG13</td> <td>11</td> <td>0.21</td>	(1,393)	1:A:12:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HG13	11	0.21
(1,393) 1:A:12:LEU:HD23 1:A:46:VAL:HG13 11 0.21 (1,361) 1:A:45:ILE:H 1:A:122:ARG:H 15 0.21 (1,337) 1:A:76:GLU:H 1:A:91:ARG:H 16 0.21 (1,33) 1:A:92:SER:H 1:A:99:LEU:HD11 16 0.21 (1,33) 1:A:92:SER:H 1:A:99:LEU:HD12 16 0.21 (1,33) 1:A:92:SER:H 1:A:99:LEU:HD13 16 0.21 (1,329) 1:A:79:LEU:H 1:A:89:GLU:H 10 0.21 (1,299) 1:A:15:MET:H 1:A:18:GLU:H 19 0.21 (1,283) 1:A:131:GLU:H 1:A:134:TYR:H 8 0.21 (1,283) 1:A:103:PHE:H 1:A:106:GLY:H 15 0.21 (1,260) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD11 10 0.21 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD12 10 0.21 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD11 9 0.21 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD13 9 <td>(1,393)</td> <td>1:A:12:LEU:HD23</td> <td>1:A:46:VAL:HG11</td> <td>11</td> <td>0.21</td>	(1,393)	1:A:12:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HG11	11	0.21
(1,361) 1:A:45:ILE:H 1:A:122:ARG:H 15 0.21 (1,337) 1:A:76:GLU:H 1:A:91:ARG:H 16 0.21 (1,33) 1:A:92:SER:H 1:A:99:LEU:HD11 16 0.21 (1,33) 1:A:92:SER:H 1:A:99:LEU:HD12 16 0.21 (1,33) 1:A:92:SER:H 1:A:99:LEU:HD13 16 0.21 (1,329) 1:A:79:LEU:H 1:A:89:GLU:H 10 0.21 (1,299) 1:A:15:MET:H 1:A:18:GLU:H 19 0.21 (1,283) 1:A:131:GLU:H 1:A:134:TYR:H 8 0.21 (1,283) 1:A:103:PHE:H 1:A:106:GLY:H 15 0.21 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD11 10 0.21 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD12 10 0.21 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD11 9 0.21 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD13 9 0.21 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD11 9	(1,393)	1:A:12:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HG12	11	0.21
(1,337) 1:A:76:GLU:H 1:A:91:ARG:H 16 0.21 (1,33) 1:A:92:SER:H 1:A:99:LEU:HD11 16 0.21 (1,33) 1:A:92:SER:H 1:A:99:LEU:HD12 16 0.21 (1,33) 1:A:92:SER:H 1:A:99:LEU:HD13 16 0.21 (1,329) 1:A:79:LEU:H 1:A:89:GLU:H 10 0.21 (1,299) 1:A:15:MET:H 1:A:18:GLU:H 19 0.21 (1,283) 1:A:131:GLU:H 1:A:134:TYR:H 8 0.21 (1,277) 1:A:103:PHE:H 1:A:106:GLY:H 15 0.21 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD11 10 0.21 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD12 10 0.21 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD11 9 0.21 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD13 9 0.21 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD11 9 0.21	(1,393)	1:A:12:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HG13	11	0.21
(1,33) 1:A:92:SER:H 1:A:99:LEU:HD11 16 0.21 (1,33) 1:A:92:SER:H 1:A:99:LEU:HD12 16 0.21 (1,33) 1:A:92:SER:H 1:A:99:LEU:HD13 16 0.21 (1,329) 1:A:79:LEU:H 1:A:89:GLU:H 10 0.21 (1,299) 1:A:15:MET:H 1:A:18:GLU:H 19 0.21 (1,283) 1:A:131:GLU:H 1:A:134:TYR:H 8 0.21 (1,277) 1:A:103:PHE:H 1:A:106:GLY:H 15 0.21 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD11 10 0.21 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD12 10 0.21 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD13 10 0.21 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD11 9 0.21 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD13 9 0.21 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD11 9 0.21	(1,361)	1:A:45:ILE:H	1:A:122:ARG:H	15	0.21
(1,33) 1:A:92:SER:H 1:A:99:LEU:HD12 16 0.21 (1,33) 1:A:92:SER:H 1:A:99:LEU:HD13 16 0.21 (1,329) 1:A:79:LEU:H 1:A:89:GLU:H 10 0.21 (1,299) 1:A:15:MET:H 1:A:18:GLU:H 19 0.21 (1,283) 1:A:131:GLU:H 1:A:134:TYR:H 8 0.21 (1,277) 1:A:103:PHE:H 1:A:106:GLY:H 15 0.21 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD11 10 0.21 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD12 10 0.21 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD13 10 0.21 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD11 9 0.21 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD13 9 0.21 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD11 9 0.21 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD11 9 0.21	(1,337)	1:A:76:GLU:H	1:A:91:ARG:H	16	0.21
(1,33) 1:A:92:SER:H 1:A:99:LEU:HD13 16 0.21 (1,329) 1:A:79:LEU:H 1:A:89:GLU:H 10 0.21 (1,299) 1:A:15:MET:H 1:A:18:GLU:H 19 0.21 (1,283) 1:A:131:GLU:H 1:A:134:TYR:H 8 0.21 (1,277) 1:A:103:PHE:H 1:A:106:GLY:H 15 0.21 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD11 10 0.21 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD12 10 0.21 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD13 10 0.21 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD11 9 0.21 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD12 9 0.21 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD13 9 0.21 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD11 9 0.21 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD11 9 0.21	(1,33)	1:A:92:SER:H	1:A:99:LEU:HD11	16	0.21
(1,329) 1:A:79:LEU:H 1:A:89:GLU:H 10 0.21 (1,299) 1:A:15:MET:H 1:A:18:GLU:H 19 0.21 (1,283) 1:A:131:GLU:H 1:A:134:TYR:H 8 0.21 (1,277) 1:A:103:PHE:H 1:A:106:GLY:H 15 0.21 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD11 10 0.21 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD12 10 0.21 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD13 10 0.21 (1,26) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD11 9 0.21 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD13 9 0.21 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD11 9 0.21 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD11 9 0.21	(1,33)	1:A:92:SER:H	1:A:99:LEU:HD12	16	0.21
(1,299) 1:A:15:MET:H 1:A:18:GLU:H 19 0.21 (1,283) 1:A:131:GLU:H 1:A:134:TYR:H 8 0.21 (1,277) 1:A:103:PHE:H 1:A:106:GLY:H 15 0.21 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD11 10 0.21 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD12 10 0.21 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD13 10 0.21 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD11 9 0.21 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD12 9 0.21 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD13 9 0.21 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD11 9 0.21	(1,33)	1:A:92:SER:H	1:A:99:LEU:HD13	16	0.21
(1,283) 1:A:131:GLU:H 1:A:134:TYR:H 8 0.21 (1,277) 1:A:103:PHE:H 1:A:106:GLY:H 15 0.21 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD11 10 0.21 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD12 10 0.21 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD13 10 0.21 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD11 9 0.21 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD12 9 0.21 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD13 9 0.21 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD11 9 0.21	(1,329)	1:A:79:LEU:H	1:A:89:GLU:H	10	0.21
(1,277) 1:A:103:PHE:H 1:A:106:GLY:H 15 0.21 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD11 10 0.21 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD12 10 0.21 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD13 10 0.21 (1,26) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD11 9 0.21 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD12 9 0.21 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD13 9 0.21 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD11 9 0.21	(1,299)	1:A:15:MET:H	1:A:18:GLU:H	19	0.21
(1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD11 10 0.21 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD12 10 0.21 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD13 10 0.21 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD11 9 0.21 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD12 9 0.21 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD13 9 0.21 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD11 9 0.21	(1,283)	1:A:131:GLU:H	1:A:134:TYR:H	8	0.21
(1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD12 10 0.21 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD13 10 0.21 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD11 9 0.21 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD12 9 0.21 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD13 9 0.21 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD11 9 0.21	(1,277)	1:A:103:PHE:H	1:A:106:GLY:H	15	0.21
(1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD13 10 0.21 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD11 9 0.21 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD12 9 0.21 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD13 9 0.21 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD11 9 0.21	(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD11	10	0.21
(1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD11 9 0.21 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD12 9 0.21 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD13 9 0.21 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD11 9 0.21	(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD12	10	0.21
(1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD11 9 0.21 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD12 9 0.21 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD13 9 0.21 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD11 9 0.21	(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD13	10	0.21
(1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD13 9 0.21 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD11 9 0.21		1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD11	9	0.21
(1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD11 9 0.21	(1,259)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD12	9	0.21
	` /	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD13	9	0.21
(4.000)	(1,259)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD11	9	0.21
(1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD12 9 0.21	(1,259)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD12	9	0.21
(1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD13 9 0.21	(1,259)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD13	9	0.21
(1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD11 9 0.21	(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD11	9	0.21
(1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD12 9 0.21	(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD12	9	0.21



 $Continued\ from\ previous\ page...$

(1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 9 0.21 (1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD11 16 0.21 (1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD12 16 0.21 (1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD13 16 0.21 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD11 16 0.21 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD12 16 0.21 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 16 0.21 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD11 16 0.21 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD12 16 0.21 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 16 0.21 (1,248) 1:A:120:ALA:H	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD12 16 0.21 (1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD13 16 0.21 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD11 16 0.21 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD12 16 0.21 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 16 0.21 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD11 16 0.21 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD12 16 0.21 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 16 0.21 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 16 0.21 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 17 0.21 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 17 0.21 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:129:LEU:HD13 17 0.21 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:129:LEU:HD13 17 0.21 (1,148) 1:A:44:ASP:H	(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD13	9	0.21
(1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD13 16 0.21 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD11 16 0.21 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD12 16 0.21 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD13 16 0.21 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD11 16 0.21 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD12 16 0.21 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 16 0.21 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 16 0.21 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 16 0.21 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD12 17 0.21 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:122:LEU:HD13 17 0.21 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:129:VAL:H 1 0.21 (1,148) 1:A:44:ASP:H 1:A:129:VAL:H 1 0.21 (1,111) 1:A:129:LEU:HD12 1<	(1,256)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD11	16	0.21
(1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD11 16 0.21 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD12 16 0.21 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD13 16 0.21 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD11 16 0.21 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD12 16 0.21 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 16 0.21 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 16 0.21 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 16 0.21 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD11 17 0.21 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD12 17 0.21 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 17 0.21 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 17 0.21 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 17 0.21 (1,348) 1:A:44:ASP:H <	(1,256)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD12	16	0.21
(1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD12 16 0.21 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD13 16 0.21 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD11 16 0.21 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD12 16 0.21 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 16 0.21 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 16 0.21 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 16 0.21 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD11 17 0.21 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 17 0.21 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 17 0.21 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 17 0.21 (1,148) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 12 0.21 (1,131) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 12 0.21 (1,11) 1:A:128:LYS:H <t< td=""><td>(1,256)</td><td>1:A:46:VAL:HG21</td><td>1:A:51:LEU:HD13</td><td>16</td><td>0.21</td></t<>	(1,256)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD13	16	0.21
(1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD13 16 0.21 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD11 16 0.21 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD12 16 0.21 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 16 0.21 (1,266) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 16 0.21 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD11 17 0.21 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD12 17 0.21 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 17 0.21 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 17 0.21 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 17 0.21 (1,148) 1:A:44:ASP:H 1:A:129:LEU:HD21 12 0.21 (1,131) 1:A:17:TYR:H 1:A:129:LEU:HD21 12 0.21 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 12 0.21 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A	(1,256)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD11	16	0.21
(1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD11 16 0.21 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD12 16 0.21 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 16 0.21 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD11 17 0.21 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD12 17 0.21 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 17 0.21 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 17 0.21 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 17 0.21 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:129:VAL:H 13 0.21 (1,148) 1:A:44:ASP:H 1:A:129:VAL:H 13 0.21 (1,148) 1:A:44:ASP:H 1:A:129:VAL:H 13 0.21 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 12 0.21 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 12 0.21 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD2	(1,256)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD12	16	0.21
(1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD12 16 0.21 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 16 0.21 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD11 17 0.21 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD12 17 0.21 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 17 0.21 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 17 0.21 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 17 0.21 (1,148) 1:A:44:ASP:H 1:A:122:LEU:HD13 17 0.21 (1,148) 1:A:44:ASP:H 1:A:129:VAL:H 13 0.21 (1,131) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 12 0.21 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 12 0.21 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 14 0.21 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 14 0.21 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU	(1,256)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD13	16	0.21
(1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 16 0.21 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD11 17 0.21 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD12 17 0.21 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 17 0.21 (1,148) 1:A:44:ASP:H 1:A:122:ARG:H 1 0.21 (1,148) 1:A:44:ASP:H 1:A:129:VAL:H 13 0.21 (1,131) 1:A:17:TYR:H 1:A:19:VAL:H 13 0.21 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 12 0.21 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 12 0.21 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 14 0.21 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 14 0.21 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 14 0.21 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 14 0.21 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:129:LEU:HD11	(1,256)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD11	16	0.21
(1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD11 17 0.21 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD12 17 0.21 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 17 0.21 (1,148) 1:A:120:ALA:H 1:A:122:ARG:H 1 0.21 (1,131) 1:A:14:ASP:H 1:A:19:VAL:H 13 0.21 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 12 0.21 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 12 0.21 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 12 0.21 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 14 0.21 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 14 0.21 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 14 0.21 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 14 0.21 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 14 0.21 (1,23) 1:A:17:TYR:H 1:A:129:LEU:HD23	(1,256)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD12	16	0.21
(1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD12 17 0.21 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 17 0.21 (1,148) 1:A:44:ASP:H 1:A:122:ARG:H 1 0.21 (1,131) 1:A:17:TYR:H 1:A:19:VAL:H 13 0.21 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 12 0.21 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 12 0.21 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 12 0.21 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 14 0.21 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 14 0.21 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 14 0.21 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 14 0.21 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 5 0.2 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 5 0.2 (1,609) 1:A:102:VAL:H 1:A:88:THR:H <td< td=""><td>(1,256)</td><td>1:A:46:VAL:HG23</td><td>1:A:51:LEU:HD13</td><td>16</td><td>0.21</td></td<>	(1,256)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD13	16	0.21
(1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 17 0.21 (1,148) 1:A:44:ASP:H 1:A:122:ARG:H 1 0.21 (1,131) 1:A:17:TYR:H 1:A:19:VAL:H 13 0.21 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 12 0.21 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 12 0.21 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 12 0.21 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 14 0.21 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 14 0.21 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 14 0.21 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 14 0.21 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 5 0.2 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 5 0.2 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 5 0.2 (1,609) 1:A:100:GLY:H 1:A:88:THR:H 19<	(1,248)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD11	17	0.21
(1,148) 1:A:44:ASP:H 1:A:122:ARG:H 1 0.21 (1,131) 1:A:17:TYR:H 1:A:19:VAL:H 13 0.21 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 12 0.21 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 12 0.21 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 12 0.21 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 14 0.21 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 14 0.21 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 14 0.21 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 5 0.2 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD12 5 0.2 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 5 0.2 (1,609) 1:A:102:VAL:H 1:A:88:THR:H 19 0.2 (1,508) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG11 16 0.2 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 16	(1,248)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD12	17	0.21
(1,131) 1:A:17:TYR:H 1:A:19:VAL:H 13 0.21 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 12 0.21 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 12 0.21 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 12 0.21 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 14 0.21 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 14 0.21 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 14 0.21 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 5 0.2 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 5 0.2 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 5 0.2 (1,609) 1:A:100:GLY:H 1:A:88:THR:H 19 0.2 (1,508) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG11 16 0.2 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 16 0.2 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 16 <td>(1,248)</td> <td>1:A:120:ALA:H</td> <td>1:A:121:LEU:HD13</td> <td>17</td> <td>0.21</td>	(1,248)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD13	17	0.21
(1,131) 1:A:17:TYR:H 1:A:19:VAL:H 13 0.21 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 12 0.21 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 12 0.21 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 12 0.21 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 14 0.21 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 14 0.21 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 14 0.21 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 14 0.21 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 5 0.2 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD12 5 0.2 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 5 0.2 (1,609) 1:A:100:GLY:H 1:A:88:THR:H 19 0.2 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG11 16 0.2 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 16 </td <td>(1,148)</td> <td>1:A:44:ASP:H</td> <td>1:A:122:ARG:H</td> <td>1</td> <td>0.21</td>	(1,148)	1:A:44:ASP:H	1:A:122:ARG:H	1	0.21
(1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 12 0.21 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 12 0.21 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 14 0.21 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 14 0.21 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 14 0.21 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 5 0.2 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 5 0.2 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 5 0.2 (1,623) 1:A:102:VAL:H 1:A:88:THR:H 19 0.2 (1,609) 1:A:100:GLY:H 1:A:90:VAL:H 19 0.2 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG11 16 0.2 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 16 0.2 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 16 0.2	(1,131)	1:A:17:TYR:H	1:A:19:VAL:H	13	0.21
(1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 12 0.21 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 14 0.21 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 14 0.21 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 14 0.21 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 5 0.2 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD12 5 0.2 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 5 0.2 (1,603) 1:A:102:VAL:H 1:A:88:THR:H 19 0.2 (1,608) 1:A:100:GLY:H 1:A:90:VAL:H 19 0.2 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG11 16 0.2 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 16 0.2 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 16 0.2	(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD21	12	0.21
(1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 14 0.21 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 14 0.21 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 14 0.21 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 5 0.2 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD12 5 0.2 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 5 0.2 (1,609) 1:A:102:VAL:H 1:A:88:THR:H 19 0.2 (1,608) 1:A:100:GLY:H 1:A:90:VAL:H 19 0.2 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG11 16 0.2 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG12 16 0.2 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 16 0.2	(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD22	12	0.21
(1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 14 0.21 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 14 0.21 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 5 0.2 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD12 5 0.2 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 5 0.2 (1,609) 1:A:102:VAL:H 1:A:88:THR:H 19 0.2 (1,608) 1:A:100:GLY:H 1:A:90:VAL:H 19 0.2 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG11 16 0.2 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG12 16 0.2 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 16 0.2	(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD23	12	0.21
(1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 14 0.21 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 5 0.2 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD12 5 0.2 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 5 0.2 (1,609) 1:A:102:VAL:H 1:A:88:THR:H 19 0.2 (1,608) 1:A:100:GLY:H 1:A:90:VAL:H 19 0.2 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG11 16 0.2 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG12 16 0.2 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 16 0.2	(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD21	14	0.21
(1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 5 0.2 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD12 5 0.2 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 5 0.2 (1,609) 1:A:102:VAL:H 1:A:88:THR:H 19 0.2 (1,608) 1:A:100:GLY:H 1:A:90:VAL:H 19 0.2 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG11 16 0.2 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG12 16 0.2 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 16 0.2	(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD22	14	0.21
(1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD12 5 0.2 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 5 0.2 (1,609) 1:A:102:VAL:H 1:A:88:THR:H 19 0.2 (1,608) 1:A:100:GLY:H 1:A:90:VAL:H 19 0.2 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG11 16 0.2 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG12 16 0.2 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 16 0.2	(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD23	14	0.21
(1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 5 0.2 (1,609) 1:A:102:VAL:H 1:A:88:THR:H 19 0.2 (1,608) 1:A:100:GLY:H 1:A:90:VAL:H 19 0.2 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG11 16 0.2 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG12 16 0.2 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 16 0.2	(1,623)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD11	5	0.2
(1,609) 1:A:102:VAL:H 1:A:88:THR:H 19 0.2 (1,608) 1:A:100:GLY:H 1:A:90:VAL:H 19 0.2 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG11 16 0.2 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG12 16 0.2 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 16 0.2	(1,623)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD12	5	0.2
(1,608) 1:A:100:GLY:H 1:A:90:VAL:H 19 0.2 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG11 16 0.2 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG12 16 0.2 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 16 0.2	(1,623)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD13	5	0.2
(1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG11 16 0.2 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG12 16 0.2 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 16 0.2	(1,609)	1:A:102:VAL:H	1:A:88:THR:H	19	0.2
(1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG12 16 0.2 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 16 0.2	(1,608)	1:A:100:GLY:H	1:A:90:VAL:H	19	0.2
(1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 16 0.2	(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG11	16	0.2
	(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG12	16	0.2
(4 ××0) 4 4 400 DIID II	(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG13	16	0.2
(1,550)	(1,550)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG21	3	0.2
(1,550) 1:A:123:PHE:H 1:A:124:VAL:HG22 3 0.2	(1,550)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG22	3	0.2
(1,550) 1:A:123:PHE:H 1:A:124:VAL:HG23 3 0.2	(1,550)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG23	3	0.2
(1,493) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:52:PHE:H 12 0.2	(1,493)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:52:PHE:H	12	0.2
(1,493) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:52:PHE:H 12 0.2	(1,493)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:52:PHE:H	12	0.2
(1,493) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:52:PHE:H 12 0.2		1:A:43:VAL:HG13	1:A:52:PHE:H	12	0.2
(1,493) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:52:PHE:H 17 0.2	(1,493)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:52:PHE:H	17	0.2
(1,493) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:52:PHE:H 17 0.2	(1,493)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:52:PHE:H	17	0.2
(1,493) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:52:PHE:H 17 0.2		1:A:43:VAL:HG13	1:A:52:PHE:H	17	0.2
(1,468) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:23:ASN:H 16 0.2		1:A:19:VAL:HG11	1:A:23:ASN:H	16	0.2
(1,468) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:23:ASN:H 16 0.2	(1,468)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:23:ASN:H	16	0.2
(1,468) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:23:ASN:H 16 0.2	(1,468)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:23:ASN:H	16	0.2
(1,465) 1:A:17:TYR:H 1:A:46:VAL:HG11 1 0.2		1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG11	1	0.2



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,465)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG12	1	0.2
(1,465)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG13	1	0.2
(1,465)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG11	16	0.2
(1,465)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG12	16	0.2
(1,465)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG13	16	0.2
(1,465)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG11	18	0.2
(1,465)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG12	18	0.2
(1,465)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG13	18	0.2
(1,435)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:26:GLU:H	5	0.2
(1,435)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:26:GLU:H	5	0.2
(1,435)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:26:GLU:H	5	0.2
(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD21	6	0.2
(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD22	6	0.2
(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD23	6	0.2
(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD21	1	0.2
(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD22	1	0.2
(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD23	1	0.2
(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD21	1	0.2
(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD22	1	0.2
(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD23	1	0.2
(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD21	1	0.2
(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD22	1	0.2
(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD23	1	0.2
(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD21	18	0.2
(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD22	18	0.2
(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD23	18	0.2
(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD21	18	0.2
(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD22	18	0.2
(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD23	18	0.2
(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD21	18	0.2
(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD22	18	0.2
(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD23	18	0.2
(1,33)	1:A:92:SER:H	1:A:99:LEU:HD11	14	0.2
(1,33)	1:A:92:SER:H	1:A:99:LEU:HD12	14	0.2
(1,33)	1:A:92:SER:H	1:A:99:LEU:HD13	14	0.2
(1,281)	1:A:110:ASN:HD22	1:A:112:LEU:H	4	0.2
(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD11	6	0.2
(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD12	6	0.2
(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD13	6	0.2
(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD11	11	0.2
(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD12	11	0.2
(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD13	11	0.2



 $Continued\ from\ previous\ page...$

(1,25) (1,25) (1,25)	1:A:43:VAL:HG21	1 A 109 DHE H		
(' /		1:A:123:PHE:H	1	0.2
(1.25)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:123:PHE:H	1	0.2
(+ , = 0)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:123:PHE:H	1	0.2
(1,248)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD11	20	0.2
(1,248)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD12	20	0.2
(1,248)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD13	20	0.2
(1,240)	1:A:75:VAL:H	1:A:99:LEU:HD11	19	0.2
(1,240)	1:A:75:VAL:H	1:A:99:LEU:HD12	19	0.2
(1,240)	1:A:75:VAL:H	1:A:99:LEU:HD13	19	0.2
(1,219)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:74:GLU:H	4	0.2
(1,219)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:74:GLU:H	4	0.2
(1,219)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:74:GLU:H	4	0.2
(1,192)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:H	3	0.2
(1,192)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:H	3	0.2
(1,192)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:H	3	0.2
(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD21	9	0.2
(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD22	9	0.2
(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD23	9	0.2
(1,106)	1:A:105:ASP:H	1:A:113:ARG:H	14	0.2
(1,84)	1:A:10:LYS:H	1:A:12:LEU:H	5	0.19
(1,84)	1:A:10:LYS:H	1:A:12:LEU:H	6	0.19
(1,70)	1:A:16:GLN:HE21	1:A:46:VAL:H	17	0.19
(1,68)	1:A:34:TRP:H	1:A:36:HIS:H	19	0.19
(1,623)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD11	10	0.19
(1,623)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD12	10	0.19
(1,623)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD13	10	0.19
(1,601)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD11	3	0.19
(1,601)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD12	3	0.19
(1,601)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD13	3	0.19
(1,601)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD21	3	0.19
(1,601)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD22	3	0.19
(1,601)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD23	3	0.19
(1,601)	1:A:142:ASN:HD22	1:A:144:LEU:HD11	3	0.19
(1,601)	1:A:142:ASN:HD22	1:A:144:LEU:HD12	3	0.19
(1,601)	1:A:142:ASN:HD22	1:A:144:LEU:HD13	3	0.19
(1,601)	1:A:142:ASN:HD22	1:A:144:LEU:HD21	3	0.19
(1,601)	1:A:142:ASN:HD22	1:A:144:LEU:HD22	3	0.19
(1,601)	1:A:142:ASN:HD22	1:A:144:LEU:HD23	3	0.19
(1,588)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:22:ASN:H	7	0.19
(1,588)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:22:ASN:H	7	0.19
(1,588)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:22:ASN:H	7	0.19
(1,580)	1:A:112:LEU:HD21	1:A:113:ARG:H	15	0.19



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,580)	1:A:112:LEU:HD22	1:A:113:ARG:H	15	0.19
(1,580)	1:A:112:LEU:HD23	1:A:113:ARG:H	15	0.19
(1,571)	1:A:140:LEU:HD11	1:A:141:PHE:H	1	0.19
(1,571)	1:A:140:LEU:HD12	1:A:141:PHE:H	1	0.19
(1,571)	1:A:140:LEU:HD13	1:A:141:PHE:H	1	0.19
(1,565)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:H	9	0.19
(1,565)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:H	9	0.19
(1,565)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:H	9	0.19
(1,546)	1:A:121:LEU:H	1:A:121:LEU:HD21	18	0.19
(1,546)	1:A:121:LEU:H	1:A:121:LEU:HD22	18	0.19
(1,546)	1:A:121:LEU:H	1:A:121:LEU:HD23	18	0.19
(1,536)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:102:VAL:H	5	0.19
(1,536)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:102:VAL:H	5	0.19
(1,536)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:102:VAL:H	5	0.19
(1,493)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:52:PHE:H	9	0.19
(1,493)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:52:PHE:H	9	0.19
(1,493)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:52:PHE:H	9	0.19
(1,493)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:52:PHE:H	11	0.19
(1,493)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:52:PHE:H	11	0.19
(1,493)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:52:PHE:H	11	0.19
(1,473)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD11	20	0.19
(1,473)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD12	20	0.19
(1,473)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD13	20	0.19
(1,469)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:24:GLY:H	11	0.19
(1,469)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:24:GLY:H	11	0.19
(1,469)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:24:GLY:H	11	0.19
(1,454)	1:A:134:TYR:H	1:A:138:LEU:HD21	2	0.19
(1,454)	1:A:134:TYR:H	1:A:138:LEU:HD22	2	0.19
(1,454)	1:A:134:TYR:H	1:A:138:LEU:HD23	2	0.19
(1,451)	1:A:75:VAL:HG11	1:A:91:ARG:H	11	0.19
(1,451)	1:A:75:VAL:HG12	1:A:91:ARG:H	11	0.19
(1,451)	1:A:75:VAL:HG13	1:A:91:ARG:H	11	0.19
(1,416)	1:A:86:ILE:H	1:A:86:ILE:HD11	19	0.19
(1,416)	1:A:86:ILE:H	1:A:86:ILE:HD12	19	0.19
(1,416)	1:A:86:ILE:H	1:A:86:ILE:HD13	19	0.19
(1,329)	1:A:79:LEU:H	1:A:89:GLU:H	6	0.19
(1,298)	1:A:14:ARG:H	1:A:17:TYR:H	4	0.19
(1,298)	1:A:14:ARG:H	1:A:17:TYR:H	7	0.19
(1,298)	1:A:14:ARG:H	1:A:17:TYR:H	14	0.19
(1,259)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD11	8	0.19
(1,259)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD12	8	0.19
(1,259)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD13	8	0.19



Continued from previous page...

(1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD11 8 0.19 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD12 8 0.19 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD11 8 0.19 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD12 8 0.19 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 8 0.19 (1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD13 8 0.19 (1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD13 9 0.19 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD13 9 0.19 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD11 9 0.19 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD12 9 0.19 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD11 9 0.19 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 9 0.19 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 9 0.19 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD13 8 0.19 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD11 8 0.19 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 8 0.19 (1,250) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 8 0.19 (1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD11 9 0.19 (1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD13 9 0.19 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD11 9 0.19 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD11 9 0.19 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD11 9 0.19 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD11 9 0.19 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD12 9 0.19 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 9 0.19 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD12 9 0.19 (1,256) 1:A:41:LEU:HD13 1:	(1,259)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD11	8	0.19
(1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD11 8 0.19 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD12 8 0.19 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 8 0.19 (1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD11 9 0.19 (1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD13 9 0.19 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD11 9 0.19 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD12 9 0.19 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD13 9 0.19 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD11 9 0.19 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD12 9 0.19 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 9 0.19 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD12 9 0.19 (1,240) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:134:TYR:H 7 0.19 (1,241) 1:A:129:LEU:HD13 1:	(1,259)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD12	8	0.19
(1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 8 0.19 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 8 0.19 (1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD11 9 0.19 (1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD13 9 0.19 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD11 9 0.19 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD12 9 0.19 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD13 9 0.19 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD11 9 0.19 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 9 0.19 (1,24) 1:A:19:LEU:HD14 1:A:134:TYR:H 7 0.19 (1,24) 1:A:19:LEU:HD13 1:A:19	(1,259)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD13	8	0.19
(1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:LE:HD13 8 0.19 (1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD11 9 0.19 (1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD12 9 0.19 (1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD11 9 0.19 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD11 9 0.19 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 9 0.19 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD11 9 0.19 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD12 9 0.19 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 9 0.19 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 9 0.19 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 9 0.19 (1,240) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:134:TYR:H 7 0.19 (1,241) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:129:LEU:HD11 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:	(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD11	8	0.19
(1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD11 9 0.19 (1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD12 9 0.19 (1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD13 9 0.19 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD11 9 0.19 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD13 9 0.19 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 9 0.19 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD12 9 0.19 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD12 9 0.19 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD12 9 0.19 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 9 0.19 (1,241) 1:A:41:EU:HD11 1:A:134:TYR:H 7 0.19 (1,242) 1:A:41:EU:HD13 1:A:134:TYR:H 7 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:134:TYR:H 7 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:129:LE	(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD12	8	0.19
(1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD12 9 0.19 (1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD13 9 0.19 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD11 9 0.19 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD13 9 0.19 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD11 9 0.19 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD12 9 0.19 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 9 0.19 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 9 0.19 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 9 0.19 (1,240) 1:A:429:LEU:HD11 1:A:134:TYR:H 7 0.19 (1,241) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:134:TYR:H 7 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:129:LEU:HD11 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:129:LEU:HD13 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD12 1:	(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD13	8	0.19
(1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD13 9 0.19 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD11 9 0.19 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD12 9 0.19 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD11 9 0.19 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD12 9 0.19 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 9 0.19 (1,240) 1:A:42:LEU:HD11 1:A:134:TYR:H 7 0.19 (1,241) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:19:LEU:HD14 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:129:LEU:HD13 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD12 1:	(1,256)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD11	9	0.19
(1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD11 9 0.19 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD12 9 0.19 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD13 9 0.19 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD12 9 0.19 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD12 9 0.19 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 9 0.19 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 9 0.19 (1,240) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:134:TYR:H 7 0.19 (1,241) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:134:TYR:H 7 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:129:LEU:HD11 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:129:LEU:HD13 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:129:LEU:HD13 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:129:LEU:HD13 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13	(1,256)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD12	9	0.19
(1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD12 9 0.19 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD13 9 0.19 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD11 9 0.19 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD12 9 0.19 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 9 0.19 (1,240) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:134:TYR:H 7 0.19 (1,241) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:134:TYR:H 7 0.19 (1,242) 1:A:149:LEU:HD13 1:A:134:TYR:H 7 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:129:LEU:HD11 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:129:LEU:HD13 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:129:LEU:HD13 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:129:LEU:HD13 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:129:LEU:HD13 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13	(1,256)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD13	9	0.19
(1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD13 9 0.19 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD11 9 0.19 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD12 9 0.19 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 9 0.19 (1,240) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:134:TYR:H 7 0.19 (1,241) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:134:TYR:H 7 0.19 (1,242) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:134:TYR:H 7 0.19 (1,242) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:129:LEU:HD11 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:129:LEU:HD13 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:129:LEU:HD13 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:129:LEU:HD13 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:129:LEU:HD13 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:129:LEU:HD13 3 0.19 (1,237) 1:A:4:1:LEU:HD13 <t< td=""><td>(1,256)</td><td>1:A:46:VAL:HG22</td><td>1:A:51:LEU:HD11</td><td>9</td><td>0.19</td></t<>	(1,256)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD11	9	0.19
(1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD11 9 0.19 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD12 9 0.19 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 9 0.19 (1,24) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:134:TYR:H 7 0.19 (1,24) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:134:TYR:H 7 0.19 (1,24) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:134:TYR:H 7 0.19 (1,24) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:134:TYR:H 7 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:129:LEU:HD11 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:129:LEU:HD13 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:129:LEU:HD13 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:129:LEU:HD13 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:129:LEU:HD13 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:129:LEU:HD13 3 0.19 (1,237) 1:A:48:LEU:HD13 1:A:	(1,256)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD12	9	0.19
(1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD12 9 0.19 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 9 0.19 (1,24) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:134:TYR:H 7 0.19 (1,24) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:134:TYR:H 7 0.19 (1,24) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:134:TYR:H 7 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:129:LEU:HD11 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:129:LEU:HD12 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:129:LEU:HD13 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:129:LEU:HD11 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:129:LEU:HD12 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:129:LEU:HD13 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:129:LEU:HD13 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:129:LEU:HD13 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13	(1,256)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD13	9	0.19
(1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 9 0.19 (1,24) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:134:TYR:H 7 0.19 (1,24) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:134:TYR:H 7 0.19 (1,24) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:134:TYR:H 7 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:129:LEU:HD11 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:129:LEU:HD13 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:129:LEU:HD13 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:129:LEU:HD11 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:129:LEU:HD13 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:129:LEU:HD12 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 <td< td=""><td>(1,256)</td><td>1:A:46:VAL:HG23</td><td>1:A:51:LEU:HD11</td><td>9</td><td>0.19</td></td<>	(1,256)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD11	9	0.19
(1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 9 0.19 (1,24) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:134:TYR:H 7 0.19 (1,24) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:134:TYR:H 7 0.19 (1,24) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:134:TYR:H 7 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:129:LEU:HD11 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:129:LEU:HD13 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:129:LEU:HD13 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:129:LEU:HD11 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:129:LEU:HD13 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:129:LEU:HD12 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 <td< td=""><td>· · /</td><td>1:A:46:VAL:HG23</td><td>1:A:51:LEU:HD12</td><td>9</td><td>0.19</td></td<>	· · /	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD12	9	0.19
(1,24) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:134:TYR:H 7 0.19 (1,24) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:134:TYR:H 7 0.19 (1,24) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:134:TYR:H 7 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:129:LEU:HD11 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:129:LEU:HD13 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:129:LEU:HD11 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:129:LEU:HD12 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:129:LEU:HD13 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:129:LEU:HD13 3 0.19 (1,237) 1:A:41:EU:HD13 1:A:129:LEU:HD13 3 0.19 (1,201) 1:A:88:THR:H 1:		1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD13	9	0.19
(1,24) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:134:TYR:H 7 0.19 (1,24) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:134:TYR:H 7 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:129:LEU:HD11 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:129:LEU:HD12 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:129:LEU:HD13 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:129:LEU:HD12 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:129:LEU:HD13 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:129:LEU:HD13 3 0.19 (1,237) 1:A:41:EU:HD13 1:A:129:LEU:HD13 3 0.19 (1,201) 1:A:88:THR:H <th< td=""><td></td><td>1:A:129:LEU:HD11</td><td>1:A:134:TYR:H</td><td>7</td><td>0.19</td></th<>		1:A:129:LEU:HD11	1:A:134:TYR:H	7	0.19
(1,24) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:134:TYR:H 7 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:129:LEU:HD11 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:129:LEU:HD12 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:129:LEU:HD13 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:129:LEU:HD12 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:129:LEU:HD13 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:129:LEU:HD13 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:129:LEU:HD12 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:129:LEU:HD12 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:129:LEU:HD13 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:129:LEU:HD12 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:129:LEU:HD12 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:129:LEU:HD13 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13	(, ,	1:A:129:LEU:HD12	1:A:134:TYR:H	7	0.19
(1,237) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:129:LEU:HD11 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:129:LEU:HD12 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:129:LEU:HD13 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:129:LEU:HD11 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:129:LEU:HD13 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:129:LEU:HD13 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:129:LEU:HD12 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:129:LEU:HD12 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:129:LEU:HD13 3 0.19 (1,201) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:HG11 12 0.19 (1,201) 1:A:19:VAL:HG11	· · /	1:A:129:LEU:HD13	1:A:134:TYR:H	7	0.19
(1,237) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:129:LEU:HD12 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:129:LEU:HD13 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:129:LEU:HD11 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:129:LEU:HD13 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:129:LEU:HD13 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:129:LEU:HD12 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:129:LEU:HD13 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:129:LEU:HD13 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:129:LEU:HD13 3 0.19 (1,201) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:HG11 12 0.19 (1,201) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:HG12 12 0.19 (1,192) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 2 0.19 (1,192) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:117:ASN:H 2 0.19 (1,162) 1:A:9:2:ER:H 1:	(1,237)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:129:LEU:HD11	3	0.19
(1,237) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:129:LEU:HD12 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:129:LEU:HD12 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:129:LEU:HD13 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:129:LEU:HD12 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:129:LEU:HD13 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:129:LEU:HD13 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:129:LEU:HD13 3 0.19 (1,201) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:HG11 12 0.19 (1,201) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:HG12 12 0.19 (1,201) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:HG13 12 0.19 (1,192) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 2 0.19 (1,192) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:117:ASN:H 2 0.19 (1,162) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:17:TYR:H 1:A:19:VAL:H 12 0.19 (1,131) 1:A:128	· · /	1:A:41:LEU:HD11	1:A:129:LEU:HD12	3	0.19
(1,237) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:129:LEU:HD12 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:129:LEU:HD13 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:129:LEU:HD11 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:129:LEU:HD12 3 0.19 (1,237) 1:A:48:THR:H 1:A:102:VAL:HG11 12 0.19 (1,201) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:HG12 12 0.19 (1,201) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:HG13 12 0.19 (1,201) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:HG13 12 0.19 (1,201) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:HG13 12 0.19 (1,192) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 2 0.19 (1,192) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:117:ASN:H 2 0.19 (1,192) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:117:ASN:H 2 0.19 (1,162) 1:A:29:SER:H 1:A:96:ASP:H 20 0.19 (1,131) 1:A:129:LEU:HD21 13	(1,237)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:129:LEU:HD13	3	0.19
(1,237) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:129:LEU:HD12 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:129:LEU:HD13 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:129:LEU:HD11 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:129:LEU:HD12 3 0.19 (1,237) 1:A:44:LEU:HD13 1:A:129:LEU:HD13 3 0.19 (1,201) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:HG11 12 0.19 (1,201) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:HG12 12 0.19 (1,201) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:HG13 12 0.19 (1,201) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:HG13 12 0.19 (1,192) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 2 0.19 (1,192) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:117:ASN:H 2 0.19 (1,192) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:117:ASN:H 2 0.19 (1,162) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:19:VAL:H 12 0.19 (1,131) 1:A:17:TYR:H 1:A:19:VAL:H	(1,237)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:129:LEU:HD11	3	0.19
(1,237) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:129:LEU:HD13 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:129:LEU:HD11 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:129:LEU:HD12 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:129:LEU:HD13 3 0.19 (1,201) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:HG11 12 0.19 (1,201) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:HG12 12 0.19 (1,201) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:HG13 12 0.19 (1,201) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:HG13 12 0.19 (1,192) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:17:ASN:H 2 0.19 (1,192) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:117:ASN:H 2 0.19 (1,192) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:17:TASN:H 2 0.19 (1,162) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:19:VAL:H 12 0.19 (1,131) 1:A:17:TYR:H 1:A:19:VAL:H 12 0.19 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 13 0.19 (1,11) 1:A:129:LEU:HD21 1:	(1,237)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:129:LEU:HD12	3	0.19
(1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:129:LEU:HD11 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:129:LEU:HD12 3 0.19 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:129:LEU:HD13 3 0.19 (1,201) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:HG11 12 0.19 (1,201) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:HG12 12 0.19 (1,201) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:HG13 12 0.19 (1,201) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:HG13 12 0.19 (1,192) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 2 0.19 (1,192) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:117:ASN:H 2 0.19 (1,192) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:117:ASN:H 2 0.19 (1,162) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:19:VAL:H 12 0.19 (1,162) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:19:VAL:H 12 0.19 (1,11) 1:A:17:TYR:H 1:A:19:VAL:H 12 0.19 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22	· · /	1:A:41:LEU:HD12	1:A:129:LEU:HD13	3	0.19
(1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:129:LEU:HD13 3 0.19 (1,201) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:HG11 12 0.19 (1,201) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:HG12 12 0.19 (1,201) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:HG13 12 0.19 (1,192) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 2 0.19 (1,192) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:117:ASN:H 2 0.19 (1,192) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:117:ASN:H 2 0.19 (1,192) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:117:ASN:H 2 0.19 (1,162) 1:A:92:SER:H 1:A:96:ASP:H 20 0.19 (1,131) 1:A:17:TYR:H 1:A:19:VAL:H 12 0.19 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 13 0.19 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 13 0.19 (1,9) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:138:LEU:H 8 0.18 (1,9) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:138:LEU:H 8 0.18 (1,9) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:H <td>(1,237)</td> <td>1:A:41:LEU:HD13</td> <td>1:A:129:LEU:HD11</td> <td>3</td> <td>0.19</td>	(1,237)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:129:LEU:HD11	3	0.19
(1,201) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:HG11 12 0.19 (1,201) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:HG12 12 0.19 (1,201) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:HG13 12 0.19 (1,192) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 2 0.19 (1,192) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:117:ASN:H 2 0.19 (1,192) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:117:ASN:H 2 0.19 (1,192) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:117:ASN:H 2 0.19 (1,192) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:117:ASN:H 2 0.19 (1,102) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:19:VAL:H 2 0.19 (1,131) 1:A:17:TYR:H 1:A:19:VAL:H 12 0.19 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 13 0.19 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 13 0.19 (1,9) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:138:LEU:H 8 0.18 (1,9) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:H <t< td=""><td>(1,237)</td><td>1:A:41:LEU:HD13</td><td>1:A:129:LEU:HD12</td><td>3</td><td>0.19</td></t<>	(1,237)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:129:LEU:HD12	3	0.19
(1,201) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:HG11 12 0.19 (1,201) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:HG12 12 0.19 (1,201) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:HG13 12 0.19 (1,192) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 2 0.19 (1,192) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:117:ASN:H 2 0.19 (1,192) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:117:ASN:H 2 0.19 (1,192) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:117:ASN:H 2 0.19 (1,192) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:19:VAL:H 2 0.19 (1,162) 1:A:92:SER:H 1:A:19:VAL:H 2 0.19 (1,131) 1:A:17:TYR:H 1:A:19:VAL:H 12 0.19 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 13 0.19 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 13 0.19 (1,9) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:138:LEU:H 8 0.18 (1,9) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:H 8 0.18 (1,9) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:H	(, ,	1:A:41:LEU:HD13	1:A:129:LEU:HD13	3	0.19
(1,201) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:HG12 12 0.19 (1,201) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:HG13 12 0.19 (1,192) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 2 0.19 (1,192) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:117:ASN:H 2 0.19 (1,192) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:117:ASN:H 2 0.19 (1,192) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:19:VAL:H 2 0.19 (1,162) 1:A:92:SER:H 1:A:96:ASP:H 20 0.19 (1,131) 1:A:17:TYR:H 1:A:19:VAL:H 12 0.19 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 13 0.19 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 13 0.19 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 13 0.19 (1,9) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:138:LEU:H 8 0.18 (1,9) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:138:LEU:H 8 0.18 (1,9) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:H 8 0.18	_ `	1:A:88:THR:H	1:A:102:VAL:HG11	12	0.19
(1,192) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 2 0.19 (1,192) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:117:ASN:H 2 0.19 (1,192) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:117:ASN:H 2 0.19 (1,162) 1:A:92:SER:H 1:A:96:ASP:H 20 0.19 (1,131) 1:A:17:TYR:H 1:A:19:VAL:H 12 0.19 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 13 0.19 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 13 0.19 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 13 0.19 (1,9) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:138:LEU:H 8 0.18 (1,9) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:H 8 0.18 (1,9) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:H 8 0.18		1:A:88:THR:H	1:A:102:VAL:HG12	12	0.19
(1,192) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 2 0.19 (1,192) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:117:ASN:H 2 0.19 (1,192) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:117:ASN:H 2 0.19 (1,162) 1:A:92:SER:H 1:A:96:ASP:H 20 0.19 (1,131) 1:A:17:TYR:H 1:A:19:VAL:H 12 0.19 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 13 0.19 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 13 0.19 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 13 0.19 (1,9) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:138:LEU:H 8 0.18 (1,9) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:H 8 0.18 (1,9) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:H 8 0.18	(1,201)	1:A:88:THR:H	1:A:102:VAL:HG13	12	0.19
(1,192) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:117:ASN:H 2 0.19 (1,192) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:117:ASN:H 2 0.19 (1,162) 1:A:92:SER:H 1:A:96:ASP:H 20 0.19 (1,131) 1:A:17:TYR:H 1:A:19:VAL:H 12 0.19 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 13 0.19 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 13 0.19 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 13 0.19 (1,9) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:138:LEU:H 8 0.18 (1,9) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:H 8 0.18 (1,9) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:H 8 0.18		1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:H	2	0.19
(1,192) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:117:ASN:H 2 0.19 (1,162) 1:A:92:SER:H 1:A:96:ASP:H 20 0.19 (1,131) 1:A:17:TYR:H 1:A:19:VAL:H 12 0.19 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 13 0.19 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 13 0.19 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 13 0.19 (1,9) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:138:LEU:H 8 0.18 (1,9) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:138:LEU:H 8 0.18 (1,9) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:H 8 0.18		1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:H		0.19
(1,162) 1:A:92:SER:H 1:A:96:ASP:H 20 0.19 (1,131) 1:A:17:TYR:H 1:A:19:VAL:H 12 0.19 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 13 0.19 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 13 0.19 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 13 0.19 (1,9) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:138:LEU:H 8 0.18 (1,9) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:138:LEU:H 8 0.18 (1,9) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:H 8 0.18	, ,	1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:H	2	0.19
(1,131) 1:A:17:TYR:H 1:A:19:VAL:H 12 0.19 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 13 0.19 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 13 0.19 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 13 0.19 (1,9) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:138:LEU:H 8 0.18 (1,9) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:138:LEU:H 8 0.18 (1,9) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:H 8 0.18		1:A:92:SER:H	1:A:96:ASP:H	20	0.19
(1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 13 0.19 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 13 0.19 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 13 0.19 (1,9) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:138:LEU:H 8 0.18 (1,9) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:138:LEU:H 8 0.18 (1,9) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:H 8 0.18		1:A:17:TYR:H	1:A:19:VAL:H	12	0.19
(1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 13 0.19 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 13 0.19 (1,9) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:138:LEU:H 8 0.18 (1,9) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:138:LEU:H 8 0.18 (1,9) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:H 8 0.18		1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD21	13	0.19
(1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 13 0.19 (1,9) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:138:LEU:H 8 0.18 (1,9) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:138:LEU:H 8 0.18 (1,9) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:H 8 0.18	/	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD22	13	0.19
(1,9) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:138:LEU:H 8 0.18 (1,9) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:138:LEU:H 8 0.18 (1,9) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:H 8 0.18	-:-:	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD23	13	0.19
(1,9) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:138:LEU:H 8 0.18 (1,9) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:H 8 0.18		1:A:129:LEU:HD21	1:A:138:LEU:H	8	0.18
(1,9) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:H 8 0.18		1:A:129:LEU:HD22	1:A:138:LEU:H	8	0.18
	/	1:A:129:LEU:HD23	1:A:138:LEU:H	8	0.18
		1:A:16:GLN:HE21	1:A:46:VAL:H		



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,70)	1:A:16:GLN:HE21	1:A:46:VAL:H	10	0.18
(1,616)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD21	1	0.18
(1,616)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD22	1	0.18
(1,616)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD23	1	0.18
(1,616)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD21	1	0.18
(1,616)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD22	1	0.18
(1,616)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD23	1	0.18
(1,616)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD21	1	0.18
(1,616)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD22	1	0.18
(1,616)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD23	1	0.18
(1,616)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD21	11	0.18
(1,616)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD22	11	0.18
(1,616)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD23	11	0.18
(1,616)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD21	11	0.18
(1,616)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD22	11	0.18
(1,616)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD23	11	0.18
(1,616)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD21	11	0.18
(1,616)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD22	11	0.18
(1,616)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD23	11	0.18
(1,616)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD21	13	0.18
(1,616)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD22	13	0.18
(1,616)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD23	13	0.18
(1,616)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD21	13	0.18
(1,616)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD22	13	0.18
(1,616)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD23	13	0.18
(1,616)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD21	13	0.18
(1,616)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD22	13	0.18
(1,616)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD23	13	0.18
(1,610)	1:A:115:CYS:H	1:A:101:HIS:H	3	0.18
(1,610)	1:A:115:CYS:H	1:A:101:HIS:H	4	0.18
(1,605)	1:A:54:SER:H	1:A:40:GLY:H	15	0.18
(1,600)	1:A:142:ASN:H	1:A:142:ASN:HD21	2	0.18
(1,600)	1:A:142:ASN:H	1:A:142:ASN:HD22	2	0.18
(1,565)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:H	10	0.18
(1,565)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:H	10	0.18
(1,565)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:H	10	0.18
(1,550)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG21	4	0.18
(1,550)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG22	4	0.18
(1,550)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG23	4	0.18
(1,550)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG21	10	0.18
(1,550)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG22	10	0.18
(1,550)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG23	10	0.18



 $Continued\ from\ previous\ page...$

(1,53) 1:A:129:LEU:H 1:A:138:LEU:HD21 1 0.18 (1,53) 1:A:129:LEU:H 1:A:138:LEU:HD22 1 0.18 (1,53) 1:A:129:LEU:H 1:A:138:LEU:HD23 1 0.18 (1,53) 1:A:129:LEU:H 1:A:138:LEU:HD22 7 0.18 (1,53) 1:A:129:LEU:H 1:A:138:LEU:HD22 7 0.18 (1,507) 1:A:75:VAL:HG11 1:A:776:GU:H 4 0.18 (1,507) 1:A:75:VAL:HG12 1:A:776:GU:H 4 0.18 (1,507) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 4 0.18 (1,507) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 17 0.18 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 17 0.18 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:71:ILE:H 9 0.18 (1,497) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:H 9 0.18 (1,497) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:H 9 0.18 (1,497) 1:A:34:VAL:HG11 1:A:52:PHE:H 4 <th>Key</th> <th>Atom-1</th> <th>Atom-2</th> <th>Model</th> <th>Violation (Å)</th>	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,53) 1:A:129:LEU:H 1:A:138:LEU:HD23 1 0.18 (1,53) 1:A:129:LEU:H 1:A:138:LEU:HD21 7 0.18 (1,53) 1:A:129:LEU:H 1:A:138:LEU:HD22 7 0.18 (1,53) 1:A:129:LEU:H 1:A:138:LEU:HD23 7 0.18 (1,507) 1:A:75:VAL:HG11 1:A:77:GLU:H 4 0.18 (1,507) 1:A:75:VAL:HG12 1:A:77:GLU:H 4 0.18 (1,507) 1:A:75:VAL:HG13 1:A:77:GLU:H 4 0.18 (1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 17 0.18 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 17 0.18 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 17 0.18 (1,497) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:LE:H 9 0.18 (1,497) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:LE:H 9 0.18 (1,497) 1:A:34:VAL:HG11 1:A:52:PHE:H 4 0.18 (1,493) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:52:PHE:H 4	(1,53)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD21	1	0.18
(1,53) 1:A:129:LEU:H 1:A:138:LEU:HD21 7 0.18 (1,53) 1:A:129:LEU:H 1:A:138:LEU:HD22 7 0.18 (1,507) 1:A:75:VAL:HG11 1:A:138:LEU:HD23 7 0.18 (1,507) 1:A:75:VAL:HG11 1:A:77:GLU:H 4 0.18 (1,507) 1:A:75:VAL:HG12 1:A:77:GLU:H 4 0.18 (1,507) 1:A:75:VAL:HG13 1:A:77:GLU:H 4 0.18 (1,507) 1:A:75:VAL:HG13 1:A:77:GLU:H 4 0.18 (1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 17 0.18 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 17 0.18 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 17 0.18 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 17 0.18 (1,497) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:H 9 0.18 (1,497) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:H 9 0.18 (1,497) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:H 9 0.18 (1,493) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:52:PHE:H 4 0.18 (1,493) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:52:PHE:H 4 0.18 (1,493) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:52:PHE:H 4 0.18 (1,493) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:52:PHE:H 4 0.18 (1,47) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:115:CYS:H 14 0.18 (1,451) 1:A:75:VAL:HG13 1:A:115:CYS:H 14 0.18 (1,451) 1:A:75:VAL:HG11 1:A:91:ARG:H 3 0.18 (1,451) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD11 10 0.18 (1,451) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD11 10 0.18 (1,451) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD11 10 0.18 (1,451) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:19:LEU:HD12 10 0.18 (1,453) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:103:PHE:H 12 0.18 (1,431) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:103:PHE:H 12 0.18 (1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 12 0.18 (1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 12 0.18 (1,441) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:	(1,53)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD22	1	0.18
(1,53) 1:A:129:LEU:H 1:A:138:LEU:HD22 7 0.18 (1,53) 1:A:129:LEU:H 1:A:138:LEU:HD23 7 0.18 (1,507) 1:A:75:VAL:HG11 1:A:77:GLU:H 4 0.18 (1,507) 1:A:75:VAL:HG12 1:A:77:GLU:H 4 0.18 (1,507) 1:A:75:VAL:HG13 1:A:77:GLU:H 4 0.18 (1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 17 0.18 (1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 17 0.18 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 17 0.18 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 17 0.18 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 17 0.18 (1,497) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:H 9 0.18 (1,497) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:H 9 0.18 (1,497) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:H 9 0.18 (1,497) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:H 9 0.18 (1,493) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:52:PHE:H 4 0.18 (1,493) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:52:PHE:H 4 0.18 (1,493) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:52:PHE:H 4 0.18 (1,493) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:52:PHE:H 4 0.18 (1,47) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:115:CYS:H 14 0.18 (1,47) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:115:CYS:H 14 0.18 (1,47) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:115:CYS:H 14 0.18 (1,451) 1:A:75:VAL:HG13 1:A:91:ARG:H 3 0.18 (1,451) 1:A:75:VAL:HG11 1:A:91:ARG:H 3 0.18 (1,451) 1:A:75:VAL:HG12 1:A:91:ARG:H 3 0.18 (1,451) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD11 10 0.18 (1,451) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:26:GLU:H 2 0.18 (1,433) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:26:GLU:H 2 0.18 (1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:26:GLU:H 2 0.18 (1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 12 0.18 (1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 12 0.18 (1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 12 0.18 (1,441) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD21 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD21 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD21 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22 14 0.18 (1,411	(1,53)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD23	1	0.18
(1,53) 1:A:129:LEU:H 1:A:138:LEU:HD23 7 0.18 (1,507) 1:A:75:VAL:HG11 1:A:77:GLU:H 4 0.18 (1,507) 1:A:75:VAL:HG12 1:A:77:GLU:H 4 0.18 (1,507) 1:A:75:VAL:HG13 1:A:76:GLU:H 4 0.18 (1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 17 0.18 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 17 0.18 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 17 0.18 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 17 0.18 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 17 0.18 (1,497) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:H 9 0.18 (1,497) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:H 9 0.18 (1,497) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:H 9 0.18 (1,497) 1:A:31:LEU:HD23 1:A:71:ILE:H 9 0.18 (1,493) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:52:PHE:H 4 0.18 (1,493) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:52:PHE:H 4 0.18 (1,493) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:52:PHE:H 4 0.18 (1,47) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:115:CYS:H 14 0.18 (1,47) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:115:CYS:H 14 0.18 (1,47) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:115:CYS:H 14 0.18 (1,451) 1:A:75:VAL:HG12 1:A:91:ARG:H 3 0.18 (1,451) 1:A:75:VAL:HG12 1:A:91:ARG:H 3 0.18 (1,451) 1:A:75:VAL:HG13 1:A:91:ARG:H 3 0.18 (1,451) 1:A:75:VAL:HG13 1:A:91:ARG:H 3 0.18 (1,451) 1:A:75:VAL:HG13 1:A:91:ARG:H 3 0.18 (1,451) 1:A:79:LEU:H 1:A:791:LEU:HD11 10 0.18 (1,45) 1:A:79:LEU:H 1:A:791:LEU:HD11 10 0.18 (1,45) 1:A:79:LEU:H 1:A:791:LEU:HD11 10 0.18 (1,45) 1:A:79:LEU:H 1:A:791:LEU:HD12 10 0.18 (1,45) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:26:GLU:H 2 0.18 (1,435) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:26:GLU:H 2 0.18 (1,435) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:26:GLU:H 2 0.18 (1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 12 0.18 (1,441) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD21 14 0.18 (1,441) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22 14 0.18 (1,441) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD21 14 0.18 (1,441) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22 14 0.18 (1,441) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:	(1,53)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD21	7	0.18
(1,507) 1:A:75:VAL:HG11 1:A:77:GLU:H 4 0.18 (1,507) 1:A:75:VAL:HG12 1:A:77:GLU:H 4 0.18 (1,507) 1:A:75:VAL:HG13 1:A:77:GLU:H 4 0.18 (1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 17 0.18 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 17 0.18 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 17 0.18 (1,497) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:H 9 0.18 (1,497) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:H 9 0.18 (1,497) 1:A:31:LEU:HD23 1:A:71:ILE:H 9 0.18 (1,497) 1:A:34:VAL:HG11 1:A:52:PHE:H 4 0.18 (1,493) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:52:PHE:H 4 0.18 (1,47) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:75:VPHE:H 4 0.18 (1,47) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:115:CYS:H 14 0.18 (1,451) 1:A:75:VAL:HG11 1:A:91:ARG:H 3	(1,53)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD22	7	0.18
(1,507) 1:A:75:VAL:HG12 1:A:77:GLU:H 4 0.18 (1,507) 1:A:75:VAL:HG13 1:A:77:GLU:H 4 0.18 (1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 17 0.18 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 17 0.18 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 17 0.18 (1,497) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:H 9 0.18 (1,497) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:H 9 0.18 (1,497) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:H 9 0.18 (1,497) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:52:PHE:H 4 0.18 (1,493) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:52:PHE:H 4 0.18 (1,493) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:52:PHE:H 4 0.18 (1,47) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:15:CYS:H 14 0.18 (1,47) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:115:CYS:H 14 0.18 (1,451) 1:A:75:VAL:HG13 1:A:91:ARG:H 3	(1,53)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD23	7	0.18
(1,507) 1:A:75:VAL:HG13 1:A:77:GLU:H 4 0.18 (1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 17 0.18 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 17 0.18 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 17 0.18 (1,497) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:H 9 0.18 (1,497) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:H 9 0.18 (1,497) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:H 9 0.18 (1,497) 1:A:34:VAL:HG11 1:A:52:PHE:H 4 0.18 (1,493) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:52:PHE:H 4 0.18 (1,493) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:52:PHE:H 4 0.18 (1,493) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:52:PHE:H 4 0.18 (1,47) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:15:CYS:H 14 0.18 (1,47) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:115:CYS:H 14 0.18 (1,451) 1:A:75:VAL:HG13 1:A:91:ARG:H 3	(1,507)	1:A:75:VAL:HG11	1:A:77:GLU:H	4	0.18
(1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 17 0.18 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 17 0.18 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 17 0.18 (1,497) 1:A:75:LEU:HD21 1:A:71:ILE:H 9 0.18 (1,497) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:H 9 0.18 (1,497) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:52:PHE:H 4 0.18 (1,493) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:52:PHE:H 4 0.18 (1,493) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:52:PHE:H 4 0.18 (1,493) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:52:PHE:H 4 0.18 (1,493) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:52:PHE:H 4 0.18 (1,47) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:15:CYS:H 14 0.18 (1,47) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:115:CYS:H 14 0.18 (1,451) 1:A:75:VAL:HG13 1:A:19:ARG:H 3 0.18 (1,451) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD11 10	(1,507)	1:A:75:VAL:HG12	1:A:77:GLU:H	4	0.18
(1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 17 0.18 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 17 0.18 (1,497) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:H 9 0.18 (1,497) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:H 9 0.18 (1,497) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:H 9 0.18 (1,497) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:52:PHE:H 4 0.18 (1,493) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:52:PHE:H 4 0.18 (1,47) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:115:CYS:H 14 0.18 (1,47) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:115:CYS:H 14 0.18 (1,47) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:19:IARG:H 3 0.18 (1,451) 1:A:75:VAL:HG12 1:A:91:ARG:H 3	(1,507)	1:A:75:VAL:HG13	1:A:77:GLU:H	4	0.18
(1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 17 0.18 (1,497) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:H 9 0.18 (1,497) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:H 9 0.18 (1,497) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:H 9 0.18 (1,493) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:52:PHE:H 4 0.18 (1,493) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:52:PHE:H 4 0.18 (1,493) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:52:PHE:H 4 0.18 (1,493) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:52:PHE:H 4 0.18 (1,493) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:52:PHE:H 4 0.18 (1,470) 1:A:39:VAL:HG13 1:A:115:CYS:H 14 0.18 (1,471) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:115:CYS:H 14 0.18 (1,451) 1:A:75:VAL:HG13 1:A:91:ARG:H 3 0.18 (1,451) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD11 10 0.18 (1,451) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD11 10 <td>(1,505)</td> <td>1:A:75:VAL:HG21</td> <td>1:A:76:GLU:H</td> <td>17</td> <td>0.18</td>	(1,505)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:76:GLU:H	17	0.18
(1,497) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:H 9 0.18 (1,497) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:H 9 0.18 (1,497) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:H 9 0.18 (1,493) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:52:PHE:H 4 0.18 (1,493) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:52:PHE:H 4 0.18 (1,493) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:52:PHE:H 4 0.18 (1,493) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:55:PHE:H 4 0.18 (1,471) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:115:CYS:H 14 0.18 (1,471) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:115:CYS:H 14 0.18 (1,471) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:15:AG:H 3 0.18 (1,471) 1:A:79:VAL:HG12 1:A:91:ARG:H 3 0.18 (1,451) 1:A:75:VAL:HG13 1:A:79:LEU:HD11 10 0.18 (1,451) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD11 10 0.18 (1,451) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD11 10<	(1,505)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:76:GLU:H	17	0.18
(1,497) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:H 9 0.18 (1,497) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:H 9 0.18 (1,493) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:52:PHE:H 4 0.18 (1,493) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:52:PHE:H 4 0.18 (1,493) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:52:PHE:H 4 0.18 (1,47) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:115:CYS:H 14 0.18 (1,47) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:115:CYS:H 14 0.18 (1,47) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:115:CYS:H 14 0.18 (1,47) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:115:CYS:H 14 0.18 (1,451) 1:A:75:VAL:HG11 1:A:91:ARG:H 3 0.18 (1,451) 1:A:75:VAL:HG12 1:A:91:ARG:H 3 0.18 (1,451) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD11 10 0.18 (1,451) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD12 10 0.18 (1,451) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD12 10 <td>(1,505)</td> <td>1:A:75:VAL:HG23</td> <td>1:A:76:GLU:H</td> <td>17</td> <td>0.18</td>	(1,505)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:76:GLU:H	17	0.18
(1,497) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:H 9 0.18 (1,493) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:52:PHE:H 4 0.18 (1,493) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:52:PHE:H 4 0.18 (1,493) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:52:PHE:H 4 0.18 (1,47) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:115:CYS:H 14 0.18 (1,47) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:115:CYS:H 14 0.18 (1,47) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:115:CYS:H 14 0.18 (1,47) 1:A:79:VAL:HG13 1:A:79:ARG:H 3 0.18 (1,451) 1:A:75:VAL:HG12 1:A:91:ARG:H 3 0.18 (1,451) 1:A:75:VAL:HG13 1:A:91:ARG:H 3 0.18 (1,451) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD11 10 0.18 (1,451) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD11 10 0.18 (1,455) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD12 10 0.18 (1,455) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:26:GLU:H 2	(1,497)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:H	9	0.18
(1,497) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:H 9 0.18 (1,493) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:52:PHE:H 4 0.18 (1,493) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:52:PHE:H 4 0.18 (1,493) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:52:PHE:H 4 0.18 (1,47) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:115:CYS:H 14 0.18 (1,47) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:115:CYS:H 14 0.18 (1,47) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:115:CYS:H 14 0.18 (1,47) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:91:ARG:H 3 0.18 (1,451) 1:A:75:VAL:HG11 1:A:91:ARG:H 3 0.18 (1,451) 1:A:75:VAL:HG12 1:A:79:LEU:HD11 10 0.18 (1,451) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD11 10 0.18 (1,45) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD12 10 0.18 (1,45) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:26:GLU:H 2 0.18 (1,435) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:26:GLU:H 2 <td>(1,497)</td> <td>1:A:51:LEU:HD22</td> <td>1:A:71:ILE:H</td> <td>9</td> <td>0.18</td>	(1,497)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:H	9	0.18
(1,493) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:52:PHE:H 4 0.18 (1,493) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:52:PHE:H 4 0.18 (1,47) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:115:CYS:H 14 0.18 (1,47) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:115:CYS:H 14 0.18 (1,47) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:15:CYS:H 14 0.18 (1,47) 1:A:79:VAL:HG11 1:A:91:ARG:H 3 0.18 (1,451) 1:A:75:VAL:HG12 1:A:91:ARG:H 3 0.18 (1,451) 1:A:79:VAL:HG13 1:A:91:ARG:H 3 0.18 (1,451) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD11 10 0.18 (1,45) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD12 10 0.18 (1,45) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD13 10 0.18 (1,45) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:26:GLU:H 2 0.18 (1,435) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:26:GLU:H 2 0.18 (1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 12		1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:H	9	0.18
(1,493) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:52:PHE:H 4 0.18 (1,47) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:115:CYS:H 14 0.18 (1,47) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:115:CYS:H 14 0.18 (1,47) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:115:CYS:H 14 0.18 (1,451) 1:A:75:VAL:HG11 1:A:91:ARG:H 3 0.18 (1,451) 1:A:75:VAL:HG12 1:A:91:ARG:H 3 0.18 (1,451) 1:A:75:VAL:HG13 1:A:91:ARG:H 3 0.18 (1,451) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD11 10 0.18 (1,45) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD12 10 0.18 (1,45) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD13 10 0.18 (1,45) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD13 10 0.18 (1,45) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:26:GLU:H 2 0.18 (1,435) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:26:GLU:H 2 0.18 (1,435) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 12	(1,493)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:52:PHE:H	4	0.18
(1,47) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:115:CYS:H 14 0.18 (1,47) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:115:CYS:H 14 0.18 (1,47) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:115:CYS:H 14 0.18 (1,451) 1:A:75:VAL:HG11 1:A:91:ARG:H 3 0.18 (1,451) 1:A:75:VAL:HG12 1:A:91:ARG:H 3 0.18 (1,451) 1:A:75:VAL:HG13 1:A:91:ARG:H 3 0.18 (1,451) 1:A:75:VAL:HG13 1:A:91:ARG:H 3 0.18 (1,451) 1:A:75:VAL:HG13 1:A:91:ARG:H 3 0.18 (1,451) 1:A:75:VAL:HG11 1:0 0.18 (1,452) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD12 10 0.18 (1,454) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD13 10 0.18 (1,455) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:26:GLU:H 2 0.18 (1,435) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:26:GLU:H 2 0.18 (1,435) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 12 0.18	(1,493)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:52:PHE:H	4	0.18
(1,47) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:115:CYS:H 14 0.18 (1,47) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:115:CYS:H 14 0.18 (1,451) 1:A:75:VAL:HG11 1:A:91:ARG:H 3 0.18 (1,451) 1:A:75:VAL:HG12 1:A:91:ARG:H 3 0.18 (1,451) 1:A:75:VAL:HG13 1:A:91:ARG:H 3 0.18 (1,451) 1:A:75:VAL:HG13 1:A:91:ARG:H 3 0.18 (1,451) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD11 10 0.18 (1,45) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD12 10 0.18 (1,45) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD13 10 0.18 (1,45) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:26:GLU:H 2 0.18 (1,435) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:26:GLU:H 2 0.18 (1,435) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:26:GLU:H 2 0.18 (1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 12 0.18 (1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 12 </td <td>(1,493)</td> <td>1:A:43:VAL:HG13</td> <td>1:A:52:PHE:H</td> <td>4</td> <td>0.18</td>	(1,493)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:52:PHE:H	4	0.18
(1,47) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:115:CYS:H 14 0.18 (1,451) 1:A:75:VAL:HG11 1:A:91:ARG:H 3 0.18 (1,451) 1:A:75:VAL:HG12 1:A:91:ARG:H 3 0.18 (1,451) 1:A:75:VAL:HG13 1:A:91:ARG:H 3 0.18 (1,451) 1:A:75:VAL:HG13 1:A:91:ARG:H 3 0.18 (1,45) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD11 10 0.18 (1,45) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD12 10 0.18 (1,45) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD13 10 0.18 (1,45) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:26:GLU:H 2 0.18 (1,435) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:26:GLU:H 2 0.18 (1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 12 0.18 (1,431) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:103:PHE:H 12 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD21 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22	(1,47)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:115:CYS:H	14	0.18
(1,451) 1:A:75:VAL:HG11 1:A:91:ARG:H 3 0.18 (1,451) 1:A:75:VAL:HG12 1:A:91:ARG:H 3 0.18 (1,451) 1:A:75:VAL:HG13 1:A:91:ARG:H 3 0.18 (1,451) 1:A:75:VAL:HG13 1:A:91:ARG:H 3 0.18 (1,45) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD11 10 0.18 (1,45) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD13 10 0.18 (1,45) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD13 10 0.18 (1,45) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:26:GLU:H 2 0.18 (1,435) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:26:GLU:H 2 0.18 (1,435) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:26:GLU:H 2 0.18 (1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 12 0.18 (1,431) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:103:PHE:H 12 0.18 (1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 12 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD21 <t< td=""><td>(1,47)</td><td>1:A:90:VAL:HG12</td><td>1:A:115:CYS:H</td><td>14</td><td>0.18</td></t<>	(1,47)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:115:CYS:H	14	0.18
(1,451) 1:A:75:VAL:HG12 1:A:91:ARG:H 3 0.18 (1,451) 1:A:75:VAL:HG13 1:A:91:ARG:H 3 0.18 (1,45) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD11 10 0.18 (1,45) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD12 10 0.18 (1,45) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD13 10 0.18 (1,45) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:26:GLU:H 2 0.18 (1,435) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:26:GLU:H 2 0.18 (1,435) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:26:GLU:H 2 0.18 (1,435) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:26:GLU:H 2 0.18 (1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 12 0.18 (1,431) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:103:PHE:H 12 0.18 (1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 12 0.18 (1,431) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD21 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD23	(1,47)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:115:CYS:H	14	0.18
(1,451) 1:A:75:VAL:HG13 1:A:91:ARG:H 3 0.18 (1,45) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD11 10 0.18 (1,45) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD12 10 0.18 (1,45) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD13 10 0.18 (1,435) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:26:GLU:H 2 0.18 (1,435) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:26:GLU:H 2 0.18 (1,435) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:26:GLU:H 2 0.18 (1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 12 0.18 (1,431) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:103:PHE:H 12 0.18 (1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 12 0.18 (1,431) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD21 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD23 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD23 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:H	(1,451)	1:A:75:VAL:HG11	1:A:91:ARG:H		0.18
(1,45) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD11 10 0.18 (1,45) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD12 10 0.18 (1,45) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD13 10 0.18 (1,435) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:26:GLU:H 2 0.18 (1,435) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:26:GLU:H 2 0.18 (1,435) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:26:GLU:H 2 0.18 (1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 12 0.18 (1,431) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:103:PHE:H 12 0.18 (1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 12 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD21 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD22 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD22 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138	(1,451)	1:A:75:VAL:HG12	1:A:91:ARG:H		0.18
(1,45) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD12 10 0.18 (1,45) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD13 10 0.18 (1,435) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:26:GLU:H 2 0.18 (1,435) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:26:GLU:H 2 0.18 (1,435) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:26:GLU:H 2 0.18 (1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 12 0.18 (1,431) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:103:PHE:H 12 0.18 (1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 12 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD21 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD22 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD23 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD23 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1	(1,451)	1:A:75:VAL:HG13	1:A:91:ARG:H	3	0.18
(1,45) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD13 10 0.18 (1,435) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:26:GLU:H 2 0.18 (1,435) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:26:GLU:H 2 0.18 (1,435) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:26:GLU:H 2 0.18 (1,431) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:103:PHE:H 12 0.18 (1,431) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:103:PHE:H 12 0.18 (1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 12 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD21 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD22 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD23 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD23 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD23 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD22 14 0.18	(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD11	10	0.18
(1,435) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:26:GLU:H 2 0.18 (1,435) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:26:GLU:H 2 0.18 (1,435) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:26:GLU:H 2 0.18 (1,431) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:103:PHE:H 12 0.18 (1,431) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:103:PHE:H 12 0.18 (1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 12 0.18 (1,431) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD21 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD21 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD22 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD23 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD21 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD22 14 0.18	(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD12	10	0.18
(1,435) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:26:GLU:H 2 0.18 (1,435) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:26:GLU:H 2 0.18 (1,431) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:103:PHE:H 12 0.18 (1,431) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:103:PHE:H 12 0.18 (1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 12 0.18 (1,431) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD21 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD21 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD22 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD23 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD21 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD22 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD22 14 0.18	(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD13	10	0.18
(1,435) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:26:GLU:H 2 0.18 (1,431) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:103:PHE:H 12 0.18 (1,431) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:103:PHE:H 12 0.18 (1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 12 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD21 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD21 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD22 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD23 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD21 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD21 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD22 14 0.18	(1,435)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:26:GLU:H	2	0.18
(1,431) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:103:PHE:H 12 0.18 (1,431) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:103:PHE:H 12 0.18 (1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 12 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD21 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD21 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD22 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD23 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD21 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD21 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD22 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD22 14 0.18	(1,435)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:26:GLU:H	2	0.18
(1,431) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:103:PHE:H 12 0.18 (1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 12 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD21 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD23 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD21 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD23 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD21 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD22 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD22 14 0.18	(1,435)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:26:GLU:H	2	0.18
(1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 12 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD21 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD23 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD21 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD23 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD21 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD21 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD22 14 0.18	(1,431)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:103:PHE:H	12	0.18
(1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD21 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD23 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD21 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD22 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD23 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD21 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD22 14 0.18	(1,431)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:103:PHE:H	12	0.18
(1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD23 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD21 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD22 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD23 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD21 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD22 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD22 14 0.18	(1,431)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:103:PHE:H	12	0.18
(1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD23 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD21 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD22 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD23 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD21 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD22 14 0.18	(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD21	14	0.18
(1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD21 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD22 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD23 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD21 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD22 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD22 14 0.18		1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD22	14	0.18
(1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD22 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD23 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD21 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD22 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD22 14 0.18		1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD23	14	0.18
(1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD23 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD21 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD22 14 0.18		1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD21	14	0.18
(1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD21 14 0.18 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD22 14 0.18	(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD22	14	0.18
(1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD22 14 0.18	(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD23	14	0.18
	(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD21	14	0.18
(1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD23 14 0.18	(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD22	14	0.18
	(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD23	14	0.18



 $Continued\ from\ previous\ page...$

(1,375) $(1,353)$ $(1,33)$	1:A:131:GLU:H 1:A:104:ASN:H	1:A:133:GLY:H	1 5	
(1,33)	1. A.104. ACM.II	1.11.100.011.11	15	0.18
\ ' ' /	1:A:104:A5N:Π	1:A:106:GLY:H	13	0.18
(1.22)	1:A:92:SER:H	1:A:99:LEU:HD11	20	0.18
(1,33)	1:A:92:SER:H	1:A:99:LEU:HD12	20	0.18
(1,33)	1:A:92:SER:H	1:A:99:LEU:HD13	20	0.18
(1,303)	1:A:18:GLU:H	1:A:20:THR:H	20	0.18
(1,266)	1:A:19:VAL:H	1:A:21:GLN:H	1	0.18
(1,266)	1:A:19:VAL:H	1:A:21:GLN:H	2	0.18
(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD11	7	0.18
(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD12	7	0.18
(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD13	7	0.18
(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD11	14	0.18
(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD12	14	0.18
(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD13	14	0.18
(1,259)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD11	7	0.18
	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD12	7	0.18
(1,259)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD13	7	0.18
(1,259)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD11	7	0.18
(1,259)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD12	7	0.18
(1,259)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD13	7	0.18
(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD11	7	0.18
(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD12	7	0.18
(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD13	7	0.18
(1,248)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD11	12	0.18
(1,248)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD12	12	0.18
(1,248)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD13	12	0.18
(1,247) 1	1:A:121:LEU:HD11	1:A:122:ARG:H	20	0.18
(1,247) 1	1:A:121:LEU:HD12	1:A:122:ARG:H	20	0.18
(1,247) 1	1:A:121:LEU:HD13	1:A:122:ARG:H	20	0.18
(1,24) 1	1:A:129:LEU:HD11	1:A:134:TYR:H	6	0.18
(1,24) 1	1:A:129:LEU:HD12	1:A:134:TYR:H	6	0.18
(1,24) 1	1:A:129:LEU:HD13	1:A:134:TYR:H	6	0.18
(1,219)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:74:GLU:H	5	0.18
(1,219)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:74:GLU:H	5	0.18
	1:A:51:LEU:HD23	1:A:74:GLU:H	5	0.18
(1,192)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:H	13	0.18
(1,192)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:H	13	0.18
	1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:H	13	0.18
	1:A:90:VAL:HG21	1:A:99:LEU:H	19	0.18
	1:A:90:VAL:HG22	1:A:99:LEU:H	19	0.18
(1,182)	1:A:90:VAL:HG23	1:A:99:LEU:H	19	0.18
(1,176)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:45:ILE:HD11	12	0.18



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,176)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:45:ILE:HD12	12	0.18
(1,176)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:45:ILE:HD13	12	0.18
(1,176)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:45:ILE:HD11	12	0.18
(1,176)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:45:ILE:HD12	12	0.18
(1,176)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:45:ILE:HD13	12	0.18
(1,176)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:45:ILE:HD11	12	0.18
(1,176)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:45:ILE:HD12	12	0.18
(1,176)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:45:ILE:HD13	12	0.18
(1,145)	1:A:128:LYS:H	1:A:130:LYS:H	3	0.18
(1,115)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:H	10	0.18
(1,83)	1:A:9:ILE:H	1:A:12:LEU:H	13	0.17
(1,8)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:42:TYR:H	6	0.17
(1,8)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:42:TYR:H	6	0.17
(1,8)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:42:TYR:H	6	0.17
(1,63)	1:A:54:SER:HG	1:A:57:LYS:H	7	0.17
(1,608)	1:A:100:GLY:H	1:A:90:VAL:H	20	0.17
(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG11	3	0.17
(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG12	3	0.17
(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG13	3	0.17
(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG11	19	0.17
(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG12	19	0.17
(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG13	19	0.17
(1,561)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:134:TYR:H	1	0.17
(1,561)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:134:TYR:H	1	0.17
(1,561)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:134:TYR:H	1	0.17
(1,561)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:134:TYR:H	6	0.17
(1,561)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:134:TYR:H	6	0.17
(1,561)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:134:TYR:H	6	0.17
(1,548)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD11	18	0.17
(1,548)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD12	18	0.17
(1,548)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD13	18	0.17
(1,525)	1:A:98:HIS:H	1:A:99:LEU:HD21	20	0.17
(1,525)	1:A:98:HIS:H	1:A:99:LEU:HD22	20	0.17
(1,525)	1:A:98:HIS:H	1:A:99:LEU:HD23	20	0.17
(1,514)	1:A:86:ILE:HD11	1:A:87:ARG:H	1	0.17
(1,514)	1:A:86:ILE:HD12	1:A:87:ARG:H	1	0.17
(1,514)	1:A:86:ILE:HD13	1:A:87:ARG:H	1	0.17
(1,512)	1:A:79:LEU:HD21	1:A:87:ARG:H	9	0.17
(1,512)	1:A:79:LEU:HD22	1:A:87:ARG:H	9	0.17
(1,512)	1:A:79:LEU:HD23	1:A:87:ARG:H	9	0.17
(1,493)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:52:PHE:H	15	0.17
(1,493)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:52:PHE:H	15	0.17



 $Continued\ from\ previous\ page...$

(1,493) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:52:PHE:H 15 0.17 (1,48) 1:A:79:LEU:HD11 1:A:88:THR:H 3 0.17 (1,48) 1:A:79:LEU:HD12 1:A:88:THR:H 3 0.17 (1,48) 1:A:79:LEU:HD12 1:A:88:THR:H 3 0.17 (1,472) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:42:TYR:H 5 0.17 (1,472) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:42:TYR:H 5 0.17 (1,472) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:42:TYR:H 5 0.17 (1,47) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:115:CYS:H 3 0.17 (1,47) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:115:CYS:H 3 0.17 (1,47) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:115:CYS:H 3 0.17 (1,47) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:115:CYS:H 13 0.17 (1,47) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:15:CYS:H 13 0.17 (1,47) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:42:ASS:H 8 0.17 (1,468) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:23:ASN:H 8	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,48) 1:A:79:LEU:HD12 1:A:88:THR:H 3 0.17 (1,48) 1:A:79:LEU:HD13 1:A:88:THR:H 3 0.17 (1,472) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:48:TYR:H 5 0.17 (1,472) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:42:TYR:H 5 0.17 (1,472) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:42:TYR:H 5 0.17 (1,47) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:115:CYS:H 3 0.17 (1,47) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:115:CYS:H 3 0.17 (1,47) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:115:CYS:H 3 0.17 (1,47) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:115:CYS:H 13 0.17 (1,47) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:115:CYS:H 13 0.17 (1,47) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:115:CYS:H 13 0.17 (1,47) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:115:CYS:H 13 0.17 (1,468) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:23:ASN:H 8 0.17 (1,468) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:46:VAL:HG21 12 <td>(1,493)</td> <td>1:A:43:VAL:HG13</td> <td>1:A:52:PHE:H</td> <td>15</td> <td>0.17</td>	(1,493)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:52:PHE:H	15	0.17
(1,48) 1:A:79:LEU:HD13 1:A:88:THR:H 3 0.17 (1,472) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:42:TYR:H 5 0.17 (1,472) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:42:TYR:H 5 0.17 (1,472) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:42:TYR:H 5 0.17 (1,47) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:115:CYS:H 3 0.17 (1,47) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:115:CYS:H 3 0.17 (1,47) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:115:CYS:H 13 0.17 (1,47) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:115:CYS:H 13 0.17 (1,47) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:23:ASN:H 8 0.17 (1,468) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:23:ASN:H 8 0.17 (1,468) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:23:ASN:H 8 0.17 (1,468) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:23:ASN:H 8 0.17 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG21 12 0.17 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG21 12	(1,48)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:88:THR:H	3	0.17
(1,472) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:42:TYR:H 5 0.17 (1,472) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:42:TYR:H 5 0.17 (1,472) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:42:TYR:H 5 0.17 (1,47) 1:A:09:VAL:HG11 1:A:115:CYS:H 3 0.17 (1,47) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:115:CYS:H 3 0.17 (1,47) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:115:CYS:H 13 0.17 (1,47) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:115:CYS:H 13 0.17 (1,47) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:115:CYS:H 13 0.17 (1,47) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:15:CYS:H 13 0.17 (1,468) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:23:ASN:H 8 0.17 (1,468) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:23:ASN:H 8 0.17 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG21 12 0.17 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG22 12 0.17 (1,443) 1:A:90:VAL:HG21 1:A:101:HIS:H 5 <td>(1,48)</td> <td>1:A:79:LEU:HD12</td> <td>1:A:88:THR:H</td> <td>3</td> <td>0.17</td>	(1,48)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:88:THR:H	3	0.17
(1,472) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:42:TYR:H 5 0.17 (1,472) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:42:TYR:H 5 0.17 (1,47) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:115:CYS:H 3 0.17 (1,47) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:115:CYS:H 3 0.17 (1,47) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:115:CYS:H 13 0.17 (1,47) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:115:CYS:H 13 0.17 (1,47) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:115:CYS:H 13 0.17 (1,47) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:115:CYS:H 13 0.17 (1,468) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:23:ASN:H 8 0.17 (1,468) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:23:ASN:H 8 0.17 (1,468) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:23:ASN:H 8 0.17 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG21 12 0.17 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG22 12 0.17 (1,443) 1:A:90:VAL:HG23 1:A:101:HIS:H 5 <td>(1,48)</td> <td>1:A:79:LEU:HD13</td> <td>1:A:88:THR:H</td> <td>3</td> <td>0.17</td>	(1,48)	1:A:79:LEU:HD13	1:A:88:THR:H	3	0.17
(1,472) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:42:TYR:H 5 0.17 (1,47) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:115:CYS:H 3 0.17 (1,47) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:115:CYS:H 3 0.17 (1,47) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:115:CYS:H 13 0.17 (1,47) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:115:CYS:H 13 0.17 (1,47) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:115:CYS:H 13 0.17 (1,47) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:115:CYS:H 13 0.17 (1,47) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:115:CYS:H 13 0.17 (1,468) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:23:ASN:H 8 0.17 (1,468) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:23:ASN:H 8 0.17 (1,468) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:42:ASN:H 8 0.17 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG21 12 0.17 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG21 12 0.17 (1,443) 1:A:90:VAL:HG21 1:A:101:HIS:H 5 </td <td>(1,472)</td> <td>1:A:41:LEU:HD21</td> <td>1:A:42:TYR:H</td> <td>5</td> <td>0.17</td>	(1,472)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:42:TYR:H	5	0.17
(1,47) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:115:CYS:H 3 0.17 (1,47) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:115:CYS:H 3 0.17 (1,47) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:115:CYS:H 3 0.17 (1,47) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:115:CYS:H 13 0.17 (1,47) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:115:CYS:H 13 0.17 (1,47) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:115:CYS:H 13 0.17 (1,468) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:23:ASN:H 8 0.17 (1,468) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:23:ASN:H 8 0.17 (1,468) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:23:ASN:H 8 0.17 (1,468) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:46:VAL:HG21 12 0.17 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG22 12 0.17 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG23 12 0.17 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:10:HIS:H 5 0.17 (1,443) 1:A:90:VAL:HG21 1:A:10:HIS:H 5 <td>(1,472)</td> <td>1:A:41:LEU:HD22</td> <td>1:A:42:TYR:H</td> <td>5</td> <td>0.17</td>	(1,472)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:42:TYR:H	5	0.17
(1,47) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:115:CYS:H 3 0.17 (1,47) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:115:CYS:H 3 0.17 (1,47) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:115:CYS:H 13 0.17 (1,47) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:115:CYS:H 13 0.17 (1,47) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:115:CYS:H 13 0.17 (1,468) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:23:ASN:H 8 0.17 (1,468) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:23:ASN:H 8 0.17 (1,468) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:40:VAL:HG21 12 0.17 (1,468) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:43:3SN:H 8 0.17 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG21 12 0.17 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG23 12 0.17 (1,443) 1:A:90:VAL:HG21 1:A:101:HIS:H 5 0.17 (1,443) 1:A:90:VAL:HG22 1:A:101:HIS:H 5 0.17 (1,441) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD21	(1,472)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:42:TYR:H	5	0.17
(1,47) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:115:CYS:H 3 0.17 (1,47) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:115:CYS:H 13 0.17 (1,47) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:115:CYS:H 13 0.17 (1,47) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:115:CYS:H 13 0.17 (1,468) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:23:ASN:H 8 0.17 (1,468) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:23:ASN:H 8 0.17 (1,468) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:23:ASN:H 8 0.17 (1,468) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:46:VAL:HG21 12 0.17 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG22 12 0.17 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG23 12 0.17 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG23 12 0.17 (1,443) 1:A:90:VAL:HG21 1:A:101:HIS:H 5 0.17 (1,443) 1:A:90:VAL:HG22 1:A:101:HIS:H 5 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD21	(1,47)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:115:CYS:H	3	0.17
(1,47) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:115:CYS:H 13 0.17 (1,47) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:115:CYS:H 13 0.17 (1,47) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:115:CYS:H 13 0.17 (1,468) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:23:ASN:H 8 0.17 (1,468) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:23:ASN:H 8 0.17 (1,468) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:23:ASN:H 8 0.17 (1,468) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:23:ASN:H 8 0.17 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG21 12 0.17 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG22 12 0.17 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:40:VAL:HG23 12 0.17 (1,443) 1:A:90:VAL:HG21 1:A:10:HIIS:H 5 0.17 (1,443) 1:A:90:VAL:HG22 1:A:10:HIIS:H 5 0.17 (1,441) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD21 19 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22	(1,47)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:115:CYS:H	3	0.17
(1,47) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:115:CYS:H 13 0.17 (1,47) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:115:CYS:H 13 0.17 (1,468) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:23:ASN:H 8 0.17 (1,468) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:23:ASN:H 8 0.17 (1,468) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:23:ASN:H 8 0.17 (1,468) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:23:ASN:H 8 0.17 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG21 12 0.17 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG22 12 0.17 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG23 12 0.17 (1,443) 1:A:90:VAL:HG21 1:A:101:HIS:H 5 0.17 (1,443) 1:A:90:VAL:HG21 1:A:101:HIS:H 5 0.17 (1,443) 1:A:90:VAL:HG22 1:A:101:HIS:H 5 0.17 (1,443) 1:A:90:VAL:HG23 1:A:101:HIS:H 5 0.17 (1,441) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD21 19 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22 19 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD23 19 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD21 19 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD22 19 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD22 19 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD22 19 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD23 19 0.17 (1,4387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG21 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG23 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG23 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 2 0.17 (1,388) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 2 0.17 (1,388) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 2 0.17 (1,388) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 2 0.17	(1,47)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:115:CYS:H	3	0.17
(1,47) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:115:CYS:H 13 0.17 (1,468) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:23:ASN:H 8 0.17 (1,468) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:23:ASN:H 8 0.17 (1,468) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:23:ASN:H 8 0.17 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG21 12 0.17 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG22 12 0.17 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG23 12 0.17 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG23 12 0.17 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG23 12 0.17 (1,443) 1:A:90:VAL:HG21 1:A:101:HIS:H 5 0.17 (1,443) 1:A:90:VAL:HG22 1:A:101:HIS:H 5 0.17 (1,441) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD21 19 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22 19 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD22 <td>(1,47)</td> <td>1:A:90:VAL:HG11</td> <td>1:A:115:CYS:H</td> <td>13</td> <td>0.17</td>	(1,47)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:115:CYS:H	13	0.17
(1,468) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:23:ASN:H 8 0.17 (1,468) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:23:ASN:H 8 0.17 (1,468) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:23:ASN:H 8 0.17 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG21 12 0.17 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG22 12 0.17 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG23 12 0.17 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG23 12 0.17 (1,443) 1:A:90:VAL:HG21 1:A:101:HIS:H 5 0.17 (1,443) 1:A:90:VAL:HG22 1:A:101:HIS:H 5 0.17 (1,443) 1:A:90:VAL:HG23 1:A:101:HIS:H 5 0.17 (1,443) 1:A:90:VAL:HG23 1:A:101:HIS:H 5 0.17 (1,441) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD21 19 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD23 19 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD23 <td>(1,47)</td> <td>1:A:90:VAL:HG12</td> <td>1:A:115:CYS:H</td> <td>13</td> <td>0.17</td>	(1,47)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:115:CYS:H	13	0.17
(1,468) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:23:ASN:H 8 0.17 (1,468) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:23:ASN:H 8 0.17 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG21 12 0.17 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG22 12 0.17 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG23 12 0.17 (1,443) 1:A:90:VAL:HG21 1:A:101:HIS:H 5 0.17 (1,443) 1:A:90:VAL:HG22 1:A:101:HIS:H 5 0.17 (1,443) 1:A:90:VAL:HG23 1:A:101:HIS:H 5 0.17 (1,441) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD21 19 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD23 19 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD23 <td>(1,47)</td> <td>1:A:90:VAL:HG13</td> <td>1:A:115:CYS:H</td> <td>13</td> <td>0.17</td>	(1,47)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:115:CYS:H	13	0.17
(1,468) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:23:ASN:H 8 0.17 (1,468) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:23:ASN:H 8 0.17 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG21 12 0.17 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG22 12 0.17 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:40:VAL:HG23 12 0.17 (1,443) 1:A:90:VAL:HG21 1:A:101:HIS:H 5 0.17 (1,443) 1:A:90:VAL:HG22 1:A:101:HIS:H 5 0.17 (1,443) 1:A:90:VAL:HG23 1:A:101:HIS:H 5 0.17 (1,443) 1:A:90:VAL:HG23 1:A:101:HIS:H 5 0.17 (1,443) 1:A:90:VAL:HG23 1:A:101:HIS:H 5 0.17 (1,441) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD21 19 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD23 19 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD23 19 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD	(1,468)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:23:ASN:H	8	0.17
(1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG21 12 0.17 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG22 12 0.17 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG23 12 0.17 (1,443) 1:A:90:VAL:HG21 1:A:101:HIS:H 5 0.17 (1,443) 1:A:90:VAL:HG22 1:A:101:HIS:H 5 0.17 (1,443) 1:A:90:VAL:HG23 1:A:101:HIS:H 5 0.17 (1,441) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD21 19 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22 19 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD23 19 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD22 19 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD23 19 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD21 19 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD23 19 0.17 (1,411) 1:A:152:LEU:HD13	(1,468)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:23:ASN:H	8	0.17
(1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG22 12 0.17 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG23 12 0.17 (1,443) 1:A:90:VAL:HG21 1:A:101:HIS:H 5 0.17 (1,443) 1:A:90:VAL:HG22 1:A:101:HIS:H 5 0.17 (1,443) 1:A:90:VAL:HG23 1:A:101:HIS:H 5 0.17 (1,441) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD21 19 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22 19 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD23 19 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD21 19 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD23 19 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD23 19 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD21 19 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD22 19 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13	(1,468)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:23:ASN:H	8	0.17
(1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG23 12 0.17 (1,443) 1:A:90:VAL:HG21 1:A:101:HIS:H 5 0.17 (1,443) 1:A:90:VAL:HG22 1:A:101:HIS:H 5 0.17 (1,443) 1:A:90:VAL:HG23 1:A:101:HIS:H 5 0.17 (1,441) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD21 19 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22 19 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD23 19 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD22 19 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD23 19 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD23 19 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD22 19 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD22 19 0.17 (1,411) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG21 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 <td>(1,453)</td> <td>1:A:44:ASP:H</td> <td>1:A:46:VAL:HG21</td> <td>12</td> <td>0.17</td>	(1,453)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG21	12	0.17
(1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG23 12 0.17 (1,443) 1:A:90:VAL:HG21 1:A:101:HIS:H 5 0.17 (1,443) 1:A:90:VAL:HG22 1:A:101:HIS:H 5 0.17 (1,443) 1:A:90:VAL:HG23 1:A:101:HIS:H 5 0.17 (1,441) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD21 19 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22 19 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD23 19 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD22 19 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD23 19 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD23 19 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD22 19 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD22 19 0.17 (1,411) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG21 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 <td> ,</td> <td>1:A:44:ASP:H</td> <td>1:A:46:VAL:HG22</td> <td>12</td> <td>0.17</td>	,	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG22	12	0.17
(1,443) 1:A:90:VAL:HG22 1:A:101:HIS:H 5 0.17 (1,443) 1:A:90:VAL:HG23 1:A:101:HIS:H 5 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD21 19 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22 19 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD23 19 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD21 19 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD22 19 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD21 19 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD22 19 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD22 19 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG21 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG23 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG23 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG23 2 0.17 (1,387) <t< td=""><td></td><td>1:A:44:ASP:H</td><td>1:A:46:VAL:HG23</td><td>12</td><td>0.17</td></t<>		1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG23	12	0.17
(1,443) 1:A:90:VAL:HG23 1:A:101:HIS:H 5 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD21 19 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22 19 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD23 19 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD21 19 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD23 19 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD23 19 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD21 19 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD22 19 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD22 19 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:99:VAL:HG21 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG23 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG23 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL	(1,443)	1:A:90:VAL:HG21	1:A:101:HIS:H	5	0.17
(1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD21 19 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22 19 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD23 19 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD21 19 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD22 19 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD23 19 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD21 19 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD23 19 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD23 19 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG21 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG23 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG23 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 2 0.17 (1,387) 1:A:75:V	(1,443)	1:A:90:VAL:HG22	1:A:101:HIS:H	5	0.17
(1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22 19 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD23 19 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD21 19 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD22 19 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD23 19 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD21 19 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD23 19 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD23 19 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD23 19 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG21 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG22 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG23 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG21 2 0.17 (1,387) 1:A:75:V	(1,443)	1:A:90:VAL:HG23	1:A:101:HIS:H	5	0.17
(1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD23 19 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD21 19 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD22 19 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD23 19 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD21 19 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD22 19 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD23 19 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG21 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG22 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG21 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG23 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG21 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG22 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 2 0.17 (1,387) <	(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD21	19	0.17
(1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD21 19 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD22 19 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD23 19 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD21 19 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD22 19 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD23 19 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG21 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG23 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG21 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG23 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG21 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG21 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG22 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 </td <td>(1,411)</td> <td>1:A:129:LEU:HD11</td> <td>1:A:138:LEU:HD22</td> <td>19</td> <td>0.17</td>	(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD22	19	0.17
(1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD22 19 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD23 19 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD21 19 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD22 19 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD23 19 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG21 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG22 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG21 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG23 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG21 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG21 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 2 0.17 (1,384) 1:A	(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD23	19	0.17
(1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD23 19 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD21 19 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD22 19 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD23 19 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG21 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG23 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG21 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG22 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG21 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 2 0.17 (1,384) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:99:LEU:HD21 7 0.17	(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD21	19	0.17
(1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD21 19 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD22 19 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD23 19 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG21 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG23 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG21 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG22 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG21 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG22 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 2 0.17 (1,384) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:99:LEU:HD21 7 0.17	(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD22	19	0.17
(1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD22 19 0.17 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD23 19 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG21 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG23 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG21 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG22 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG23 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG21 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG22 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 2 0.17 (1,384) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:99:LEU:HD21 7 0.17	(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD23	19	0.17
(1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD23 19 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG21 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG22 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG23 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG21 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG23 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG21 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG22 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 2 0.17 (1,384) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:99:LEU:HD21 7 0.17	(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD21	19	0.17
(1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG21 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG22 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG23 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG21 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG23 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG21 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG22 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 2 0.17 (1,384) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:99:LEU:HD21 7 0.17	(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD22	19	0.17
(1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG22 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG23 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG21 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG22 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG21 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG22 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 2 0.17 (1,384) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:99:LEU:HD21 7 0.17	(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD23	19	0.17
(1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG23 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG21 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG22 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG23 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG21 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG22 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 2 0.17 (1,384) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:99:LEU:HD21 7 0.17	(1,387)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:90:VAL:HG21	2	0.17
(1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG23 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG21 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG22 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG23 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG21 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG22 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 2 0.17 (1,384) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:99:LEU:HD21 7 0.17	, ,	1:A:75:VAL:HG21	1:A:90:VAL:HG22	2	0.17
(1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG21 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG22 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG23 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG21 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG22 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 2 0.17 (1,384) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:99:LEU:HD21 7 0.17		1:A:75:VAL:HG21	1:A:90:VAL:HG23	2	0.17
(1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG22 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG23 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG21 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG22 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 2 0.17 (1,384) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:99:LEU:HD21 7 0.17		1:A:75:VAL:HG22	1:A:90:VAL:HG21	2	0.17
(1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG23 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG21 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG22 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 2 0.17 (1,384) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:99:LEU:HD21 7 0.17		1:A:75:VAL:HG22	1:A:90:VAL:HG22	2	0.17
(1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG21 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG22 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 2 0.17 (1,384) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:99:LEU:HD21 7 0.17	· · /	1:A:75:VAL:HG22	1:A:90:VAL:HG23	2	0.17
(1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG22 2 0.17 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 2 0.17 (1,384) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:99:LEU:HD21 7 0.17		1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG21	2	0.17
(1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 2 0.17 (1,384) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:99:LEU:HD21 7 0.17		1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG22	2	0.17
(1,384) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:99:LEU:HD21 7 0.17			1:A:90:VAL:HG23	2	0.17
	· · /	1:A:46:VAL:HG21	1:A:99:LEU:HD21	7	0.17
			1:A:99:LEU:HD22	7	0.17



 $Continued\ from\ previous\ page...$

(1,384) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:99:LEU:HD23 7 0.17 (1,384) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:99:LEU:HD21 7 0.17 (1,384) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:99:LEU:HD22 7 0.17 (1,384) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:99:LEU:HD21 7 0.17 (1,384) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:99:LEU:HD22 7 0.17 (1,384) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:99:LEU:HD23 7 0.17 (1,384) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:99:LEU:HD23 7 0.17 (1,379) 1:A:34:TYR:H 1:A:39:LEU:HD23 7 0.17 (1,377) 1:A:134:TYR:H 1:A:135:GLU:H 7 0.17 (1,283) 1:A:19:VAL:H 1:A:134:TYR:H 17 0.17 (1,266) 1:A:19:VAL:H 1:A:25:GLN:H 10 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD11 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD13 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD13 <th>Key</th> <th>Atom-1</th> <th>Atom-2</th> <th>Model</th> <th>Violation (Å)</th>	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,384) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:99:LEU:HD22 7 0.17 (1,384) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:99:LEU:HD23 7 0.17 (1,384) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:99:LEU:HD21 7 0.17 (1,384) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:99:LEU:HD22 7 0.17 (1,384) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:99:LEU:HD22 7 0.17 (1,384) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:99:LEU:HD22 7 0.17 (1,379) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:H 14 0.17 (1,377) 1:A:134:TYR:H 1:A:135:GLU:H 7 0.17 (1,283) 1:A:131:GLU:H 1:A:135:GLU:H 7 0.17 (1,283) 1:A:131:GLU:H 1:A:134:TYR:H 17 0.17 (1,266) 1:A:19:VAL:H 1:A:134:TYR:H 17 0.17 (1,266) 1:A:19:VAL:H 1:A:21:GLN:H 5 0.17 (1,266) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD11 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD12 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD11 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD13 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD11 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD11 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD11 1 0.17 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 11 0.17 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:13:ASN:HD22 9 0.17 (1,232) 1:A:12:LEU:HD11 1:A:13:ASN:HD22 9 0.17 (1,232) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:13:ASN:HD22 9 0.17 (1,232) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:13:ASN:HD22 9 0.17 (1,232) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:13:ASN:HD22 9 0.17 (1,201) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:HG13 1 0.17 (1,191) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 6 0.17 (1,191) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:HD21 13 0.17 (1,191) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:HD21 13 0.17 (1,191) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:HD21 13 0.17 (1,19	(1,384)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:99:LEU:HD23	7	0.17
(1,384) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:99:LEU:HD23 7 0.17 (1,384) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:99:LEU:HD21 7 0.17 (1,384) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:99:LEU:HD22 7 0.17 (1,384) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:99:LEU:HD23 7 0.17 (1,384) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:99:LEU:HD23 7 0.17 (1,378) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:H 14 0.17 (1,377) 1:A:134:TYR:H 1:A:135:GLU:H 7 0.17 (1,283) 1:A:131:GLU:H 1:A:134:TYR:H 17 0.17 (1,283) 1:A:131:GLU:H 1:A:64:TRP:HE1 18 0.17 (1,266) 1:A:19:VAL:H 1:A:21:GLN:H 5 0.17 (1,266) 1:A:19:VAL:H 1:A:21:GLN:H 5 0.17 (1,266) 1:A:49:VAL:H 1:A:21:GLN:H 5 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD11 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD12 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD13 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD13 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD11 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD11 4 0.17 (1,257) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 11 0.17 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:13:ASN:HD22 9 0.17 (1,232) 1:A:12:LEU:HD11 1:A:13:ASN:HD22 9 0.17 (1,232) 1:A:12:LEU:HD11 1:A:13:ASN:HD22 9 0.17 (1,232) 1:A:12:LEU:HD11 1:A:13:ASN:HD22 9 0.17 (1,201) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:HG11 1 0.17 (1,201) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:HG11 1 0.17 (1,191) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 6 0.17 (1,191) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 6 0.17 (1,191) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 6 0.17 (1,191) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 10 0.17 (1,191) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 11 0.17 (1,191) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:HD21 13 0.17 (1,191) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:HD21 13 0.17 (1,191) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:HD21 13 0.17 (1,191) 1:A:1	(1,384)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:99:LEU:HD21	7	0.17
(1,384) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:99:LEU:HD21 7 0.17 (1,384) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:99:LEU:HD22 7 0.17 (1,384) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:99:LEU:HD23 7 0.17 (1,379) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:H 14 0.17 (1,377) 1:A:134:TYR:H 1:A:135:GLU:H 7 0.17 (1,279) 1:A:26:GLU:H 1:A:134:TYR:H 17 0.17 (1,266) 1:A:19:VAL:H 1:A:21:GLN:H 5 0.17 (1,266) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD11 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD12 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD13 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD14 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD14 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD14 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD14 <td>(1,384)</td> <td>1:A:46:VAL:HG22</td> <td>1:A:99:LEU:HD22</td> <td>7</td> <td>0.17</td>	(1,384)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:99:LEU:HD22	7	0.17
(1,384) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:99:LEU:HD22 7 0.17 (1,384) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:99:LEU:HD23 7 0.17 (1,379) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:H 14 0.17 (1,377) 1:A:131:GLU:H 1:A:135:GLU:H 7 0.17 (1,283) 1:A:131:GLU:H 1:A:132:GLN:H 7 0.17 (1,279) 1:A:26:GLU:H 1:A:46:TRP:HE1 18 0.17 (1,266) 1:A:19:VAL:H 1:A:21:GLN:H 5 0.17 (1,266) 1:A:19:VAL:H 1:A:21:GLN:H 10 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD11 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD13 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD11 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD13 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD14 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD14	(1,384)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:99:LEU:HD23	7	0.17
(1,384) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:99:LEU:HD23 7 0.17 (1,379) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:H 14 0.17 (1,377) 1:A:134:TYR:H 1:A:135:GLU:H 7 0.17 (1,283) 1:A:131:GLU:H 1:A:134:TYR:H 17 0.17 (1,279) 1:A:26:GLU:H 1:A:64:TRP:HE1 18 0.17 (1,266) 1:A:19:VAL:H 1:A:21:GLN:H 10 0.17 (1,266) 1:A:49:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD11 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD12 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD13 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD14 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD13 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG33 1:A:51:LEU:HD13	(1,384)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:99:LEU:HD21	7	0.17
(1,379) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:H 14 0.17 (1,377) 1:A:134:TYR:H 1:A:135:GLU:H 7 0.17 (1,283) 1:A:131:GLU:H 1:A:134:TYR:H 17 0.17 (1,279) 1:A:26:GLU:H 1:A:64:TRP:HE1 18 0.17 (1,266) 1:A:19:VAL:H 1:A:21:GLN:H 5 0.17 (1,266) 1:A:19:VAL:H 1:A:21:GLN:H 10 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD11 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD12 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD13 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD13 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD13 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD14 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD14 4 0.17 (1,247) 1:A:121:LEU:HD14 1:A:122:ARG:H 11 0.17 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 11 0.17 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 11 0.17 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:13:ASN:HD22 9 0.17 (1,232) 1:A:12:LEU:HD11 1:A:13:ASN:HD22 9 0.17 (1,201) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:HG11 1 0.17 (1,191) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 6 0.17 (1,192) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 6 0.17 (1,192) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 6 0.17 (1,192) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 6 0.17 (1,191) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 6 0.17 (1,191) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 1 1 0.17 (1,191) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:1	(1,384)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:99:LEU:HD22	7	0.17
(1,377) 1:A:134:TYR:H 1:A:135:GLU:H 7 0.17 (1,283) 1:A:131:GLU:H 1:A:134:TYR:H 17 0.17 (1,279) 1:A:26:GLU:H 1:A:64:TRP:HE1 18 0.17 (1,266) 1:A:19:VAL:H 1:A:21:GLN:H 5 0.17 (1,266) 1:A:19:VAL:H 1:A:21:GLN:H 10 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD11 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD12 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD13 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD12 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD13 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 4 0.17 (1,247) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H	(1,384)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:99:LEU:HD23	7	0.17
(1,283) 1:A:131:GLU:H 1:A:134:TYR:H 17 0.17 (1,279) 1:A:26:GLU:H 1:A:64:TRP:HE1 18 0.17 (1,266) 1:A:19:VAL:H 1:A:21:GLN:H 5 0.17 (1,266) 1:A:19:VAL:H 1:A:21:GLN:H 10 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD11 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD12 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD13 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD11 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD13 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD11 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 4 0.17 (1,247) 1:A:12:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 11 0.17 (1,247) 1:A:12:LEU:HD11 1:A:13:ASN:HD22	(1,379)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:H	14	0.17
(1,279) 1:A:26:GLU:H 1:A:64:TRP:HE1 18 0.17 (1,266) 1:A:19:VAL:H 1:A:21:GLN:H 5 0.17 (1,266) 1:A:19:VAL:H 1:A:21:GLN:H 10 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD11 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD12 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD13 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD11 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD12 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD13 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD12 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 4 0.17 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 11 0.17 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:13:ASN:HD22	(1,377)	1:A:134:TYR:H	1:A:135:GLU:H	7	0.17
(1,266) 1:A:19:VAL:H 1:A:21:GLN:H 5 0.17 (1,266) 1:A:19:VAL:H 1:A:21:GLN:H 10 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD11 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD12 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD13 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD11 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD12 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD13 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD11 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 4 0.17 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:121:LEU:HD13 4 0.17 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:AR	(1,283)	1:A:131:GLU:H	1:A:134:TYR:H	17	0.17
(1,266) 1:A:19:VAL:H 1:A:21:GLN:H 10 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD11 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD12 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD13 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD11 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD12 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD11 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD12 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD12 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD12 4 0.17 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 11 0.17 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:13:ASN:HD22 9 0.17 (1,232) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:13	(1,279)	1:A:26:GLU:H	1:A:64:TRP:HE1	18	0.17
(1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD11 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD12 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD13 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD11 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD12 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD11 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD12 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 4 0.17 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:121:LEU:HD13 4 0.17 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 11 0.17 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:13:ASN:HD22 9 0.17 (1,232) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:13:ASN:HD22 9 0.17 (1,232) 1:A:12:LEU:HD13 <td< td=""><td>(1,266)</td><td>1:A:19:VAL:H</td><td>1:A:21:GLN:H</td><td>5</td><td>0.17</td></td<>	(1,266)	1:A:19:VAL:H	1:A:21:GLN:H	5	0.17
(1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD12 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD13 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD11 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD12 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD11 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD12 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 4 0.17 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 11 0.17 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 11 0.17 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:13:ASN:HD22 9 0.17 (1,232) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:13:ASN:HD22 9 0.17 (1,232) 1:A:12:LEU:HD13 1	(1,266)	1:A:19:VAL:H	1:A:21:GLN:H	10	0.17
(1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD12 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD13 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD11 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD12 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD11 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD12 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 4 0.17 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 11 0.17 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:12:2ARG:H 11 0.17 (1,247) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:13:ASN:HD22 9 0.17 (1,232) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:13:ASN:HD22 9 0.17 (1,232) 1:A:18:EU:HD13 1:A	(1,256)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD11	4	0.17
(1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD13 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD11 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD12 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD12 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD12 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 4 0.17 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:121:LEU:HD13 4 0.17 (1,247) 1:A:121:LEU:HD12 1:A:122:ARG:H 11 0.17 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 11 0.17 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:13:ASN:HD22 9 0.17 (1,232) 1:A:12:LEU:HD11 1:A:13:ASN:HD22 9 0.17 (1,232) 1:A:18:12:LEU:HD13 1:A:13:ASN:HD22 9 0.17 (1,201) 1:A:88:THR:H <td< td=""><td>(1,256)</td><td>1:A:46:VAL:HG21</td><td>1:A:51:LEU:HD12</td><td>4</td><td>0.17</td></td<>	(1,256)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD12	4	0.17
(1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD12 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD13 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD11 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD12 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 4 0.17 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 11 0.17 (1,247) 1:A:121:LEU:HD12 1:A:122:ARG:H 11 0.17 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 11 0.17 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:13:ASN:HD22 9 0.17 (1,232) 1:A:12:LEU:HD11 1:A:13:ASN:HD22 9 0.17 (1,232) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:13:ASN:HD22 9 0.17 (1,232) 1:A:18:RHR:H 1:A:102:VAL:HG11 1 0.17 (1,201) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:HG12 1 0.17 (1,192) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:1		1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD13	4	0.17
(1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD13 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD11 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD12 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 4 0.17 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 11 0.17 (1,247) 1:A:121:LEU:HD12 1:A:122:ARG:H 11 0.17 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 11 0.17 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:13:ASN:HD22 9 0.17 (1,232) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:13:ASN:HD22 9 0.17 (1,232) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:13:ASN:HD22 9 0.17 (1,201) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:HG11 1 0.17 (1,201) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:HG13 1 0.17 (1,192) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 6 0.17 (1,192) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:117	(1,256)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD11	4	0.17
(1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD13 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD11 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD12 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 4 0.17 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 11 0.17 (1,247) 1:A:121:LEU:HD12 1:A:122:ARG:H 11 0.17 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 11 0.17 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:13:ASN:HD22 9 0.17 (1,232) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:13:ASN:HD22 9 0.17 (1,232) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:13:ASN:HD22 9 0.17 (1,201) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:HG11 1 0.17 (1,201) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:HG13 1 0.17 (1,192) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 6 0.17 (1,192) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:117	('	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD12	4	0.17
(1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD12 4 0.17 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 4 0.17 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 11 0.17 (1,247) 1:A:121:LEU:HD12 1:A:122:ARG:H 11 0.17 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 11 0.17 (1,247) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:13:ASN:HD22 9 0.17 (1,232) 1:A:12:LEU:HD11 1:A:13:ASN:HD22 9 0.17 (1,232) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:13:ASN:HD22 9 0.17 (1,201) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:HG11 1 0.17 (1,201) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:HG12 1 0.17 (1,201) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:HG13 1 0.17 (1,192) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 6 0.17 (1,192) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:117:ASN:HD21 13 0.17 (1,191) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:117:		1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD13	4	0.17
(1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 4 0.17 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 11 0.17 (1,247) 1:A:121:LEU:HD12 1:A:122:ARG:H 11 0.17 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 11 0.17 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:13:ASN:HD22 9 0.17 (1,232) 1:A:12:LEU:HD12 1:A:13:ASN:HD22 9 0.17 (1,232) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:13:ASN:HD22 9 0.17 (1,232) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:13:ASN:HD22 9 0.17 (1,201) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:HG11 1 0.17 (1,201) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:HG12 1 0.17 (1,201) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:HG13 1 0.17 (1,192) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 6 0.17 (1,192) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:117:ASN:HD21 13 0.17 (1,191) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:117	(1,256)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD11	4	0.17
(1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 11 0.17 (1,247) 1:A:121:LEU:HD12 1:A:122:ARG:H 11 0.17 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 11 0.17 (1,247) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:13:ASN:HD22 9 0.17 (1,232) 1:A:12:LEU:HD12 1:A:13:ASN:HD22 9 0.17 (1,232) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:13:ASN:HD22 9 0.17 (1,201) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:HG11 1 0.17 (1,201) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:HG12 1 0.17 (1,201) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:HG13 1 0.17 (1,192) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 6 0.17 (1,192) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:117:ASN:H 6 0.17 (1,191) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:117:ASN:HD21 13 0.17 (1,191) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:117:ASN:HD21 13 0.17 (1,191) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:127	(1,256)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD12	4	0.17
(1,247) 1:A:121:LEU:HD12 1:A:122:ARG:H 11 0.17 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 11 0.17 (1,232) 1:A:12:LEU:HD11 1:A:13:ASN:HD22 9 0.17 (1,232) 1:A:12:LEU:HD12 1:A:13:ASN:HD22 9 0.17 (1,232) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:13:ASN:HD22 9 0.17 (1,232) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:13:ASN:HD22 9 0.17 (1,201) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:HG11 1 0.17 (1,201) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:HG13 1 0.17 (1,192) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 6 0.17 (1,192) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:117:ASN:H 6 0.17 (1,191) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:HD21 13 0.17 (1,191) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:117:ASN:HD21 13 0.17 (1,191) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:127:HIS:H 11 0.17 (1,19) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:12	(1,256)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD13	4	0.17
(1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 11 0.17 (1,232) 1:A:12:LEU:HD11 1:A:13:ASN:HD22 9 0.17 (1,232) 1:A:12:LEU:HD12 1:A:13:ASN:HD22 9 0.17 (1,232) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:13:ASN:HD22 9 0.17 (1,201) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:HG11 1 0.17 (1,201) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:HG12 1 0.17 (1,201) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:HG13 1 0.17 (1,201) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:HG13 1 0.17 (1,192) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 6 0.17 (1,192) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:117:ASN:HD21 13 0.17 (1,191) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:HD21 13 0.17 (1,191) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:117:ASN:HD21 13 0.17 (1,191) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:127:HIS:H 11 0.17 (1,19) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:12	(1,247)	1:A:121:LEU:HD11	1:A:122:ARG:H	11	0.17
(1,232) 1:A:12:LEU:HD11 1:A:13:ASN:HD22 9 0.17 (1,232) 1:A:12:LEU:HD12 1:A:13:ASN:HD22 9 0.17 (1,232) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:13:ASN:HD22 9 0.17 (1,201) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:HG11 1 0.17 (1,201) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:HG12 1 0.17 (1,201) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:HG13 1 0.17 (1,201) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:HG13 1 0.17 (1,192) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 6 0.17 (1,192) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:117:ASN:HD21 13 0.17 (1,191) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:117:ASN:HD21 13 0.17 (1,191) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:117:ASN:HD21 13 0.17 (1,19) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:127:HIS:H 11 0.17 (1,19) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:127:HIS:H 11 0.17 (1,19) 1:A:78:LYS:H 1:A:102:VAL:	(1,247)	1:A:121:LEU:HD12	1:A:122:ARG:H	11	0.17
(1,232) 1:A:12:LEU:HD12 1:A:13:ASN:HD22 9 0.17 (1,232) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:13:ASN:HD22 9 0.17 (1,201) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:HG11 1 0.17 (1,201) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:HG12 1 0.17 (1,201) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:HG13 1 0.17 (1,201) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 6 0.17 (1,192) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:117:ASN:H 6 0.17 (1,192) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:117:ASN:HD21 13 0.17 (1,191) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:117:ASN:HD21 13 0.17 (1,191) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:117:ASN:HD21 13 0.17 (1,191) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:127:HIS:H 11 0.17 (1,19) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:127:HIS:H 11 0.17 (1,19) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:127:HIS:H 11 0.17 (1,19) 1:A:78:LYS:H 1:A:102:VAL:	(1,247)	1:A:121:LEU:HD13	1:A:122:ARG:H	11	0.17
(1,232) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:13:ASN:HD22 9 0.17 (1,201) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:HG11 1 0.17 (1,201) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:HG12 1 0.17 (1,201) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:HG13 1 0.17 (1,192) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 6 0.17 (1,192) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:117:ASN:H 6 0.17 (1,191) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:HD21 13 0.17 (1,191) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:117:ASN:HD21 13 0.17 (1,191) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:117:ASN:HD21 13 0.17 (1,191) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:127:HIS:H 11 0.17 (1,19) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:127:HIS:H 11 0.17 (1,19) 1:A:78:LYS:H 1:A:102:VAL:HG11 20 0.17	(1,232)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:13:ASN:HD22	9	0.17
(1,232) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:13:ASN:HD22 9 0.17 (1,201) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:HG11 1 0.17 (1,201) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:HG12 1 0.17 (1,201) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:HG13 1 0.17 (1,192) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 6 0.17 (1,192) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:117:ASN:H 6 0.17 (1,191) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:HD21 13 0.17 (1,191) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:117:ASN:HD21 13 0.17 (1,191) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:117:ASN:HD21 13 0.17 (1,191) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:127:HIS:H 11 0.17 (1,19) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:127:HIS:H 11 0.17 (1,19) 1:A:78:LYS:H 1:A:102:VAL:HG11 20 0.17	(1,232)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:13:ASN:HD22	9	0.17
(1,201) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:HG12 1 0.17 (1,201) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:HG13 1 0.17 (1,192) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 6 0.17 (1,192) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:117:ASN:H 6 0.17 (1,192) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:117:ASN:HD21 13 0.17 (1,191) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:HD21 13 0.17 (1,191) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:117:ASN:HD21 13 0.17 (1,191) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:117:ASN:HD21 13 0.17 (1,19) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:127:HIS:H 11 0.17 (1,19) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:127:HIS:H 11 0.17 (1,19) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:127:HIS:H 11 0.17 (1,15) 1:A:78:LYS:H 1:A:102:VAL:HG11 20 0.17	(1,232)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:13:ASN:HD22	9	0.17
(1,201) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:HG13 1 0.17 (1,192) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 6 0.17 (1,192) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:117:ASN:H 6 0.17 (1,192) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:117:ASN:H 6 0.17 (1,191) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:HD21 13 0.17 (1,191) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:117:ASN:HD21 13 0.17 (1,191) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:117:ASN:HD21 13 0.17 (1,19) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:127:HIS:H 11 0.17 (1,19) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:127:HIS:H 11 0.17 (1,19) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:127:HIS:H 11 0.17 (1,15) 1:A:78:LYS:H 1:A:102:VAL:HG11 20 0.17	(1,201)	1:A:88:THR:H	1:A:102:VAL:HG11	1	0.17
(1,192) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 6 0.17 (1,192) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:117:ASN:H 6 0.17 (1,192) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:117:ASN:H 6 0.17 (1,191) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:HD21 13 0.17 (1,191) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:117:ASN:HD21 13 0.17 (1,191) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:117:ASN:HD21 13 0.17 (1,19) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:127:HIS:H 11 0.17 (1,19) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:127:HIS:H 11 0.17 (1,19) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:127:HIS:H 11 0.17 (1,15) 1:A:78:LYS:H 1:A:102:VAL:HG11 20 0.17	(1,201)	1:A:88:THR:H	1:A:102:VAL:HG12	1	0.17
(1,192) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:117:ASN:H 6 0.17 (1,192) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:117:ASN:H 6 0.17 (1,191) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:HD21 13 0.17 (1,191) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:117:ASN:HD21 13 0.17 (1,191) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:117:ASN:HD21 13 0.17 (1,19) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:127:HIS:H 11 0.17 (1,19) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:127:HIS:H 11 0.17 (1,19) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:127:HIS:H 11 0.17 (1,15) 1:A:78:LYS:H 1:A:102:VAL:HG11 20 0.17	(1,201)	1:A:88:THR:H	1:A:102:VAL:HG13	1	0.17
(1,192) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:117:ASN:H 6 0.17 (1,192) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:117:ASN:H 6 0.17 (1,191) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:HD21 13 0.17 (1,191) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:117:ASN:HD21 13 0.17 (1,191) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:117:ASN:HD21 13 0.17 (1,19) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:127:HIS:H 11 0.17 (1,19) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:127:HIS:H 11 0.17 (1,19) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:127:HIS:H 11 0.17 (1,15) 1:A:78:LYS:H 1:A:102:VAL:HG11 20 0.17	(1,192)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:H	6	0.17
(1,192) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:117:ASN:H 6 0.17 (1,191) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:HD21 13 0.17 (1,191) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:117:ASN:HD21 13 0.17 (1,191) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:117:ASN:HD21 13 0.17 (1,19) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:127:HIS:H 11 0.17 (1,19) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:127:HIS:H 11 0.17 (1,19) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:127:HIS:H 11 0.17 (1,15) 1:A:78:LYS:H 1:A:102:VAL:HG11 20 0.17		1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:H	6	0.17
(1,191) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:HD21 13 0.17 (1,191) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:117:ASN:HD21 13 0.17 (1,191) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:117:ASN:HD21 13 0.17 (1,19) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:127:HIS:H 11 0.17 (1,19) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:127:HIS:H 11 0.17 (1,19) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:127:HIS:H 11 0.17 (1,15) 1:A:78:LYS:H 1:A:102:VAL:HG11 20 0.17		1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:H	6	0.17
(1,191) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:117:ASN:HD21 13 0.17 (1,191) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:117:ASN:HD21 13 0.17 (1,19) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:127:HIS:H 11 0.17 (1,19) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:127:HIS:H 11 0.17 (1,19) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:127:HIS:H 11 0.17 (1,15) 1:A:78:LYS:H 1:A:102:VAL:HG11 20 0.17		1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:HD21	13	0.17
(1,191) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:117:ASN:HD21 13 0.17 (1,19) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:127:HIS:H 11 0.17 (1,19) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:127:HIS:H 11 0.17 (1,19) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:127:HIS:H 11 0.17 (1,15) 1:A:78:LYS:H 1:A:102:VAL:HG11 20 0.17		1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:HD21	13	0.17
(1,19) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:127:HIS:H 11 0.17 (1,19) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:127:HIS:H 11 0.17 (1,19) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:127:HIS:H 11 0.17 (1,15) 1:A:78:LYS:H 1:A:102:VAL:HG11 20 0.17	, ,	1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:HD21	13	0.17
(1,19) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:127:HIS:H 11 0.17 (1,19) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:127:HIS:H 11 0.17 (1,15) 1:A:78:LYS:H 1:A:102:VAL:HG11 20 0.17		1:A:124:VAL:HG11	1:A:127:HIS:H	11	0.17
(1,19) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:127:HIS:H 11 0.17 (1,15) 1:A:78:LYS:H 1:A:102:VAL:HG11 20 0.17		1:A:124:VAL:HG12	1:A:127:HIS:H	11	0.17
(1,15) 1:A:78:LYS:H 1:A:102:VAL:HG11 20 0.17	(1,19)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:127:HIS:H	11	0.17
	(1,15)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG11	20	0.17
(1,15) 1:A:78:LYS:H 1:A:102:VAL:HG12 20 0.17	(1,15)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG12	20	0.17



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,15)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG13	20	0.17
(1,147)	1:A:130:LYS:H	1:A:134:TYR:H	13	0.17
(1,139)	1:A:46:VAL:H	1:A:48:GLY:H	3	0.17
(1,13)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:131:GLU:H	19	0.17
(1,13)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:131:GLU:H	19	0.17
(1,13)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:131:GLU:H	19	0.17
(1,119)	1:A:88:THR:H	1:A:102:VAL:H	15	0.17
(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD21	1	0.17
(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD22	1	0.17
(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD23	1	0.17
(1,98)	1:A:31:ASN:H	1:A:34:TRP:H	12	0.16
(1,93)	1:A:8:LYS:H	1:A:10:LYS:H	12	0.16
(1,9)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:138:LEU:H	9	0.16
(1,9)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:138:LEU:H	9	0.16
(1,9)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:138:LEU:H	9	0.16
(1,9)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:138:LEU:H	10	0.16
(1,9)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:138:LEU:H	10	0.16
(1,9)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:138:LEU:H	10	0.16
(1,623)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD11	1	0.16
(1,623)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD12	1	0.16
(1,623)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD13	1	0.16
(1,623)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD11	13	0.16
(1,623)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD12	13	0.16
(1,623)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD13	13	0.16
(1,616)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD21	10	0.16
(1,616)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD22	10	0.16
(1,616)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD23	10	0.16
(1,616)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD21	10	0.16
(1,616)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD22	10	0.16
(1,616)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD23	10	0.16
(1,616)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD21	10	0.16
(1,616)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD22	10	0.16
(1,616)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD23	10	0.16
(1,61)	1:A:54:SER:HG	1:A:55:LYS:H	17	0.16
(1,609)	1:A:102:VAL:H	1:A:88:THR:H	16	0.16
(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG11	11	0.16
(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG12	11	0.16
(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG13	11	0.16
(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG11	18	0.16
(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG12	18	0.16
(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG13	18	0.16
(1,583)	1:A:90:VAL:H	1:A:102:VAL:HG21	10	0.16



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,583)	1:A:90:VAL:H	1:A:102:VAL:HG22	10	0.16
(1,583)	1:A:90:VAL:H	1:A:102:VAL:HG23	10	0.16
(1,57)	1:A:112:LEU:HD11	1:A:113:ARG:H	7	0.16
(1,57)	1:A:112:LEU:HD12	1:A:113:ARG:H	7	0.16
(1,57)	1:A:112:LEU:HD13	1:A:113:ARG:H	7	0.16
(1,57)	1:A:112:LEU:HD11	1:A:113:ARG:H	14	0.16
(1,57)	1:A:112:LEU:HD12	1:A:113:ARG:H	14	0.16
(1,57)	1:A:112:LEU:HD13	1:A:113:ARG:H	14	0.16
(1,550)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG21	13	0.16
(1,550)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG22	13	0.16
(1,550)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG23	13	0.16
(1,542)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD21	8	0.16
(1,542)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD22	8	0.16
(1,542)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD23	8	0.16
(1,512)	1:A:79:LEU:HD21	1:A:87:ARG:H	11	0.16
(1,512)	1:A:79:LEU:HD22	1:A:87:ARG:H	11	0.16
(1,512)	1:A:79:LEU:HD23	1:A:87:ARG:H	11	0.16
(1,493)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:52:PHE:H	1	0.16
(1,493)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:52:PHE:H	1	0.16
(1,493)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:52:PHE:H	1	0.16
(1,47)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:115:CYS:H	5	0.16
(1,47)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:115:CYS:H	5	0.16
(1,47)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:115:CYS:H	5	0.16
(1,465)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG11	12	0.16
(1,465)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG12	12	0.16
(1,465)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG13	12	0.16
(1,454)	1:A:134:TYR:H	1:A:138:LEU:HD21	8	0.16
(1,454)	1:A:134:TYR:H	1:A:138:LEU:HD22	8	0.16
(1,454)	1:A:134:TYR:H	1:A:138:LEU:HD23	8	0.16
(1,453)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG21	20	0.16
(1,453)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG22	20	0.16
(1,453)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG23	20	0.16
(1,451)	1:A:75:VAL:HG11	1:A:91:ARG:H	12	0.16
(1,451)	1:A:75:VAL:HG12	1:A:91:ARG:H	12	0.16
(1,451)	1:A:75:VAL:HG13	1:A:91:ARG:H	12	0.16
(1,451)	1:A:75:VAL:HG11	1:A:91:ARG:H	13	0.16
(1,451)	1:A:75:VAL:HG12	1:A:91:ARG:H	13	0.16
(1,451)	1:A:75:VAL:HG13	1:A:91:ARG:H	13	0.16
(1,443)	1:A:90:VAL:HG21	1:A:101:HIS:H	15	0.16
(1,443)	1:A:90:VAL:HG22	1:A:101:HIS:H	15	0.16
(1,443)	1:A:90:VAL:HG23	1:A:101:HIS:H	15	0.16
(1,431)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:103:PHE:H	20	0.16



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,431)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:103:PHE:H	20	0.16
(1,431)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:103:PHE:H	20	0.16
(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD11	17	0.16
(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD12	17	0.16
(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD13	17	0.16
(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD11	17	0.16
(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD12	17	0.16
(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD13	17	0.16
(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD11	17	0.16
(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD12	17	0.16
(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD13	17	0.16
(1,407)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:46:VAL:HG21	11	0.16
(1,407)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:46:VAL:HG22	11	0.16
(1,407)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:46:VAL:HG23	11	0.16
(1,407)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:46:VAL:HG21	11	0.16
(1,407)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:46:VAL:HG22	11	0.16
(1,407)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:46:VAL:HG23	11	0.16
(1,407)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:46:VAL:HG21	11	0.16
(1,407)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:46:VAL:HG22	11	0.16
(1,407)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:46:VAL:HG23	11	0.16
(1,40)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:97:SER:H	16	0.16
(1,40)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:97:SER:H	16	0.16
(1,40)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:97:SER:H	16	0.16
(1,4)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:124:VAL:H	8	0.16
(1,4)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:H	8	0.16
(1,4)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:H	8	0.16
(1,393)	1:A:12:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HG11	3	0.16
(1,393)	1:A:12:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HG12	3	0.16
(1,393)	1:A:12:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HG13	3	0.16
(1,393)	1:A:12:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HG11	3	0.16
(1,393)	1:A:12:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HG12	3	0.16
(1,393)	1:A:12:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HG13	3	0.16
(1,393)	1:A:12:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HG11	3	0.16
(1,393)	1:A:12:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HG12	3	0.16
(1,393)	1:A:12:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HG13	3	0.16
(1,393)	1:A:12:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HG11	20	0.16
(1,393)	1:A:12:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HG12	20	0.16
(1,393)	1:A:12:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HG13	20	0.16
(1,393)	1:A:12:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HG11	20	0.16
(1,393)	1:A:12:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HG12	20	0.16
(1,393)	1:A:12:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HG13	20	0.16
(1,393)	1:A:12:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HG11	20	0.16



 $Continued\ from\ previous\ page...$

(1,393) 1:A:12:LEU:HD23 1:A:46:VAL:HG13 20 0.16 (1,374) 1:A:132:LEU:HD23 1:A:46:VAL:HG13 20 0.16 (1,374) 1:A:132:GLU:H 1:A:134:TYR:H 12 0.16 (1,37) 1:A:9:ILE:HD11 1:A:13:ASN:HD21 1 0.16 (1,37) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:13:ASN:HD21 1 0.16 (1,37) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:13:ASN:HD21 1 0.16 (1,355) 1:A:6:FLEHD13 1:A:13:ASN:HD21 1 0.16 (1,355) 1:A:A:6:FLEU:H 1:A:14:TYR:H 1 0.16 (1,355) 1:A:A:6:FLEU:H 1.A:14:TYR:H 1 0.16 (1,290) 1:A:A:14:ARG:H 1:A:114:TYR:H 1 0.16 (1,298) 1:A:14:ARG:H 1:A:17:TYR:H 12 0.16 (1,260) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:25:THR:H 19 0.16 (1,250) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:25:THR:H 19 0.16 (1,24) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:134:TYR:H <td< th=""><th>Key</th><th>Atom-1</th><th>Atom-2</th><th>Model</th><th>Violation (Å)</th></td<>	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,374) 1:A:132:GLU:H 1:A:134:TYR:H 12 0.16 (1,37) 1:A:9:ILE:HD11 1:A:13:ASN:HD21 1 0.16 (1,37) 1:A:9:ILE:HD12 1:A:13:ASN:HD21 1 0.16 (1,37) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:13:ASN:HD21 1 0.16 (1,37) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:13:ASN:HD21 1 0.16 (1,37) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:13:ASN:HD21 1 0.16 (1,35) 1:A:6:PIE:HD13 1:A:13:ASN:HD21 1 0.16 (1,329) 1:A:79:LEU:HD 11 1:A:18:PIE:HD12 0.16 (1,298) 1:A:14:ARG:H 1:A:17:TYR:H 12 0.16 (1,267) 1:A:14:ARG:H 1:A:17:TYR:H 12 0.16 (1,267) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:25:THR:H 19 0.16 (1,250) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:25:THR:H 19 0.16 (1,24) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:25:THR:H 19 0.16 (1,24) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:134:TYR:H 1 0.	(1,393)	1:A:12:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HG12	20	0.16
(1,37) 1:A:9:ILE:HD11 1:A:13:ASN:HD21 1 0.16 (1,37) 1:A:9:ILE:HD12 1:A:13:ASN:HD21 1 0.16 (1,37) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:13:ASN:HD21 1 0.16 (1,355) 1:A:67:PHE:H 1:A:114:TYR:H 1 0.16 (1,329) 1:A:79:LEU:H 1:A:89:GLU:H 1 0.16 (1,298) 1:A:14:ARG:H 1:A:17:TYR:H 12 0.16 (1,267) 1:A:21:GLN:H 1:A:24:GLY:H 2 0.16 (1,250) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:25:THR:H 19 0.16 (1,250) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:25:THR:H 19 0.16 (1,250) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:25:THR:H 19 0.16 (1,250) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:25:THR:H 19 0.16 (1,24) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:134:TYR:H 1 0.16 (1,24) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:134:TYR:H 1 0.16 (1,24) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:134:TYR:H 4	(1,393)	1:A:12:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HG13	20	0.16
(1,37) 1:A:9:ILE:HD12 1:A:13:ASN:HD21 1 0.16 (1,37) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:13:ASN:HD21 1 0.16 (1,335) 1:A:67:PHE:H 1:A:114:TYR:H 1 0.16 (1,329) 1:A:79:LEU:H 1:A:89:GLU:H 1 0.16 (1,298) 1:A:14:ARG:H 1:A:17:TYR:H 12 0.16 (1,298) 1:A:14:ARG:H 1:A:17:TYR:H 12 0.16 (1,207) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:25:THR:H 19 0.16 (1,250) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:25:THR:H 19 0.16 (1,250) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:25:THR:H 19 0.16 (1,250) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:25:THR:H 19 0.16 (1,251) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:25:THR:H 19 0.16 (1,24) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:134:TYR:H 1 0.16 (1,24) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:134:TYR:H 1 0.16 (1,24) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:134:TYR:H 1 0.16 (1,24) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:134:TYR:H 4 0.16 (1,24) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:134:TYR:H 4 0.16 (1,24) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:134:TYR:H 4 0.16 (1,24) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:134:TYR:H 4 0.16 (1,21) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:138:LEU:HD11 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:138:LEU:HD11 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:138:LEU:HD11 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD13 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD13 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD13 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD11 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD11 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD13 17 0.16 (1,111) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 15 0.16 (1,111) 1:A:138:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 17 0.16 (1,111) 1:A:138:LYS:H 1:A:129:LEU:H	(1,374)	1:A:132:GLU:H	1:A:134:TYR:H	12	0.16
(1,37) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:13:ASN:HD21 1 0.16 (1,355) 1:A:67:PHE:H 1:A:114:TYR:H 1 0.16 (1,329) 1:A:79:LEU:H 1:A:89:GLU:H 1 0.16 (1,298) 1:A:14:ARG:H 1:A:17:TYR:H 12 0.16 (1,267) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:25:THR:H 19 0.16 (1,250) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:25:THR:H 19 0.16 (1,250) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:25:THR:H 19 0.16 (1,250) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:25:THR:H 19 0.16 (1,24) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:25:THR:H 19 0.16 (1,24) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:25:THR:H 19 0.16 (1,24) 1:A:19:LEU:HD11 1:A:134:TYR:H 1 0.16 (1,24) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:134:TYR:H 1 0.16 (1,24) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:134:TYR:H 4 0.16 (1,21) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD11 17	(1,37)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:13:ASN:HD21	1	0.16
(1,355) 1:A:67:PHE:H 1:A:114:TYR:H 1 0.16 (1,329) 1:A:79:LEU:H 1:A:89:GLU:H 1 0.16 (1,298) 1:A:14:ARG:H 1:A:17:TYR:H 12 0.16 (1,267) 1:A:21:GLN:H 1:A:24:GLY:H 2 0.16 (1,250) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:25:THR:H 19 0.16 (1,250) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:25:THR:H 19 0.16 (1,250) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:25:THR:H 19 0.16 (1,24) 1:A:19:LEU:HD11 1:A:134:TYR:H 1 0.16 (1,24) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:134:TYR:H 1 0.16 (1,24) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:134:TYR:H 4 0.16 (1,24) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:134:TYR:H 4 0.16 (1,24) 1:A:149:LEU:HD12 1:A:134:TYR:H 4 0.16 (1,24) 1:A:149:LEU:HD13 1:A:134:TYR:H 4 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD11 17	(1,37)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:13:ASN:HD21	1	0.16
(1,329) 1:A:79:LEU:H 1:A:89:GLU:H 1 0.16 (1,298) 1:A:14:ARG:H 1:A:17:TYR:H 12 0.16 (1,267) 1:A:21:GLN:H 1:A:24:GLY:H 2 0.16 (1,250) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:25:THR:H 19 0.16 (1,250) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:25:THR:H 19 0.16 (1,250) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:25:THR:H 19 0.16 (1,250) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:25:THR:H 19 0.16 (1,24) 1:A:19:LEU:HD11 1:A:134:TYR:H 1 0.16 (1,24) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:134:TYR:H 1 0.16 (1,24) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:134:TYR:H 4 0.16 (1,24) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:134:TYR:H 4 0.16 (1,24) 1:A:142:LEU:HD12 1:A:134:TYR:H 4 0.16 (1,24) 1:A:142:EU:HD12 1:A:138:LEU:HD11 17 0.16 (1,211) 1:A:441:LEU:HD21 1:A:138:LEU:HD13 17	(1,37)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:13:ASN:HD21	1	0.16
(1,298) 1:A:14:ARG:H 1:A:17:TYR:H 12 0.16 (1,267) 1:A:21:GLN:H 1:A:24:GLY:H 2 0.16 (1,250) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:25:THR:H 19 0.16 (1,250) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:25:THR:H 19 0.16 (1,250) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:25:THR:H 19 0.16 (1,24) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:25:THR:H 19 0.16 (1,24) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:25:THR:H 19 0.16 (1,24) 1:A:19:LEU:HD11 1:A:134:TYR:H 1 0.16 (1,24) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:134:TYR:H 1 0.16 (1,24) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:134:TYR:H 4 0.16 (1,24) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:134:TYR:H 4 0.16 (1,24) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD11 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:138:LEU:HD12 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD13	(1,355)	1:A:67:PHE:H	1:A:114:TYR:H	1	0.16
(1,267) 1:A:21:GLN:H 1:A:24:GLY:H 2 0.16 (1,250) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:25:THR:H 19 0.16 (1,250) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:25:THR:H 19 0.16 (1,250) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:25:THR:H 19 0.16 (1,24) 1:A:19:VAL:HD11 1:A:134:TYR:H 1 0.16 (1,24) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:134:TYR:H 1 0.16 (1,24) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:134:TYR:H 1 0.16 (1,24) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:134:TYR:H 4 0.16 (1,24) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:134:TYR:H 4 0.16 (1,24) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:134:TYR:H 4 0.16 (1,24) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD11 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:138:LEU:HD12 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD13 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD13	(1,329)	1:A:79:LEU:H	1:A:89:GLU:H	1	0.16
(1,250) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:25:THR:H 19 0.16 (1,250) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:25:THR:H 19 0.16 (1,250) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:25:THR:H 19 0.16 (1,24) 1:A:19:LEU:HD11 1:A:134:TYR:H 1 0.16 (1,24) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:134:TYR:H 1 0.16 (1,24) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:134:TYR:H 1 0.16 (1,24) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:134:TYR:H 4 0.16 (1,24) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:134:TYR:H 4 0.16 (1,24) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:134:TYR:H 4 0.16 (1,24) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:134:TYR:H 4 0.16 (1,24) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:134:TYR:H 4 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:138:LEU:HD11 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:138:LEU:HD13 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD13	(1,298)	1:A:14:ARG:H	1:A:17:TYR:H	12	0.16
(1,250) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:25:THR:H 19 0.16 (1,250) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:25:THR:H 19 0.16 (1,24) 1:A:19:LEU:HD11 1:A:134:TYR:H 1 0.16 (1,24) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:134:TYR:H 1 0.16 (1,24) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:134:TYR:H 4 0.16 (1,24) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:134:TYR:H 4 0.16 (1,24) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:134:TYR:H 4 0.16 (1,24) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD11 17 0.16 (1,241) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:138:LEU:HD11 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:138:LEU:HD13 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:138:LEU:HD11 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD11 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD13 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:1	(1,267)	1:A:21:GLN:H	1:A:24:GLY:H	2	0.16
(1,250) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:25:THR:H 19 0.16 (1,24) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:134:TYR:H 1 0.16 (1,24) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:134:TYR:H 1 0.16 (1,24) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:134:TYR:H 1 0.16 (1,24) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:134:TYR:H 4 0.16 (1,24) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:134:TYR:H 4 0.16 (1,24) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:134:TYR:H 4 0.16 (1,24) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD11 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:138:LEU:HD12 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD13 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD11 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD12 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD13 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:	(1,250)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:25:THR:H	19	0.16
(1,24) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:134:TYR:H 1 0.16 (1,24) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:134:TYR:H 1 0.16 (1,24) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:134:TYR:H 1 0.16 (1,24) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:134:TYR:H 4 0.16 (1,24) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:134:TYR:H 4 0.16 (1,24) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:134:TYR:H 4 0.16 (1,24) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD11 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:138:LEU:HD12 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:138:LEU:HD13 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD11 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD12 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD13 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD13 17 0.16 (1,211) 1:A:42:LEU:HD23	(1,250)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:25:THR:H	19	0.16
(1,24) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:134:TYR:H 1 0.16 (1,24) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:134:TYR:H 1 0.16 (1,24) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:134:TYR:H 4 0.16 (1,24) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:134:TYR:H 4 0.16 (1,24) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:134:TYR:H 4 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:138:LEU:HD11 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:138:LEU:HD12 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:138:LEU:HD13 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD11 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD12 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD13 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD13 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD13 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD23	(1,250)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:25:THR:H	19	0.16
(1,24) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:134:TYR:H 1 0.16 (1,24) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:134:TYR:H 1 0.16 (1,24) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:134:TYR:H 4 0.16 (1,24) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:134:TYR:H 4 0.16 (1,24) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:134:TYR:H 4 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:138:LEU:HD11 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:138:LEU:HD12 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:138:LEU:HD13 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD11 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD12 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD13 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD13 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD13 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD23	(1,24)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:134:TYR:H	1	0.16
(1,24) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:134:TYR:H 4 0.16 (1,24) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:134:TYR:H 4 0.16 (1,24) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:134:TYR:H 4 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:138:LEU:HD11 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:138:LEU:HD12 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:138:LEU:HD13 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD11 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD12 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD13 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD13 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD12 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD13 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD13 17 0.16 (1,211) 1:A:412:LEU:HD23	(1,24)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:134:TYR:H	1	0.16
(1,24) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:134:TYR:H 4 0.16 (1,24) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:134:TYR:H 4 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:138:LEU:HD11 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:138:LEU:HD12 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD13 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD11 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD12 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD13 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD13 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD12 17 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H	(1,24)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:134:TYR:H	1	0.16
(1,24) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:134:TYR:H 4 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:138:LEU:HD11 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:138:LEU:HD12 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:138:LEU:HD13 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD11 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD12 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD13 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD11 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD12 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD12 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD13 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD12 17 0.16 (1,11) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:129:LEU:HD23 15 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H </td <td>(1,24)</td> <td>1:A:129:LEU:HD11</td> <td>1:A:134:TYR:H</td> <td>4</td> <td>0.16</td>	(1,24)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:134:TYR:H	4	0.16
(1,211) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:138:LEU:HD11 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:138:LEU:HD12 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:138:LEU:HD13 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD11 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD12 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD13 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD11 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD12 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD13 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD13 17 0.16 (1,11) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD13 17 0.16 (1,11) 1:A:4128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 15 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 15 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H <td>· · /</td> <td>1:A:129:LEU:HD12</td> <td>1:A:134:TYR:H</td> <td>4</td> <td>0.16</td>	· · /	1:A:129:LEU:HD12	1:A:134:TYR:H	4	0.16
(1,211) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:138:LEU:HD12 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:138:LEU:HD13 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD11 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD12 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD13 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD11 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD12 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD12 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD13 17 0.16 (1,162) 1:A:92:SER:H 1:A:196:ASP:H 14 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 15 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 15 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 17 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 17 0.16 (1,11) 1:A:128:L	(1,24)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:134:TYR:H	4	0.16
(1,211) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:138:LEU:HD13 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD11 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD12 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD13 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD11 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD12 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD12 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD13 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD13 17 0.16 (1,162) 1:A:49:SER:H 1:A:129:LEU:HD21 15 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 15 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 15 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 17 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H	(1,211)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:138:LEU:HD11	17	0.16
(1,211) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD11 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD12 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD13 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD11 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD12 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD13 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD13 17 0.16 (1,162) 1:A:92:SER:H 1:A:199:LEU:HD21 15 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 15 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 15 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 17 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 17 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 17 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H <	(1,211)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:138:LEU:HD12	17	0.16
(1,211) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD12 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD13 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD11 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD12 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD13 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD13 17 0.16 (1,162) 1:A:92:SER:H 1:A:96:ASP:H 14 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 15 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 15 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 17 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 17 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 17 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 20 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:	(1,211)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:138:LEU:HD13	17	0.16
(1,211) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD13 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD11 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD12 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD13 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD13 17 0.16 (1,162) 1:A:92:SER:H 1:A:96:ASP:H 14 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 15 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 15 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 17 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 17 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 17 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 20 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 20 0.16 (1,11) 1:A:3128:LYS:H 1:A:12	(1,211)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:138:LEU:HD11	17	0.16
(1,211) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD11 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD12 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD13 17 0.16 (1,162) 1:A:92:SER:H 1:A:96:ASP:H 14 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 15 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 15 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 15 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 17 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 17 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 17 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 20 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 20 0.16 (1,11) 1:A:138:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 20 0.16 (1,87) 1:A:31:ASN:H 1:A:34:TRP:HE1	(1,211)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:138:LEU:HD12	17	0.16
(1,211) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD12 17 0.16 (1,211) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD13 17 0.16 (1,162) 1:A:92:SER:H 1:A:96:ASP:H 14 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 15 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 15 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 15 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 17 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 17 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 17 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 20 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 20 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 20 0.16 (1,11) 1:A:31:ASN:H 1:A:34:TRP:HE1 7 0.15 (1,84) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 19 0.15	(1,211)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:138:LEU:HD13	17	0.16
(1,211) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD13 17 0.16 (1,162) 1:A:92:SER:H 1:A:96:ASP:H 14 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 15 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 15 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 15 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 17 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 17 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 17 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 20 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 20 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 20 0.16 (1,11) 1:A:31:ASN:H 1:A:129:LEU:HD23 20 0.16 (1,87) 1:A:31:ASN:H 1:A:34:TRP:HE1 7 0.15 (1,84) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 19 0.15	(1,211)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:138:LEU:HD11	17	0.16
(1,162) 1:A:92:SER:H 1:A:96:ASP:H 14 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 15 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 15 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 15 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 17 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 17 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 17 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 20 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 20 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 20 0.16 (1,11) 1:A:31:ASN:H 1:A:34:TRP:HE1 7 0.15 (1,84) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 19 0.15 (1,84) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 19 0.15	(1,211)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:138:LEU:HD12	17	0.16
(1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 15 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 15 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 15 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 17 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 17 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 17 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 20 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 20 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 20 0.16 (1,11) 1:A:31:ASN:H 1:A:129:LEU:HD23 20 0.16 (1,87) 1:A:31:ASN:H 1:A:34:TRP:HE1 7 0.15 (1,84) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 19 0.15 (1,84) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 19 0.15	(1,211)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:138:LEU:HD13	17	0.16
(1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 15 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 15 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 17 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 17 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 17 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 20 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 20 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 20 0.16 (1,11) 1:A:31:ASN:H 1:A:34:TRP:HE1 7 0.15 (1,84) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 12 0.15 (1,84) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 19 0.15	(1,162)	1:A:92:SER:H	1:A:96:ASP:H	14	0.16
(1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 15 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 17 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 17 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 17 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 20 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 20 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 20 0.16 (1,87) 1:A:31:ASN:H 1:A:34:TRP:HE1 7 0.15 (1,84) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 12 0.15 (1,84) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 19 0.15	(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD21	15	0.16
(1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 17 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 17 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 17 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 20 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 20 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 20 0.16 (1,87) 1:A:31:ASN:H 1:A:34:TRP:HE1 7 0.15 (1,84) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 12 0.15 (1,84) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 19 0.15	(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD22	15	0.16
(1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 17 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 17 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 20 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 20 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 20 0.16 (1,87) 1:A:31:ASN:H 1:A:34:TRP:HE1 7 0.15 (1,84) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 12 0.15 (1,84) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 19 0.15	(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD23	15	0.16
(1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 17 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 20 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 20 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 20 0.16 (1,87) 1:A:31:ASN:H 1:A:34:TRP:HE1 7 0.15 (1,84) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 12 0.15 (1,84) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 19 0.15	(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD21	17	0.16
(1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 17 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 20 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 20 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 20 0.16 (1,87) 1:A:31:ASN:H 1:A:34:TRP:HE1 7 0.15 (1,84) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 12 0.15 (1,84) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 19 0.15	_ ` '	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD22	17	0.16
(1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 20 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 20 0.16 (1,87) 1:A:31:ASN:H 1:A:34:TRP:HE1 7 0.15 (1,84) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 12 0.15 (1,84) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 19 0.15	_ `	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD23	17	0.16
(1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 20 0.16 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 20 0.16 (1,87) 1:A:31:ASN:H 1:A:34:TRP:HE1 7 0.15 (1,84) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 12 0.15 (1,84) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 19 0.15	(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD21	20	0.16
(1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 20 0.16 (1,87) 1:A:31:ASN:H 1:A:34:TRP:HE1 7 0.15 (1,84) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 12 0.15 (1,84) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 19 0.15	/	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD22	20	0.16
(1,87) 1:A:31:ASN:H 1:A:34:TRP:HE1 7 0.15 (1,84) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 12 0.15 (1,84) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 19 0.15	(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD23	20	0.16
(1,84) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 19 0.15		1:A:31:ASN:H	1:A:34:TRP:HE1	7	0.15
	(1,84)	1:A:10:LYS:H	1:A:12:LEU:H	12	0.15
	(1,84)	1:A:10:LYS:H	1:A:12:LEU:H	19	0.15
1 - 1 - 2 - 2	(1,68)	1:A:34:TRP:H	1:A:36:HIS:H	16	0.15



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,605)	1:A:54:SER:H	1:A:40:GLY:H	3	0.15
(1,572)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:141:PHE:H	12	0.15
(1,572)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:141:PHE:H	12	0.15
(1,572)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:141:PHE:H	12	0.15
(1,57)	1:A:112:LEU:HD11	1:A:113:ARG:H	18	0.15
(1,57)	1:A:112:LEU:HD12	1:A:113:ARG:H	18	0.15
(1,57)	1:A:112:LEU:HD13	1:A:113:ARG:H	18	0.15
(1,562)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD21	3	0.15
(1,562)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD22	3	0.15
(1,562)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD23	3	0.15
(1,562)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD21	12	0.15
(1,562)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD22	12	0.15
(1,562)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD23	12	0.15
(1,550)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG21	6	0.15
(1,550)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG22	6	0.15
(1,550)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG23	6	0.15
(1,550)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG21	15	0.15
(1,550)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG22	15	0.15
(1,550)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG23	15	0.15
(1,549)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD21	7	0.15
(1,549)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD22	7	0.15
(1,549)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD23	7	0.15
(1,544)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:120:ALA:H	16	0.15
(1,544)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:120:ALA:H	16	0.15
(1,544)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:120:ALA:H	16	0.15
(1,536)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:102:VAL:H	17	0.15
(1,536)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:102:VAL:H	17	0.15
(1,536)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:102:VAL:H	17	0.15
(1,53)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD21	6	0.15
(1,53)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD22	6	0.15
(1,53)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD23	6	0.15
(1,526)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:98:HIS:H	7	0.15
(1,526)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:98:HIS:H	7	0.15
(1,526)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:98:HIS:H	7	0.15
(1,513)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:87:ARG:H	5	0.15
(1,513)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:87:ARG:H	5	0.15
(1,513)	1:A:79:LEU:HD13	1:A:87:ARG:H	5	0.15
(1,505)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:76:GLU:H	1	0.15
(1,505)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:76:GLU:H	1	0.15
(1,505)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:76:GLU:H	1	0.15
(1,493)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:52:PHE:H	18	0.15
(1,493)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:52:PHE:H	18	0.15
() - /				d on next nage



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,493)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:52:PHE:H	18	0.15
(1,47)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:115:CYS:H	11	0.15
(1,47)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:115:CYS:H	11	0.15
(1,47)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:115:CYS:H	11	0.15
(1,469)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:24:GLY:H	14	0.15
(1,469)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:24:GLY:H	14	0.15
(1,469)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:24:GLY:H	14	0.15
(1,464)	1:A:16:GLN:H	1:A:46:VAL:HG11	6	0.15
(1,464)	1:A:16:GLN:H	1:A:46:VAL:HG12	6	0.15
(1,464)	1:A:16:GLN:H	1:A:46:VAL:HG13	6	0.15
(1,456)	1:A:9:ILE:H	1:A:12:LEU:HD21	7	0.15
(1,456)	1:A:9:ILE:H	1:A:12:LEU:HD22	7	0.15
(1,456)	1:A:9:ILE:H	1:A:12:LEU:HD23	7	0.15
(1,451)	1:A:75:VAL:HG11	1:A:91:ARG:H	6	0.15
(1,451)	1:A:75:VAL:HG12	1:A:91:ARG:H	6	0.15
(1,451)	1:A:75:VAL:HG13	1:A:91:ARG:H	6	0.15
(1,451)	1:A:75:VAL:HG11	1:A:91:ARG:H	19	0.15
(1,451)	1:A:75:VAL:HG12	1:A:91:ARG:H	19	0.15
(1,451)	1:A:75:VAL:HG13	1:A:91:ARG:H	19	0.15
(1,445)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:113:ARG:H	13	0.15
(1,445)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:113:ARG:H	13	0.15
(1,445)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:113:ARG:H	13	0.15
(1,438)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:120:ALA:H	4	0.15
(1,438)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:120:ALA:H	4	0.15
(1,438)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:120:ALA:H	4	0.15
(1,431)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:103:PHE:H	1	0.15
(1,431)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:103:PHE:H	1	0.15
(1,431)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:103:PHE:H	1	0.15
(1,425)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:119:ALA:H	1	0.15
(1,425)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:119:ALA:H	1	0.15
(1,425)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:119:ALA:H	1	0.15
(1,375)	1:A:131:GLU:H	1:A:133:GLY:H	12	0.15
(1,375)	1:A:131:GLU:H	1:A:133:GLY:H	18	0.15
(1,34)	1:A:104:ASN:HD22	1:A:112:LEU:HD21	16	0.15
(1,34)	1:A:104:ASN:HD22	1:A:112:LEU:HD22	16	0.15
(1,34)	1:A:104:ASN:HD22	1:A:112:LEU:HD23	16	0.15
(1,337)	1:A:76:GLU:H	1:A:91:ARG:H	6	0.15
(1,322)	1:A:54:SER:H	1:A:57:LYS:H	9	0.15
(1,32)	1:A:103:PHE:H	1:A:112:LEU:HD21	17	0.15
(1,32)	1:A:103:PHE:H	1:A:112:LEU:HD22	17	0.15
(1,32)	1:A:103:PHE:H	1:A:112:LEU:HD23	17	0.15
(1,309)	1:A:33:TYR:H	1:A:36:HIS:H	5	0.15



 $Continued\ from\ previous\ page...$

(1,308) 1:A:30:GLN:H 1:A:34:TRP:HE1 13 0.15 (1,283) 1:A:131:GLU:H 1:A:134:TYR:H 16 0.15 (1,267) 1:A:21:GLN:H 1:A:24:GLY:H 8 0.15 (1,266) 1:A:19:VAL:H 1:A:21:GLN:H 9 0.15 (1,266) 1:A:19:VAL:H 1:A:21:GLN:H 17 0.15 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD11 5 0.15 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD12 5 0.15 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD13 5 0.15 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD11 13 0.15 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD12 13 0.15 (1,26) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD12 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD13 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD12 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD13 1	(Å)
(1,267) 1:A:21:GLN:H 1:A:24:GLY:H 8 0.15 (1,266) 1:A:19:VAL:H 1:A:21:GLN:H 9 0.15 (1,266) 1:A:19:VAL:H 1:A:21:GLN:H 17 0.15 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD11 5 0.15 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD12 5 0.15 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD13 5 0.15 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD11 13 0.15 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD12 13 0.15 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD12 13 0.15 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD12 13 0.15 (1,26) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD13 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD13 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD13 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD13 <	
(1,266) 1:A:19:VAL:H 1:A:21:GLN:H 9 0.15 (1,266) 1:A:19:VAL:H 1:A:21:GLN:H 17 0.15 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD11 5 0.15 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD12 5 0.15 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD13 5 0.15 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD11 13 0.15 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD12 13 0.15 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:121:LE:HD13 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD13 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD13 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13	
(1,266) 1:A:19:VAL:H 1:A:21:GLN:H 17 0.15 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD11 5 0.15 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD12 5 0.15 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD13 5 0.15 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD11 13 0.15 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD12 13 0.15 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:121:LE:HD13 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD13 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD13 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13	
(1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD11 5 0.15 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD12 5 0.15 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD13 5 0.15 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD11 13 0.15 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD12 13 0.15 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD13 13 0.15 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD13 13 0.15 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD13 13 0.15 (1,26) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD11 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD13 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD11 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD11 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD1	
(1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD12 5 0.15 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD13 5 0.15 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD11 13 0.15 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD12 13 0.15 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD13 13 0.15 (1,26) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD13 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD12 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD13 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD11 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD12 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD11 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE	
(1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD11 13 0.15 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD11 13 0.15 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD12 13 0.15 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD13 13 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD11 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD12 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD13 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD11 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD12 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD13 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD11 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD13 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71	
(1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD11 13 0.15 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD12 13 0.15 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD13 13 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD11 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD12 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD13 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD11 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD12 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD13 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD11 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD11 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD11 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A	
(1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD12 13 0.15 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD13 13 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD11 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD12 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD13 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD11 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD12 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD13 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD11 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD11 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD13 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD13 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1	
(1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD13 13 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD11 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD12 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD13 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD11 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD12 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD12 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD13 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD11 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD13 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD11 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22	
(1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD11 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD12 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD13 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD11 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD12 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD13 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD11 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD12 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD11 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD13 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD11 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD11 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 <t< td=""><td></td></t<>	
(1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD12 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD13 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD11 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD12 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD11 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD12 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD11 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD13 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD11 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD11 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD11 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 <	
(1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD13 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD11 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD12 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD13 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD11 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD12 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD11 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD13 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD11 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD11 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD11 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23	
(1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD11 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD12 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD13 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD11 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD12 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD11 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD13 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD13 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD13 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD11 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD12 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23	
(1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD11 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD12 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD13 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD11 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD12 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD11 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD13 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD11 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD11 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD11 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD12 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23	
(1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD13 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD11 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD12 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD11 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD13 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD11 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD12 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD13 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD11 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD12 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 18 0.15 (1,247) 1:A:51:LEU:HD23	
(1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD11 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD12 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD11 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD12 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD13 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD11 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD13 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD11 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD12 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD12 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 18 0.15 (1,247) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 18 0.15	
(1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD12 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD11 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD12 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD13 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD11 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD12 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD11 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD12 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD12 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 18 0.15 (1,247) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD13 18 0.15	
(1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 1 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD11 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD12 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD13 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD11 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD12 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD11 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD11 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD12 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 18 0.15 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 4 0.15	
(1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD11 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD12 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD13 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD11 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD12 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD11 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD12 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 18 0.15 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:71:ILE:HD13 4 0.15	
(1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD12 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD13 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD11 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD12 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD13 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD11 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD12 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 18 0.15 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 4 0.15	
(1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD13 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD11 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD12 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD13 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD11 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD12 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 18 0.15 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 4 0.15	
(1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD11 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD12 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD13 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD11 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD12 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 18 0.15 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 4 0.15	
(1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD12 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD13 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD11 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD12 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 18 0.15 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 4 0.15	
(1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD13 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD11 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD12 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 18 0.15 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 4 0.15	
(1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD11 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD12 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 18 0.15 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 4 0.15	
(1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD12 18 0.15 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 18 0.15 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 4 0.15	
(1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 18 0.15 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 4 0.15	
(1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 4 0.15	
(1,247) 1:A:121:LEU:HD12 1:A:122:ARG:H 4 0.15	
(1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 4 0.15	
(1,147) 1:A:130:LYS:H 1:A:134:TYR:H 8 0.15	
(1,115) 1:A:89:GLU:H 1:A:102:VAL:H 2 0.15	
(1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 7 0.15	
(1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 7 0.15	
(1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 7 0.15	
(1,89) 1:A:55:LYS:H 1:A:57:LYS:H 9 0.14	
(1,84) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 11 0.14	
(1,8) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:42:TYR:H 15 0.14	
(1,8) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:42:TYR:H 15 0.14	
(1,8) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:42:TYR:H 15 0.14	



 $Continued\ from\ previous\ page...$

(1,68) 1:A:34:TRP:H 1:A:36:HIS:H 5 0.14 (1,609) 1:A:102:VAL:H 1:A:88:THR:H 17 0.14 (1,608) 1:A:100:GLY:H 1:A:90:VAL:H 14 0.14 (1,600) 1:A:142:ASN:H 1:A:142:ASN:HD21 15 0.14 (1,600) 1:A:142:ASN:H 1:A:142:ASN:HD22 15 0.14 (1,60) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD11 1 0.14 (1,60) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD12 1 0.14 (1,60) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD13 1 0.14 (1,60) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD11 16 0.14 (1,60) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD12 16 0.14 (1,60) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD13 16 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG11 2 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG12 2 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 4<	
(1,608) 1:A:100:GLY:H 1:A:90:VAL:H 14 0.14 (1,600) 1:A:142:ASN:H 1:A:142:ASN:HD21 15 0.14 (1,600) 1:A:142:ASN:H 1:A:142:ASN:HD22 15 0.14 (1,600) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD11 1 0.14 (1,60) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD12 1 0.14 (1,60) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD13 1 0.14 (1,60) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD11 16 0.14 (1,60) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD12 16 0.14 (1,60) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD13 16 0.14 (1,60) 1:A:135:GLU:H 1:A:73:VAL:HG11 2 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG12 2 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 2 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 4 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13	
(1,600) 1:A:142:ASN:H 1:A:142:ASN:HD21 15 0.14 (1,600) 1:A:142:ASN:H 1:A:142:ASN:HD22 15 0.14 (1,600) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD11 1 0.14 (1,600) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD12 1 0.14 (1,600) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD13 1 0.14 (1,600) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD11 16 0.14 (1,600) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD12 16 0.14 (1,600) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD13 16 0.14 (1,500) 1:A:145:GLU:H 1:A:75:VAL:HG11 2 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL	
(1,600) 1:A:142:ASN:H 1:A:142:ASN:HD22 15 0.14 (1,60) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD11 1 0.14 (1,60) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD12 1 0.14 (1,60) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD13 1 0.14 (1,60) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD11 16 0.14 (1,60) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD12 16 0.14 (1,60) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD13 16 0.14 (1,60) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD13 16 0.14 (1,50) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD13 16 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG11 2 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13	
(1,60) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD11 1 0.14 (1,60) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD12 1 0.14 (1,60) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD13 1 0.14 (1,60) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD11 16 0.14 (1,60) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD12 16 0.14 (1,60) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD13 16 0.14 (1,560) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG11 2 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG12 2 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 2 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG12 4 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 4 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 4 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 10 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 1	-
(1,60) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD12 1 0.14 (1,60) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD13 1 0.14 (1,60) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD11 16 0.14 (1,60) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD12 16 0.14 (1,60) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD13 16 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG11 2 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 2 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 2 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG12 4 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 4 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 4 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG12 10 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 10 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 1	
(1,60) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD13 1 0.14 (1,60) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD11 16 0.14 (1,60) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD12 16 0.14 (1,60) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD13 16 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG11 2 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG12 2 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 2 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG11 4 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 4 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG11 10 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG12 10 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 10 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 10 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13	
(1,60) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD11 16 0.14 (1,60) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD12 16 0.14 (1,60) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD13 16 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG11 2 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG12 2 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 2 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG11 4 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG12 4 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 4 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG11 10 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 1	
(1,60) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD12 16 0.14 (1,60) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD13 16 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG11 2 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG12 2 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 2 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG11 4 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG12 4 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 4 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG11 10 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG12 10 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 10 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG11 17 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG12 17 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 17	
(1,60) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD13 16 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG11 2 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG12 2 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 2 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG11 4 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG12 4 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 4 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG11 10 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 10 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 10 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 17 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 17 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 17 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 17<	
(1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG11 2 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG12 2 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 2 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG11 4 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG12 4 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 4 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG11 10 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG12 10 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 10 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG11 17 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG12 17 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 17 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG19 17 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG19 17 </td <td></td>	
(1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG12 2 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 2 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG11 4 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG12 4 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 4 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG11 10 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG12 10 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 10 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG11 17 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG12 17 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 17 0.14 (1,574) 1:A:144:LEU:HD11 1:A:145:GLU:H 9 0.14 (1,574) 1:A:144:LEU:HD12 1:A:145:GLU:H 9 0.14 (1,571) 1:A:140:LEU:HD11 1:A:141:PHE:H <th< td=""><td></td></th<>	
(1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 2 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG11 4 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG12 4 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 4 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG11 10 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG12 10 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 10 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG11 17 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG12 17 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 17 0.14 (1,574) 1:A:144:LEU:HD11 1:A:145:GLU:H 9 0.14 (1,574) 1:A:144:LEU:HD12 1:A:145:GLU:H 9 0.14 (1,574) 1:A:140:LEU:HD13 1:A:141:PHE:H 17 0.14 (1,571) 1:A:140:LEU:HD12 1:A:141:PHE:H	
(1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG11 4 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG12 4 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 4 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG11 10 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG12 10 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 10 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG11 17 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG12 17 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 17 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 17 0.14 (1,574) 1:A:144:LEU:HD11 1:A:145:GLU:H 9 0.14 (1,574) 1:A:144:LEU:HD13 1:A:145:GLU:H 9 0.14 (1,574) 1:A:140:LEU:HD11 1:A:141:PHE:H 17 0.14 (1,571) 1:A:140:LEU:HD12 1:A:141:PHE:H	
(1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG11 4 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG12 4 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 4 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG11 10 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG12 10 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 10 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG11 17 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG12 17 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 17 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 17 0.14 (1,574) 1:A:144:LEU:HD11 1:A:145:GLU:H 9 0.14 (1,574) 1:A:144:LEU:HD13 1:A:145:GLU:H 9 0.14 (1,571) 1:A:140:LEU:HD11 1:A:141:PHE:H 17 0.14 (1,571) 1:A:140:LEU:HD12 1:A:141:PHE:H	
(1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 4 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG11 10 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG12 10 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 10 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG11 17 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG12 17 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 17 0.14 (1,585) 1:A:144:LEU:HD11 1:A:145:GLU:H 9 0.14 (1,574) 1:A:144:LEU:HD12 1:A:145:GLU:H 9 0.14 (1,574) 1:A:144:LEU:HD13 1:A:145:GLU:H 9 0.14 (1,574) 1:A:140:LEU:HD11 1:A:141:PHE:H 17 0.14 (1,571) 1:A:140:LEU:HD12 1:A:141:PHE:H 17 0.14	
(1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG11 10 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG12 10 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 10 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG11 17 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG12 17 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 17 0.14 (1,574) 1:A:144:LEU:HD11 1:A:145:GLU:H 9 0.14 (1,574) 1:A:144:LEU:HD12 1:A:145:GLU:H 9 0.14 (1,574) 1:A:144:LEU:HD13 1:A:145:GLU:H 9 0.14 (1,571) 1:A:140:LEU:HD11 1:A:141:PHE:H 17 0.14 (1,571) 1:A:140:LEU:HD12 1:A:141:PHE:H 17 0.14	-
(1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG12 10 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 10 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG11 17 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG12 17 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 17 0.14 (1,574) 1:A:144:LEU:HD11 1:A:145:GLU:H 9 0.14 (1,574) 1:A:144:LEU:HD12 1:A:145:GLU:H 9 0.14 (1,574) 1:A:144:LEU:HD13 1:A:145:GLU:H 9 0.14 (1,574) 1:A:140:LEU:HD11 1:A:141:PHE:H 17 0.14 (1,571) 1:A:140:LEU:HD12 1:A:141:PHE:H 17 0.14	
(1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 10 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG11 17 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG12 17 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 17 0.14 (1,574) 1:A:144:LEU:HD11 1:A:145:GLU:H 9 0.14 (1,574) 1:A:144:LEU:HD12 1:A:145:GLU:H 9 0.14 (1,574) 1:A:144:LEU:HD13 1:A:145:GLU:H 9 0.14 (1,574) 1:A:140:LEU:HD11 1:A:141:PHE:H 17 0.14 (1,571) 1:A:140:LEU:HD12 1:A:141:PHE:H 17 0.14	
(1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG11 17 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG12 17 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 17 0.14 (1,574) 1:A:144:LEU:HD11 1:A:145:GLU:H 9 0.14 (1,574) 1:A:144:LEU:HD12 1:A:145:GLU:H 9 0.14 (1,574) 1:A:144:LEU:HD13 1:A:145:GLU:H 9 0.14 (1,571) 1:A:140:LEU:HD11 1:A:141:PHE:H 17 0.14 (1,571) 1:A:140:LEU:HD12 1:A:141:PHE:H 17 0.14	
(1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG12 17 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 17 0.14 (1,574) 1:A:144:LEU:HD11 1:A:145:GLU:H 9 0.14 (1,574) 1:A:144:LEU:HD12 1:A:145:GLU:H 9 0.14 (1,574) 1:A:144:LEU:HD13 1:A:145:GLU:H 9 0.14 (1,574) 1:A:140:LEU:HD11 1:A:141:PHE:H 17 0.14 (1,571) 1:A:140:LEU:HD12 1:A:141:PHE:H 17 0.14	
(1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 17 0.14 (1,574) 1:A:144:LEU:HD11 1:A:145:GLU:H 9 0.14 (1,574) 1:A:144:LEU:HD12 1:A:145:GLU:H 9 0.14 (1,574) 1:A:144:LEU:HD13 1:A:145:GLU:H 9 0.14 (1,571) 1:A:140:LEU:HD11 1:A:141:PHE:H 17 0.14 (1,571) 1:A:140:LEU:HD12 1:A:141:PHE:H 17 0.14	
(1,574) 1:A:144:LEU:HD11 1:A:145:GLU:H 9 0.14 (1,574) 1:A:144:LEU:HD12 1:A:145:GLU:H 9 0.14 (1,574) 1:A:144:LEU:HD13 1:A:145:GLU:H 9 0.14 (1,574) 1:A:140:LEU:HD11 1:A:141:PHE:H 17 0.14 (1,571) 1:A:140:LEU:HD12 1:A:141:PHE:H 17 0.14	
(1,574) 1:A:144:LEU:HD12 1:A:145:GLU:H 9 0.14 (1,574) 1:A:144:LEU:HD13 1:A:145:GLU:H 9 0.14 (1,571) 1:A:140:LEU:HD11 1:A:141:PHE:H 17 0.14 (1,571) 1:A:140:LEU:HD12 1:A:141:PHE:H 17 0.14	
(1,574) 1:A:144:LEU:HD13 1:A:145:GLU:H 9 0.14 (1,571) 1:A:140:LEU:HD11 1:A:141:PHE:H 17 0.14 (1,571) 1:A:140:LEU:HD12 1:A:141:PHE:H 17 0.14	
(1,571) 1:A:140:LEU:HD11 1:A:141:PHE:H 17 0.14 (1,571) 1:A:140:LEU:HD12 1:A:141:PHE:H 17 0.14	
(1,571) 1:A:140:LEU:HD11 1:A:141:PHE:H 17 0.14 (1,571) 1:A:140:LEU:HD12 1:A:141:PHE:H 17 0.14	
(1,571) 1:A:140:LEU:HD13 1:A:141:PHE:H 17 0.14	
1 \	
(1,571) 1:A:140:LEU:HD11 1:A:141:PHE:H 20 0.14	
(1,571) 1:A:140:LEU:HD12 1:A:141:PHE:H 20 0.14	
(1,571) 1:A:140:LEU:HD13 1:A:141:PHE:H 20 0.14	
(1,565) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:H 11 0.14	-
(1,565) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:H 11 0.14	
(1,565) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:H 11 0.14	
(1,558) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:132:GLU:H 10 0.14	
(1,558) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:132:GLU:H 10 0.14	
(1,558) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:132:GLU:H 10 0.14	
(1,556) 1:A:129:LEU:H 1:A:138:LEU:HD11 4 0.14	
(1,556) 1:A:129:LEU:H 1:A:138:LEU:HD12 4 0.14	
(1,556) 1:A:129:LEU:H 1:A:138:LEU:HD13 4 0.14	
(1,549) 1:A:130:LYS:H 1:A:138:LEU:HD21 1 0.14	



 $Continued\ from\ previous\ page...$

(1.540)		Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,549)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD22	1	0.14
(1,549)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD23	1	0.14
(1,53)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD21	19	0.14
(1,53)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD22	19	0.14
(1,53)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD23	19	0.14
(1,526)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:98:HIS:H	11	0.14
(1,526)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:98:HIS:H	11	0.14
(1,526)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:98:HIS:H	11	0.14
(1,505)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:76:GLU:H	19	0.14
(1,505)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:76:GLU:H	19	0.14
(1,505)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:76:GLU:H	19	0.14
(1,503)	1:A:76:GLU:H	1:A:99:LEU:HD21	4	0.14
(1,503)	1:A:76:GLU:H	1:A:99:LEU:HD22	4	0.14
(1,503)	1:A:76:GLU:H	1:A:99:LEU:HD23	4	0.14
(1,493)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:52:PHE:H	13	0.14
(1,493)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:52:PHE:H	13	0.14
(1,493)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:52:PHE:H	13	0.14
(1,488)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:51:LEU:H	2	0.14
(1,488)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:51:LEU:H	2	0.14
(1,488)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:51:LEU:H	2	0.14
(1,473)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD11	19	0.14
(1,473)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD12	19	0.14
(1,473)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD13	19	0.14
(1,469)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:24:GLY:H	3	0.14
(1,469)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:24:GLY:H	3	0.14
(1,469)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:24:GLY:H	3	0.14
(1,469)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:24:GLY:H	4	0.14
(1,469)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:24:GLY:H	4	0.14
(1,469)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:24:GLY:H	4	0.14
(1,468)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:23:ASN:H	3	0.14
(1,468)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:23:ASN:H	3	0.14
(1,468)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:23:ASN:H	3	0.14
(1,468)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:23:ASN:H	6	0.14
(1,468)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:23:ASN:H	6	0.14
(1,468)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:23:ASN:H	6	0.14
(1,464)	1:A:16:GLN:H	1:A:46:VAL:HG11	12	0.14
(1,464)	1:A:16:GLN:H	1:A:46:VAL:HG12	12	0.14
(1,464)	1:A:16:GLN:H	1:A:46:VAL:HG13	12	0.14
(1,462)	1:A:45:ILE:HD11	1:A:46:VAL:H	11	0.14
(1,462)	1:A:45:ILE:HD12	1:A:46:VAL:H	11	0.14
(1,462)	1:A:45:ILE:HD13	1:A:46:VAL:H	11	0.14
(1,454)	1:A:134:TYR:H	1:A:138:LEU:HD21	5	0.14



 $Continued\ from\ previous\ page...$

(1,454) 1:A:134:TYR:H 1:A:138:LEU:HD22 5 0.14 (1,454) 1:A:134:TYR:H 1:A:138:LEU:HD23 5 0.14 (1,45) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD11 7 0.14 (1,45) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD12 7 0.14 (1,45) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD13 7 0.14 (1,45) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD11 12 0.14 (1,45) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD12 12 0.14 (1,45) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD13 12 0.14 (1,45) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD13 12 0.14 (1,442) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG11 10 0.14 (1,442) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG13 10 0.14 (1,442) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG13 10 0.14 (1,440) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:100:GLY:H 4 0.14 (1,440) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:100:GLY:H 5 <th>Key</th> <th>Atom-1</th> <th>Atom-2</th> <th>Model</th> <th>Violation (Å)</th>	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,45) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD11 7 0.14 (1,45) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD12 7 0.14 (1,45) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD13 7 0.14 (1,45) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD11 12 0.14 (1,45) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD13 12 0.14 (1,45) 1:A:79:LEU:H 1:A:75:VAL:HG11 10 0.14 (1,442) 1:A:71:LE:H 1:A:75:VAL:HG12 10 0.14 (1,440) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:100:GLY:H 4 0.14 (1,440) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:100:GLY:H 5 0.14 (1,440) 1:A:90:VAL:HG21 1:A:120:ALA:H 14	(1,454)	1:A:134:TYR:H	1:A:138:LEU:HD22	5	0.14
(1,45) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD12 7 0.14 (1,45) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD13 7 0.14 (1,45) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD11 12 0.14 (1,45) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD12 12 0.14 (1,45) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD13 12 0.14 (1,45) 1:A:79:LEU:H 1:A:75:VAL:HG11 10 0.14 (1,442) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG13 10 0.14 (1,442) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG13 10 0.14 (1,440) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:100:GLY:H 4 0.14 (1,440) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:100:GLY:H 4 0.14 (1,440) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:100:GLY:H 5 0.14 (1,440) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:100:GLY:H 5 0.14 (1,440) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:100:GLY:H 5 0.14 (1,440) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:120:ALA:H 1 <td>(1,454)</td> <td>1:A:134:TYR:H</td> <td>1:A:138:LEU:HD23</td> <td>5</td> <td>0.14</td>	(1,454)	1:A:134:TYR:H	1:A:138:LEU:HD23	5	0.14
(1,45) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD13 7 0.14 (1,45) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD11 12 0.14 (1,45) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD12 12 0.14 (1,45) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD13 12 0.14 (1,442) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG11 10 0.14 (1,442) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG12 10 0.14 (1,442) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG13 10 0.14 (1,442) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG13 10 0.14 (1,440) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:100:GLY:H 4 0.14 (1,440) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:100:GLY:H 4 0.14 (1,440) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:100:GLY:H 5 0.14 (1,440) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:100:GLY:H 5 0.14 (1,440) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:120:ALA:H 14 0.14 (1,438) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:120:ALA:H 1	(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD11	7	0.14
(1,45) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD11 12 0.14 (1,45) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD12 12 0.14 (1,45) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD13 12 0.14 (1,442) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG11 10 0.14 (1,442) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG11 10 0.14 (1,442) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG13 10 0.14 (1,442) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG13 10 0.14 (1,440) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:100:GLY:H 4 0.14 (1,440) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:100:GLY:H 4 0.14 (1,440) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:100:GLY:H 4 0.14 (1,440) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:100:GLY:H 5 0.14 (1,438) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:120:ALA:H 14 0.14 (1,438) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:120:ALA:H 14 0.14 (1,438) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:120:ALA:H 14 0.14 (1,438) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:120:ALA:H 14 0.14 (1,438) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:120:ALA:H 16 0.14 (1,430) 1:A:46:VAL:HG11 1:A:47:SER:H 17 0.14 (1,430) 1:A:46:VAL:HG12 1:A:120:ALA:H 16 0.14 (1,430) 1:A:46:VAL:HG13 1:A:120:ALA:H 16 0.14 (1,430) 1:A:46:VAL:HG13 1:A:120:ALA:H 16 0.14 (1,449) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD21 4 0.14 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD22 4 0.14 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD21 20 0.14 (1,410) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD21 20 0.14 (1,410) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD21 20 0.14 (1,410) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD21 20 0.14 (1,416) 1:A:86:ILE:H 1:A:86:ILE:HD11 9 0.1	(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD12	7	0.14
(1,45) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD12 12 0.14 (1,45) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD13 12 0.14 (1,442) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG11 10 0.14 (1,442) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG12 10 0.14 (1,442) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG13 10 0.14 (1,440) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:100:GLY:H 4 0.14 (1,440) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:100:GLY:H 4 0.14 (1,440) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:100:GLY:H 5 0.14 (1,440) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:100:GLY:H 5 0.14 (1,440) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:100:GLY:H 5 0.14 (1,440) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:100:GLY:H 5 0.14 (1,440) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:100:GLY:H 5 0.14 (1,440) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:100:GLY:H 5 0.14 (1,438) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:120:ALA:H <th< td=""><td>(1,45)</td><td>1:A:79:LEU:H</td><td>1:A:79:LEU:HD13</td><td>7</td><td>0.14</td></th<>	(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD13	7	0.14
(1,45) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD13 12 0.14 (1,442) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG11 10 0.14 (1,442) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG12 10 0.14 (1,442) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG13 10 0.14 (1,440) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:100:GLY:H 4 0.14 (1,440) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:100:GLY:H 4 0.14 (1,440) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:100:GLY:H 5 0.14 (1,440) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:100:GLY:H 5 0.14 (1,440) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:100:GLY:H 5 0.14 (1,440) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:100:GLY:H 5 0.14 (1,430) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:100:GLY:H 5 0.14 (1,438) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:120:ALA:H 14 0.14 (1,438) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:120:ALA:H 16 0.14 (1,438) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:120:ALA:H	(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD11	12	0.14
(1,442) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG11 10 0.14 (1,442) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG12 10 0.14 (1,442) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG13 10 0.14 (1,440) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:100:GLY:H 4 0.14 (1,440) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:100:GLY:H 4 0.14 (1,440) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:100:GLY:H 5 0.14 (1,440) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:100:GLY:H 5 0.14 (1,440) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:100:GLY:H 5 0.14 (1,440) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:100:GLY:H 5 0.14 (1,438) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:120:ALA:H 14 0.14 (1,438) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:120:ALA:H 14 0.14 (1,438) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:120:ALA:H 16 0.14 (1,438) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:120:ALA:H 16 0.14 (1,438) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:120:ALA:H	(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD12	12	0.14
(1,442) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG12 10 0.14 (1,442) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG13 10 0.14 (1,440) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:100:GLY:H 4 0.14 (1,440) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:100:GLY:H 4 0.14 (1,440) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:100:GLY:H 4 0.14 (1,440) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:100:GLY:H 5 0.14 (1,440) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:100:GLY:H 5 0.14 (1,440) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:100:GLY:H 5 0.14 (1,440) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:120:ALA:H 14 0.14 (1,438) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:120:ALA:H 14 0.14 (1,438) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:120:ALA:H 14 0.14 (1,438) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:120:ALA:H 16 0.14 (1,438) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:120:ALA:H 16 0.14 (1,438) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:120:ALA:H	(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD13	12	0.14
(1,442) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG13 10 0.14 (1,440) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:100:GLY:H 4 0.14 (1,440) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:100:GLY:H 4 0.14 (1,440) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:100:GLY:H 4 0.14 (1,440) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:100:GLY:H 5 0.14 (1,440) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:100:GLY:H 5 0.14 (1,440) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:120:ALA:H 14 0.14 (1,438) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:120:ALA:H 14 0.14 (1,438) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:120:ALA:H 16 0.14 (1,438) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:120:ALA:H 16 0.14 (1,438) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:120:ALA:H	(1,442)	1:A:71:ILE:H	1:A:75:VAL:HG11	10	0.14
(1,440) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:100:GLY:H 4 0.14 (1,440) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:100:GLY:H 4 0.14 (1,440) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:100:GLY:H 4 0.14 (1,440) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:100:GLY:H 5 0.14 (1,440) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:100:GLY:H 5 0.14 (1,440) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:100:GLY:H 5 0.14 (1,440) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:120:ALA:H 14 0.14 (1,438) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:120:ALA:H 14 0.14 (1,438) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:120:ALA:H 16 0.14 (1,438) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:120:ALA:H 16 0.14 (1,438) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:120:ALA:H 16 0.14 (1,438) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:120:ALA:H 16 0.14 (1,438) 1:A:46:VAL:HG11 1:A:47:SER:H 17 0.14 (1,430) 1:A:46:VAL:HG13 1:A:47:SER:H	(1,442)	1:A:71:ILE:H	1:A:75:VAL:HG12	10	0.14
(1,440) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:100:GLY:H 4 0.14 (1,440) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:100:GLY:H 4 0.14 (1,440) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:100:GLY:H 4 0.14 (1,440) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:100:GLY:H 5 0.14 (1,440) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:100:GLY:H 5 0.14 (1,440) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:100:GLY:H 5 0.14 (1,440) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:120:ALA:H 14 0.14 (1,438) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:120:ALA:H 14 0.14 (1,438) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:120:ALA:H 16 0.14 (1,438) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:120:ALA:H 16 0.14 (1,438) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:120:ALA:H 16 0.14 (1,438) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:120:ALA:H 16 0.14 (1,438) 1:A:46:VAL:HG11 1:A:47:SER:H 17 0.14 (1,430) 1:A:46:VAL:HG13 1:A:47:SER:H	(1,442)	1:A:71:ILE:H	1:A:75:VAL:HG13	10	0.14
(1,440) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:100:GLY:H 4 0.14 (1,440) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:100:GLY:H 5 0.14 (1,440) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:100:GLY:H 5 0.14 (1,440) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:100:GLY:H 5 0.14 (1,448) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:120:ALA:H 14 0.14 (1,438) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:120:ALA:H 14 0.14 (1,438) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:120:ALA:H 14 0.14 (1,438) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:120:ALA:H 16 0.14 (1,438) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:120:ALA:H 16 0.14 (1,438) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:120:ALA:H 16 0.14 (1,438) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:120:ALA:H 16 0.14 (1,438) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:120:ALA:H 16 0.14 (1,438) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:120:ALA:H 16 0.14 (1,430) 1:A:46:VAL:HG13 1:A:120:ALA:H		1:A:90:VAL:HG11	1:A:100:GLY:H	4	0.14
(1,440) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:100:GLY:H 5 0.14 (1,440) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:100:GLY:H 5 0.14 (1,440) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:100:GLY:H 5 0.14 (1,448) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:120:ALA:H 14 0.14 (1,438) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:120:ALA:H 14 0.14 (1,438) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:120:ALA:H 16 0.14 (1,438) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:120:ALA:H 16 0.14 (1,438) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:120:ALA:H 16 0.14 (1,438) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:120:ALA:H 16 0.14 (1,438) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:120:ALA:H 16 0.14 (1,438) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:120:ALA:H 16 0.14 (1,438) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:120:ALA:H 16 0.14 (1,439) 1:A:46:VAL:HG11 1:A:47:SER:H 17 0.14 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD21	(1,440)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:100:GLY:H	4	0.14
(1,440) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:100:GLY:H 5 0.14 (1,440) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:100:GLY:H 5 0.14 (1,440) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:100:GLY:H 5 0.14 (1,438) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:120:ALA:H 14 0.14 (1,438) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:120:ALA:H 14 0.14 (1,438) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:120:ALA:H 16 0.14 (1,438) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:120:ALA:H 16 0.14 (1,438) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:120:ALA:H 16 0.14 (1,438) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:120:ALA:H 16 0.14 (1,438) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:120:ALA:H 16 0.14 (1,438) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:120:ALA:H 16 0.14 (1,438) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:120:ALA:H 17 0.14 (1,430) 1:A:46:VAL:HG11 1:A:47:SER:H 17 0.14 (1,430) 1:A:46:VAL:HG12 1:A:47:SER:H	(1,440)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:100:GLY:H	4	0.14
(1,440) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:100:GLY:H 5 0.14 (1,438) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:120:ALA:H 14 0.14 (1,438) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:120:ALA:H 14 0.14 (1,438) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:120:ALA:H 16 0.14 (1,438) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:120:ALA:H 16 0.14 (1,438) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:120:ALA:H 16 0.14 (1,430) 1:A:46:VAL:HG11 1:A:47:SER:H 17 0.14 (1,430) 1:A:46:VAL:HG12 1:A:47:SER:H 17 0.14 (1,430) 1:A:46:VAL:HG13 1:A:47:SER:H 17 0.14 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD21 4 0.14 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD23	(1,440)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:100:GLY:H	5	0.14
(1,438) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:120:ALA:H 14 0.14 (1,438) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:120:ALA:H 14 0.14 (1,438) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:120:ALA:H 14 0.14 (1,438) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:120:ALA:H 16 0.14 (1,438) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:120:ALA:H 16 0.14 (1,438) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:120:ALA:H 16 0.14 (1,438) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:120:ALA:H 16 0.14 (1,430) 1:A:46:VAL:HG11 1:A:47:SER:H 17 0.14 (1,430) 1:A:46:VAL:HG12 1:A:47:SER:H 17 0.14 (1,430) 1:A:46:VAL:HG13 1:A:47:SER:H 17 0.14 (1,430) 1:A:46:VAL:HG13 1:A:47:SER:H 17 0.14 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD21 4 0.14 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD23 4 0.14 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD23	(1,440)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:100:GLY:H	5	0.14
(1,438) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:120:ALA:H 14 0.14 (1,438) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:120:ALA:H 14 0.14 (1,438) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:120:ALA:H 16 0.14 (1,438) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:120:ALA:H 16 0.14 (1,438) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:120:ALA:H 16 0.14 (1,438) 1:A:49:VAL:HG23 1:A:47:SER:H 17 0.14 (1,430) 1:A:46:VAL:HG13 1:A:47:SER:H 17 0.14 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD21 4 0.14 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD23 4 0.14 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD23	(1,440)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:100:GLY:H	5	0.14
(1,438) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:120:ALA:H 14 0.14 (1,438) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:120:ALA:H 16 0.14 (1,438) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:120:ALA:H 16 0.14 (1,438) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:120:ALA:H 16 0.14 (1,430) 1:A:46:VAL:HG11 1:A:47:SER:H 17 0.14 (1,430) 1:A:46:VAL:HG12 1:A:47:SER:H 17 0.14 (1,430) 1:A:46:VAL:HG13 1:A:47:SER:H 17 0.14 (1,430) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD21 4 0.14 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD22 4 0.14 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD23 4 0.14 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD22 20 0.14 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD23 20 0.14 (1,416) 1:A:86:ILE:H 1:A:86:ILE:HD11 4 0.14 (1,416) 1:A:86:ILE:H 1:A:86:ILE:HD11	(1,438)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:120:ALA:H	14	0.14
(1,438) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:120:ALA:H 16 0.14 (1,438) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:120:ALA:H 16 0.14 (1,438) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:120:ALA:H 16 0.14 (1,430) 1:A:46:VAL:HG11 1:A:47:SER:H 17 0.14 (1,430) 1:A:46:VAL:HG12 1:A:47:SER:H 17 0.14 (1,430) 1:A:46:VAL:HG13 1:A:47:SER:H 17 0.14 (1,430) 1:A:46:VAL:HG13 1:A:47:SER:H 17 0.14 (1,430) 1:A:46:VAL:HG13 1:A:47:SER:H 17 0.14 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD21 4 0.14 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD23 4 0.14 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD21 20 0.14 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD22 20 0.14 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:86:ILE:HD12 20 0.14 (1,416) 1:A:86:ILE:H 1:A:86:ILE:HD11	(1,438)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:120:ALA:H	14	0.14
(1,438) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:120:ALA:H 16 0.14 (1,438) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:120:ALA:H 16 0.14 (1,430) 1:A:46:VAL:HG11 1:A:47:SER:H 17 0.14 (1,430) 1:A:46:VAL:HG12 1:A:47:SER:H 17 0.14 (1,430) 1:A:46:VAL:HG13 1:A:47:SER:H 17 0.14 (1,430) 1:A:120:ALA:H 1:A:47:SER:H 17 0.14 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD21 4 0.14 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD22 4 0.14 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD21 20 0.14 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD22 20 0.14 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD22 20 0.14 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD23 20 0.14 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:6:ILE:HD12 20 0.14 (1,416) 1:A:86:ILE:H 1:A:86:ILE:HD11	(1,438)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:120:ALA:H	14	0.14
(1,438) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:120:ALA:H 16 0.14 (1,430) 1:A:46:VAL:HG11 1:A:47:SER:H 17 0.14 (1,430) 1:A:46:VAL:HG12 1:A:47:SER:H 17 0.14 (1,430) 1:A:46:VAL:HG13 1:A:47:SER:H 17 0.14 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD21 4 0.14 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD22 4 0.14 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD23 4 0.14 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD21 20 0.14 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD22 20 0.14 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD22 20 0.14 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD22 20 0.14 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD23 20 0.14 (1,410) 1:A:86:ILE:H 1:A:86:ILE:HD11 4 0.14 (1,416) 1:A:86:ILE:H 1:A:86:ILE:HD13 <td>(1,438)</td> <td>1:A:19:VAL:HG21</td> <td>1:A:120:ALA:H</td> <td>16</td> <td>0.14</td>	(1,438)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:120:ALA:H	16	0.14
(1,430) 1:A:46:VAL:HG11 1:A:47:SER:H 17 0.14 (1,430) 1:A:46:VAL:HG12 1:A:47:SER:H 17 0.14 (1,430) 1:A:46:VAL:HG13 1:A:47:SER:H 17 0.14 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD21 4 0.14 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD22 4 0.14 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD23 4 0.14 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD22 20 0.14 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD22 20 0.14 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD23 20 0.14 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD23 20 0.14 (1,416) 1:A:86:ILE:H 1:A:86:ILE:HD11 4 0.14 (1,416) 1:A:86:ILE:H 1:A:86:ILE:HD12 4 0.14 (1,416) 1:A:86:ILE:H 1:A:86:ILE:HD11 9 0.14 (1,416) 1:A:86:ILE:H 1:A:86:ILE:HD12	(1,438)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:120:ALA:H	16	0.14
(1,430) 1:A:46:VAL:HG12 1:A:47:SER:H 17 0.14 (1,430) 1:A:46:VAL:HG13 1:A:47:SER:H 17 0.14 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD21 4 0.14 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD22 4 0.14 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD23 4 0.14 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD21 20 0.14 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD22 20 0.14 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD23 20 0.14 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD23 20 0.14 (1,416) 1:A:86:ILE:H 1:A:86:ILE:HD11 4 0.14 (1,416) 1:A:86:ILE:H 1:A:86:ILE:HD12 4 0.14 (1,416) 1:A:86:ILE:H 1:A:86:ILE:HD11 9 0.14 (1,416) 1:A:86:ILE:H 1:A:86:ILE:HD12 9 0.14 (1,416) 1:A:86:ILE:H 1:A:86:ILE:HD13	(1,438)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:120:ALA:H	16	0.14
(1,430) 1:A:46:VAL:HG13 1:A:47:SER:H 17 0.14 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD21 4 0.14 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD22 4 0.14 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD23 4 0.14 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD21 20 0.14 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD22 20 0.14 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD23 20 0.14 (1,419) 1:A:86:ILE:H 1:A:86:ILE:HD13 20 0.14 (1,416) 1:A:86:ILE:H 1:A:86:ILE:HD11 4 0.14 (1,416) 1:A:86:ILE:H 1:A:86:ILE:HD13 4 0.14 (1,416) 1:A:86:ILE:H 1:A:86:ILE:HD11 9 0.14 (1,416) 1:A:86:ILE:H 1:A:86:ILE:HD12 9 0.14 (1,416) 1:A:86:ILE:H 1:A:86:ILE:HD13 9 0.14 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD21	(1,430)	1:A:46:VAL:HG11	1:A:47:SER:H	17	0.14
(1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD21 4 0.14 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD22 4 0.14 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD23 4 0.14 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD21 20 0.14 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD22 20 0.14 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD23 20 0.14 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:86:ILE:HD13 20 0.14 (1,416) 1:A:86:ILE:H 1:A:86:ILE:HD11 4 0.14 (1,416) 1:A:86:ILE:H 1:A:86:ILE:HD13 4 0.14 (1,416) 1:A:86:ILE:H 1:A:86:ILE:HD11 9 0.14 (1,416) 1:A:86:ILE:H 1:A:86:ILE:HD12 9 0.14 (1,416) 1:A:86:ILE:H 1:A:86:ILE:HD13 9 0.14 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD21 17 0.14 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD23<	(1,430)	1:A:46:VAL:HG12	1:A:47:SER:H	17	0.14
(1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD22 4 0.14 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD23 4 0.14 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD21 20 0.14 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD22 20 0.14 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD23 20 0.14 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD23 20 0.14 (1,416) 1:A:86:ILE:H 1:A:86:ILE:HD11 4 0.14 (1,416) 1:A:86:ILE:H 1:A:86:ILE:HD12 4 0.14 (1,416) 1:A:86:ILE:H 1:A:86:ILE:HD11 9 0.14 (1,416) 1:A:86:ILE:H 1:A:86:ILE:HD12 9 0.14 (1,416) 1:A:86:ILE:H 1:A:86:ILE:HD13 9 0.14 (1,416) 1:A:86:ILE:H 1:A:138:LEU:HD21 17 0.14 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22 17 0.14 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD23	(1,430)	1:A:46:VAL:HG13	1:A:47:SER:H	17	0.14
(1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD23 4 0.14 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD21 20 0.14 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD22 20 0.14 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD23 20 0.14 (1,416) 1:A:86:ILE:H 1:A:86:ILE:HD11 4 0.14 (1,416) 1:A:86:ILE:H 1:A:86:ILE:HD12 4 0.14 (1,416) 1:A:86:ILE:H 1:A:86:ILE:HD13 4 0.14 (1,416) 1:A:86:ILE:H 1:A:86:ILE:HD11 9 0.14 (1,416) 1:A:86:ILE:H 1:A:86:ILE:HD12 9 0.14 (1,416) 1:A:86:ILE:H 1:A:86:ILE:HD13 9 0.14 (1,416) 1:A:86:ILE:H 1:A:86:ILE:HD13 9 0.14 (1,416) 1:A:86:ILE:H 1:A:138:LEU:HD21 17 0.14 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22 17 0.14 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD23 17 0.14	(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD21	4	0.14
(1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD21 20 0.14 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD22 20 0.14 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD23 20 0.14 (1,416) 1:A:86:ILE:H 1:A:86:ILE:HD11 4 0.14 (1,416) 1:A:86:ILE:H 1:A:86:ILE:HD12 4 0.14 (1,416) 1:A:86:ILE:H 1:A:86:ILE:HD13 4 0.14 (1,416) 1:A:86:ILE:H 1:A:86:ILE:HD11 9 0.14 (1,416) 1:A:86:ILE:H 1:A:86:ILE:HD12 9 0.14 (1,416) 1:A:86:ILE:H 1:A:86:ILE:HD13 9 0.14 (1,416) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD21 17 0.14 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22 17 0.14 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD23 17 0.14 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD23 17 0.14	(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD22	4	0.14
(1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD22 20 0.14 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD23 20 0.14 (1,416) 1:A:86:ILE:H 1:A:86:ILE:HD11 4 0.14 (1,416) 1:A:86:ILE:H 1:A:86:ILE:HD12 4 0.14 (1,416) 1:A:86:ILE:H 1:A:86:ILE:HD13 4 0.14 (1,416) 1:A:86:ILE:H 1:A:86:ILE:HD11 9 0.14 (1,416) 1:A:86:ILE:H 1:A:86:ILE:HD12 9 0.14 (1,416) 1:A:86:ILE:H 1:A:86:ILE:HD13 9 0.14 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD21 17 0.14 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22 17 0.14 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD23 17 0.14	(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD23	4	0.14
(1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD23 20 0.14 (1,416) 1:A:86:ILE:H 1:A:86:ILE:HD11 4 0.14 (1,416) 1:A:86:ILE:H 1:A:86:ILE:HD12 4 0.14 (1,416) 1:A:86:ILE:H 1:A:86:ILE:HD13 4 0.14 (1,416) 1:A:86:ILE:H 1:A:86:ILE:HD11 9 0.14 (1,416) 1:A:86:ILE:H 1:A:86:ILE:HD12 9 0.14 (1,416) 1:A:86:ILE:H 1:A:86:ILE:HD13 9 0.14 (1,416) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD21 17 0.14 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22 17 0.14 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD23 17 0.14	(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD21	20	0.14
(1,416) 1:A:86:ILE:H 1:A:86:ILE:HD11 4 0.14 (1,416) 1:A:86:ILE:H 1:A:86:ILE:HD12 4 0.14 (1,416) 1:A:86:ILE:H 1:A:86:ILE:HD13 4 0.14 (1,416) 1:A:86:ILE:H 1:A:86:ILE:HD11 9 0.14 (1,416) 1:A:86:ILE:H 1:A:86:ILE:HD12 9 0.14 (1,416) 1:A:86:ILE:H 1:A:86:ILE:HD13 9 0.14 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD21 17 0.14 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22 17 0.14 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD23 17 0.14	(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD22	20	0.14
(1,416) 1:A:86:ILE:H 1:A:86:ILE:HD11 4 0.14 (1,416) 1:A:86:ILE:H 1:A:86:ILE:HD12 4 0.14 (1,416) 1:A:86:ILE:H 1:A:86:ILE:HD13 4 0.14 (1,416) 1:A:86:ILE:H 1:A:86:ILE:HD11 9 0.14 (1,416) 1:A:86:ILE:H 1:A:86:ILE:HD12 9 0.14 (1,416) 1:A:86:ILE:H 1:A:86:ILE:HD13 9 0.14 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD21 17 0.14 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22 17 0.14 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD23 17 0.14	(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD23	20	0.14
(1,416) 1:A:86:ILE:H 1:A:86:ILE:HD13 4 0.14 (1,416) 1:A:86:ILE:H 1:A:86:ILE:HD11 9 0.14 (1,416) 1:A:86:ILE:H 1:A:86:ILE:HD12 9 0.14 (1,416) 1:A:86:ILE:H 1:A:86:ILE:HD13 9 0.14 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD21 17 0.14 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22 17 0.14 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD23 17 0.14	(1,416)	1:A:86:ILE:H	1:A:86:ILE:HD11	4	0.14
(1,416) 1:A:86:ILE:H 1:A:86:ILE:HD13 4 0.14 (1,416) 1:A:86:ILE:H 1:A:86:ILE:HD11 9 0.14 (1,416) 1:A:86:ILE:H 1:A:86:ILE:HD12 9 0.14 (1,416) 1:A:86:ILE:H 1:A:86:ILE:HD13 9 0.14 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD21 17 0.14 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22 17 0.14 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD23 17 0.14	(1,416)	1:A:86:ILE:H		4	0.14
(1,416) 1:A:86:ILE:H 1:A:86:ILE:HD12 9 0.14 (1,416) 1:A:86:ILE:H 1:A:86:ILE:HD13 9 0.14 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD21 17 0.14 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22 17 0.14 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD23 17 0.14		1:A:86:ILE:H	1:A:86:ILE:HD13	4	0.14
(1,416) 1:A:86:ILE:H 1:A:86:ILE:HD13 9 0.14 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD21 17 0.14 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22 17 0.14 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD23 17 0.14	(1,416)	1:A:86:ILE:H	1:A:86:ILE:HD11	9	0.14
(1,416) 1:A:86:ILE:H 1:A:86:ILE:HD13 9 0.14 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD21 17 0.14 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22 17 0.14 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD23 17 0.14	(1,416)	1:A:86:ILE:H	1:A:86:ILE:HD12	9	0.14
(1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22 17 0.14 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD23 17 0.14		1:A:86:ILE:H	1:A:86:ILE:HD13	9	0.14
(1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD23 17 0.14	(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD21	17	0.14
	(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD22	17	0.14
(1.411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD21 17 0.14	(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD23	17	0.14
(, , ,	(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD21	17	0.14



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD22	17	0.14
(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD23	17	0.14
(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD21	17	0.14
(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD22	17	0.14
(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD23	17	0.14
(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD11	7	0.14
(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD12	7	0.14
(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD13	7	0.14
(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD11	7	0.14
(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD12	7	0.14
(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD13	7	0.14
(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD11	7	0.14
(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD12	7	0.14
(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD13	7	0.14
(1,366)	1:A:41:LEU:H	1:A:126:LYS:H	7	0.14
(1,366)	1:A:41:LEU:H	1:A:126:LYS:H	9	0.14
(1,329)	1:A:79:LEU:H	1:A:89:GLU:H	14	0.14
(1,303)	1:A:18:GLU:H	1:A:20:THR:H	14	0.14
(1,299)	1:A:15:MET:H	1:A:18:GLU:H	11	0.14
(1,298)	1:A:14:ARG:H	1:A:17:TYR:H	8	0.14
(1,291)	1:A:8:LYS:H	1:A:11:SER:H	12	0.14
(1,283)	1:A:131:GLU:H	1:A:134:TYR:H	5	0.14
(1,283)	1:A:131:GLU:H	1:A:134:TYR:H	13	0.14
(1,281)	1:A:110:ASN:HD22	1:A:112:LEU:H	3	0.14
(1,267)	1:A:21:GLN:H	1:A:24:GLY:H	18	0.14
(1,266)	1:A:19:VAL:H	1:A:21:GLN:H	6	0.14
(1,266)	1:A:19:VAL:H	1:A:21:GLN:H	19	0.14
(1,259)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD11	14	0.14
(1,259)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD12	14	0.14
(1,259)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD13	14	0.14
(1,259)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD11	14	0.14
(1,259)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD12	14	0.14
(1,259)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD13	14	0.14
(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD11	14	0.14
(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD12	14	0.14
(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD13	14	0.14
(1,256)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD11	8	0.14
(1,256)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD12	8	0.14
(1,256)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD13	8	0.14
(1,256)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD11	8	0.14
(1,256)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD12	8	0.14
(1,256)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD13	8	0.14



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,256)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD11	8	0.14
(1,256)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD12	8	0.14
(1,256)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD13	8	0.14
(1,25)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:123:PHE:H	10	0.14
(1,25)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:123:PHE:H	10	0.14
(1,25)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:123:PHE:H	10	0.14
(1,247)	1:A:121:LEU:HD11	1:A:122:ARG:H	7	0.14
(1,247)	1:A:121:LEU:HD12	1:A:122:ARG:H	7	0.14
(1,247)	1:A:121:LEU:HD13	1:A:122:ARG:H	7	0.14
(1,222)	1:A:71:ILE:HD11	1:A:140:LEU:HD21	9	0.14
(1,222)	1:A:71:ILE:HD11	1:A:140:LEU:HD22	9	0.14
(1,222)	1:A:71:ILE:HD11	1:A:140:LEU:HD23	9	0.14
(1,222)	1:A:71:ILE:HD12	1:A:140:LEU:HD21	9	0.14
(1,222)	1:A:71:ILE:HD12	1:A:140:LEU:HD22	9	0.14
(1,222)	1:A:71:ILE:HD12	1:A:140:LEU:HD23	9	0.14
(1,222)	1:A:71:ILE:HD13	1:A:140:LEU:HD21	9	0.14
(1,222)	1:A:71:ILE:HD13	1:A:140:LEU:HD22	9	0.14
(1,222)	1:A:71:ILE:HD13	1:A:140:LEU:HD23	9	0.14
(1,219)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:74:GLU:H	8	0.14
(1,219)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:74:GLU:H	8	0.14
(1,219)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:74:GLU:H	8	0.14
(1,192)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:H	8	0.14
(1,192)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:H	8	0.14
(1,192)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:H	8	0.14
(1,192)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:H	15	0.14
(1,192)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:H	15	0.14
(1,192)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:H	15	0.14
(1,192)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:H	17	0.14
(1,192)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:H	17	0.14
(1,192)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:H	17	0.14
(1,19)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:127:HIS:H	4	0.14
(1,19)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:127:HIS:H	4	0.14
(1,19)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:127:HIS:H	4	0.14
(1,148)	1:A:44:ASP:H	1:A:122:ARG:H	6	0.14
(1,14)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD21	18	0.14
(1,14)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD22	18	0.14
(1,14)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD23	18	0.14
(1,132)	1:A:16:GLN:H	1:A:19:VAL:H	18	0.14
(1,131)	1:A:17:TYR:H	1:A:19:VAL:H	10	0.14
(1,131)	1:A:17:TYR:H	1:A:19:VAL:H	16	0.14
(1,131)	1:A:17:TYR:H	1:A:19:VAL:H	20	0.14
(1,84)	1:A:10:LYS:H	1:A:12:LEU:H	4	0.13



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,8)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:42:TYR:H	9	0.13
(1,8)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:42:TYR:H	9	0.13
(1,8)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:42:TYR:H	9	0.13
(1,8)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:42:TYR:H	17	0.13
(1,8)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:42:TYR:H	17	0.13
(1,8)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:42:TYR:H	17	0.13
(1,78)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:H	15	0.13
(1,67)	1:A:117:ASN:H	1:A:117:ASN:HD22	18	0.13
(1,616)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD21	4	0.13
(1,616)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD22	4	0.13
(1,616)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD23	4	0.13
(1,616)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD21	4	0.13
(1,616)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD22	4	0.13
(1,616)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD23	4	0.13
(1,616)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD21	4	0.13
(1,616)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD22	4	0.13
(1,616)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD23	4	0.13
(1,616)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD21	15	0.13
(1,616)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD22	15	0.13
(1,616)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD23	15	0.13
(1,616)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD21	15	0.13
(1,616)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD22	15	0.13
(1,616)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD23	15	0.13
(1,616)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD21	15	0.13
(1,616)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD22	15	0.13
(1,616)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD23	15	0.13
(1,610)	1:A:115:CYS:H	1:A:101:HIS:H	17	0.13
(1,609)	1:A:102:VAL:H	1:A:88:THR:H	5	0.13
(1,608)	1:A:100:GLY:H	1:A:90:VAL:H	4	0.13
(1,60)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD11	20	0.13
(1,60)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD12	20	0.13
(1,60)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD13	20	0.13
(1,588)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:22:ASN:H	1	0.13
(1,588)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:22:ASN:H	1	0.13
(1,588)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:22:ASN:H	1	0.13
(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG11	8	0.13
(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG12	8	0.13
(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG13	8	0.13
(1,57)	1:A:112:LEU:HD11	1:A:113:ARG:H	13	0.13
(1,57)	1:A:112:LEU:HD12	1:A:113:ARG:H	13	0.13
(1,57)	1:A:112:LEU:HD13	1:A:113:ARG:H	13	0.13
(1,564)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:137:TYR:H	14	0.13



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,564)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:137:TYR:H	14	0.13
(1,564)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:137:TYR:H	14	0.13
(1,560)	1:A:134:TYR:H	1:A:138:LEU:HD11	8	0.13
(1,560)	1:A:134:TYR:H	1:A:138:LEU:HD12	8	0.13
(1,560)	1:A:134:TYR:H	1:A:138:LEU:HD13	8	0.13
(1,550)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG21	1	0.13
(1,550)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG22	1	0.13
(1,550)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG23	1	0.13
(1,549)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD21	19	0.13
(1,549)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD22	19	0.13
(1,549)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD23	19	0.13
(1,544)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:120:ALA:H	1	0.13
(1,544)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:120:ALA:H	1	0.13
(1,544)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:120:ALA:H	1	0.13
(1,544)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:120:ALA:H	4	0.13
(1,544)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:120:ALA:H	4	0.13
(1,544)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:120:ALA:H	4	0.13
(1,544)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:120:ALA:H	15	0.13
(1,544)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:120:ALA:H	15	0.13
(1,544)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:120:ALA:H	15	0.13
(1,542)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD21	6	0.13
(1,542)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD22	6	0.13
(1,542)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD23	6	0.13
(1,536)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:102:VAL:H	3	0.13
(1,536)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:102:VAL:H	3	0.13
(1,536)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:102:VAL:H	3	0.13
(1,53)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD21	3	0.13
(1,53)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD22	3	0.13
(1,53)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD23	3	0.13
(1,529)	1:A:99:LEU:H	1:A:116:ILE:HD11	7	0.13
(1,529)	1:A:99:LEU:H	1:A:116:ILE:HD12	7	0.13
(1,529)	1:A:99:LEU:H	1:A:116:ILE:HD13	7	0.13
(1,513)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:87:ARG:H	19	0.13
(1,513)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:87:ARG:H	19	0.13
(1,513)	1:A:79:LEU:HD13	1:A:87:ARG:H	19	0.13
(1,493)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:52:PHE:H	2	0.13
(1,493)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:52:PHE:H	2	0.13
(1,493)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:52:PHE:H	2	0.13
(1,488)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:51:LEU:H	15	0.13
(1,488)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:51:LEU:H	15	0.13
(1,488)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:51:LEU:H	15	0.13
(1,±00 <i>)</i>	1.A.45. VAL.11G25	1.71.01.11	10	0.10



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,472)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:42:TYR:H	17	0.13
(1,472)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:42:TYR:H	17	0.13
(1,47)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:115:CYS:H	7	0.13
(1,47)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:115:CYS:H	7	0.13
(1,47)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:115:CYS:H	7	0.13
(1,47)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:115:CYS:H	8	0.13
(1,47)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:115:CYS:H	8	0.13
(1,47)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:115:CYS:H	8	0.13
(1,458)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:10:LYS:H	11	0.13
(1,458)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:10:LYS:H	11	0.13
(1,458)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:10:LYS:H	11	0.13
(1,455)	1:A:8:LYS:H	1:A:9:ILE:HD11	18	0.13
(1,455)	1:A:8:LYS:H	1:A:9:ILE:HD12	18	0.13
(1,455)	1:A:8:LYS:H	1:A:9:ILE:HD13	18	0.13
(1,445)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:113:ARG:H	1	0.13
(1,445)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:113:ARG:H	1	0.13
(1,445)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:113:ARG:H	1	0.13
(1,445)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:113:ARG:H	10	0.13
(1,445)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:113:ARG:H	10	0.13
(1,445)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:113:ARG:H	10	0.13
(1,437)	1:A:46:VAL:HG11	1:A:48:GLY:H	7	0.13
(1,437)	1:A:46:VAL:HG12	1:A:48:GLY:H	7	0.13
(1,437)	1:A:46:VAL:HG13	1:A:48:GLY:H	7	0.13
(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD21	17	0.13
(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD22	17	0.13
(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD23	17	0.13
(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD21	7	0.13
(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD22	7	0.13
(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD23	7	0.13
(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD21	7	0.13
(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD22	7	0.13
(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD23	7	0.13
(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD21	7	0.13
(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD22	7	0.13
(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD23	7	0.13
(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD21	9	0.13
(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD22	9	0.13
(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD23	9	0.13
(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD21	9	0.13
(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD22	9	0.13
(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD23	9	0.13
(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD21	9	0.13
	1	I	<u> </u>	d on nort nago



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD22	9	0.13
(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD23	9	0.13
(1,40)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:97:SER:H	17	0.13
(1,40)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:97:SER:H	17	0.13
(1,40)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:97:SER:H	17	0.13
(1,4)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:124:VAL:H	1	0.13
(1,4)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:H	1	0.13
(1,4)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:H	1	0.13
(1,4)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:124:VAL:H	5	0.13
(1,4)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:H	5	0.13
(1,4)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:H	5	0.13
(1,399)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:129:LEU:HD21	2	0.13
(1,399)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:129:LEU:HD22	2	0.13
(1,399)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:129:LEU:HD23	2	0.13
(1,399)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:129:LEU:HD21	2	0.13
(1,399)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:129:LEU:HD22	2	0.13
(1,399)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:129:LEU:HD23	2	0.13
(1,399)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:129:LEU:HD21	2	0.13
(1,399)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:129:LEU:HD22	2	0.13
(1,399)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:129:LEU:HD23	2	0.13
(1,375)	1:A:131:GLU:H	1:A:133:GLY:H	20	0.13
(1,374)	1:A:132:GLU:H	1:A:134:TYR:H	18	0.13
(1,37)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:13:ASN:HD21	8	0.13
(1,37)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:13:ASN:HD21	8	0.13
(1,37)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:13:ASN:HD21	8	0.13
(1,366)	1:A:41:LEU:H	1:A:126:LYS:H	11	0.13
(1,361)	1:A:45:ILE:H	1:A:122:ARG:H	2	0.13
(1,347)	1:A:103:PHE:H	1:A:114:TYR:H	9	0.13
(1,345)	1:A:103:PHE:H	1:A:105:ASP:H	5	0.13
(1,307)	1:A:32:GLU:H	1:A:34:TRP:H	1	0.13
(1,303)	1:A:18:GLU:H	1:A:20:THR:H	16	0.13
(1,290)	1:A:10:LYS:H	1:A:13:ASN:H	13	0.13
(1,266)	1:A:19:VAL:H	1:A:21:GLN:H	7	0.13
(1,266)	1:A:19:VAL:H	1:A:21:GLN:H	14	0.13
(1,266)	1:A:19:VAL:H	1:A:21:GLN:H	16	0.13
(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD11	1	0.13
(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD12	1	0.13
(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD13	1	0.13
(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD11	8	0.13
(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD12	8	0.13
(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD13	8	0.13
(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD11	19	0.13



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD12	19	0.13
(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD13	19	0.13
(1,247)	1:A:121:LEU:HD11	1:A:122:ARG:H	18	0.13
(1,247)	1:A:121:LEU:HD12	1:A:122:ARG:H	18	0.13
(1,247)	1:A:121:LEU:HD13	1:A:122:ARG:H	18	0.13
(1,24)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:134:TYR:H	3	0.13
(1,24)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:134:TYR:H	3	0.13
(1,24)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:134:TYR:H	3	0.13
(1,24)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:134:TYR:H	12	0.13
(1,24)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:134:TYR:H	12	0.13
(1,24)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:134:TYR:H	12	0.13
(1,24)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:134:TYR:H	20	0.13
(1,24)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:134:TYR:H	20	0.13
(1,24)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:134:TYR:H	20	0.13
(1,235)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:13:ASN:HD21	7	0.13
(1,235)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:13:ASN:HD21	7	0.13
(1,235)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:13:ASN:HD21	7	0.13
(1,222)	1:A:71:ILE:HD11	1:A:140:LEU:HD21	18	0.13
(1,222)	1:A:71:ILE:HD11	1:A:140:LEU:HD22	18	0.13
(1,222)	1:A:71:ILE:HD11	1:A:140:LEU:HD23	18	0.13
(1,222)	1:A:71:ILE:HD12	1:A:140:LEU:HD21	18	0.13
(1,222)	1:A:71:ILE:HD12	1:A:140:LEU:HD22	18	0.13
(1,222)	1:A:71:ILE:HD12	1:A:140:LEU:HD23	18	0.13
(1,222)	1:A:71:ILE:HD13	1:A:140:LEU:HD21	18	0.13
(1,222)	1:A:71:ILE:HD13	1:A:140:LEU:HD22	18	0.13
(1,222)	1:A:71:ILE:HD13	1:A:140:LEU:HD23	18	0.13
(1,219)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:74:GLU:H	18	0.13
(1,219)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:74:GLU:H	18	0.13
(1,219)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:74:GLU:H	18	0.13
(1,192)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:H	9	0.13
(1,192)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:H	9	0.13
(1,192)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:H	9	0.13
(1,192)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:H	16	0.13
(1,192)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:H	16	0.13
(1,192)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:H	16	0.13
(1,172)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:20:THR:H	2	0.13
(1,172)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:20:THR:H	2	0.13
(1,172)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:20:THR:H	2	0.13
(1,17)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD21	2	0.13
(1,17)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD22	2	0.13
(1,17)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD23	2	0.13
(1,162)	1:A:92:SER:H	1:A:96:ASP:H	16	0.13



 $Continued\ from\ previous\ page...$

(1,160) 1:A:54:SER:H 1:A:56:ASP:H 18 0.13 (1,147) 1:A:130:LYS:H 1:A:134:TYR:H 9 0.13 (1,147) 1:A:130:LYS:H 1:A:134:TYR:H 15 0.13 (1,144) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD21 12 0.13 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD22 12 0.13 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD23 12 0.13 (1,14) 1:A:17:TYR:H 1:A:19:VAL:H 4 0.13 (1,131) 1:A:17:TYR:H 1:A:19:VAL:H 6 0.13 (1,131) 1:A:17:TYR:H 1:A:19:VAL:H 18 0.13 (1,131) 1:A:17:TYR:H 1:A:19:VAL:H 8 0.13 (1,13) 1:A:17:TYR:H 1:A:19:VAL:H 18 0.13 (1,13) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:131:GLU:H 8 0.13 (1,13) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:131:GLU:H 8 0.13 (1,14) 1:A:21:GLN:H 1:A:23:ASN:H 10 0.13	
(1,147) 1:A:130:LYS:H 1:A:134:TYR:H 15 0.13 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD21 12 0.13 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD22 12 0.13 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD23 12 0.13 (1,131) 1:A:17:TYR:H 1:A:19:VAL:H 4 0.13 (1,131) 1:A:17:TYR:H 1:A:19:VAL:H 18 0.13 (1,13) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:131:GLU:H 8 0.13 (1,13) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:131:GLU:H 8 0.13 (1,13) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:131:GLU:H 8 0.13 (1,127) 1:A:21:GLN:H 1:A:7:GLU:H 15 0.13 (1,14) 1:A:88:THR:H 1:A:10:VAL:H 2 0	
(1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD21 12 0.13 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD22 12 0.13 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD23 12 0.13 (1,131) 1:A:17:TYR:H 1:A:19:VAL:H 4 0.13 (1,131) 1:A:17:TYR:H 1:A:19:VAL:H 6 0.13 (1,131) 1:A:17:TYR:H 1:A:19:VAL:H 18 0.13 (1,131) 1:A:17:TYR:H 1:A:19:VAL:H 8 0.13 (1,131) 1:A:17:TYR:H 1:A:19:VAL:H 8 0.13 (1,13) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:131:GLU:H 8 0.13 (1,13) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:131:GLU:H 8 0.13 (1,13) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:131:GLU:H 8 0.13 (1,127) 1:A:21:GLN:H 1:A:23:ASN:H 10 0.13 (1,144) 1:A:55:LYS:H 1:A:102:VAL:H 2 0.13 (1,119) 1:A:88:THR:H 1:A:129:LEU:HD21 5	
(1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD22 12 0.13 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD23 12 0.13 (1,131) 1:A:17:TYR:H 1:A:19:VAL:H 4 0.13 (1,131) 1:A:17:TYR:H 1:A:19:VAL:H 6 0.13 (1,131) 1:A:17:TYR:H 1:A:19:VAL:H 18 0.13 (1,131) 1:A:17:TYR:H 1:A:19:VAL:H 8 0.13 (1,131) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:131:GLU:H 8 0.13 (1,13) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:131:GLU:H 8 0.13 (1,13) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:131:GLU:H 8 0.13 (1,13) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:131:GLU:H 8 0.13 (1,127) 1:A:21:GLN:H 1:A:7:GLU:H 15 0.13 (1,124) 1:A:5:LYS:H 1:A:7:GLU:H 15 0.13 (1,119) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:H 2 0.13 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 5 0.	
(1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD23 12 0.13 (1,131) 1:A:17:TYR:H 1:A:19:VAL:H 4 0.13 (1,131) 1:A:17:TYR:H 1:A:19:VAL:H 6 0.13 (1,131) 1:A:17:TYR:H 1:A:19:VAL:H 18 0.13 (1,13) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:131:GLU:H 8 0.13 (1,13) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:131:GLU:H 8 0.13 (1,13) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:131:GLU:H 8 0.13 (1,13) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:131:GLU:H 8 0.13 (1,14) 1:A:21:GLN:H 1:A:23:ASN:H 10 0.13 (1,127) 1:A:21:GLN:H 1:A:7:GLU:H 15 0.13 (1,124) 1:A:5:LYS:H 1:A:10:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 5 0.13 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 5 0.13 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 5 0.13 (1,84) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H	
(1,131) 1:A:17:TYR:H 1:A:19:VAL:H 4 0.13 (1,131) 1:A:17:TYR:H 1:A:19:VAL:H 6 0.13 (1,131) 1:A:17:TYR:H 1:A:19:VAL:H 18 0.13 (1,13) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:131:GLU:H 8 0.13 (1,13) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:131:GLU:H 8 0.13 (1,13) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:131:GLU:H 8 0.13 (1,13) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:131:GLU:H 8 0.13 (1,127) 1:A:21:GLN:H 1:A:23:ASN:H 10 0.13 (1,124) 1:A:5:LYS:H 1:A:7:GLU:H 15 0.13 (1,119) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:H 2 0.13 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 5 0.13 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 5 0.13 (1,84) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 15 0.12	
(1,131) 1:A:17:TYR:H 1:A:19:VAL:H 6 0.13 (1,131) 1:A:17:TYR:H 1:A:19:VAL:H 18 0.13 (1,13) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:131:GLU:H 8 0.13 (1,13) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:131:GLU:H 8 0.13 (1,13) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:131:GLU:H 8 0.13 (1,127) 1:A:21:GLN:H 1:A:23:ASN:H 10 0.13 (1,124) 1:A:5:LYS:H 1:A:7:GLU:H 15 0.13 (1,119) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:H 2 0.13 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 5 0.13 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 5 0.13 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 5 0.13 (1,84) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 15 0.12	
(1,131) 1:A:17:TYR:H 1:A:19:VAL:H 18 0.13 (1,13) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:131:GLU:H 8 0.13 (1,13) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:131:GLU:H 8 0.13 (1,13) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:131:GLU:H 8 0.13 (1,127) 1:A:21:GLN:H 1:A:23:ASN:H 10 0.13 (1,124) 1:A:5:LYS:H 1:A:7:GLU:H 15 0.13 (1,119) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:H 2 0.13 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 5 0.13 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 5 0.13 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 5 0.13 (1,84) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 15 0.12	
(1,13) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:131:GLU:H 8 0.13 (1,13) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:131:GLU:H 8 0.13 (1,13) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:131:GLU:H 8 0.13 (1,127) 1:A:21:GLN:H 1:A:23:ASN:H 10 0.13 (1,124) 1:A:5:LYS:H 1:A:7:GLU:H 15 0.13 (1,119) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:H 2 0.13 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 5 0.13 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 5 0.13 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 5 0.13 (1,84) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 15 0.12	
(1,13) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:131:GLU:H 8 0.13 (1,13) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:131:GLU:H 8 0.13 (1,127) 1:A:21:GLN:H 1:A:23:ASN:H 10 0.13 (1,124) 1:A:5:LYS:H 1:A:7:GLU:H 15 0.13 (1,119) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:H 2 0.13 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 5 0.13 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 5 0.13 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 5 0.13 (1,84) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 15 0.12	
(1,13) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:131:GLU:H 8 0.13 (1,127) 1:A:21:GLN:H 1:A:23:ASN:H 10 0.13 (1,124) 1:A:5:LYS:H 1:A:7:GLU:H 15 0.13 (1,119) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:H 2 0.13 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 5 0.13 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 5 0.13 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 5 0.13 (1,84) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 15 0.12	ı
(1,127) 1:A:21:GLN:H 1:A:23:ASN:H 10 0.13 (1,124) 1:A:5:LYS:H 1:A:7:GLU:H 15 0.13 (1,119) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:H 2 0.13 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 5 0.13 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 5 0.13 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 5 0.13 (1,84) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 15 0.12	
(1,124) 1:A:5:LYS:H 1:A:7:GLU:H 15 0.13 (1,119) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:H 2 0.13 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 5 0.13 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 5 0.13 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 5 0.13 (1,84) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 15 0.12	
(1,119) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:H 2 0.13 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 5 0.13 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 5 0.13 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 5 0.13 (1,84) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 15 0.12	
(1,119) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:H 2 0.13 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 5 0.13 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 5 0.13 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 5 0.13 (1,84) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 15 0.12	
(1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 5 0.13 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 5 0.13 (1,84) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 15 0.12	
(1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 5 0.13 (1,84) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 15 0.12	
(1,84) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 15 0.12	
(1.02) 1.4.0.11 [2.11] 1.4.10.1 [2.11] 1.7	
(1,83) 1:A:9:ILE:H 1:A:12:LEU:H 17 0.12	
(1,83) 1:A:9:ILE:H 1:A:12:LEU:H 20 0.12	
(1,8) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:42:TYR:H 16 0.12	
(1,8) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:42:TYR:H 16 0.12	
(1,8) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:42:TYR:H 16 0.12	
(1,616) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD21 8 0.12	
(1,616) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD22 8 0.12	
(1,616) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD23 8 0.12	
(1,616) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:99:LEU:HD21 8 0.12	
(1,616) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:99:LEU:HD22 8 0.12	
(1,616) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:99:LEU:HD23 8 0.12	
(1,616) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD21 8 0.12	
(1,616) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD22 8 0.12	
(1,616) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD23 8 0.12	
(1,609) 1:A:102:VAL:H 1:A:88:THR:H 13 0.12	
(1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:112:LEU:HD21 16 0.12	
(1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:112:LEU:HD22 16 0.12	
(1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:112:LEU:HD23 16 0.12	
(1,57) 1:A:112:LEU:HD11 1:A:113:ARG:H 15 0.12	
(1,57) 1:A:112:LEU:HD12 1:A:113:ARG:H 15 0.12	
(1,57) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H 15 0.12	
(1,562) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD21 4 0.12	
(1,562) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD22 4 0.12	



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,562)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD23	4	0.12
(1,559)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:132:GLU:H	11	0.12
(1,559)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:132:GLU:H	11	0.12
(1,559)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:132:GLU:H	11	0.12
(1,555)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD11	8	0.12
(1,555)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD12	8	0.12
(1,555)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD13	8	0.12
(1,551)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD11	8	0.12
(1,551)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD12	8	0.12
(1,551)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD13	8	0.12
(1,548)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD11	15	0.12
(1,548)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD12	15	0.12
(1,548)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD13	15	0.12
(1,536)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:102:VAL:H	9	0.12
(1,536)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:102:VAL:H	9	0.12
(1,536)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:102:VAL:H	9	0.12
(1,53)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD21	4	0.12
(1,53)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD22	4	0.12
(1,53)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD23	4	0.12
(1,518)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD11	11	0.12
(1,518)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD12	11	0.12
(1,518)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD13	11	0.12
(1,505)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:76:GLU:H	4	0.12
(1,505)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:76:GLU:H	4	0.12
(1,505)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:76:GLU:H	4	0.12
(1,483)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:49:LYS:H	10	0.12
(1,483)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:49:LYS:H	10	0.12
(1,483)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:49:LYS:H	10	0.12
(1,483)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:49:LYS:H	14	0.12
(1,483)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:49:LYS:H	14	0.12
(1,483)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:49:LYS:H	14	0.12
(1,472)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:42:TYR:H	2	0.12
(1,472)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:42:TYR:H	2	0.12
(1,472)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:42:TYR:H	2	0.12
(1,469)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:24:GLY:H	16	0.12
(1,469)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:24:GLY:H	16	0.12
(1,469)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:24:GLY:H	16	0.12
(1,465)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG11	6	0.12
(1,465)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG12	6	0.12
(1,465)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG13	6	0.12
(1,462)	1:A:45:ILE:HD11	1:A:46:VAL:H	5	0.12
(1,462)	1:A:45:ILE:HD12	1:A:46:VAL:H	5	0.12



 $Continued\ from\ previous\ page...$

(1,455) 1:A:8:LYS:H 1:A:9 (1,455) 1:A:8:LYS:H 1:A:9 (1,455) 1:A:8:LYS:H 1:A:9 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46 (1,451) 1:A:75:VAL:HG11 1:A: (1,451) 1:A:75:VAL:HG12 1:A: (1,451) 1:A:75:VAL:HG13 1:A:	46:VAL:H 5 :ILE:HD11 3 :ILE:HD12 3 :ILE:HD13 3 :VAL:HG21 9 :VAL:HG22 9 :VAL:HG23 9 91:ARG:H 10 91:ARG:H 10	0.12 0.12 0.12 0.12 0.12 0.12 0.12 0.12 0.12 0.12 0.12
(1,455) 1:A:8:LYS:H 1:A:9 (1,455) 1:A:8:LYS:H 1:A:9 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46 (1,451) 1:A:75:VAL:HG11 1:A: (1,451) 1:A:75:VAL:HG12 1:A: (1,451) 1:A:75:VAL:HG13 1:A:	:ILE:HD12 3 :ILE:HD13 3 ::VAL:HG21 9 ::VAL:HG22 9 ::VAL:HG23 9 :P1:ARG:H 10 :P1:ARG:H 10	0.12 0.12 0.12 0.12 0.12 0.12 0.12
(1,455) 1:A:8:LYS:H 1:A:9 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46 (1,451) 1:A:75:VAL:HG11 1:A: (1,451) 1:A:75:VAL:HG12 1:A: (1,451) 1:A:75:VAL:HG13 1:A:	:ILE:HD13 3 ::VAL:HG21 9 ::VAL:HG22 9 ::VAL:HG23 9 :P1:ARG:H 10 :P1:ARG:H 10 :P1:ARG:H 10	0.12 0.12 0.12 0.12 0.12 0.12 0.12
(1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46 (1,451) 1:A:75:VAL:HG11 1:A: (1,451) 1:A:75:VAL:HG12 1:A: (1,451) 1:A:75:VAL:HG13 1:A:	9:VAL:HG21 9 0:VAL:HG22 9 0:VAL:HG23 9 91:ARG:H 10 91:ARG:H 10	0.12 0.12 0.12 0.12 0.12
(1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46 (1,451) 1:A:75:VAL:HG11 1:A: (1,451) 1:A:75:VAL:HG12 1:A: (1,451) 1:A:75:VAL:HG13 1:A:	9:VAL:HG22 9 9:VAL:HG23 9 91:ARG:H 10 91:ARG:H 10 91:ARG:H 10	0.12 0.12 0.12 0.12
(1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46 (1,451) 1:A:75:VAL:HG11 1:A: (1,451) 1:A:75:VAL:HG12 1:A: (1,451) 1:A:75:VAL:HG13 1:A:	9:VAL:HG23 9 91:ARG:H 10 91:ARG:H 10 91:ARG:H 10	0.12 0.12 0.12
(1,451) 1:A:75:VAL:HG11 1:A: (1,451) 1:A:75:VAL:HG12 1:A: (1,451) 1:A:75:VAL:HG13 1:A:	91:ARG:H 10 91:ARG:H 10 91:ARG:H 10	0.12 0.12
(1,451) 1:A:75:VAL:HG12 1:A: (1,451) 1:A:75:VAL:HG13 1:A:	91:ARG:H 10 91:ARG:H 10	0.12
(1,451) 1:A:75:VAL:HG13 1:A:	91:ARG:H 10	
() /		0.12
(1.45) $1 \cdot A \cdot 79 \cdot LEU \cdot H$ $1 \cdot A \cdot 70$	I DII IID11	1
(1,10) 1.11.10.110.11 1.11.10	:LEU:HD11 3	0.12
(1,45) 1:A:79:LEU:H 1:A:79	:LEU:HD12 3	0.12
(1,45) 1:A:79:LEU:H 1:A:79	:LEU:HD13 3	0.12
(1,435) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:	26:GLU:H 20	0.12
(1,435) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:	26:GLU:H 20	0.12
(1,435) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:	26:GLU:H 20	0.12
(1,431) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:	.03:PHE:H 2	0.12
(1,431) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:	.03:PHE:H 2	0.12
(1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:	.03:PHE:H 2	0.12
(1,407) 1:A:12:LEU:HD11 1:A:46	:VAL:HG21 3	0.12
(1,407) 1:A:12:LEU:HD11 1:A:46	:VAL:HG22 3	0.12
(1,407) 1:A:12:LEU:HD11 1:A:46	:VAL:HG23 3	0.12
(1,407) 1:A:12:LEU:HD12 1:A:46	:VAL:HG21 3	0.12
(1,407) 1:A:12:LEU:HD12 1:A:46	:VAL:HG22 3	0.12
(1,407) 1:A:12:LEU:HD12 1:A:46	:VAL:HG23 3	0.12
(1,407) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:46	:VAL:HG21 3	0.12
(1,407) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:46	:VAL:HG22 3	0.12
(1,407) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:46	:VAL:HG23 3	0.12
(1,407) 1:A:12:LEU:HD11 1:A:46	:VAL:HG21 13	0.12
(1,407) 1:A:12:LEU:HD11 1:A:46	:VAL:HG22 13	0.12
(1,407) 1:A:12:LEU:HD11 1:A:46	:VAL:HG23 13	0.12
(1,407) 1:A:12:LEU:HD12 1:A:46	:VAL:HG21 13	0.12
(1,407) 1:A:12:LEU:HD12 1:A:46	:VAL:HG22 13	0.12
	:VAL:HG23 13	0.12
	:VAL:HG21 13	0.12
	:VAL:HG22 13	0.12
, , , , , , , , , , , , , , , , , , ,	:VAL:HG23 13	0.12
(1,393) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:46	:VAL:HG11 13	0.12
	:VAL:HG12 13	0.12
(1,393) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:46	:VAL:HG13 13	0.12
(1,393) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46	:VAL:HG11 13	0.12
(1,393) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46	:VAL:HG12 13	0.12



 $Continued\ from\ previous\ page...$

(/ /	1:A:12:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HG13	10	
		1.A.40. VAL.HG15	13	0.12
(1,393)	1:A:12:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HG11	13	0.12
	1:A:12:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HG12	13	0.12
(1,393)	1:A:12:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HG13	13	0.12
(1,368)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:H	8	0.12
(1,339)	1:A:92:SER:H	1:A:98:HIS:H	2	0.12
(1,337)	1:A:76:GLU:H	1:A:91:ARG:H	8	0.12
(1,336)	1:A:90:VAL:H	1:A:101:HIS:H	10	0.12
(1,329)	1:A:79:LEU:H	1:A:89:GLU:H	5	0.12
(1,329)	1:A:79:LEU:H	1:A:89:GLU:H	18	0.12
(1,329)	1:A:79:LEU:H	1:A:89:GLU:H	19	0.12
(1,312)	1:A:41:LEU:H	1:A:124:VAL:H	14	0.12
(1,299)	1:A:15:MET:H	1:A:18:GLU:H	13	0.12
(1,298)	1:A:14:ARG:H	1:A:17:TYR:H	9	0.12
(1,298)	1:A:14:ARG:H	1:A:17:TYR:H	20	0.12
(1,285)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:H	17	0.12
(1,267)	1:A:21:GLN:H	1:A:24:GLY:H	7	0.12
(1,266)	1:A:19:VAL:H	1:A:21:GLN:H	13	0.12
(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD11	2	0.12
(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD12	2	0.12
(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD13	2	0.12
(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD11	17	0.12
(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD12	17	0.12
(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD13	17	0.12
(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD11	20	0.12
(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD12	20	0.12
(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD13	20	0.12
(1,248)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD11	2	0.12
(1,248)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD12	2	0.12
(1,248)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD13	2	0.12
(1,247)	1:A:121:LEU:HD11	1:A:122:ARG:H	8	0.12
(1,247)	1:A:121:LEU:HD12	1:A:122:ARG:H	8	0.12
(1,247)	1:A:121:LEU:HD13	1:A:122:ARG:H	8	0.12
(1,247)	1:A:121:LEU:HD11	1:A:122:ARG:H	9	0.12
(1,247)	1:A:121:LEU:HD12	1:A:122:ARG:H	9	0.12
	1:A:121:LEU:HD13	1:A:122:ARG:H	9	0.12
(1,225)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:71:ILE:HD11	10	0.12
(1,225)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:71:ILE:HD12	10	0.12
(1,225)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:71:ILE:HD13	10	0.12
(1,225)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:71:ILE:HD11	10	0.12
(1,225)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:71:ILE:HD12	10	0.12
(1,225)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:71:ILE:HD13	10	0.12



 $Continued\ from\ previous\ page...$

(1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD11 10 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD12 10 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD13 10 (1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD11 14 (1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD12 14 (1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD13 14 (1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD11 14 (1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD13 14 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD13 14 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD11 14 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD12 14 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD13 14 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD14 6 (1,219) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:74:GLU:H 6 (1,219) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:74:GLU:H 6 (1,200) 1:A:75:VAL:HG11 1:A:102:VAL:HG21	0.12 0.12 0.12 0.12 0.12 0.12 0.12 0.12 0.12 0.12 0.12 0.12 0.12
(1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD13 10 (1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD11 14 (1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD12 14 (1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD13 14 (1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD11 14 (1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD12 14 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD13 14 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD11 14 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD12 14 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD13 14 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD13 14 (1,219) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:74:GLU:H 6 (1,219) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:74:GLU:H 6 (1,200) 1:A:75:VAL:HG11 1:A:102:VAL:HG21 5 (1,200) 1:A:75:VAL:HG11 1:A:102:VAL:HG22 5	0.12 0.12 0.12 0.12 0.12 0.12 0.12 0.12 0.12 0.12 0.12
(1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD11 14 (1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD12 14 (1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD13 14 (1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD11 14 (1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD12 14 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD13 14 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD12 14 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD12 14 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD13 14 (1,219) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:74:GLU:H 6 (1,219) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:74:GLU:H 6 (1,200) 1:A:75:VAL:HG11 1:A:102:VAL:HG21 5 (1,200) 1:A:75:VAL:HG11 1:A:102:VAL:HG22 5	0.12 0.12 0.12 0.12 0.12 0.12 0.12 0.12 0.12
(1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD12 14 (1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD13 14 (1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD11 14 (1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD12 14 (1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD13 14 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD11 14 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD12 14 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD13 14 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD13 14 (1,219) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:74:GLU:H 6 (1,219) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:74:GLU:H 6 (1,219) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:74:GLU:H 6 (1,200) 1:A:75:VAL:HG11 1:A:102:VAL:HG21 5 (1,200) 1:A:75:VAL:HG11 1:A:102:VAL:HG22 5	0.12 0.12 0.12 0.12 0.12 0.12 0.12 0.12 0.12
(1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD13 14 (1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD11 14 (1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD12 14 (1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD13 14 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD11 14 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD12 14 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD13 14 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD13 14 (1,219) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:74:GLU:H 6 (1,219) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:74:GLU:H 6 (1,200) 1:A:75:VAL:HG11 1:A:102:VAL:HG21 5 (1,200) 1:A:75:VAL:HG11 1:A:102:VAL:HG22 5	0.12 0.12 0.12 0.12 0.12 0.12 0.12
(1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD11 14 (1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD12 14 (1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD13 14 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD11 14 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD12 14 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD13 14 (1,219) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:74:GLU:H 6 (1,219) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:74:GLU:H 6 (1,219) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:74:GLU:H 6 (1,200) 1:A:75:VAL:HG11 1:A:102:VAL:HG21 5 (1,200) 1:A:75:VAL:HG11 1:A:102:VAL:HG22 5	0.12 0.12 0.12 0.12 0.12 0.12
(1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD12 14 (1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD13 14 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD11 14 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD12 14 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD13 14 (1,219) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:74:GLU:H 6 (1,219) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:74:GLU:H 6 (1,219) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:74:GLU:H 6 (1,200) 1:A:75:VAL:HG11 1:A:102:VAL:HG21 5 (1,200) 1:A:75:VAL:HG11 1:A:102:VAL:HG22 5	0.12 0.12 0.12 0.12 0.12
(1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD13 14 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD11 14 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD12 14 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD13 14 (1,219) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:74:GLU:H 6 (1,219) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:74:GLU:H 6 (1,219) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:74:GLU:H 6 (1,200) 1:A:75:VAL:HG11 1:A:102:VAL:HG21 5 (1,200) 1:A:75:VAL:HG11 1:A:102:VAL:HG22 5	0.12 0.12 0.12 0.12
(1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD11 14 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD12 14 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD13 14 (1,219) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:74:GLU:H 6 (1,219) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:74:GLU:H 6 (1,219) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:74:GLU:H 6 (1,200) 1:A:75:VAL:HG11 1:A:102:VAL:HG21 5 (1,200) 1:A:75:VAL:HG11 1:A:102:VAL:HG22 5	0.12 0.12 0.12
(1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD12 14 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD13 14 (1,219) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:74:GLU:H 6 (1,219) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:74:GLU:H 6 (1,219) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:74:GLU:H 6 (1,200) 1:A:75:VAL:HG11 1:A:102:VAL:HG21 5 (1,200) 1:A:75:VAL:HG11 1:A:102:VAL:HG22 5	0.12 0.12
(1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD13 14 (1,219) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:74:GLU:H 6 (1,219) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:74:GLU:H 6 (1,219) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:74:GLU:H 6 (1,200) 1:A:75:VAL:HG11 1:A:102:VAL:HG21 5 (1,200) 1:A:75:VAL:HG11 1:A:102:VAL:HG22 5	0.12
(1,219) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:74:GLU:H 6 (1,219) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:74:GLU:H 6 (1,219) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:74:GLU:H 6 (1,200) 1:A:75:VAL:HG11 1:A:102:VAL:HG21 5 (1,200) 1:A:75:VAL:HG11 1:A:102:VAL:HG22 5	
(1,219) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:74:GLU:H 6 (1,219) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:74:GLU:H 6 (1,200) 1:A:75:VAL:HG11 1:A:102:VAL:HG21 5 (1,200) 1:A:75:VAL:HG11 1:A:102:VAL:HG22 5	
(1,219) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:74:GLU:H 6 (1,200) 1:A:75:VAL:HG11 1:A:102:VAL:HG21 5 (1,200) 1:A:75:VAL:HG11 1:A:102:VAL:HG22 5	0.12
(1,200) 1:A:75:VAL:HG11 1:A:102:VAL:HG21 5 (1,200) 1:A:75:VAL:HG11 1:A:102:VAL:HG22 5	0.12
(1,200) 1:A:75:VAL:HG11 1:A:102:VAL:HG21 5 (1,200) 1:A:75:VAL:HG11 1:A:102:VAL:HG22 5	0.12
	0.12
	0.12
(1,200) 1:A:75:VAL:HG11 1:A:102:VAL:HG23 5	0.12
(1,200) 1:A:75:VAL:HG12 1:A:102:VAL:HG21 5	0.12
(1,200) 1:A:75:VAL:HG12 1:A:102:VAL:HG22 5	0.12
(1,200) 1:A:75:VAL:HG12 1:A:102:VAL:HG23 5	0.12
(1,200) 1:A:75:VAL:HG13 1:A:102:VAL:HG21 5	0.12
(1,200) 1:A:75:VAL:HG13 1:A:102:VAL:HG22 5	0.12
(1,200) 1:A:75:VAL:HG13 1:A:102:VAL:HG23 5	0.12
(1,2) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:114:TYR:H 1	0.12
(1,2) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:114:TYR:H 1	0.12
(1,2) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:114:TYR:H 1	0.12
(1,192) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 18	0.12
(1,192) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:117:ASN:H 18	0.12
(1,192) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:117:ASN:H 18	0.12
(1,192) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 20	0.12
(1,192) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:117:ASN:H 20	0.12
(1,192) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:117:ASN:H 20	0.12
(1,19) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:127:HIS:H 1	0.12
(1,19) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:127:HIS:H 1	0.12
(1,19) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:127:HIS:H 1	0.12
(1,19) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:127:HIS:H 10	0.12
(1,19) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:127:HIS:H 10	0.12
(1,19) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:127:HIS:H 10	0.12
(1,162) 1:A:92:SER:H 1:A:96:ASP:H 19	0.12
(1,148) 1:A:44:ASP:H 1:A:122:ARG:H 11	0.12
(1,146) 1:A:130:LYS:H 1:A:132:GLU:H 2	0.14



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,13)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:131:GLU:H	16	0.12
(1,13)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:131:GLU:H	16	0.12
(1,13)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:131:GLU:H	16	0.12
(1,99)	1:A:20:THR:H	1:A:23:ASN:H	1	0.11
(1,99)	1:A:20:THR:H	1:A:23:ASN:H	20	0.11
(1,89)	1:A:55:LYS:H	1:A:57:LYS:H	17	0.11
(1,84)	1:A:10:LYS:H	1:A:12:LEU:H	2	0.11
(1,74)	1:A:30:GLN:H	1:A:31:ASN:H	11	0.11
(1,63)	1:A:54:SER:HG	1:A:57:LYS:H	10	0.11
(1,623)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD11	11	0.11
(1,623)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD12	11	0.11
(1,623)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD13	11	0.11
(1,616)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD21	2	0.11
(1,616)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD22	2	0.11
(1,616)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD23	2	0.11
(1,616)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD21	2	0.11
(1,616)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD22	2	0.11
(1,616)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD23	2	0.11
(1,616)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD21	2	0.11
(1,616)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD22	2	0.11
(1,616)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD23	2	0.11
(1,616)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD21	9	0.11
(1,616)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD22	9	0.11
(1,616)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD23	9	0.11
(1,616)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD21	9	0.11
(1,616)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD22	9	0.11
(1,616)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD23	9	0.11
(1,616)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD21	9	0.11
(1,616)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD22	9	0.11
(1,616)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD23	9	0.11
(1,616)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD21	12	0.11
(1,616)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD22	12	0.11
(1,616)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD23	12	0.11
(1,616)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD21	12	0.11
(1,616)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD22	12	0.11
(1,616)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD23	12	0.11
(1,616)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD21	12	0.11
(1,616)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD22	12	0.11
(1,616)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD23	12	0.11
(1,616)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD21	20	0.11
(1,616)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD22	20	0.11
(1,616)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD23	20	0.11
()/			l	od on next nage



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,616)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD21	20	0.11
(1,616)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD22	20	0.11
(1,616)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD23	20	0.11
(1,616)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD21	20	0.11
(1,616)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD22	20	0.11
(1,616)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD23	20	0.11
(1,60)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD11	11	0.11
(1,60)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD12	11	0.11
(1,60)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD13	11	0.11
(1,59)	1:A:132:GLU:H	1:A:138:LEU:HD11	8	0.11
(1,59)	1:A:132:GLU:H	1:A:138:LEU:HD12	8	0.11
(1,59)	1:A:132:GLU:H	1:A:138:LEU:HD13	8	0.11
(1,584)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD11	16	0.11
(1,584)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD12	16	0.11
(1,584)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD13	16	0.11
(1,581)	1:A:102:VAL:HG11	1:A:113:ARG:H	8	0.11
(1,581)	1:A:102:VAL:HG12	1:A:113:ARG:H	8	0.11
(1,581)	1:A:102:VAL:HG13	1:A:113:ARG:H	8	0.11
(1,57)	1:A:112:LEU:HD11	1:A:113:ARG:H	2	0.11
(1,57)	1:A:112:LEU:HD12	1:A:113:ARG:H	2	0.11
(1,57)	1:A:112:LEU:HD13	1:A:113:ARG:H	2	0.11
(1,564)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:137:TYR:H	19	0.11
(1,564)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:137:TYR:H	19	0.11
(1,564)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:137:TYR:H	19	0.11
(1,557)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:131:GLU:H	11	0.11
(1,557)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:131:GLU:H	11	0.11
(1,557)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:131:GLU:H	11	0.11
(1,555)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD11	19	0.11
(1,555)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD12	19	0.11
(1,555)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD13	19	0.11
(1,551)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD11	9	0.11
(1,551)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD12	9	0.11
(1,551)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD13	9	0.11
(1,542)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD21	4	0.11
(1,542)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD22	4	0.11
(1,542)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD23	4	0.11
(1,536)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:102:VAL:H	14	0.11
(1,536)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:102:VAL:H	14	0.11
(1,536)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:102:VAL:H	14	0.11
(1,52)	1:A:16:GLN:HE21	1:A:46:VAL:HG11	1	0.11
(1,52)	1:A:16:GLN:HE21	1:A:46:VAL:HG12	1	0.11
(1,52)	1:A:16:GLN:HE21	1:A:46:VAL:HG13	1	0.11



 $Continued\ from\ previous\ page...$

(1 F1F)	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,517)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:HG21	8	0.11
(1,517)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:HG22	8	0.11
(1,517)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:HG23	8	0.11
(1,517)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:HG21	11	0.11
(1,517)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:HG22	11	0.11
(1,517)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:HG23	11	0.11
(1,512)	1:A:79:LEU:HD21	1:A:87:ARG:H	16	0.11
(1,512)	1:A:79:LEU:HD22	1:A:87:ARG:H	16	0.11
(1,512)	1:A:79:LEU:HD23	1:A:87:ARG:H	16	0.11
(1,493)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:52:PHE:H	20	0.11
(1,493)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:52:PHE:H	20	0.11
(1,493)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:52:PHE:H	20	0.11
(1,490)	1:A:51:LEU:HD11	1:A:52:PHE:H	16	0.11
(1,490)	1:A:51:LEU:HD12	1:A:52:PHE:H	16	0.11
(1,490)	1:A:51:LEU:HD13	1:A:52:PHE:H	16	0.11
(1,49)	1:A:78:LYS:H	1:A:90:VAL:HG11	13	0.11
(1,49)	1:A:78:LYS:H	1:A:90:VAL:HG12	13	0.11
(1,49)	1:A:78:LYS:H	1:A:90:VAL:HG13	13	0.11
(1,488)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:51:LEU:H	17	0.11
(1,488)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:51:LEU:H	17	0.11
(1,488)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:51:LEU:H	17	0.11
(1,469)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:24:GLY:H	8	0.11
(1,469)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:24:GLY:H	8	0.11
(1,469)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:24:GLY:H	8	0.11
(1,468)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:23:ASN:H	12	0.11
(1,468)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:23:ASN:H	12	0.11
(1,468)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:23:ASN:H	12	0.11
(1,462)	1:A:45:ILE:HD11	1:A:46:VAL:H	19	0.11
(1,462)	1:A:45:ILE:HD12	1:A:46:VAL:H	19	0.11
(1,462)	1:A:45:ILE:HD13	1:A:46:VAL:H	19	0.11
(1,458)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:10:LYS:H	10	0.11
(1,458)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:10:LYS:H	10	0.11
(1,458)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:10:LYS:H	10	0.11
(1,458)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:10:LYS:H	15	0.11
(1,458)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:10:LYS:H	15	0.11
(1,458)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:10:LYS:H	15	0.11
(1,453)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG21	1	0.11
(1,453)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG22	1	0.11
(1,453)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG23	1	0.11
(1,453)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG21	4	0.11
(1,453)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG22	4	0.11
(1,453)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG23	4	0.11



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,453)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG21	5	0.11
(1,453)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG22	5	0.11
(1,453)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG23	5	0.11
(1,452)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG21	1	0.11
(1,452)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG22	1	0.11
(1,452)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG23	1	0.11
(1,451)	1:A:75:VAL:HG11	1:A:91:ARG:H	18	0.11
(1,451)	1:A:75:VAL:HG12	1:A:91:ARG:H	18	0.11
(1,451)	1:A:75:VAL:HG13	1:A:91:ARG:H	18	0.11
(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD11	11	0.11
(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD12	11	0.11
(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD13	11	0.11
(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD11	16	0.11
(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD12	16	0.11
(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD13	16	0.11
(1,443)	1:A:90:VAL:HG21	1:A:101:HIS:H	10	0.11
(1,443)	1:A:90:VAL:HG22	1:A:101:HIS:H	10	0.11
(1,443)	1:A:90:VAL:HG23	1:A:101:HIS:H	10	0.11
(1,438)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:120:ALA:H	6	0.11
(1,438)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:120:ALA:H	6	0.11
(1,438)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:120:ALA:H	6	0.11
(1,438)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:120:ALA:H	8	0.11
(1,438)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:120:ALA:H	8	0.11
(1,438)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:120:ALA:H	8	0.11
(1,435)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:26:GLU:H	16	0.11
(1,435)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:26:GLU:H	16	0.11
(1,435)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:26:GLU:H	16	0.11
(1,42)	1:A:15:MET:H	1:A:19:VAL:HG21	3	0.11
(1,42)	1:A:15:MET:H	1:A:19:VAL:HG22	3	0.11
(1,42)	1:A:15:MET:H	1:A:19:VAL:HG23	3	0.11
(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD21	10	0.11
(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD22	10	0.11
(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD23	10	0.11
(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD21	10	0.11
(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD22	10	0.11
(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD23	10	0.11
(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD21	10	0.11
(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD22	10	0.11
(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD23	10	0.11
(1,41)	1:A:45:ILE:H	1:A:46:VAL:HG21	18	0.11
(1,41)	1:A:45:ILE:H	1:A:46:VAL:HG22	18	0.11
(1,41)	1:A:45:ILE:H	1:A:46:VAL:HG23	18	0.11



 $Continued\ from\ previous\ page...$

(1,407) 1:A:12:LEU:HD11 1:A:46:VAL:HG21 1 (1,407) 1:A:12:LEU:HD11 1:A:46:VAL:HG22 1 (1,407) 1:A:12:LEU:HD11 1:A:46:VAL:HG23 1 (1,407) 1:A:12:LEU:HD12 1:A:46:VAL:HG21 1 (1,407) 1:A:12:LEU:HD12 1:A:46:VAL:HG22 1 (1,407) 1:A:12:LEU:HD12 1:A:46:VAL:HG23 1 (1,407) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:46:VAL:HG21 1	0.11 0.11 0.11 0.11 0.11 0.11 0.11
(1,407) 1:A:12:LEU:HD11 1:A:46:VAL:HG23 1 (1,407) 1:A:12:LEU:HD12 1:A:46:VAL:HG21 1 (1,407) 1:A:12:LEU:HD12 1:A:46:VAL:HG22 1 (1,407) 1:A:12:LEU:HD12 1:A:46:VAL:HG23 1 (1,407) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:46:VAL:HG21 1	0.11 0.11 0.11 0.11 0.11 0.11
(1,407) 1:A:12:LEU:HD12 1:A:46:VAL:HG21 1 (1,407) 1:A:12:LEU:HD12 1:A:46:VAL:HG22 1 (1,407) 1:A:12:LEU:HD12 1:A:46:VAL:HG23 1 (1,407) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:46:VAL:HG21 1	0.11 0.11 0.11 0.11 0.11
(1,407) 1:A:12:LEU:HD12 1:A:46:VAL:HG22 1 (1,407) 1:A:12:LEU:HD12 1:A:46:VAL:HG23 1 (1,407) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:46:VAL:HG21 1	0.11 0.11 0.11 0.11
(1,407) 1:A:12:LEU:HD12 1:A:46:VAL:HG23 1 (1,407) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:46:VAL:HG21 1	0.11 0.11 0.11
(1,407) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:46:VAL:HG21 1	0.11 0.11
	0.11
(1,407) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:46:VAL:HG22 1	0.11
(1,407) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:46:VAL:HG23 1	0.11
(1,404) 1:A:102:VAL:HG11 1:A:112:LEU:HD21 4	0.11
(1,404) 1:A:102:VAL:HG11 1:A:112:LEU:HD22 4	0.11
(1,404) 1:A:102:VAL:HG11 1:A:112:LEU:HD23 4	0.11
(1,404) 1:A:102:VAL:HG12 1:A:112:LEU:HD21 4	0.11
(1,404) 1:A:102:VAL:HG12 1:A:112:LEU:HD22 4	0.11
(1,404) 1:A:102:VAL:HG12 1:A:112:LEU:HD23 4	0.11
(1,404) 1:A:102:VAL:HG13 1:A:112:LEU:HD21 4	0.11
(1,404) 1:A:102:VAL:HG13 1:A:112:LEU:HD22 4	0.11
(1,404) 1:A:102:VAL:HG13 1:A:112:LEU:HD23 4	0.11
(1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG21 9	0.11
(1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG22 9	0.11
(1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG23 9	0.11
(1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG21 9	0.11
(1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG22 9	0.11
(1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG23 9	0.11
(1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG21 9	0.11
(1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG22 9	0.11
(1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 9	0.11
(1,375) 1:A:131:GLU:H 1:A:133:GLY:H 19	0.11
(1,374) 1:A:132:GLU:H 1:A:134:TYR:H 4	0.11
(1,374) 1:A:132:GLU:H 1:A:134:TYR:H 19	0.11
(1,329) 1:A:79:LEU:H 1:A:89:GLU:H 4	0.11
(1,329) 1:A:79:LEU:H 1:A:89:GLU:H 17	0.11
(1,329) 1:A:79:LEU:H 1:A:89:GLU:H 20	0.11
(1,31) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:49:LYS:H 2	0.11
(1,31) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:49:LYS:H 2	0.11
(1,31) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:49:LYS:H 2	0.11
(1,303) 1:A:18:GLU:H 1:A:20:THR:H 19	0.11
(1,30) 1:A:106:GLY:H 1:A:112:LEU:HD21 8	0.11
(1,30) 1:A:106:GLY:H 1:A:112:LEU:HD22 8	0.11
(1,30) 1:A:106:GLY:H 1:A:112:LEU:HD23 8	0.11
(1,299) 1:A:15:MET:H 1:A:18:GLU:H 10	0.11
(1,299) 1:A:15:MET:H 1:A:18:GLU:H 16	0.11



Continued from previous page...

(1,298) 1:A:14:ARG:H 1:A:17:TYR:H 13 0.11 (1,267) 1:A:21:GLN:H 1:A:24:GLY:H 16 0.11 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD11 9 0.11 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD12 9 0.11 (1,26) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD13 9 0.11 (1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD12 11 0.11 (1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD13 11 0.11 (1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD13 11 0.11 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD11 11 0.11 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD13 11 0.11 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 11 0.11 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 11 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 11 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD11 9 0.11 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD12 9 0.11 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD13 9 0.11 (1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD11 11 0.11 (1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD12 11 0.11 (1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD13 11 0.11 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD11 11 0.11 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD12 11 0.11 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD13 11 0.11 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD11 11 0.11 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD11 11 0.11 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 11 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 1 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:	(1,298)	1:A:14:ARG:H	1:A:17:TYR:H	13	0.11
(1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD12 9 0.11 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD13 9 0.11 (1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD11 11 0.11 (1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD13 11 0.11 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD13 11 0.11 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD11 11 0.11 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD12 11 0.11 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 11 0.11 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD11 11 0.11 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD12 11 0.11 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 11 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 11 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD11 5 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H	(1,267)	1:A:21:GLN:H	1:A:24:GLY:H	16	0.11
(1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD13 9 0.11 (1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD11 11 0.11 (1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD12 11 0.11 (1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD13 11 0.11 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD11 11 0.11 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD12 11 0.11 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 11 0.11 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD11 11 0.11 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD12 11 0.11 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 11 0.11 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 11 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 1 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD11 5 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H <t< td=""><td>(1,26)</td><td>1:A:128:LYS:H</td><td>1:A:129:LEU:HD11</td><td>9</td><td>0.11</td></t<>	(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD11	9	0.11
(1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD11 11 0.11 (1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD12 11 0.11 (1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD13 11 0.11 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD11 11 0.11 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD12 11 0.11 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 11 0.11 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD11 11 0.11 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD12 11 0.11 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD12 11 0.11 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD12 11 0.11 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 11 0.11 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD12 11 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 11 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H	(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD12	9	0.11
(1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD12 11 0.11 (1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD13 11 0.11 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD11 11 0.11 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD12 11 0.11 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 11 0.11 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD11 11 0.11 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD12 11 0.11 (1,266) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 11 0.11 (1,266) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 11 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 5 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H	(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD13	9	0.11
(1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD13 11 0.11 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD11 11 0.11 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD12 11 0.11 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD13 11 0.11 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD11 11 0.11 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD12 11 0.11 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 11 0.11 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 11 0.11 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 11 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD11 5 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 5 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 6 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 6 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H <td< td=""><td>(1,256)</td><td>1:A:46:VAL:HG21</td><td>1:A:51:LEU:HD11</td><td>11</td><td>0.11</td></td<>	(1,256)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD11	11	0.11
(1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD11 11 0.11 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD12 11 0.11 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD13 11 0.11 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD11 11 0.11 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD12 11 0.11 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 11 0.11 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 11 0.11 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 11 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD11 5 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 5 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD12 6 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 6 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD11 9 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1	(1,256)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD12	11	0.11
(1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD12 11 0.11 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD13 11 0.11 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD11 11 0.11 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD12 11 0.11 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 11 0.11 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 11 0.11 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 11 0.11 (1,248) 1:A:4120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD11 5 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 5 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD12 6 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 6 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD12 9 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 9 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:	(1,256)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD13	11	0.11
(1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD13 11 0.11 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD11 11 0.11 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD12 11 0.11 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 11 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD11 5 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD12 5 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 5 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD11 6 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 6 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 9 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD12 9 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 9 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 9 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:L	(1,256)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD11	11	0.11
(1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD11 11 0.11 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD12 11 0.11 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 11 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD11 5 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD12 5 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 5 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD11 6 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD12 6 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 6 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD11 9 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 9 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 9 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 10 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LE	(1,256)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD12	11	0.11
(1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD12 11 0.11 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 11 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD11 5 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD12 5 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 5 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD11 6 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD12 6 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 6 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD11 9 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 9 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 9 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 10 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD12 10 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU	(1,256)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD13	11	0.11
(1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 11 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD11 5 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD12 5 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 5 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD11 6 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD12 6 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 6 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD11 9 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 9 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 9 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD11 10 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD12 10 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 10 0.11 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:A	(1,256)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD11	11	0.11
(1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD11 5 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD12 5 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 5 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD11 6 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD12 6 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 6 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD12 9 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 9 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD11 10 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD11 10 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 10 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 10 0.11 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 5 0.11 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:AR	(1,256)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD12	11	0.11
(1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD11 5 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD12 5 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 5 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD11 6 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD12 6 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 6 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD12 9 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 9 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD11 10 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD11 10 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 10 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 10 0.11 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 5 0.11 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:AR	(1,256)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD13	11	0.11
(1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD12 5 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 5 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD11 6 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD12 6 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 6 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD11 9 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD12 9 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 9 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD11 10 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD12 10 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 10 0.11 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 5 0.11 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 5 0.11 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG	(1,248)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD11	5	0.11
(1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 5 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD11 6 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD12 6 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 6 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD11 9 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD12 9 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 9 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD11 10 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD12 10 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 10 0.11 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 5 0.11 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 5 0.11 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 5 0.11 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG		1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD12	5	0.11
(1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD11 6 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD12 6 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 6 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD11 9 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD12 9 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 9 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD11 10 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD12 10 0.11 (1,248) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 5 0.11 (1,247) 1:A:121:LEU:HD12 1:A:122:ARG:H 5 0.11 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 5 0.11 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 5 0.11 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 5 0.11	. ,	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD13	5	0.11
(1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD12 6 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 6 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD11 9 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD12 9 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 9 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD11 10 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD12 10 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 10 0.11 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 5 0.11 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 5 0.11 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 5 0.11 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 5 0.11 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 5 0.11		1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD11	6	0.11
(1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD11 9 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD12 9 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 9 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD11 10 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD12 10 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 10 0.11 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 5 0.11 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 5 0.11 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 5 0.11 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 5 0.11 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 5 0.11 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 12 0.11		1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD12	6	0.11
(1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD12 9 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 9 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD11 10 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD12 10 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 10 0.11 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 5 0.11 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 5 0.11 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 5 0.11 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 5 0.11	(1,248)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD13	6	0.11
(1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 9 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD11 10 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD12 10 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 10 0.11 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 5 0.11 (1,247) 1:A:121:LEU:HD12 1:A:122:ARG:H 5 0.11 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 5 0.11 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 5 0.11 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 12 0.11	(1,248)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD11	9	0.11
(1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 9 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD11 10 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD12 10 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 10 0.11 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 5 0.11 (1,247) 1:A:121:LEU:HD12 1:A:122:ARG:H 5 0.11 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 5 0.11 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 5 0.11 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 12 0.11	(1,248)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD12	9	0.11
(1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD12 10 0.11 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 10 0.11 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 5 0.11 (1,247) 1:A:121:LEU:HD12 1:A:122:ARG:H 5 0.11 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 5 0.11 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 5 0.11 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 12 0.11	(1,248)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD13	9	0.11
(1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 10 0.11 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 5 0.11 (1,247) 1:A:121:LEU:HD12 1:A:122:ARG:H 5 0.11 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 5 0.11 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 12 0.11 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 12 0.11	(1,248)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD11	10	0.11
(1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 5 0.11 (1,247) 1:A:121:LEU:HD12 1:A:122:ARG:H 5 0.11 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 5 0.11 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 12 0.11 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 12 0.11	(1,248)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD12	10	0.11
(1,247) 1:A:121:LEU:HD12 1:A:122:ARG:H 5 0.11 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 5 0.11 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 12 0.11	(1,248)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD13	10	0.11
(1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 5 0.11 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 12 0.11	(1,247)	1:A:121:LEU:HD11	1:A:122:ARG:H	5	0.11
(1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 12 0.11	(1,247)	1:A:121:LEU:HD12	1:A:122:ARG:H	5	0.11
	(1,247)	1:A:121:LEU:HD13	1:A:122:ARG:H	5	0.11
	(1,247)	1:A:121:LEU:HD11	1:A:122:ARG:H	12	0.11
(1,247) 1:A:121:LEU:HD12 1:A:122:ARG:H 12 0.11	(1,247)	1:A:121:LEU:HD12	1:A:122:ARG:H	12	0.11
(1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 12 0.11	(1,247)	1:A:121:LEU:HD13	1:A:122:ARG:H	12	0.11
(1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 19 0.11	, ,	1:A:121:LEU:HD11	1:A:122:ARG:H	19	0.11
(1,247) 1:A:121:LEU:HD12 1:A:122:ARG:H 19 0.11	· · /	1:A:121:LEU:HD12	1:A:122:ARG:H	19	0.11
(1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 19 0.11		1:A:121:LEU:HD13	1:A:122:ARG:H	19	0.11
(1,22) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:137:TYR:H 11 0.11	(1,22)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:137:TYR:H	11	0.11
(1,22) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:137:TYR:H 11 0.11		1:A:129:LEU:HD12	1:A:137:TYR:H	11	0.11
(1,22) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:137:TYR:H 11 0.11		1:A:129:LEU:HD13	1:A:137:TYR:H	11	0.11
(1,194) 1:A:42:TYR:H 1:A:43:VAL:HG11 2 0.11		1:A:42:TYR:H	1:A:43:VAL:HG11	2	0.11
(1,194) 1:A:42:TYR:H 1:A:43:VAL:HG12 2 0.11	(1,194)	1:A:42:TYR:H	1:A:43:VAL:HG12	2	0.11
(1,194) 1:A:42:TYR:H 1:A:43:VAL:HG13 2 0.11	(1,194)	1:A:42:TYR:H	1:A:43:VAL:HG13	2	0.11
(1,194) 1:A:42:TYR:H 1:A:43:VAL:HG11 11 0.11	(1,194)	1:A:42:TYR:H	1:A:43:VAL:HG11	11	0.11



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,194)	1:A:42:TYR:H	1:A:43:VAL:HG12	11	0.11
(1,194)	1:A:42:TYR:H	1:A:43:VAL:HG13	11	0.11
(1,192)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:H	5	0.11
(1,192)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:H	5	0.11
(1,192)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:H	5	0.11
(1,192)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:H	14	0.11
(1,192)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:H	14	0.11
(1,192)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:H	14	0.11
(1,190)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:26:GLU:H	1	0.11
(1,190)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:26:GLU:H	1	0.11
(1,190)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:26:GLU:H	1	0.11
(1,176)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:45:ILE:HD11	9	0.11
(1,176)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:45:ILE:HD12	9	0.11
(1,176)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:45:ILE:HD13	9	0.11
(1,176)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:45:ILE:HD11	9	0.11
(1,176)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:45:ILE:HD12	9	0.11
(1,176)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:45:ILE:HD13	9	0.11
(1,176)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:45:ILE:HD11	9	0.11
(1,176)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:45:ILE:HD12	9	0.11
(1,176)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:45:ILE:HD13	9	0.11
(1,176)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:45:ILE:HD11	13	0.11
(1,176)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:45:ILE:HD12	13	0.11
(1,176)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:45:ILE:HD13	13	0.11
(1,176)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:45:ILE:HD11	13	0.11
(1,176)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:45:ILE:HD12	13	0.11
(1,176)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:45:ILE:HD13	13	0.11
(1,176)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:45:ILE:HD11	13	0.11
(1,176)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:45:ILE:HD12	13	0.11
(1,176)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:45:ILE:HD13	13	0.11
(1,161)	1:A:133:GLY:H	1:A:135:GLU:H	7	0.11
(1,161)	1:A:133:GLY:H	1:A:135:GLU:H	19	0.11
(1,15)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG11	13	0.11
(1,15)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG12	13	0.11
(1,15)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG13	13	0.11
(1,15)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG11	16	0.11
(1,15)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG12	16	0.11
(1,15)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG13	16	0.11
(1,139)	1:A:46:VAL:H	1:A:48:GLY:H	7	0.11
(1,131)	1:A:17:TYR:H	1:A:19:VAL:H	14	0.11
(1,13)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:131:GLU:H	7	0.11
(1,13)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:131:GLU:H	7	0.11
(1,13)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:131:GLU:H	7	0.11



 $Continued\ from\ previous\ page...$

(1,13) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:131:GLU:H 20 0.11 (1,13) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:131:GLU:H 20 0.11 (1,14) 1:A:29:LEU:HD23 1:A:131:GLU:H 20 0.11 (1,14) 1:A:29:PHE:H 1:A:31:ASN:H 18 0.11 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 8 0.11 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 8 0.11 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 8 0.11 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 8 0.11 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 16 0.11 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 16 0.11 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 16 0.11 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 16 0.11 (1,10) 1:A:105:ASP:H 1:A:138:LEU:HD23 16 0.11 (1,10) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:138:LEU:H 5 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:138:LEU:H 5 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:H 5 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:H 5 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:H 5 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:138:LEU:H 15 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:138:LEU:H 15 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:138:LEU:H 15 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:H 15 0.1 (1,84) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 15 0.1 (1,63) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:H 16 0.1 (1,84) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 15 0.1 (1,63) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:H 10 0.1 (1,63) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 12 0.1 (1,571) 1:A:140:LEU:HD11 1:A:141:PHE:H 10 0.1	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,13) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:131:GLU:H 20 0.11 (1,114) 1:A:29:PHE:H 1:A:31:ASN:H 18 0.11 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 8 0.11 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 8 0.11 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 8 0.11 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 16 0.11 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 16 0.11 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 16 0.11 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 16 0.11 (1,106) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:138:LEU:H 5 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:138:LEU:H 5 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:H 5 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:H 15 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:H 1	(1,13)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:131:GLU:H	20	0.11
(1,114) 1:A:29:PHE:H 1:A:31:ASN:H 18 0.11 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 8 0.11 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 8 0.11 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 8 0.11 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 8 0.11 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 16 0.11 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 16 0.11 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 16 0.11 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 16 0.11 (1,106) 1:A:105:ASP:H 1:A:113:ARG:H 17 0.11 (1,9) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:138:LEU:H 5 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:138:LEU:H 5 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:H 5 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:H 15 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:138:LEU:H 15 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:138:LEU:H 15 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:H 15 0.1 (1,84) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 8 0.1 (1,84) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 8 0.1 (1,84) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 16 0.1 (1,84) 1:A:149:LYS:H 1:A:12:LEU:H 16 0.1 (1,85) 1:A:34:TRP:H 1:A:36:HIS:H 17 0.1 (1,63) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 12 0.1 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 12 0.1 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 12 0.1 (1,633) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 12 0.1 (1,640) 1:A:10:LVS:LHG11 1:A:22:ASN:H 19 0.1 (1,588) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:22:ASN:H 19 0.1 (1,588) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:22:ASN:H 19 0.1 (1,588) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:22:ASN:H 19 0.1 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG11 12 0.1 (1,585) 1:A:14:LEU:HD11 12 0.1 (1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:11:LEU:HD21 14 0.1 (1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:11:LEU:HD22 14 0.1 (1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:11:LEU:HD23 14 0.1 (1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:11:LEU:HD24 14 0.1 (1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:11:LEU:HD24 14 0.1 (1,577) 1:A:140:LEU:HD11 1:A:141:PHE:H 10 0.1	(1,13)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:131:GLU:H	20	0.11
(1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 8 0.11 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 8 0.11 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 8 0.11 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 16 0.11 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 16 0.11 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 16 0.11 (1,11) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:138:LEU:H 5 0.1 (1,106) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:138:LEU:H 5 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:138:LEU:H 5 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:H 15 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:138:LEU:H 15 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:138:LEU:H 15 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:H 15 0.1 (1,8) 1:A:149:LEU:HD23 1:A:138:LEU:H 15	(1,13)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:131:GLU:H	20	0.11
(1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 8 0.11 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 8 0.11 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 16 0.11 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 16 0.11 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 16 0.11 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 16 0.11 (1,106) 1:A:105:ASP:H 1:A:113:ARG:H 17 0.11 (1,9) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:138:LEU:H 5 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:138:LEU:H 5 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:H 5 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:H 5 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:138:LEU:H 15 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:138:LEU:H 15 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:H 15 0.1 (1,84) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 8 0.1 (1,84) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 16 0.1 (1,84) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 16 0.1 (1,63) 1:A:34:TRP:H 1:A:36:HIS:H 17 0.1 (1,63) 1:A:34:TRP:H 1:A:36:HIS:H 17 0.1 (1,63) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 12 0.1 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 12 0.1 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD12 12 0.1 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 12 0.1 (1,633) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 12 0.1 (1,588) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:22:ASN:H 19 0.1 (1,588) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:22:ASN:H 19 0.1 (1,588) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:22:ASN:H 19 0.1 (1,588) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:22:ASN:H 19 0.1 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG11 12 0.1 (1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:112:LEU:HD21 14 0.1 (1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:112:LEU:HD23 14 0.1 (1,571) 1:A:140:LEU:HD11 1:A:141:PHE:H 10 0.1 (1,571) 1:A:140:LEU:HD11 1:A:141:PHE:H 13 0.1	(1,114)	1:A:29:PHE:H	1:A:31:ASN:H	18	0.11
(1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 8 0.11 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 16 0.11 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 16 0.11 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 16 0.11 (1,106) 1:A:105:ASP:H 1:A:138:LEU:HD23 16 0.11 (1,90) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:138:LEU:H 5 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:138:LEU:H 5 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:H 5 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:H 15 0.1 (1,84) 1:A:10:LYS:H 1:A:138:LEU:H 15 <td>(1,11)</td> <td>1:A:128:LYS:H</td> <td>1:A:129:LEU:HD21</td> <td>8</td> <td>0.11</td>	(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD21	8	0.11
(1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 16 0.11 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 16 0.11 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 16 0.11 (1,106) 1:A:105:ASP:H 1:A:113:ARG:H 17 0.11 (1,9) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:138:LEU:H 5 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:138:LEU:H 5 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:H 5 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:H 5 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:H 5 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:138:LEU:H 15 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:138:LEU:H 15 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:138:LEU:H 15 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:H 15 0.1 (1,84) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 8 0.1 (1,84) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 16 0.1 (1,84) 1:A:13:LYS:H 1:A:12:LEU:H 16 0.1 (1,84) 1:A:47:SER:H 1:A:48:GLY:H 13 0.1 (1,68) 1:A:47:SER:H 1:A:48:GLY:H 13 0.1 (1,68) 1:A:47:SER:H 1:A:12:LEU:HD11 12 0.1 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 12 0.1 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 12 0.1 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 12 0.1 (1,693) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 12 0.1 (1,588) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:22:ASN:H 19 0.1 (1,588) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:12:LEU:HD21 12 0.1 (1,588) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:22:ASN:H 19 0.1 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG11 12 0.1 (1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:12:LEU:HD23 14 0.1 (1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:12:LEU:HD23 14 0.1 (1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:112:LEU:HD23 14 0.1 (1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:112:LEU:HD24 14 0.1 (1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:112:LEU:HD24 14 0.1 (1,577) 1:A:140:LEU:HD13 1:A:141:PHE:H 10 0.1 (1,577) 1:	(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD22	8	0.11
(1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 16 0.11 (1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 16 0.11 (1,106) 1:A:105:ASP:H 1:A:113:ARG:H 17 0.11 (1,9) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:138:LEU:H 5 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:138:LEU:H 5 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:138:LEU:H 5 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:138:LEU:H 5 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:138:LEU:H 15 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:138:LEU:H 15 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:138:LEU:H 15 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:H 15 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:H 15 0.1 (1,84) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 8 0.1 (1,84) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 8 0.1 (1,84) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 16 0.1 (1,81) 1:A:47:SER:H 1:A:48:GLY:H 13 0.1 (1,68) 1:A:34:TRP:H 1:A:36:HIS:H 17 0.1 (1,63) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 12 0.1 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 12 0.1 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD12 12 0.1 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 12 0.1 (1,609) 1:A:102:VAL:H 1:A:88:THR:H 12 0.1 (1,588) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:22:ASN:H 19 0.1 (1,588) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:22:ASN:H 19 0.1 (1,588) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:22:ASN:H 19 0.1 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG11 12 0.1 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG11 12 0.1 (1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:11:LEU:HD22 14 0.1 (1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:11:LEU:HD21 14 0.1 (1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:11:LEU:HD22 14 0.1 (1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:11:LEU:HD21 14 0.1 (1,577) 1:A:110:LEU:HD11 1:A:11:LEU:HD21 14 0.1 (1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:11:LEU:HD21 14 0.1 (1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:11:LEU:HD21 14 0.1 (1,577) 1:A:110:LEU:HD11 1:A:11:PHE:H 10 0.1 (1,577) 1:A:140:LEU:HD11 1:A:141:PHE:H 10 0.1 (1,571) 1:A:140:LEU:HD11 1:A:141:PHE:H 10 0.1	(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD23	8	0.11
(1,11) 1:A:128:LVS:H 1:A:129:LEU:HD23 16 0.11 (1,106) 1:A:105:ASP:H 1:A:113:ARG:H 17 0.11 (1,9) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:138:LEU:H 5 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:138:LEU:H 5 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:138:LEU:H 5 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:H 5 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:138:LEU:H 15 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:138:LEU:H 15 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:138:LEU:H 15 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:138:LEU:H 15 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:H 15 0.1 (1,84) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 8 0.1 (1,84) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 8 0.1 (1,84) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 8 0.1 (1,84) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 16 0.1 (1,81) 1:A:47:SER:H 1:A:48:GLY:H 13 0.1 (1,68) 1:A:34:TRP:H 1:A:36:HIS:H 17 0.1 (1,63) 1:A:54:SER:HG 1:A:57:LYS:H 15 0.1 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 12 0.1 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 12 0.1 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD12 12 0.1 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 12 0.1 (1,588) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:22:ASN:H 19 0.1 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG11 12 0.1 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 12 0.1 (1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:11:LEU:HD23 14 0.1 (1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:112:LEU:HD23 14 0.1 (1,577) 1:A:140:LEU:HD11 1:A:141:PHE:H 10 0.1 (1,571) 1:A:140:LEU:HD11 1:A:141:PHE:H 13 0.1 (1,571) 1:A:140:LEU:HD11 1:A:141:PHE:H 13 0.1 (1,571) 1:A:140:LEU:HD11 1:	(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD21	16	0.11
(1,106) 1:A:105:ASP:H 1:A:113:ARG:H 17 0.11 (1,9) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:138:LEU:H 5 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:138:LEU:H 5 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:H 5 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:H 5 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:138:LEU:H 15 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:138:LEU:H 15 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:H 15 0.1 (1,84) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 8 0.1 (1,84) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 8 0.1 (1,84) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 16 0.1 (1,81) 1:A:34:TSER:H 1:A:36:HIS:H 17 0.1 (1,81) 1:A:34:TSER:H 1:A:36:HIS:H 17 0.1 (1,63) 1:A:54:SER:HG 1:A:57:LYS:H 15 0.1 (1,63) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 12 0.1 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 12 0.1 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD12 12 0.1 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 12 0.1 (1,588) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:22:ASN:H 19 0.1 (1,588) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:22:ASN:H 19 0.1 (1,588) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:22:ASN:H 19 0.1 (1,588) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:22:ASN:H 19 0.1 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG11 12 0.1 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG11 12 0.1 (1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:112:LEU:HD22 14 0.1 (1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:112:LEU:HD23 14 0.1 (1,577) 1:A:140:LEU:HD11 1:A:141:PHE:H 10 0.1 (1,571) 1:A:140:LEU:HD11 1:A:141:PHE:H 10 0.1 (1,571) 1:A:140:LEU:HD11 1:A:141:PHE:H 10 0.1 (1,571) 1:A:140:LEU:HD12 1:A:141:PHE:H 10 0.1 (1,571) 1:A:140:LEU:HD13 1:A:141:PHE:H 10 0.1 (1,571) 1:A:140:LEU:HD13 1:A:141:PHE:H 13 0.1	(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD22	16	0.11
(1,9) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:138:LEU:H 5 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:138:LEU:H 5 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:H 5 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:138:LEU:H 15 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:H 15 0.1 (1,9) 1:A:10:LYS:H 1:A:138:LEU:H 15 0.1 (1,84) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 8 0.1 (1,84) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 16 0.1 (1,84) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 16 0.1 (1,84) 1:A:47:SER:H 1:A:36:HIS:H 17 0.1 (1,681) 1:A:43:TRP:H 1:A:36:HIS:H 17 0.1 (1,682) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 12 0.1 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD12 12 0.1 (1,699) 1:A:10:VAL:HG11 1:A:22:ASN:H 19 0.1	(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD23	16	0.11
(1,9) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:138:LEU:H 5 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:H 5 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:138:LEU:H 15 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:138:LEU:H 15 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:H 15 0.1 (1,9) 1:A:10:LYS:H 1:A:138:LEU:H 15 0.1 (1,84) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 8 0.1 (1,84) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 16 0.1 (1,84) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 16 0.1 (1,84) 1:A:47:SER:H 1:A:48:GLY:H 13 0.1 (1,84) 1:A:47:SER:H 1:A:48:GLY:H 13 0.1 (1,68) 1:A:43:TRP:H 1:A:43:GLY:H 13 0.1 (1,68) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 12 0.1 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD12 12 0.1	(1,106)	1:A:105:ASP:H	1:A:113:ARG:H	17	0.11
(1,9) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:H 5 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:138:LEU:H 15 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:138:LEU:H 15 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:H 15 0.1 (1,84) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 8 0.1 (1,84) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 16 0.1 (1,84) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 16 0.1 (1,81) 1:A:47:SER:H 1:A:48:GLY:H 13 0.1 (1,68) 1:A:34:TRP:H 1:A:36:HIS:H 17 0.1 (1,68) 1:A:34:TRP:H 1:A:36:HIS:H 17 0.1 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 12 0.1 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 12 0.1 (1,623) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:28:THR:H 12 0.1 (1,588) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:28:THR:H 19 0.1 <td>(1,9)</td> <td>1:A:129:LEU:HD21</td> <td>1:A:138:LEU:H</td> <td>5</td> <td>0.1</td>	(1,9)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:138:LEU:H	5	0.1
(1,9) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:138:LEU:H 15 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:138:LEU:H 15 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:H 15 0.1 (1,84) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 8 0.1 (1,84) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 16 0.1 (1,84) 1:A:10:LYS:H 1:A:48:GLY:H 13 0.1 (1,68) 1:A:34:TRP:H 1:A:36:HIS:H 17 0.1 (1,63) 1:A:45:SER:HG 1:A:57:LYS:H 15 0.1 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 12 0.1 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD12 12 0.1 (1,623) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:88:THR:H 12 0.1	(1,9)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:138:LEU:H	5	0.1
(1,9) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:138:LEU:H 15 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:138:LEU:H 15 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:H 15 0.1 (1,84) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 8 0.1 (1,84) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 16 0.1 (1,81) 1:A:47:SER:H 1:A:48:GLY:H 13 0.1 (1,68) 1:A:34:TRP:H 1:A:36:HIS:H 17 0.1 (1,63) 1:A:54:SER:HG 1:A:57:IYS:H 15 0.1 (1,63) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 12 0.1 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD12 12 0.1 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 12 0.1 (1,623) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:28:AS:HH:H 12 0.1 (1,588) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:22:ASN:H 19 0.1 (1,588) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:22:ASN:H 19 0.1	(1,9)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:138:LEU:H	5	0.1
(1,9) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:H 15 0.1 (1,84) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 8 0.1 (1,84) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 16 0.1 (1,81) 1:A:47:SER:H 1:A:48:GLY:H 13 0.1 (1,68) 1:A:34:TRP:H 1:A:36:HIS:H 17 0.1 (1,63) 1:A:54:SER:HG 1:A:57:LYS:H 15 0.1 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 12 0.1 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD12 12 0.1 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 12 0.1 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 12 0.1 (1,623) 1:A:19:VAL:HG! 1:A:88:THR:H 12 0.1 (1,609) 1:A:102:VAL:HG! 1:A:88:THR:H 12 0.1 (1,588) 1:A:19:VAL:HG!1 1:A:22:ASN:H 19 0.1 (1,588) 1:A:19:VAL:HG!3 1:A:22:ASN:H 19 0.1		1:A:129:LEU:HD21	1:A:138:LEU:H	15	0.1
(1,84) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 8 0.1 (1,84) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 16 0.1 (1,81) 1:A:47:SER:H 1:A:48:GLY:H 13 0.1 (1,68) 1:A:34:TRP:H 1:A:36:HIS:H 17 0.1 (1,63) 1:A:45:SER:HG 1:A:57:LYS:H 15 0.1 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 12 0.1 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD12 12 0.1 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 12 0.1 (1,623) 1:A:19:LEU:HD13 12 0.1 (1,623) 1:A:19:LEU:HD13 12 0.1 (1,623) 1:A:14	(1,9)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:138:LEU:H	15	0.1
(1,84) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 16 0.1 (1,81) 1:A:47:SER:H 1:A:48:GLY:H 13 0.1 (1,68) 1:A:34:TRP:H 1:A:36:HIS:H 17 0.1 (1,63) 1:A:45:SER:HG 1:A:57:LYS:H 15 0.1 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 12 0.1 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD12 12 0.1 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 12 0.1 (1,609) 1:A:10:LEU:HD13 12 0.1 (1,588) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:22:ASN:H 19 0.1	(1,9)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:138:LEU:H	15	0.1
(1,81) 1:A:47:SER:H 1:A:48:GLY:H 13 0.1 (1,68) 1:A:34:TRP:H 1:A:36:HIS:H 17 0.1 (1,63) 1:A:54:SER:HG 1:A:57:LYS:H 15 0.1 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 12 0.1 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD12 12 0.1 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 12 0.1 (1,609) 1:A:102:VAL:H 1:A:88:THR:H 12 0.1 (1,588) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:22:ASN:H 19 0.1 (1,588) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:22:ASN:H 19 0.1 (1,588) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:22:ASN:H 19 0.1 (1,588) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:75:VAL:HG11 12 0.1 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG11 12 0.1 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 12 0.1 (1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:112:LEU:HD21 14 <th< td=""><td>(1,84)</td><td>1:A:10:LYS:H</td><td>1:A:12:LEU:H</td><td>8</td><td>0.1</td></th<>	(1,84)	1:A:10:LYS:H	1:A:12:LEU:H	8	0.1
(1,68) 1:A:34:TRP:H 1:A:36:HIS:H 17 0.1 (1,63) 1:A:54:SER:HG 1:A:57:LYS:H 15 0.1 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 12 0.1 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD12 12 0.1 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 12 0.1 (1,609) 1:A:10:VAL:H 1:A:88:THR:H 12 0.1 (1,588) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:22:ASN:H 19 0.1 (1,588) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:22:ASN:H 19 0.1 (1,588) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:22:ASN:H 19 0.1 (1,588) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG11 12 0.1 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG12 12 0.1 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 12 0.1 (1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:112:LEU:HD21 14 0.1 (1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:141:PHE:H 10	(1,84)	1:A:10:LYS:H	1:A:12:LEU:H	16	0.1
(1,63) 1:A:54:SER:HG 1:A:57:LYS:H 15 0.1 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 12 0.1 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD12 12 0.1 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 12 0.1 (1,609) 1:A:10:VAL:H 1:A:88:THR:H 12 0.1 (1,588) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:22:ASN:H 19 0.1 (1,588) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:22:ASN:H 19 0.1 (1,588) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:22:ASN:H 19 0.1 (1,588) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG11 12 0.1 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG12 12 0.1 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 12 0.1 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:112:LEU:HD21 14 0.1 (1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:112:LEU:HD21 14 0.1 (1,577) 1:A:140:LEU:HD11 1:A:141:PHE:H 10	(1,81)	1:A:47:SER:H	1:A:48:GLY:H	13	0.1
(1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 12 0.1 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD12 12 0.1 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 12 0.1 (1,609) 1:A:102:VAL:H 1:A:88:THR:H 12 0.1 (1,588) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:22:ASN:H 19 0.1 (1,588) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:22:ASN:H 19 0.1 (1,588) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:22:ASN:H 19 0.1 (1,588) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:22:ASN:H 19 0.1 (1,588) 1:A:19:VAL:HG13 1:D 0.1 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG11 12 0.1 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 12 0.1 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 12 0.1 (1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:112:LEU:HD21 14 0.1 (1,577) 1:A:140:LEU:HD11 1:A:141:PHE:H 10 0.1	(1,68)	1:A:34:TRP:H	1:A:36:HIS:H	17	0.1
(1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD12 12 0.1 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 12 0.1 (1,609) 1:A:102:VAL:H 1:A:88:THR:H 12 0.1 (1,588) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:22:ASN:H 19 0.1 (1,588) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:22:ASN:H 19 0.1 (1,588) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG11 12 0.1 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG12 12 0.1 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 12 0.1 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 12 0.1 (1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:112:LEU:HD21 14 0.1 (1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:112:LEU:HD22 14 0.1 (1,577) 1:A:140:LEU:HD11 1:A:141:PHE:H 10 0.1 (1,571) 1:A:140:LEU:HD12 1:A:141:PHE:H 10 0.1 (1,571) 1:A:140:LEU:HD11 1:A:141:PHE:H 13<	(1,63)	1:A:54:SER:HG	1:A:57:LYS:H	15	0.1
(1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 12 0.1 (1,609) 1:A:102:VAL:H 1:A:88:THR:H 12 0.1 (1,588) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:22:ASN:H 19 0.1 (1,588) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:22:ASN:H 19 0.1 (1,588) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:22:ASN:H 19 0.1 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG11 12 0.1 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG12 12 0.1 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 12 0.1 (1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:112:LEU:HD21 14 0.1 (1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:112:LEU:HD22 14 0.1 (1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:112:LEU:HD23 14 0.1 (1,577) 1:A:140:LEU:HD11 1:A:141:PHE:H 10 0.1 (1,571) 1:A:140:LEU:HD12 1:A:141:PHE:H 10 0.1 (1,571) 1:A:140:LEU:HD11 1:A:141:PHE:H 1	(1,623)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD11	12	0.1
(1,609) 1:A:102:VAL:H 1:A:88:THR:H 12 0.1 (1,588) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:22:ASN:H 19 0.1 (1,588) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:22:ASN:H 19 0.1 (1,588) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:22:ASN:H 19 0.1 (1,588) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG11 12 0.1 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG12 12 0.1 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 12 0.1 (1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:112:LEU:HD21 14 0.1 (1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:112:LEU:HD22 14 0.1 (1,577) 1:A:140:LEU:HD11 1:A:141:PHE:H 10 0.1 (1,571) 1:A:140:LEU:HD12 1:A:141:PHE:H 10 0.1 (1,571) 1:A:140:LEU:HD11 1:A:141:PHE:H 13 0.1 (1,571) 1:A:140:LEU:HD12 1:A:141:PHE:H 13 0.1 (1,571) 1:A:140:LEU:HD13 1:A:141:PHE:H <th< td=""><td>(1,623)</td><td>1:A:17:TYR:H</td><td>1:A:12:LEU:HD12</td><td>12</td><td>0.1</td></th<>	(1,623)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD12	12	0.1
(1,588) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:22:ASN:H 19 0.1 (1,588) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:22:ASN:H 19 0.1 (1,588) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:22:ASN:H 19 0.1 (1,588) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG11 12 0.1 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG12 12 0.1 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 12 0.1 (1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:112:LEU:HD21 14 0.1 (1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:112:LEU:HD22 14 0.1 (1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:112:LEU:HD23 14 0.1 (1,571) 1:A:140:LEU:HD11 1:A:141:PHE:H 10 0.1 (1,571) 1:A:140:LEU:HD12 1:A:141:PHE:H 10 0.1 (1,571) 1:A:140:LEU:HD11 1:A:141:PHE:H 13 0.1 (1,571) 1:A:140:LEU:HD12 1:A:141:PHE:H 13 0.1 (1,571) 1:A:140:LEU:HD13 1:A:141:PHE:H	(1,623)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD13	12	0.1
(1,588) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:22:ASN:H 19 0.1 (1,588) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:22:ASN:H 19 0.1 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG11 12 0.1 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG12 12 0.1 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 12 0.1 (1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:112:LEU:HD21 14 0.1 (1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:112:LEU:HD22 14 0.1 (1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:112:LEU:HD23 14 0.1 (1,577) 1:A:140:LEU:HD11 1:A:141:PHE:H 10 0.1 (1,571) 1:A:140:LEU:HD12 1:A:141:PHE:H 10 0.1 (1,571) 1:A:140:LEU:HD11 1:A:141:PHE:H 13 0.1 (1,571) 1:A:140:LEU:HD12 1:A:141:PHE:H 13 0.1 (1,571) 1:A:140:LEU:HD13 1:A:141:PHE:H 13 0.1	(1,609)	1:A:102:VAL:H	1:A:88:THR:H	12	0.1
(1,588) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:22:ASN:H 19 0.1 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG11 12 0.1 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG12 12 0.1 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 12 0.1 (1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:112:LEU:HD21 14 0.1 (1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:112:LEU:HD22 14 0.1 (1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:112:LEU:HD23 14 0.1 (1,571) 1:A:140:LEU:HD11 1:A:141:PHE:H 10 0.1 (1,571) 1:A:140:LEU:HD12 1:A:141:PHE:H 10 0.1 (1,571) 1:A:140:LEU:HD11 1:A:141:PHE:H 13 0.1 (1,571) 1:A:140:LEU:HD12 1:A:141:PHE:H 13 0.1 (1,571) 1:A:140:LEU:HD13 1:A:141:PHE:H 13 0.1 (1,571) 1:A:140:LEU:HD13 1:A:141:PHE:H 13 0.1	(1,588)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:22:ASN:H	19	0.1
(1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG11 12 0.1 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG12 12 0.1 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 12 0.1 (1,585) 1:A:111:GLY:H 1:A:112:LEU:HD21 14 0.1 (1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:112:LEU:HD22 14 0.1 (1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:112:LEU:HD23 14 0.1 (1,571) 1:A:140:LEU:HD11 1:A:141:PHE:H 10 0.1 (1,571) 1:A:140:LEU:HD12 1:A:141:PHE:H 10 0.1 (1,571) 1:A:140:LEU:HD13 1:A:141:PHE:H 13 0.1 (1,571) 1:A:140:LEU:HD12 1:A:141:PHE:H 13 0.1 (1,571) 1:A:140:LEU:HD13 1:A:141:PHE:H 13 0.1 (1,571) 1:A:140:LEU:HD13 1:A:141:PHE:H 13 0.1 (1,571) 1:A:140:LEU:HD13 1:A:141:PHE:H 13 0.1	(1,588)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:22:ASN:H	19	0.1
(1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG12 12 0.1 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 12 0.1 (1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:112:LEU:HD21 14 0.1 (1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:112:LEU:HD22 14 0.1 (1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:112:LEU:HD23 14 0.1 (1,571) 1:A:140:LEU:HD11 1:A:141:PHE:H 10 0.1 (1,571) 1:A:140:LEU:HD12 1:A:141:PHE:H 10 0.1 (1,571) 1:A:140:LEU:HD13 1:A:141:PHE:H 13 0.1 (1,571) 1:A:140:LEU:HD12 1:A:141:PHE:H 13 0.1 (1,571) 1:A:140:LEU:HD13 1:A:141:PHE:H 13 0.1 (1,571) 1:A:140:LEU:HD13 1:A:141:PHE:H 13 0.1	(1,588)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:22:ASN:H	19	0.1
(1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 12 0.1 (1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:112:LEU:HD21 14 0.1 (1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:112:LEU:HD22 14 0.1 (1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:112:LEU:HD23 14 0.1 (1,571) 1:A:140:LEU:HD11 1:A:141:PHE:H 10 0.1 (1,571) 1:A:140:LEU:HD12 1:A:141:PHE:H 10 0.1 (1,571) 1:A:140:LEU:HD13 1:A:141:PHE:H 13 0.1 (1,571) 1:A:140:LEU:HD12 1:A:141:PHE:H 13 0.1 (1,571) 1:A:140:LEU:HD13 1:A:141:PHE:H 13 0.1 (1,571) 1:A:140:LEU:HD13 1:A:141:PHE:H 13 0.1	(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG11	12	0.1
(1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 12 0.1 (1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:112:LEU:HD21 14 0.1 (1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:112:LEU:HD22 14 0.1 (1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:112:LEU:HD23 14 0.1 (1,571) 1:A:140:LEU:HD11 1:A:141:PHE:H 10 0.1 (1,571) 1:A:140:LEU:HD12 1:A:141:PHE:H 10 0.1 (1,571) 1:A:140:LEU:HD13 1:A:141:PHE:H 13 0.1 (1,571) 1:A:140:LEU:HD12 1:A:141:PHE:H 13 0.1 (1,571) 1:A:140:LEU:HD13 1:A:141:PHE:H 13 0.1 (1,571) 1:A:140:LEU:HD13 1:A:141:PHE:H 13 0.1	(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG12	12	0.1
(1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:112:LEU:HD21 14 0.1 (1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:112:LEU:HD22 14 0.1 (1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:12:LEU:HD23 14 0.1 (1,571) 1:A:140:LEU:HD11 1:A:141:PHE:H 10 0.1 (1,571) 1:A:140:LEU:HD12 1:A:141:PHE:H 10 0.1 (1,571) 1:A:140:LEU:HD13 1:A:141:PHE:H 13 0.1 (1,571) 1:A:140:LEU:HD12 1:A:141:PHE:H 13 0.1 (1,571) 1:A:140:LEU:HD13 1:A:141:PHE:H 13 0.1 (1,571) 1:A:140:LEU:HD13 1:A:141:PHE:H 13 0.1		1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG13	12	0.1
(1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:112:LEU:HD22 14 0.1 (1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:112:LEU:HD23 14 0.1 (1,571) 1:A:140:LEU:HD11 1:A:141:PHE:H 10 0.1 (1,571) 1:A:140:LEU:HD12 1:A:141:PHE:H 10 0.1 (1,571) 1:A:140:LEU:HD13 1:A:141:PHE:H 10 0.1 (1,571) 1:A:140:LEU:HD11 1:A:141:PHE:H 13 0.1 (1,571) 1:A:140:LEU:HD12 1:A:141:PHE:H 13 0.1 (1,571) 1:A:140:LEU:HD13 1:A:141:PHE:H 13 0.1		1:A:111:GLY:H	1:A:112:LEU:HD21	14	0.1
(1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:112:LEU:HD23 14 0.1 (1,571) 1:A:140:LEU:HD11 1:A:141:PHE:H 10 0.1 (1,571) 1:A:140:LEU:HD12 1:A:141:PHE:H 10 0.1 (1,571) 1:A:140:LEU:HD13 1:A:141:PHE:H 10 0.1 (1,571) 1:A:140:LEU:HD11 1:A:141:PHE:H 13 0.1 (1,571) 1:A:140:LEU:HD12 1:A:141:PHE:H 13 0.1 (1,571) 1:A:140:LEU:HD13 1:A:141:PHE:H 13 0.1	(1,577)	1:A:111:GLY:H	1:A:112:LEU:HD22	14	0.1
(1,571) 1:A:140:LEU:HD12 1:A:141:PHE:H 10 0.1 (1,571) 1:A:140:LEU:HD13 1:A:141:PHE:H 10 0.1 (1,571) 1:A:140:LEU:HD11 1:A:141:PHE:H 13 0.1 (1,571) 1:A:140:LEU:HD12 1:A:141:PHE:H 13 0.1 (1,571) 1:A:140:LEU:HD13 1:A:141:PHE:H 13 0.1		1:A:111:GLY:H	1:A:112:LEU:HD23	14	0.1
(1,571) 1:A:140:LEU:HD12 1:A:141:PHE:H 10 0.1 (1,571) 1:A:140:LEU:HD13 1:A:141:PHE:H 10 0.1 (1,571) 1:A:140:LEU:HD11 1:A:141:PHE:H 13 0.1 (1,571) 1:A:140:LEU:HD12 1:A:141:PHE:H 13 0.1 (1,571) 1:A:140:LEU:HD13 1:A:141:PHE:H 13 0.1		1:A:140:LEU:HD11	1:A:141:PHE:H	10	0.1
(1,571) 1:A:140:LEU:HD11 1:A:141:PHE:H 13 0.1 (1,571) 1:A:140:LEU:HD12 1:A:141:PHE:H 13 0.1 (1,571) 1:A:140:LEU:HD13 1:A:141:PHE:H 13 0.1		1:A:140:LEU:HD12	1:A:141:PHE:H	10	0.1
(1,571) 1:A:140:LEU:HD12 1:A:141:PHE:H 13 0.1 (1,571) 1:A:140:LEU:HD13 1:A:141:PHE:H 13 0.1	(1,571)	1:A:140:LEU:HD13	1:A:141:PHE:H	10	0.1
(1,571) 1:A:140:LEU:HD13 1:A:141:PHE:H 13 0.1	(1,571)	1:A:140:LEU:HD11	1:A:141:PHE:H	13	0.1
		1:A:140:LEU:HD12	1:A:141:PHE:H	13	0.1
	(1,571)	1:A:140:LEU:HD13	1:A:141:PHE:H	13	0.1
(1,57) 1:A:112:LEU:HD11 1:A:113:ARG:H 1 0.1	(1,57)	1:A:112:LEU:HD11	1:A:113:ARG:H	1	0.1



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,57)	1:A:112:LEU:HD12	1:A:113:ARG:H	1	0.1
(1,57)	1:A:112:LEU:HD13	1:A:113:ARG:H	1	0.1
(1,57)	1:A:112:LEU:HD11	1:A:113:ARG:H	10	0.1
(1,57)	1:A:112:LEU:HD12	1:A:113:ARG:H	10	0.1
(1,57)	1:A:112:LEU:HD13	1:A:113:ARG:H	10	0.1
(1,565)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:H	14	0.1
(1,565)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:H	14	0.1
(1,565)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:H	14	0.1
(1,564)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:137:TYR:H	9	0.1
(1,564)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:137:TYR:H	9	0.1
(1,564)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:137:TYR:H	9	0.1
(1,562)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD21	6	0.1
(1,562)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD22	6	0.1
(1,562)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD23	6	0.1
(1,551)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD11	3	0.1
(1,551)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD12	3	0.1
(1,551)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD13	3	0.1
(1,546)	1:A:121:LEU:H	1:A:121:LEU:HD21	19	0.1
(1,546)	1:A:121:LEU:H	1:A:121:LEU:HD22	19	0.1
(1,546)	1:A:121:LEU:H	1:A:121:LEU:HD23	19	0.1
(1,544)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:120:ALA:H	20	0.1
(1,544)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:120:ALA:H	20	0.1
(1,544)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:120:ALA:H	20	0.1
(1,536)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:102:VAL:H	2	0.1
(1,536)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:102:VAL:H	2	0.1
(1,536)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:102:VAL:H	2	0.1
(1,518)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD11	17	0.1
(1,518)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD12	17	0.1
(1,518)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD13	17	0.1
(1,517)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:HG21	13	0.1
(1,517)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:HG22	13	0.1
(1,517)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:HG23	13	0.1
(1,517)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:HG21	19	0.1
(1,517)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:HG22	19	0.1
(1,517)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:HG23	19	0.1
(1,512)	1:A:79:LEU:HD21	1:A:87:ARG:H	5	0.1
(1,512)	1:A:79:LEU:HD22	1:A:87:ARG:H	5	0.1
(1,512)	1:A:79:LEU:HD23	1:A:87:ARG:H	5	0.1
(1,497)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:H	11	0.1
(1,497)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:H	11	0.1
(1,497)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:H	11	0.1
(1,491)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:52:PHE:H	17	0.1



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	$\mathbf{Atom} extbf{-2}$	Model	Violation (Å)
(1,491)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:52:PHE:H	17	0.1
(1,491)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:52:PHE:H	17	0.1
(1,465)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG11	19	0.1
(1,465)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG12	19	0.1
(1,465)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG13	19	0.1
(1,464)	1:A:16:GLN:H	1:A:46:VAL:HG11	3	0.1
(1,464)	1:A:16:GLN:H	1:A:46:VAL:HG12	3	0.1
(1,464)	1:A:16:GLN:H	1:A:46:VAL:HG13	3	0.1
(1,462)	1:A:45:ILE:HD11	1:A:46:VAL:H	13	0.1
(1,462)	1:A:45:ILE:HD12	1:A:46:VAL:H	13	0.1
(1,462)	1:A:45:ILE:HD13	1:A:46:VAL:H	13	0.1
(1,458)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:10:LYS:H	3	0.1
(1,458)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:10:LYS:H	3	0.1
(1,458)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:10:LYS:H	3	0.1
(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD11	8	0.1
(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD12	8	0.1
(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD13	8	0.1
(1,445)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:113:ARG:H	8	0.1
(1,445)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:113:ARG:H	8	0.1
(1,445)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:113:ARG:H	8	0.1
(1,445)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:113:ARG:H	9	0.1
(1,445)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:113:ARG:H	9	0.1
(1,445)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:113:ARG:H	9	0.1
(1,440)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:100:GLY:H	2	0.1
(1,440)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:100:GLY:H	2	0.1
(1,440)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:100:GLY:H	2	0.1
(1,44)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:48:GLY:H	4	0.1
(1,44)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:48:GLY:H	4	0.1
(1,44)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:48:GLY:H	4	0.1
(1,44)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:48:GLY:H	8	0.1
(1,44)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:48:GLY:H	8	0.1
(1,44)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:48:GLY:H	8	0.1
(1,431)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:103:PHE:H	7	0.1
(1,431)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:103:PHE:H	7	0.1
(1,431)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:103:PHE:H	7	0.1
(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD21	3	0.1
(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD22	3	0.1
(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD23	3	0.1
(1,416)	1:A:86:ILE:H	1:A:86:ILE:HD11	20	0.1
(1,416)	1:A:86:ILE:H	1:A:86:ILE:HD12	20	0.1
(1,416)	1:A:86:ILE:H	1:A:86:ILE:HD13	20	0.1
	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD21	18	0.1



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD22	18	0.1
(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD23	18	0.1
(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD21	19	0.1
(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD22	19	0.1
(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD23	19	0.1
(1,387)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:90:VAL:HG21	14	0.1
(1,387)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:90:VAL:HG22	14	0.1
(1,387)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:90:VAL:HG23	14	0.1
(1,387)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:90:VAL:HG21	14	0.1
(1,387)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:90:VAL:HG22	14	0.1
(1,387)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:90:VAL:HG23	14	0.1
(1,387)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG21	14	0.1
(1,387)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG22	14	0.1
(1,387)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG23	14	0.1
(1,38)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:13:ASN:HD22	7	0.1
(1,38)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:13:ASN:HD22	7	0.1
(1,38)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:13:ASN:HD22	7	0.1
(1,375)	1:A:131:GLU:H	1:A:133:GLY:H	7	0.1
(1,37)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:13:ASN:HD21	4	0.1
(1,37)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:13:ASN:HD21	4	0.1
(1,37)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:13:ASN:HD21	4	0.1
(1,361)	1:A:45:ILE:H	1:A:122:ARG:H	17	0.1
(1,345)	1:A:103:PHE:H	1:A:105:ASP:H	10	0.1
(1,332)	1:A:85:MET:H	1:A:86:ILE:H	11	0.1
(1,327)	1:A:78:LYS:H	1:A:89:GLU:H	5	0.1
(1,322)	1:A:54:SER:H	1:A:57:LYS:H	4	0.1
(1,31)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:49:LYS:H	7	0.1
(1,31)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:49:LYS:H	7	0.1
(1,31)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:49:LYS:H	7	0.1
(1,308)	1:A:30:GLN:H	1:A:34:TRP:HE1	2	0.1
(1,30)	1:A:106:GLY:H	1:A:112:LEU:HD21	14	0.1
(1,30)	1:A:106:GLY:H	1:A:112:LEU:HD22	14	0.1
(1,30)	1:A:106:GLY:H	1:A:112:LEU:HD23	14	0.1
(1,299)	1:A:15:MET:H	1:A:18:GLU:H	17	0.1
(1,279)	1:A:26:GLU:H	1:A:64:TRP:HE1	3	0.1
(1,279)	1:A:26:GLU:H	1:A:64:TRP:HE1	9	0.1
(1,275)	1:A:92:SER:H	1:A:99:LEU:H	10	0.1
(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD11	15	0.1
(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD12	15	0.1
(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD13	15	0.1
(1,259)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD11	6	0.1
(1,259)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD12	6	0.1



 $Continued\ from\ previous\ page...$

(1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD13 6 0.1 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD11 6 0.1 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD13 6 0.1 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD11 6 0.1 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD12 6 0.1 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 6 0.1 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 6 0.1 (1,259) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD11 14 0.1 (1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD12 14 0.1 (1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD13 14 0.1 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD13 14 0.1 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 14 0.1 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 14 0.1 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LE	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD12 6 0.1 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 6 0.1 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD12 6 0.1 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD12 6 0.1 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 6 0.1 (1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD11 14 0.1 (1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD13 14 0.1 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD13 14 0.1 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD13 14 0.1 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD13 14 0.1 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:	(1,259)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD13	6	0.1
(1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD13 6 0.1 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD11 6 0.1 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD12 6 0.1 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 6 0.1 (1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD11 14 0.1 (1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD13 14 0.1 (1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD13 14 0.1 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD12 14 0.1 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD12 14 0.1 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD11 14 0.1 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD12 14 0.1 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 14 0.1 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 14 0.1 (1,257) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:12	(1,259)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD11	6	0.1
(1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD11 6 0.1 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD12 6 0.1 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 6 0.1 (1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD11 14 0.1 (1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD11 14 0.1 (1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD12 14 0.1 (1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD13 14 0.1 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD13 14 0.1 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD11 14 0.1 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD11 14 0.1 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD11 14 0.1 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD12 14 0.1 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 14 0.1 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 14 0.1 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD11 14 0.1 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 10 0.1 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 10 0.1 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 10 0.1 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 15 0.1 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 15 0.1 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 15 0.1 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 15 0.1 (1,247) 1:A:13:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD11 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD11 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD11 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:	(1,259)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD12	6	0.1
(1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD12 6 0.1 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 6 0.1 (1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD11 14 0.1 (1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD12 14 0.1 (1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD13 14 0.1 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD11 14 0.1 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD13 14 0.1 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 14 0.1 (1,247) 1:A:41:LEU:HD14 1:A:	(1,259)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD13	6	0.1
(1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 6 0.1 (1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD11 14 0.1 (1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD12 14 0.1 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD13 14 0.1 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD12 14 0.1 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD13 14 0.1 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 14 0.1 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD11 14 0.1 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 14 0.1 (1,257) 1:A:412:LEU:HD11 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 10 0.1 (1,247) 1:A	(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD11	6	0.1
(1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD11 14 0.1 (1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD12 14 0.1 (1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD13 14 0.1 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD11 14 0.1 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD11 14 0.1 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD12 14 0.1 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD13 14 0.1 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 14 0.1 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD11 14 0.1 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD12 14 0.1 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD12 14 0.1 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD12 14 0.1 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 10 0.1 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 15 0.1 (1,247) 1:A:121:LEU:HD12 1:A:122:ARG:H 15 0.1 (1,247) 1:A:121:LEU:HD12 1:A:122:ARG:H 15 0.1 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 15 0.1 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 15 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD11 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD13 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD13 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD11 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD11 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD11 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD11 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD11 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD11 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE	(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD12	6	0.1
(1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD12 14 0.1 (1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD13 14 0.1 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD11 14 0.1 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD12 14 0.1 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 14 0.1 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD11 14 0.1 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD12 14 0.1 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 14 0.1 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 14 0.1 (1,247) 1:A:4121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 10 0.1 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 10 0.1 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 15 0.1 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:121:LEU:HD13 1:A:121:LE:HD13 0.1 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13	(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD13	6	0.1
(1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD13 14 0.1 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD11 14 0.1 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD12 14 0.1 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD13 14 0.1 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD11 14 0.1 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD11 14 0.1 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD11 14 0.1 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD12 14 0.1 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 14 0.1 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 14 0.1 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 14 0.1 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 10 0.1 (1,247) 1:A:121:LEU:HD12 1:A:122:ARG:H 10 0.1 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 10 0.1 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 15 0.1 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 15 0.1 (1,247) 1:A:121:LEU:HD12 1:A:122:ARG:H 15 0.1 (1,247) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD11 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD11 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD12 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD12 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD11 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD11 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD11 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD12 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD11 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD13 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD11 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD11 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD11 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD11 19 0.1	(1,256)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD11	14	0.1
(1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD11 14 0.1 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD12 14 0.1 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD13 14 0.1 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD11 14 0.1 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD12 14 0.1 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 14 0.1 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 14 0.1 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 10 0.1 (1,247) 1:A:121:LEU:HD12 1:A:122:ARG:H 10 0.1 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 15 0.1 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 15 0.1 (1,247) 1:A:4:3:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD11 13 0.1 (1,225) 1:A:4:3:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD12 13 0.1 (1,225) 1:A:4:3:VAL:HG12 1:A	(1,256)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD12	14	0.1
(1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD12 14 0.1 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD13 14 0.1 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD11 14 0.1 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD12 14 0.1 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 14 0.1 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:51:22:ARG:H 10 0.1 (1,247) 1:A:121:LEU:HD12 1:A:122:ARG:H 10 0.1 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 10 0.1 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 15 0.1 (1,247) 1:A:421:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 15 0.1 (1,247) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD11 13 0.1 (1,247) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD12 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD13 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:7	(1,256)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD13	14	0.1
(1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD13 14 0.1 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD11 14 0.1 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD12 14 0.1 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 14 0.1 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 10 0.1 (1,247) 1:A:121:LEU:HD12 1:A:122:ARG:H 10 0.1 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 10 0.1 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 15 0.1 (1,247) 1:A:121:LEU:HD12 1:A:122:ARG:H 15 0.1 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:121:LE:HD11 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD11 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD13 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD11 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71	(1,256)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD11	14	0.1
(1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD11 14 0.1 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD12 14 0.1 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 14 0.1 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 10 0.1 (1,247) 1:A:121:LEU:HD12 1:A:122:ARG:H 10 0.1 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 10 0.1 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 15 0.1 (1,247) 1:A:121:LEU:HD12 1:A:122:ARG:H 15 0.1 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 15 0.1 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 15 0.1 (1,247) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD11 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD13 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD13 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:IL	(1,256)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD12	14	0.1
(1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD12 14 0.1 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 14 0.1 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 10 0.1 (1,247) 1:A:121:LEU:HD12 1:A:122:ARG:H 10 0.1 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 10 0.1 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 15 0.1 (1,247) 1:A:121:LEU:HD12 1:A:122:ARG:H 15 0.1 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 15 0.1 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 15 0.1 (1,247) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD11 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD13 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD11 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD13 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:IL	(1,256)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD13	14	0.1
(1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 14 0.1 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 10 0.1 (1,247) 1:A:121:LEU:HD12 1:A:122:ARG:H 10 0.1 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 10 0.1 (1,247) 1:A:121:LEU:HD12 1:A:122:ARG:H 15 0.1 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 15 0.1 (1,247) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD11 13 0.1 (1,247) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD11 13 0.1 (1,247) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD12 13 0.1 (1,247) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD12 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD13 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD13 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD13 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:	(1,256)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD11	14	0.1
(1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 14 0.1 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 10 0.1 (1,247) 1:A:121:LEU:HD12 1:A:122:ARG:H 10 0.1 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 10 0.1 (1,247) 1:A:121:LEU:HD12 1:A:122:ARG:H 15 0.1 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 15 0.1 (1,247) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD11 13 0.1 (1,247) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD11 13 0.1 (1,247) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD12 13 0.1 (1,247) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD12 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD13 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD13 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD13 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:	, ,	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD12	14	0.1
(1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 10 0.1 (1,247) 1:A:121:LEU:HD12 1:A:122:ARG:H 10 0.1 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 10 0.1 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 15 0.1 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 15 0.1 (1,247) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD11 13 0.1 (1,247) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD11 13 0.1 (1,247) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD12 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD13 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD12 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD13 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD11 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD13 3 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:I		1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD13	14	0.1
(1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 10 0.1 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 15 0.1 (1,247) 1:A:121:LEU:HD12 1:A:122:ARG:H 15 0.1 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 15 0.1 (1,247) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD11 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD12 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD13 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD11 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD13 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD11 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD12 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD13 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD11 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71		1:A:121:LEU:HD11	1:A:122:ARG:H	10	0.1
(1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 15 0.1 (1,247) 1:A:121:LEU:HD12 1:A:122:ARG:H 15 0.1 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 15 0.1 (1,247) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD11 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD12 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD13 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD12 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD13 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD13 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD12 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD13 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD11 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD11 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:7	(1,247)	1:A:121:LEU:HD12	1:A:122:ARG:H	10	0.1
(1,247) 1:A:121:LEU:HD12 1:A:122:ARG:H 15 0.1 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 15 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD11 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD12 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD13 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD11 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD13 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD11 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD12 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD13 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD11 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD13 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD13 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:	(1,247)	1:A:121:LEU:HD13	1:A:122:ARG:H	10	0.1
(1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 15 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD11 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD12 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD13 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD11 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD12 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD13 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD11 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD13 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD11 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD13 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD11 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD11 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A	(1,247)	1:A:121:LEU:HD11	1:A:122:ARG:H	15	0.1
(1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD11 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD12 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD13 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD11 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD12 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD13 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD12 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD13 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD11 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD13 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD11 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD11 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD11 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:	(1,247)	1:A:121:LEU:HD12	1:A:122:ARG:H	15	0.1
(1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD12 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD13 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD11 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD12 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD13 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD11 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD12 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD13 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD12 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD13 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD11 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD13 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD11 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:	(1,247)	1:A:121:LEU:HD13	1:A:122:ARG:H	15	0.1
(1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD13 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD11 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD12 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD13 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD11 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD12 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD13 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD11 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD13 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD11 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD13 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD11 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD11 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:	(1,225)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:71:ILE:HD11	13	0.1
(1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD11 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD12 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD13 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD11 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD12 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD13 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD11 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD12 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD11 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD12 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD13 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD11 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD13 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:	(1,225)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:71:ILE:HD12	13	0.1
(1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD12 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD13 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD11 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD12 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD13 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD11 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD13 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD11 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD13 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD11 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD11 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD11 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD12 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:	(1,225)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:71:ILE:HD13	13	0.1
(1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD13 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD11 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD12 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD13 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD11 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD12 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD11 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD12 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD13 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD11 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD12 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD13 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD13 19 0.1 (1,225) 1:A:54:SLEU:HD21 1	(1,225)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:71:ILE:HD11	13	0.1
(1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD11 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD12 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD13 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD11 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD12 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD13 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD12 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD13 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD11 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD12 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD12 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD13 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD13 19 0.1 (1,229) 1:A:51:LEU:HD21 1:	(1,225)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:71:ILE:HD12	13	0.1
(1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD12 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD13 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD11 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD12 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD13 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD12 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD13 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD11 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD12 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD12 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD13 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD13 19 0.1 (1,225) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:74:GLU:H 1 0.1	(1,225)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:71:ILE:HD13	13	0.1
(1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD13 13 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD11 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD12 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD13 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD11 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD12 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD11 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD12 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD12 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD13 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD13 19 0.1 (1,219) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:74:GLU:H 1 0.1	(1,225)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:71:ILE:HD11	13	0.1
(1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD11 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD12 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD13 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD11 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD12 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD13 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD11 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD12 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD13 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD13 19 0.1 (1,219) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:74:GLU:H 1 0.1	(1,225)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:71:ILE:HD12	13	0.1
(1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD12 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD13 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD11 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD12 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD13 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD11 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD12 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD13 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD13 19 0.1 (1,219) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:74:GLU:H 1 0.1	(1,225)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:71:ILE:HD13	13	0.1
(1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD13 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD11 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD12 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD13 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD11 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD12 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD13 19 0.1 (1,219) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:74:GLU:H 1 0.1	(1,225)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:71:ILE:HD11	19	0.1
(1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD11 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD12 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD13 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD11 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD12 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD13 19 0.1 (1,219) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:74:GLU:H 1 0.1	(1,225)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:71:ILE:HD12	19	0.1
(1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD12 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD13 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD11 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD12 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD13 19 0.1 (1,219) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:74:GLU:H 1 0.1	(1,225)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:71:ILE:HD13	19	0.1
(1,225) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD13 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD11 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD12 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD13 19 0.1 (1,219) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:74:GLU:H 1 0.1	(1,225)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:71:ILE:HD11	19	0.1
(1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD11 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD12 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD13 19 0.1 (1,219) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:74:GLU:H 1 0.1		1:A:43:VAL:HG12	1:A:71:ILE:HD12	19	0.1
(1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD11 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD12 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD13 19 0.1 (1,219) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:74:GLU:H 1 0.1		1:A:43:VAL:HG12	1:A:71:ILE:HD13	19	0.1
(1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD12 19 0.1 (1,225) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD13 19 0.1 (1,219) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:74:GLU:H 1 0.1		1:A:43:VAL:HG13	1:A:71:ILE:HD11	19	0.1
(1,219) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:74:GLU:H 1 0.1		1:A:43:VAL:HG13	1:A:71:ILE:HD12	19	0.1
	(1,225)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:71:ILE:HD13	19	0.1
(1.219) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:74:GLU:H 1 0.1	(1,219)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:74:GLU:H	1	0.1
(, -,	(1,219)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:74:GLU:H	1	0.1



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,219)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:74:GLU:H	1	0.1
(1,212)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:129:LEU:HD11	3	0.1
(1,212)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:129:LEU:HD12	3	0.1
(1,212)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:129:LEU:HD13	3	0.1
(1,212)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:129:LEU:HD11	3	0.1
(1,212)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:129:LEU:HD12	3	0.1
(1,212)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:129:LEU:HD13	3	0.1
(1,212)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:129:LEU:HD11	3	0.1
(1,212)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:129:LEU:HD12	3	0.1
(1,212)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:129:LEU:HD13	3	0.1
(1,212)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:129:LEU:HD11	9	0.1
(1,212)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:129:LEU:HD12	9	0.1
(1,212)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:129:LEU:HD13	9	0.1
(1,212)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:129:LEU:HD11	9	0.1
(1,212)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:129:LEU:HD12	9	0.1
(1,212)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:129:LEU:HD13	9	0.1
(1,212)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:129:LEU:HD11	9	0.1
(1,212)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:129:LEU:HD12	9	0.1
(1,212)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:129:LEU:HD13	9	0.1
(1,2)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:114:TYR:H	7	0.1
(1,2)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:114:TYR:H	7	0.1
(1,2)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:114:TYR:H	7	0.1
(1,192)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:H	7	0.1
(1,192)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:H	7	0.1
(1,192)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:H	7	0.1
(1,19)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:127:HIS:H	3	0.1
(1,19)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:127:HIS:H	3	0.1
(1,19)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:127:HIS:H	3	0.1
(1,171)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG11	3	0.1
(1,171)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG12	3	0.1
(1,171)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG13	3	0.1
(1,17)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD21	13	0.1
(1,17)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD22	13	0.1
(1,17)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD23	13	0.1
(1,162)	1:A:92:SER:H	1:A:96:ASP:H	13	0.1
(1,161)	1:A:133:GLY:H	1:A:135:GLU:H	6	0.1
(1,160)	1:A:54:SER:H	1:A:56:ASP:H	5	0.1
(1,147)	1:A:130:LYS:H	1:A:134:TYR:H	3	0.1
(1,147)	1:A:130:LYS:H	1:A:134:TYR:H	11	0.1
(1,147)	1:A:130:LYS:H	1:A:134:TYR:H	12	0.1
(1,133)	1:A:7:GLU:H	1:A:9:ILE:H	18	0.1
(1,131)	1:A:17:TYR:H	1:A:19:VAL:H	2	0.1
	I .	l .	<i>Q</i> ,;	d on nort nago



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,13)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:131:GLU:H	6	0.1
(1,13)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:131:GLU:H	6	0.1
(1,13)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:131:GLU:H	6	0.1
(1,13)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:131:GLU:H	13	0.1
(1,13)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:131:GLU:H	13	0.1
(1,13)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:131:GLU:H	13	0.1
(1,115)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:H	8	0.1
(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD21	19	0.1
(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD22	19	0.1
(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD23	19	0.1
(1,99)	1:A:20:THR:H	1:A:23:ASN:H	18	0.09
(1,93)	1:A:8:LYS:H	1:A:10:LYS:H	20	0.09
(1,89)	1:A:55:LYS:H	1:A:57:LYS:H	13	0.09
(1,83)	1:A:9:ILE:H	1:A:12:LEU:H	9	0.09
(1,75)	1:A:29:PHE:H	1:A:30:GLN:H	11	0.09
(1,65)	1:A:118:SER:HG	1:A:119:ALA:H	2	0.09
(1,63)	1:A:54:SER:HG	1:A:57:LYS:H	12	0.09
(1,610)	1:A:115:CYS:H	1:A:101:HIS:H	9	0.09
(1,609)	1:A:102:VAL:H	1:A:88:THR:H	6	0.09
(1,609)	1:A:102:VAL:H	1:A:88:THR:H	7	0.09
(1,603)	1:A:144:LEU:HD11	1:A:145:GLU:H	1	0.09
(1,603)	1:A:144:LEU:HD12	1:A:145:GLU:H	1	0.09
(1,603)	1:A:144:LEU:HD13	1:A:145:GLU:H	1	0.09
(1,603)	1:A:144:LEU:HD21	1:A:145:GLU:H	1	0.09
(1,603)	1:A:144:LEU:HD22	1:A:145:GLU:H	1	0.09
(1,603)	1:A:144:LEU:HD23	1:A:145:GLU:H	1	0.09
(1,601)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD11	2	0.09
(1,601)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD12	2	0.09
(1,601)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD13	2	0.09
(1,601)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD21	2	0.09
(1,601)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD22	2	0.09
(1,601)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD23	2	0.09
(1,601)	1:A:142:ASN:HD22	1:A:144:LEU:HD11	2	0.09
(1,601)	1:A:142:ASN:HD22	1:A:144:LEU:HD12	2	0.09
(1,601)	1:A:142:ASN:HD22	1:A:144:LEU:HD13	2	0.09
(1,601)	1:A:142:ASN:HD22	1:A:144:LEU:HD21	2	0.09
(1,601)	1:A:142:ASN:HD22	1:A:144:LEU:HD22	2	0.09
(1,601)	1:A:142:ASN:HD22	1:A:144:LEU:HD23	2	0.09
(1,60)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD11	6	0.09
(1,60)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD12	6	0.09
(1,60)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD13	6	0.09
(1,59)	1:A:132:GLU:H	1:A:138:LEU:HD11	18	0.09



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,59)	1:A:132:GLU:H	1:A:138:LEU:HD12	18	0.09
(1,59)	1:A:132:GLU:H	1:A:138:LEU:HD13	18	0.09
(1,571)	1:A:140:LEU:HD11	1:A:141:PHE:H	18	0.09
(1,571)	1:A:140:LEU:HD12	1:A:141:PHE:H	18	0.09
(1,571)	1:A:140:LEU:HD13	1:A:141:PHE:H	18	0.09
(1,565)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:H	16	0.09
(1,565)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:H	16	0.09
(1,565)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:H	16	0.09
(1,565)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:H	19	0.09
(1,565)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:H	19	0.09
(1,565)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:H	19	0.09
(1,564)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:137:TYR:H	10	0.09
(1,564)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:137:TYR:H	10	0.09
(1,564)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:137:TYR:H	10	0.09
(1,564)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:137:TYR:H	16	0.09
(1,564)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:137:TYR:H	16	0.09
(1,564)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:137:TYR:H	16	0.09
(1,562)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD21	18	0.09
(1,562)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD22	18	0.09
(1,562)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD23	18	0.09
(1,562)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD21	19	0.09
(1,562)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD22	19	0.09
(1,562)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD23	19	0.09
(1,550)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG21	16	0.09
(1,550)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG22	16	0.09
(1,550)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG23	16	0.09
(1,549)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD21	6	0.09
(1,549)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD22	6	0.09
(1,549)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD23	6	0.09
(1,549)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD21	20	0.09
(1,549)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD22	20	0.09
(1,549)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD23	20	0.09
(1,542)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD21	1	0.09
(1,542)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD22	1	0.09
(1,542)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD23	1	0.09
(1,542)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD21	10	0.09
(1,542)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD22	10	0.09
(1,542)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD23	10	0.09
(1,534)	1:A:101:HIS:H	1:A:102:VAL:HG11	8	0.09
(1,534)	1:A:101:HIS:H	1:A:102:VAL:HG12	8	0.09
(1,534)	1:A:101:HIS:H	1:A:102:VAL:HG13	8	0.09
(1,53)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD21	20	0.09



 $Continued\ from\ previous\ page...$

(1,53) 1:A:129:LEU:H 1:A:138:LEU:HD22 20 0.09 (1,538) 1:A:129:LEU:H 1:A:138:LEU:HD23 20 0.09 (1,518) 1:A:115:CYS:H 1:A:116:ILE:HD11 19 0.09 (1,518) 1:A:115:CYS:H 1:A:116:ILE:HD12 19 0.09 (1,518) 1:A:115:CYS:H 1:A:116:ILE:HD13 19 0.09 (1,518) 1:A:115:CYS:H 1:A:116:ILE:HD13 19 0.09 (1,517) 1:A:89:GLU:H 1:A:102:VAL:HG21 18 0.09 (1,517) 1:A:89:GLU:H 1:A:102:VAL:HG22 18 0.09 (1,517) 1:A:89:GLU:H 1:A:102:VAL:HG23 18 0.09 (1,512) 1:A:79:LEU:HD21 1:A:87:ARG:H 4 0.09 (1,512) 1:A:79:LEU:HD22 1:A:87:ARG:H 4 0.09 (1,512) 1:A:79:LEU:HD23 1:A:87:ARG:H 4 0.09 (1,512) 1:A:79:LEU:HD23 1:A:87:ARG:H 4 0.09 (1,512) 1:A:79:LEU:HD21 1:A:87:ARG:H 7 0.09 (1,512) 1:A:79:LEU:HD22 1:A:87:ARG:H 7 0.09 (1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 7 0.09 (1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 7 0.09 (1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 7 0.09 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 13 0.09 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 13 0.09 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 13 0.09 (1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 13 0.09 (1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 13 0.09 (1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 13 0.09 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 13 0.09 (1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG22 13 0.09 (1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG22 13 0.09 (1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG23 13 0.09 (1,409) 1:A:71:ILE:H 1:A:71:ILE:HD11 12 0.09 (1,409) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:24:GLY:H 7 0.09 (1,472) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:42:GLY:H 7 0.09 (1,472) 1:A:41:LEU:HD	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,518) 1:A:115:CYS:H 1:A:116:ILE:HD11 19 0.09 (1,518) 1:A:115:CYS:H 1:A:116:ILE:HD12 19 0.09 (1,518) 1:A:115:CYS:H 1:A:116:ILE:HD13 19 0.09 (1,517) 1:A:89:GLU:H 1:A:102:VAL:HG21 18 0.09 (1,517) 1:A:89:GLU:H 1:A:102:VAL:HG23 18 0.09 (1,517) 1:A:89:GLU:H 1:A:102:VAL:HG23 18 0.09 (1,512) 1:A:79:LEU:HD21 1:A:87:ARG:H 4 0.09 (1,512) 1:A:79:LEU:HD22 1:A:87:ARG:H 4 0.09 (1,512) 1:A:79:LEU:HD23 1:A:87:ARG:H 7 0.09 (1,512) 1:A:79:LEU:HD23 1:A:87:ARG:H 7 0.09 (1,512) 1:A:79:LEU:HD23 1:A:76:GLU:H 7 0.09 (1,512) 1:A:79:LEU:HD23 1:A:76:GLU:H 7 0.09 (1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 7 0.09 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H	(1,53)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD22	20	0.09
(1,518) 1:A:115:CYS:H 1:A:116:ILE:HD12 19 0.09 (1,518) 1:A:115:CYS:H 1:A:116:ILE:HD13 19 0.09 (1,517) 1:A:89:GLU:H 1:A:102:VAL:HG21 18 0.09 (1,517) 1:A:89:GLU:H 1:A:102:VAL:HG22 18 0.09 (1,517) 1:A:89:GLU:H 1:A:102:VAL:HG22 18 0.09 (1,517) 1:A:89:GLU:H 1:A:102:VAL:HG23 18 0.09 (1,512) 1:A:79:LEU:HD21 1:A:87:ARG:H 4 0.09 (1,512) 1:A:79:LEU:HD22 1:A:87:ARG:H 4 0.09 (1,512) 1:A:79:LEU:HD23 1:A:87:ARG:H 4 0.09 (1,512) 1:A:79:LEU:HD23 1:A:87:ARG:H 7 0.09 (1,550) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 7 0.09 (1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 7 0.09 (1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 7 0.09 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 7 0.09 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 13 0.09 (1,505) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG21 13 0.09 (1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG21 13 0.09 (1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG22 13 0.09 (1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG23 16 0.09 (1,409) 1:A:71:ILE:H 1:A:71:ILE:HD11 12 0.09 (1,409) 1:A:71:ILE:H 1:A:	(1,53)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD23	20	0.09
(1,518) 1:A:115:CYS:H 1:A:116:ILE:HD13 19 0.09 (1,517) 1:A:89:GLU:H 1:A:102:VAL:HG21 18 0.09 (1,517) 1:A:89:GLU:H 1:A:102:VAL:HG22 18 0.09 (1,517) 1:A:89:GLU:H 1:A:102:VAL:HG23 18 0.09 (1,512) 1:A:79:LEU:HD21 1:A:87:ARG:H 4 0.09 (1,512) 1:A:79:LEU:HD23 1:A:87:ARG:H 4 0.09 (1,512) 1:A:79:LEU:HD23 1:A:87:ARG:H 7 0.09 (1,512) 1:A:79:LEU:HD23 1:A:76:GLU:H 7 0.09 (1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 7 0.09 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 7 0.09 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 13	(1,518)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD11	19	0.09
(1,517) 1:A:89:GLU:H 1:A:102:VAL:HG21 18 0.09 (1,517) 1:A:89:GLU:H 1:A:102:VAL:HG22 18 0.09 (1,517) 1:A:89:GLU:H 1:A:102:VAL:HG23 18 0.09 (1,512) 1:A:79:LEU:HD21 1:A:87:ARG:H 4 0.09 (1,512) 1:A:79:LEU:HD23 1:A:87:ARG:H 4 0.09 (1,512) 1:A:79:LEU:HD23 1:A:87:ARG:H 4 0.09 (1,512) 1:A:79:LEU:HD21 1:A:87:ARG:H 7 0.09 (1,512) 1:A:79:LEU:HD22 1:A:87:ARG:H 7 0.09 (1,512) 1:A:79:LEU:HD23 1:A:87:ARG:H 7 0.09 (1,512) 1:A:79:LEU:HD23 1:A:76:GLU:H 7 0.09 (1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 7 0.09 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 7 0.09 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 13 0.09 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 13 </td <td>(1,518)</td> <td>1:A:115:CYS:H</td> <td>1:A:116:ILE:HD12</td> <td>19</td> <td>0.09</td>	(1,518)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD12	19	0.09
(1,517) 1:A:89:GLU:H 1:A:102:VAL:HG22 18 0.09 (1,517) 1:A:89:GLU:H 1:A:102:VAL:HG23 18 0.09 (1,512) 1:A:79:LEU:HD21 1:A:87:ARG:H 4 0.09 (1,512) 1:A:79:LEU:HD22 1:A:87:ARG:H 4 0.09 (1,512) 1:A:79:LEU:HD23 1:A:87:ARG:H 7 0.09 (1,512) 1:A:79:LEU:HD22 1:A:87:ARG:H 7 0.09 (1,512) 1:A:79:LEU:HD22 1:A:87:ARG:H 7 0.09 (1,512) 1:A:79:LEU:HD23 1:A:76:GLU:H 7 0.09 (1,512) 1:A:79:LEU:HD23 1:A:76:GLU:H 7 0.09 (1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 7 0.09 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 7 0.09 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 13 0.09 (1,505) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG21 13 0.09 (1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG23 13 <td>(1,518)</td> <td>1:A:115:CYS:H</td> <td>1:A:116:ILE:HD13</td> <td>19</td> <td>0.09</td>	(1,518)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD13	19	0.09
(1,517)	(1,517)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:HG21	18	0.09
(1,512) 1:A:79:LEU:HD21 1:A:87:ARG:H 4 0.09 (1,512) 1:A:79:LEU:HD22 1:A:87:ARG:H 4 0.09 (1,512) 1:A:79:LEU:HD23 1:A:87:ARG:H 4 0.09 (1,512) 1:A:79:LEU:HD21 1:A:87:ARG:H 7 0.09 (1,512) 1:A:79:LEU:HD22 1:A:87:ARG:H 7 0.09 (1,512) 1:A:79:LEU:HD23 1:A:87:ARG:H 7 0.09 (1,512) 1:A:79:LEU:HD23 1:A:76:GLU:H 7 0.09 (1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 7 0.09 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 7 0.09 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 13 0.09 (1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 13 0.09 (1,505) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG22 13 0.09 (1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG23 13 0.09 (1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG23 16	(1,517)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:HG22	18	0.09
(1,512) 1:A:79:LEU:HD22 1:A:87:ARG:H 4 0.09 (1,512) 1:A:79:LEU:HD23 1:A:87:ARG:H 4 0.09 (1,512) 1:A:79:LEU:HD21 1:A:87:ARG:H 7 0.09 (1,512) 1:A:79:LEU:HD22 1:A:87:ARG:H 7 0.09 (1,512) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 7 0.09 (1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 7 0.09 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 7 0.09 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 7 0.09 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 13 0.09 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 13 0.09 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 13 0.09 (1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG21 13 0.09 (1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG23 13 0.09 (1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG21 16 <td>(1,517)</td> <td>1:A:89:GLU:H</td> <td>1:A:102:VAL:HG23</td> <td>18</td> <td>0.09</td>	(1,517)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:HG23	18	0.09
(1,512) 1:A:79:LEU:HD23 1:A:87:ARG:H 4 0.09 (1,512) 1:A:79:LEU:HD21 1:A:87:ARG:H 7 0.09 (1,512) 1:A:79:LEU:HD22 1:A:87:ARG:H 7 0.09 (1,512) 1:A:79:LEU:HD23 1:A:87:ARG:H 7 0.09 (1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 7 0.09 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 7 0.09 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 7 0.09 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 13 0.09 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 13 0.09 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 13 0.09 (1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG21 13 0.09 (1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG22 13 0.09 (1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG23 13 0.09 (1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG22 16 <td>(1,512)</td> <td>1:A:79:LEU:HD21</td> <td>1:A:87:ARG:H</td> <td>4</td> <td>0.09</td>	(1,512)	1:A:79:LEU:HD21	1:A:87:ARG:H	4	0.09
(1,512) 1:A:79:LEU:HD21 1:A:87:ARG:H 7 0.09 (1,512) 1:A:79:LEU:HD22 1:A:87:ARG:H 7 0.09 (1,512) 1:A:79:LEU:HD23 1:A:87:ARG:H 7 0.09 (1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 7 0.09 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 7 0.09 (1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 13 0.09 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 13 0.09 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 13 0.09 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 13 0.09 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 13 0.09 (1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG21 13 0.09 (1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG23 13 0.09 (1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG23 16 0.09 (1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG23 16<	(1,512)	1:A:79:LEU:HD22	1:A:87:ARG:H	4	0.09
(1,512) 1:A:79:LEU:HD22 1:A:87:ARG:H 7 0.09 (1,512) 1:A:79:LEU:HD23 1:A:87:ARG:H 7 0.09 (1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 7 0.09 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 7 0.09 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 7 0.09 (1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 13 0.09 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 13 0.09 (1,505) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG21 13 0.09 (1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG22 13 0.09 (1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG22 13 0.09 (1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG23 13 0.09 (1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG23 16 0.09 (1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG21 16 0.09 (1,499) 1:A:71:ILE:H 1:A:71:ILE:HD11 12<	(1,512)	1:A:79:LEU:HD23	1:A:87:ARG:H	4	0.09
(1,512) 1:A:79:LEU:HD23 1:A:87:ARG:H 7 0.09 (1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 7 0.09 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 7 0.09 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 7 0.09 (1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 13 0.09 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 13 0.09 (1,505) 1:A:74:GLU:H 1:A:76:GLU:H 13 0.09 (1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG21 13 0.09 (1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG22 13 0.09 (1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG23 13 0.09 (1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG23 16 0.09 (1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG21 16 0.09 (1,499) 1:A:71:ILE:H 1:A:71:ILE:HD11 12 0.09 (1,499) 1:A:71:ILE:H 1:A:71:ILE:HD13 12 <td>(1,512)</td> <td>1:A:79:LEU:HD21</td> <td>1:A:87:ARG:H</td> <td>7</td> <td>0.09</td>	(1,512)	1:A:79:LEU:HD21	1:A:87:ARG:H	7	0.09
(1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 7 0.09 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 7 0.09 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 7 0.09 (1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 13 0.09 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 13 0.09 (1,505) 1:A:74:GLU:H 1:A:76:GLU:H 13 0.09 (1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG21 13 0.09 (1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG22 13 0.09 (1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG23 13 0.09 (1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG23 16 0.09 (1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG21 16 0.09 (1,499) 1:A:71:ILE:H 1:A:71:ILE:HD11 12 0.09 (1,499) 1:A:71:ILE:H 1:A:71:ILE:HD12 12 0.09 (1,489) 1:A:79:LEU:HD11 1:A:88:THR:H 18 </td <td>(1,512)</td> <td>1:A:79:LEU:HD22</td> <td>1:A:87:ARG:H</td> <td>7</td> <td>0.09</td>	(1,512)	1:A:79:LEU:HD22	1:A:87:ARG:H	7	0.09
(1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 7 0.09 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 7 0.09 (1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 13 0.09 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 13 0.09 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 13 0.09 (1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG21 13 0.09 (1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG22 13 0.09 (1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG23 13 0.09 (1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG21 16 0.09 (1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG22 16 0.09 (1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG23 16 0.09 (1,499) 1:A:71:ILE:H 1:A:71:ILE:HD11 12 0.09 (1,499) 1:A:71:ILE:H 1:A:71:ILE:HD13 12 0.09 (1,48) 1:A:79:LEU:HD11 1:A:88:THR:H 1	(1,512)	1:A:79:LEU:HD23	1:A:87:ARG:H	7	0.09
(1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 7 0.09 (1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 13 0.09 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 13 0.09 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 13 0.09 (1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG21 13 0.09 (1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG22 13 0.09 (1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG23 13 0.09 (1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG21 16 0.09 (1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG22 16 0.09 (1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG22 16 0.09 (1,499) 1:A:71:ILE:H 1:A:71:ILE:HD11 12 0.09 (1,499) 1:A:71:ILE:H 1:A:71:ILE:HD12 12 0.09 (1,48) 1:A:79:LEU:HD11 1:A:88:THR:H 18 0.09 (1,48) 1:A:79:LEU:HD12 1:A:48:TYR:H 7	(1,505)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:76:GLU:H	7	0.09
(1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 13 0.09 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 13 0.09 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 13 0.09 (1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG21 13 0.09 (1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG22 13 0.09 (1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG23 13 0.09 (1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG21 16 0.09 (1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG22 16 0.09 (1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG23 16 0.09 (1,499) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG23 16 0.09 (1,499) 1:A:71:ILE:H 1:A:71:ILE:HD11 12 0.09 (1,499) 1:A:77:ILE:H 1:A:71:ILE:HD12 12 0.09 (1,48) 1:A:79:LEU:HD11 1:A:88:THR:H 18 0.09 (1,48) 1:A:79:LEU:HD12 1:A:88:THR:H	(1,505)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:76:GLU:H	7	0.09
(1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 13 0.09 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 13 0.09 (1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG21 13 0.09 (1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG22 13 0.09 (1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG23 13 0.09 (1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG21 16 0.09 (1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG22 16 0.09 (1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG23 16 0.09 (1,499) 1:A:71:ILE:H 1:A:71:ILE:HD13 12 0.09 (1,499) 1:A:71:ILE:H 1:A:71:ILE:HD12 12 0.09 (1,48) 1:A:79:LEU:HD11 1:A:88:THR:H 18 0.09 (1,48) 1:A:79:LEU:HD12 1:A:88:THR:H 18 0.09 (1,472) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:42:TYR:H 7 0.09 (1,472) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:42:TYR:H 7	(1,505)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:76:GLU:H	7	0.09
(1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 13 0.09 (1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG21 13 0.09 (1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG22 13 0.09 (1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG23 13 0.09 (1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG21 16 0.09 (1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG22 16 0.09 (1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG23 16 0.09 (1,499) 1:A:71:ILE:H 1:A:71:ILE:HD11 12 0.09 (1,499) 1:A:71:ILE:H 1:A:71:ILE:HD12 12 0.09 (1,499) 1:A:71:ILE:H 1:A:71:ILE:HD13 12 0.09 (1,48) 1:A:79:LEU:HD11 1:A:88:THR:H 18 0.09 (1,48) 1:A:79:LEU:HD12 1:A:88:THR:H 18 0.09 (1,472) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:42:TYR:H 7 0.09 (1,472) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:42:TYR:H 7	(1,505)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:76:GLU:H	13	0.09
(1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG21 13 0.09 (1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG22 13 0.09 (1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG23 13 0.09 (1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG21 16 0.09 (1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG22 16 0.09 (1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG23 16 0.09 (1,499) 1:A:71:ILE:H 1:A:71:ILE:HD11 12 0.09 (1,499) 1:A:71:ILE:H 1:A:71:ILE:HD12 12 0.09 (1,499) 1:A:71:ILE:H 1:A:71:ILE:HD13 12 0.09 (1,48) 1:A:79:LEU:HD11 1:A:88:THR:H 18 0.09 (1,48) 1:A:79:LEU:HD12 1:A:88:THR:H 18 0.09 (1,472) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:42:TYR:H 7 0.09 (1,472) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:42:TYR:H 7 0.09 (1,470) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:24:GLY:H 7<	(1,505)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:76:GLU:H	13	0.09
(1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG22 13 0.09 (1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG23 13 0.09 (1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG21 16 0.09 (1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG22 16 0.09 (1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG23 16 0.09 (1,499) 1:A:71:ILE:H 1:A:71:ILE:HD11 12 0.09 (1,499) 1:A:71:ILE:H 1:A:71:ILE:HD12 12 0.09 (1,499) 1:A:71:ILE:H 1:A:71:ILE:HD13 12 0.09 (1,499) 1:A:71:ILE:H 1:A:71:ILE:HD13 12 0.09 (1,48) 1:A:79:LEU:HD11 1:A:88:THR:H 18 0.09 (1,48) 1:A:79:LEU:HD12 1:A:88:THR:H 18 0.09 (1,472) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:42:TYR:H 7 0.09 (1,472) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:42:TYR:H 7 0.09 (1,470) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:24:GLY:H 7<	(1,505)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:76:GLU:H	13	0.09
(1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG23 13 0.09 (1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG21 16 0.09 (1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG22 16 0.09 (1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG23 16 0.09 (1,499) 1:A:71:ILE:H 1:A:71:ILE:HD11 12 0.09 (1,499) 1:A:71:ILE:H 1:A:71:ILE:HD12 12 0.09 (1,499) 1:A:71:ILE:H 1:A:71:ILE:HD13 12 0.09 (1,499) 1:A:71:ILE:H 1:A:88:THR:H 18 0.09 (1,48) 1:A:79:LEU:HD11 1:A:88:THR:H 18 0.09 (1,48) 1:A:79:LEU:HD12 1:A:88:THR:H 18 0.09 (1,47) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:42:TYR:H 7 0.09 (1,472) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:42:TYR:H 7 0.09 (1,470) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:24:GLY:H 7 0.09 (1,470) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:24:GLY:H 7	(1,501)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG21	13	0.09
(1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG21 16 0.09 (1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG22 16 0.09 (1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG23 16 0.09 (1,499) 1:A:71:ILE:H 1:A:71:ILE:HD11 12 0.09 (1,499) 1:A:71:ILE:H 1:A:71:ILE:HD12 12 0.09 (1,489) 1:A:79:LEU:HD11 1:A:88:THR:H 18 0.09 (1,48) 1:A:79:LEU:HD11 1:A:88:THR:H 18 0.09 (1,48) 1:A:79:LEU:HD12 1:A:88:THR:H 18 0.09 (1,48) 1:A:79:LEU:HD13 1:A:88:THR:H 18 0.09 (1,472) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:42:TYR:H 7 0.09 (1,472) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:42:TYR:H 7 0.09 (1,472) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:42:TYR:H 7 0.09 (1,470) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:24:GLY:H 7 0.09 (1,470) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:115:CYS:H 6 <td>(1,501)</td> <td>1:A:74:GLU:H</td> <td>1:A:75:VAL:HG22</td> <td>13</td> <td>0.09</td>	(1,501)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG22	13	0.09
(1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG22 16 0.09 (1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG23 16 0.09 (1,499) 1:A:71:ILE:H 1:A:71:ILE:HD11 12 0.09 (1,499) 1:A:71:ILE:H 1:A:71:ILE:HD12 12 0.09 (1,499) 1:A:71:ILE:H 1:A:71:ILE:HD13 12 0.09 (1,48) 1:A:79:LEU:HD11 1:A:88:THR:H 18 0.09 (1,48) 1:A:79:LEU:HD12 1:A:88:THR:H 18 0.09 (1,48) 1:A:79:LEU:HD13 1:A:88:THR:H 18 0.09 (1,472) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:42:TYR:H 7 0.09 (1,472) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:42:TYR:H 7 0.09 (1,472) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:42:TYR:H 7 0.09 (1,470) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:24:GLY:H 7 0.09 (1,470) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:24:GLY:H 7 0.09 (1,47) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:115:CYS:H 6	(1,501)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG23	13	0.09
(1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG23 16 0.09 (1,499) 1:A:71:ILE:H 1:A:71:ILE:HD11 12 0.09 (1,499) 1:A:71:ILE:H 1:A:71:ILE:HD12 12 0.09 (1,499) 1:A:71:ILE:H 1:A:71:ILE:HD13 12 0.09 (1,48) 1:A:79:LEU:HD11 1:A:88:THR:H 18 0.09 (1,48) 1:A:79:LEU:HD12 1:A:88:THR:H 18 0.09 (1,48) 1:A:79:LEU:HD13 1:A:88:THR:H 18 0.09 (1,48) 1:A:79:LEU:HD13 1:A:88:THR:H 18 0.09 (1,47) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:42:TYR:H 7 0.09 (1,472) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:42:TYR:H 7 0.09 (1,470) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:24:GLY:H 7 0.09 (1,470) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:24:GLY:H 7 0.09 (1,47) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:115:CYS:H 6 0.09 (1,47) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:115:CYS:H 6	(1,501)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG21	16	0.09
(1,499) 1:A:71:ILE:H 1:A:71:ILE:HD11 12 0.09 (1,499) 1:A:71:ILE:H 1:A:71:ILE:HD12 12 0.09 (1,499) 1:A:71:ILE:H 1:A:71:ILE:HD13 12 0.09 (1,48) 1:A:79:LEU:HD11 1:A:88:THR:H 18 0.09 (1,48) 1:A:79:LEU:HD12 1:A:88:THR:H 18 0.09 (1,48) 1:A:79:LEU:HD13 1:A:88:THR:H 18 0.09 (1,472) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:42:TYR:H 7 0.09 (1,472) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:42:TYR:H 7 0.09 (1,472) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:42:TYR:H 7 0.09 (1,470) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:24:GLY:H 7 0.09 (1,470) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:24:GLY:H 7 0.09 (1,47) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:115:CYS:H 6 0.09 (1,47) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:115:CYS:H 6 0.09	(1,501)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG22	16	0.09
(1,499) 1:A:71:ILE:H 1:A:71:ILE:HD12 12 0.09 (1,499) 1:A:71:ILE:H 1:A:71:ILE:HD13 12 0.09 (1,48) 1:A:79:LEU:HD11 1:A:88:THR:H 18 0.09 (1,48) 1:A:79:LEU:HD12 1:A:88:THR:H 18 0.09 (1,48) 1:A:79:LEU:HD13 1:A:88:THR:H 18 0.09 (1,48) 1:A:79:LEU:HD13 1:A:88:THR:H 18 0.09 (1,472) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:42:TYR:H 7 0.09 (1,472) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:42:TYR:H 7 0.09 (1,470) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:42:TYR:H 7 0.09 (1,470) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:24:GLY:H 7 0.09 (1,470) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:24:GLY:H 7 0.09 (1,47) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:115:CYS:H 6 0.09 (1,47) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:115:CYS:H 6 0.09 (1,47) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:115:CYS:H 6	(1,501)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG23	16	0.09
(1,499) 1:A:71:ILE:H 1:A:71:ILE:HD13 12 0.09 (1,48) 1:A:79:LEU:HD11 1:A:88:THR:H 18 0.09 (1,48) 1:A:79:LEU:HD12 1:A:88:THR:H 18 0.09 (1,48) 1:A:79:LEU:HD13 1:A:88:THR:H 18 0.09 (1,472) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:42:TYR:H 7 0.09 (1,472) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:42:TYR:H 7 0.09 (1,472) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:42:TYR:H 7 0.09 (1,470) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:24:GLY:H 7 0.09 (1,470) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:24:GLY:H 7 0.09 (1,470) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:24:GLY:H 7 0.09 (1,470) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:115:CYS:H 6 0.09 (1,47) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:115:CYS:H 6 0.09 (1,47) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:115:CYS:H 6 0.09	(1,499)	1:A:71:ILE:H	1:A:71:ILE:HD11	12	0.09
(1,48) 1:A:79:LEU:HD11 1:A:88:THR:H 18 0.09 (1,48) 1:A:79:LEU:HD12 1:A:88:THR:H 18 0.09 (1,48) 1:A:79:LEU:HD13 1:A:88:THR:H 18 0.09 (1,472) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:42:TYR:H 7 0.09 (1,472) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:42:TYR:H 7 0.09 (1,472) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:42:TYR:H 7 0.09 (1,470) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:24:GLY:H 7 0.09 (1,470) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:24:GLY:H 7 0.09 (1,470) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:115:CYS:H 6 0.09 (1,47) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:115:CYS:H 6 0.09 (1,47) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:115:CYS:H 6 0.09	(1,499)	1:A:71:ILE:H	1:A:71:ILE:HD12	12	0.09
(1,48) 1:A:79:LEU:HD12 1:A:88:THR:H 18 0.09 (1,48) 1:A:79:LEU:HD13 1:A:88:THR:H 18 0.09 (1,472) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:42:TYR:H 7 0.09 (1,472) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:42:TYR:H 7 0.09 (1,472) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:42:TYR:H 7 0.09 (1,470) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:24:GLY:H 7 0.09 (1,470) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:24:GLY:H 7 0.09 (1,470) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:115:CYS:H 6 0.09 (1,47) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:115:CYS:H 6 0.09 (1,47) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:115:CYS:H 6 0.09	(1,499)	1:A:71:ILE:H	1:A:71:ILE:HD13	12	0.09
(1,48) 1:A:79:LEU:HD13 1:A:88:THR:H 18 0.09 (1,472) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:42:TYR:H 7 0.09 (1,472) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:42:TYR:H 7 0.09 (1,472) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:42:TYR:H 7 0.09 (1,470) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:24:GLY:H 7 0.09 (1,470) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:24:GLY:H 7 0.09 (1,470) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:115:CYS:H 6 0.09 (1,47) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:115:CYS:H 6 0.09 (1,47) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:115:CYS:H 6 0.09	(1,48)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:88:THR:H	18	0.09
(1,472) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:42:TYR:H 7 0.09 (1,472) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:42:TYR:H 7 0.09 (1,472) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:42:TYR:H 7 0.09 (1,470) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:24:GLY:H 7 0.09 (1,470) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:24:GLY:H 7 0.09 (1,470) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:24:GLY:H 7 0.09 (1,47) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:115:CYS:H 6 0.09 (1,47) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:115:CYS:H 6 0.09 (1,47) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:115:CYS:H 6 0.09		1:A:79:LEU:HD12	1:A:88:THR:H	18	0.09
(1,472) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:42:TYR:H 7 0.09 (1,472) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:42:TYR:H 7 0.09 (1,472) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:42:TYR:H 7 0.09 (1,470) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:24:GLY:H 7 0.09 (1,470) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:24:GLY:H 7 0.09 (1,470) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:24:GLY:H 7 0.09 (1,47) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:115:CYS:H 6 0.09 (1,47) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:115:CYS:H 6 0.09 (1,47) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:115:CYS:H 6 0.09	` /	1:A:79:LEU:HD13	1:A:88:THR:H	18	0.09
(1,472) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:42:TYR:H 7 0.09 (1,470) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:24:GLY:H 7 0.09 (1,470) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:24:GLY:H 7 0.09 (1,470) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:24:GLY:H 7 0.09 (1,47) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:115:CYS:H 6 0.09 (1,47) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:115:CYS:H 6 0.09 (1,47) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:115:CYS:H 6 0.09		1:A:41:LEU:HD21	1:A:42:TYR:H	7	0.09
(1,472) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:42:TYR:H 7 0.09 (1,470) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:24:GLY:H 7 0.09 (1,470) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:24:GLY:H 7 0.09 (1,470) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:24:GLY:H 7 0.09 (1,47) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:115:CYS:H 6 0.09 (1,47) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:115:CYS:H 6 0.09 (1,47) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:115:CYS:H 6 0.09	(1,472)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:42:TYR:H	7	0.09
(1,470) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:24:GLY:H 7 0.09 (1,470) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:24:GLY:H 7 0.09 (1,47) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:115:CYS:H 6 0.09 (1,47) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:115:CYS:H 6 0.09 (1,47) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:115:CYS:H 6 0.09		1:A:41:LEU:HD23	1:A:42:TYR:H	7	0.09
(1,470) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:24:GLY:H 7 0.09 (1,470) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:24:GLY:H 7 0.09 (1,47) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:115:CYS:H 6 0.09 (1,47) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:115:CYS:H 6 0.09 (1,47) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:115:CYS:H 6 0.09	(1,470)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:24:GLY:H	7	0.09
(1,470) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:24:GLY:H 7 0.09 (1,47) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:115:CYS:H 6 0.09 (1,47) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:115:CYS:H 6 0.09 (1,47) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:115:CYS:H 6 0.09		1:A:19:VAL:HG12	1:A:24:GLY:H	7	0.09
(1,47) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:115:CYS:H 6 0.09 (1,47) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:115:CYS:H 6 0.09		1:A:19:VAL:HG13	1:A:24:GLY:H	7	0.09
(1,47) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:115:CYS:H 6 0.09 (1,47) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:115:CYS:H 6 0.09	(1,47)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:115:CYS:H	6	0.09
(1,47) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:115:CYS:H 6 0.09		1:A:90:VAL:HG12	1:A:115:CYS:H	6	0.09
	· · /	1:A:90:VAL:HG13	1:A:115:CYS:H	6	0.09
	(1,468)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:23:ASN:H	18	0.09



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	ea jrom previous page Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,468)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:23:ASN:H	18	0.09
(1,468)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:23:ASN:H	18	0.09
(1,462)	1:A:45:ILE:HD11	1:A:46:VAL:H	16	0.09
(1,462)	1:A:45:ILE:HD12	1:A:46:VAL:H	16	0.09
(1,462)	1:A:45:ILE:HD13	1:A:46:VAL:H	16	0.09
(1,458)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:10:LYS:H	9	0.09
(1,458)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:10:LYS:H	9	0.09
(1,458)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:10:LYS:H	9	0.09
(1,453)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG21	14	0.09
(1,453)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG22	14	0.09
(1,453)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG23	14	0.09
(1,453)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG21	15	0.09
(1,453)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG22	15	0.09
(1,453)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG23	15	0.09
(1,453)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG21	19	0.09
(1,453)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG22	19	0.09
(1,453)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG23	19	0.09
(1,451)	1:A:75:VAL:HG11	1:A:91:ARG:H	1	0.09
(1,451)	1:A:75:VAL:HG12	1:A:91:ARG:H	1	0.09
(1,451)	1:A:75:VAL:HG13	1:A:91:ARG:H	1	0.09
(1,451)	1:A:75:VAL:HG11	1:A:91:ARG:H	9	0.09
(1,451)	1:A:75:VAL:HG12	1:A:91:ARG:H	9	0.09
(1,451)	1:A:75:VAL:HG13	1:A:91:ARG:H	9	0.09
(1,451)	1:A:75:VAL:HG11	1:A:91:ARG:H	14	0.09
(1,451)	1:A:75:VAL:HG12	1:A:91:ARG:H	14	0.09
(1,451)	1:A:75:VAL:HG13	1:A:91:ARG:H	14	0.09
(1,451)	1:A:75:VAL:HG11	1:A:91:ARG:H	16	0.09
(1,451)	1:A:75:VAL:HG12	1:A:91:ARG:H	16	0.09
(1,451)	1:A:75:VAL:HG13	1:A:91:ARG:H	16	0.09
(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD11	6	0.09
(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD12	6	0.09
(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD13	6	0.09
(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD11	9	0.09
(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD12	9	0.09
(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD13	9	0.09
(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD11	13	0.09
(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD12	13	0.09
(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD13	13	0.09
(1,447)	1:A:41:LEU:H	1:A:124:VAL:HG21	5	0.09
(1,447)	1:A:41:LEU:H	1:A:124:VAL:HG22	5	0.09
(1,447)	1:A:41:LEU:H	1:A:124:VAL:HG23	5	0.09
(1,447)	1:A:41:LEU:H	1:A:124:VAL:HG21	14	0.09



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,447)	1:A:41:LEU:H	1:A:124:VAL:HG22	14	0.09
(1,447)	1:A:41:LEU:H	1:A:124:VAL:HG23	14	0.09
(1,445)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:113:ARG:H	4	0.09
(1,445)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:113:ARG:H	4	0.09
(1,445)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:113:ARG:H	4	0.09
(1,445)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:113:ARG:H	11	0.09
(1,445)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:113:ARG:H	11	0.09
(1,445)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:113:ARG:H	11	0.09
(1,443)	1:A:90:VAL:HG21	1:A:101:HIS:H	13	0.09
(1,443)	1:A:90:VAL:HG22	1:A:101:HIS:H	13	0.09
(1,443)	1:A:90:VAL:HG23	1:A:101:HIS:H	13	0.09
(1,440)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:100:GLY:H	17	0.09
(1,440)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:100:GLY:H	17	0.09
(1,440)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:100:GLY:H	17	0.09
(1,440)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:100:GLY:H	19	0.09
(1,440)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:100:GLY:H	19	0.09
(1,440)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:100:GLY:H	19	0.09
(1,44)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:48:GLY:H	17	0.09
(1,44)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:48:GLY:H	17	0.09
(1,44)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:48:GLY:H	17	0.09
(1,435)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:26:GLU:H	1	0.09
(1,435)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:26:GLU:H	1	0.09
(1,435)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:26:GLU:H	1	0.09
(1,435)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:26:GLU:H	13	0.09
(1,435)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:26:GLU:H	13	0.09
(1,435)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:26:GLU:H	13	0.09
(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD21	16	0.09
(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD22	16	0.09
(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD23	16	0.09
(1,416)	1:A:86:ILE:H	1:A:86:ILE:HD11	5	0.09
(1,416)	1:A:86:ILE:H	1:A:86:ILE:HD12	5	0.09
(1,416)	1:A:86:ILE:H	1:A:86:ILE:HD13	5	0.09
(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD21	9	0.09
(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD22	9	0.09
(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD23	9	0.09
(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD21	15	0.09
(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD22	15	0.09
(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD23	15	0.09
(1,41)	1:A:45:ILE:H	1:A:46:VAL:HG21	16	0.09
(1,41)	1:A:45:ILE:H	1:A:46:VAL:HG22	16	0.09
(1,41)	1:A:45:ILE:H	1:A:46:VAL:HG23	16	0.09
(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD11	14	0.09



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD12	14	0.09
(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD13	14	0.09
(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD11	14	0.09
(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD12	14	0.09
(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD13	14	0.09
(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD11	14	0.09
(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD12	14	0.09
(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD13	14	0.09
(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD11	19	0.09
(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD12	19	0.09
(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD13	19	0.09
(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD11	19	0.09
(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD12	19	0.09
(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD13	19	0.09
(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD11	19	0.09
(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD12	19	0.09
(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD13	19	0.09
(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD11	20	0.09
(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD12	20	0.09
(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD13	20	0.09
(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD11	20	0.09
(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD12	20	0.09
(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD13	20	0.09
(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD11	20	0.09
(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD12	20	0.09
(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD13	20	0.09
(1,4)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:124:VAL:H	11	0.09
(1,4)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:H	11	0.09
(1,4)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:H	11	0.09
(1,4)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:124:VAL:H	17	0.09
(1,4)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:H	17	0.09
(1,4)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:H	17	0.09
(1,4)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:124:VAL:H	19	0.09
(1,4)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:H	19	0.09
(1,4)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:H	19	0.09
(1,399)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:129:LEU:HD21	11	0.09
(1,399)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:129:LEU:HD22	11	0.09
(1,399)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:129:LEU:HD23	11	0.09
(1,399)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:129:LEU:HD21	11	0.09
(1,399)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:129:LEU:HD22	11	0.09
(1,399)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:129:LEU:HD23	11	0.09
(1,399)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:129:LEU:HD21	11	0.09



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,399)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:129:LEU:HD22	11	0.09
(1,399)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:129:LEU:HD23	11	0.09
(1,375)	1:A:131:GLU:H	1:A:133:GLY:H	5	0.09
(1,374)	1:A:132:GLU:H	1:A:134:TYR:H	1	0.09
(1,37)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:13:ASN:HD21	2	0.09
(1,37)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:13:ASN:HD21	2	0.09
(1,37)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:13:ASN:HD21	2	0.09
(1,364)	1:A:43:VAL:H	1:A:124:VAL:H	15	0.09
(1,350)	1:A:108:GLY:H	1:A:111:GLY:H	15	0.09
(1,336)	1:A:90:VAL:H	1:A:101:HIS:H	16	0.09
(1,332)	1:A:85:MET:H	1:A:86:ILE:H	6	0.09
(1,329)	1:A:79:LEU:H	1:A:89:GLU:H	8	0.09
(1,322)	1:A:54:SER:H	1:A:57:LYS:H	13	0.09
(1,312)	1:A:41:LEU:H	1:A:124:VAL:H	13	0.09
(1,303)	1:A:18:GLU:H	1:A:20:THR:H	7	0.09
(1,298)	1:A:14:ARG:H	1:A:17:TYR:H	2	0.09
(1,298)	1:A:14:ARG:H	1:A:17:TYR:H	10	0.09
(1,298)	1:A:14:ARG:H	1:A:17:TYR:H	11	0.09
(1,298)	1:A:14:ARG:H	1:A:17:TYR:H	16	0.09
(1,285)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:H	10	0.09
(1,283)	1:A:131:GLU:H	1:A:134:TYR:H	9	0.09
(1,274)	1:A:80:ASP:H	1:A:89:GLU:H	8	0.09
(1,267)	1:A:21:GLN:H	1:A:24:GLY:H	10	0.09
(1,267)	1:A:21:GLN:H	1:A:24:GLY:H	14	0.09
(1,266)	1:A:19:VAL:H	1:A:21:GLN:H	20	0.09
(1,259)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD11	13	0.09
(1,259)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD12	13	0.09
(1,259)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD13	13	0.09
(1,259)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD11	13	0.09
(1,259)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD12	13	0.09
(1,259)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD13	13	0.09
(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD11	13	0.09
(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD12	13	0.09
(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD13	13	0.09
(1,259)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD11	16	0.09
(1,259)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD12	16	0.09
(1,259)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD13	16	0.09
(1,259)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD11	16	0.09
(1,259)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD12	16	0.09
(1,259)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD13	16	0.09
(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD11	16	0.09
(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD12	16	0.09



 $Continued\ from\ previous\ page...$

(1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 16 0.09 (1,25) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:123:PHE:H 7 0.09 (1,25) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:123:PHE:H 7 0.09 (1,25) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:123:PHE:H 7 0.09 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD11 3 0.09 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD12 3 0.09 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 3 0.09 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 3 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:129:LEU:HD13 4 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:129:LEU:HD13 4 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:129:LEU:HD14 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:129:LEU:HD13 4 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:129:LEU:HD14 4 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:129:LEU:HD13	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,25) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:123:PHE:H 7 0.09 (1,25) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:123:PHE:H 7 0.09 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD11 3 0.09 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD12 3 0.09 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 4 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:129:LEU:HD12 4 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:129:LEU:HD12 4 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:129:LEU:HD13 4 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:129:LEU:HD14 4 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:129:LEU:HD13 4 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:129:L	(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD13	16	0.09
(1,25) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:123:PHE:H 7 0.09 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD11 3 0.09 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD12 3 0.09 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 3 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:129:LEU:HD11 4 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:129:LEU:HD12 4 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:129:LEU:HD13 4 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:129:LEU:HD11 4 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:129:LEU:HD13 4 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:129:LEU:HD13 4 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:129:LEU:HD11 4 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:129:LEU:HD13 4 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:129:LEU:HD13 4 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 <th< td=""><td>(1,25)</td><td>1:A:43:VAL:HG21</td><td>1:A:123:PHE:H</td><td>7</td><td>0.09</td></th<>	(1,25)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:123:PHE:H	7	0.09
(1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD11 3 0.09 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD12 3 0.09 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 3 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:129:LEU:HD11 4 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:129:LEU:HD12 4 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:129:LEU:HD13 4 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:129:LEU:HD11 4 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:129:LEU:HD12 4 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:129:LEU:HD13 4 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:129:LEU:HD11 4 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:129:LEU:HD12 4 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:129:LEU:HD13 4 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:13:ASN:HD21 15 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13	(1,25)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:123:PHE:H	7	0.09
(1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD12 3 0.09 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 3 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:129:LEU:HD11 4 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:129:LEU:HD12 4 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:129:LEU:HD13 4 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:129:LEU:HD11 4 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:129:LEU:HD12 4 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:129:LEU:HD13 4 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:129:LEU:HD13 4 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:129:LEU:HD12 4 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:129:LEU:HD13 4 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:13:ASN:HD21 5 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:13:ASN:HD21 15 0.09 (1,235) 1:A:41:LEU:HD13	(1,25)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:123:PHE:H	7	0.09
(1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 3 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:129:LEU:HD11 4 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:129:LEU:HD12 4 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:129:LEU:HD13 4 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:129:LEU:HD11 4 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:129:LEU:HD12 4 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:129:LEU:HD13 4 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:129:LEU:HD11 4 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:129:LEU:HD12 4 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:13:ASN:HD21 4 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:13:ASN:HD21 15 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:13:ASN:HD21 15 0.09 (1,235) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:13:ASN:HD21 15 0.09 (1,235) 1:A:12:LEU:HD21	(1,248)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD11	3	0.09
(1,237) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:129:LEU:HD11 4 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:129:LEU:HD12 4 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:129:LEU:HD13 4 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:129:LEU:HD11 4 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:129:LEU:HD12 4 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:129:LEU:HD13 4 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:129:LEU:HD11 4 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:129:LEU:HD12 4 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:129:LEU:HD12 4 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:13:ASN:HD21 4 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:13:ASN:HD21 15 0.09 (1,235) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:13:ASN:HD21 15 0.09 (1,235) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:74:GLU:H 11 0.09 (1,219) 1:A:51:LEU:HD23	(1,248)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD12	3	0.09
(1,237) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:129:LEU:HD12 4 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:129:LEU:HD13 4 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:129:LEU:HD11 4 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:129:LEU:HD12 4 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:129:LEU:HD13 4 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:129:LEU:HD11 4 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:129:LEU:HD12 4 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:129:LEU:HD12 4 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:129:LEU:HD13 4 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:129:LEU:HD13 4 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:12:SEU:HD13 4 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:13:ASN:HD21 15 0.09 (1,235) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:13:ASN:HD21 15 0.09 (1,299) 1:A:51:LEU:HD21	(1,248)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD13	3	0.09
(1,237) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:129:LEU:HD13 4 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:129:LEU:HD11 4 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:129:LEU:HD12 4 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:129:LEU:HD13 4 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:129:LEU:HD11 4 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:129:LEU:HD12 4 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:129:LEU:HD13 4 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:129:LEU:HD13 4 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:13:ASN:HD21 15 0.09 (1,235) 1:A:12:LEU:HD11 1:A:13:ASN:HD21 15 0.09 (1,235) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:13:ASN:HD21 15 0.09 (1,219) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:74:GLU:H 11 0.09 (1,219) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:74:GLU:H 11 0.09 (1,210) 1:A:41:LEU:H <t< td=""><td>(1,237)</td><td>1:A:41:LEU:HD11</td><td>1:A:129:LEU:HD11</td><td>4</td><td>0.09</td></t<>	(1,237)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:129:LEU:HD11	4	0.09
(1,237) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:129:LEU:HD11 4 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:129:LEU:HD12 4 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:129:LEU:HD13 4 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:129:LEU:HD11 4 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:129:LEU:HD12 4 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:129:LEU:HD13 4 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:129:LEU:HD13 4 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:13:ASN:HD21 15 0.09 (1,235) 1:A:12:LEU:HD11 1:A:13:ASN:HD21 15 0.09 (1,235) 1:A:12:LEU:HD12 1:A:74:GLU:H 11 0.09 (1,219) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:74:GLU:H 11 0.09 (1,219) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:74:GLU:H 11 0.09 (1,219) 1:A:41:LEU:H 1:A:41:LEU:HD21 10 0.09 (1,210) 1:A:41:LEU:H 1:A:	(1,237)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:129:LEU:HD12	4	0.09
(1,237) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:129:LEU:HD12 4 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:129:LEU:HD13 4 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:129:LEU:HD11 4 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:129:LEU:HD12 4 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:129:LEU:HD13 4 0.09 (1,235) 1:A:12:LEU:HD11 1:A:13:ASN:HD21 15 0.09 (1,235) 1:A:12:LEU:HD12 1:A:13:ASN:HD21 15 0.09 (1,235) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:74:GLU:H 11 0.09 (1,219) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:74:GLU:H 11 0.09 (1,219) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:74:GLU:H 11 0.09 (1,219) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:74:GLU:H 11 0.09 (1,210) 1:A:41:LEU:H 1:A:41:LEU:HD21 10 0.09 (1,210) 1:A:41:LEU:H 1:A:41:LEU:HD22 10 0.09 (1,192) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117	(1,237)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:129:LEU:HD13	4	0.09
(1,237) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:129:LEU:HD13 4 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:129:LEU:HD11 4 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:129:LEU:HD12 4 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:129:LEU:HD13 4 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:129:LEU:HD13 4 0.09 (1,235) 1:A:12:LEU:HD11 1:A:13:ASN:HD21 15 0.09 (1,235) 1:A:12:LEU:HD12 1:A:13:ASN:HD21 15 0.09 (1,235) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:13:ASN:HD21 15 0.09 (1,235) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:13:ASN:HD21 15 0.09 (1,219) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:74:GLU:H 11 0.09 (1,219) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:74:GLU:H 11 0.09 (1,219) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:0 0.09 (1,210) 1:A:41:LEU:H 1:A:41:LEU:HD21 10 0.09 (1,210) 1:A:41:LEU:H 1:A:41:LEU:HD23 <t< td=""><td>(1,237)</td><td>1:A:41:LEU:HD12</td><td>1:A:129:LEU:HD11</td><td>4</td><td>0.09</td></t<>	(1,237)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:129:LEU:HD11	4	0.09
(1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:129:LEU:HD11 4 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:129:LEU:HD12 4 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:129:LEU:HD13 4 0.09 (1,235) 1:A:12:LEU:HD11 1:A:13:ASN:HD21 15 0.09 (1,235) 1:A:12:LEU:HD12 1:A:13:ASN:HD21 15 0.09 (1,235) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:13:ASN:HD21 15 0.09 (1,235) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:13:ASN:HD21 15 0.09 (1,219) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:74:GLU:H 11 0.09 (1,219) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:74:GLU:H 11 0.09 (1,219) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:74:GLU:H 11 0.09 (1,210) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:74:GLU:H 11 0.09 (1,210) 1:A:41:LEU:H 1:A:41:LEU:HD21 10 0.09 (1,210) 1:A:41:LEU:H 1:A:41:LEU:HD23 10 0.09 (1,210) 1:A:41:P:VAL:HG11 1:A:1	(1,237)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:129:LEU:HD12	4	0.09
(1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:129:LEU:HD12 4 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:129:LEU:HD13 4 0.09 (1,235) 1:A:12:LEU:HD11 1:A:13:ASN:HD21 15 0.09 (1,235) 1:A:12:LEU:HD12 1:A:13:ASN:HD21 15 0.09 (1,235) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:13:ASN:HD21 15 0.09 (1,235) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:74:GLU:H 11 0.09 (1,219) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:74:GLU:H 11 0.09 (1,219) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:74:GLU:H 11 0.09 (1,219) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:74:GLU:H 11 0.09 (1,210) 1:A:41:LEU:HD23 1:0 0.09 (1,210) 1:A:41:LEU:H 1:A:41:LEU:HD22 10 0.09 (1,210) 1:A:41:LEU:H 1:A:41:LEU:HD23 10 0.09 (1,210) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 19 0.09 (1,192) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:117:ASN:H 19	(1,237)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:129:LEU:HD13	4	0.09
(1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:129:LEU:HD13 4 0.09 (1,237) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:129:LEU:HD13 4 0.09 (1,235) 1:A:12:LEU:HD11 1:A:13:ASN:HD21 15 0.09 (1,235) 1:A:12:LEU:HD12 1:A:13:ASN:HD21 15 0.09 (1,235) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:13:ASN:HD21 15 0.09 (1,219) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:74:GLU:H 11 0.09 (1,219) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:74:GLU:H 11 0.09 (1,219) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:74:GLU:H 11 0.09 (1,210) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:41:LEU:HD21 10 0.09 (1,210) 1:A:41:LEU:H 1:A:41:LEU:HD22 10 0.09 (1,210) 1:A:41:LEU:H 1:A:41:LEU:HD23 10 0.09 (1,210) 1:A:41:LEU:H 1:A:41:LEU:HD23 10 0.09 (1,210) 1:A:41:LEU:H 1:A:41:LEU:HD23 10 0.09 (1,210) 1:A:41:LEU:H 1:A:41:LEU:HD	, ,	1:A:41:LEU:HD13	1:A:129:LEU:HD11	4	0.09
(1,235) 1:A:12:LEU:HD11 1:A:13:ASN:HD21 15 0.09 (1,235) 1:A:12:LEU:HD12 1:A:13:ASN:HD21 15 0.09 (1,235) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:13:ASN:HD21 15 0.09 (1,219) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:74:GLU:H 11 0.09 (1,219) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:74:GLU:H 11 0.09 (1,219) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:74:GLU:H 11 0.09 (1,210) 1:A:41:LEU:HD23 10 0.09 (1,210) 1:A:41:LEU:H 1:A:41:LEU:HD22 10 0.09 (1,210) 1:A:41:LEU:H 1:A:41:LEU:HD23 10 0.09 (1,210) 1:A:41:LEU:H 1:A:117:ASN:H 19 0.09 (1,192) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 19 0.09 (1,192) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:117:ASN:H 19 0.09 (1,19) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:127:HIS:H 9 0.09 (1,19) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:127:HIS:H 9 <td< td=""><td></td><td>1:A:41:LEU:HD13</td><td>1:A:129:LEU:HD12</td><td>4</td><td>0.09</td></td<>		1:A:41:LEU:HD13	1:A:129:LEU:HD12	4	0.09
(1,235) 1:A:12:LEU:HD12 1:A:13:ASN:HD21 15 0.09 (1,235) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:13:ASN:HD21 15 0.09 (1,219) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:74:GLU:H 11 0.09 (1,219) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:74:GLU:H 11 0.09 (1,219) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:74:GLU:H 11 0.09 (1,210) 1:A:41:LEU:H 1:A:41:LEU:HD21 10 0.09 (1,210) 1:A:41:LEU:H 1:A:41:LEU:HD22 10 0.09 (1,210) 1:A:41:LEU:H 1:A:41:LEU:HD23 10 0.09 (1,210) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 19 0.09 (1,192) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 19 0.09 (1,192) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:117:ASN:H 19 0.09 (1,19) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:127:HIS:H 9 0.09 (1,19) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:127:HIS:H 9 0.09 (1,19) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:127:HIS:H	(1,237)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:129:LEU:HD13	4	0.09
(1,235) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:13:ASN:HD21 15 0.09 (1,219) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:74:GLU:H 11 0.09 (1,219) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:74:GLU:H 11 0.09 (1,219) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:74:GLU:H 11 0.09 (1,210) 1:A:41:LEU:H 1:A:41:LEU:HD21 10 0.09 (1,210) 1:A:41:LEU:H 1:A:41:LEU:HD22 10 0.09 (1,210) 1:A:41:LEU:H 1:A:41:LEU:HD23 10 0.09 (1,192) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 19 0.09 (1,192) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:117:ASN:H 19 0.09 (1,192) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:127:HIS:H 9 0.09 (1,19) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:127:HIS:H 9 0.09 (1,19) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:127:HIS:H 9 0.09 (1,19) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:127:HIS:H 16 0.09 (1,19) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:127:HIS:H	(1,235)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:13:ASN:HD21	15	0.09
(1,219) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:74:GLU:H 11 0.09 (1,219) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:74:GLU:H 11 0.09 (1,219) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:74:GLU:H 11 0.09 (1,210) 1:A:41:LEU:H 1:A:41:LEU:HD21 10 0.09 (1,210) 1:A:41:LEU:H 1:A:41:LEU:HD22 10 0.09 (1,210) 1:A:41:LEU:H 1:A:41:LEU:HD23 10 0.09 (1,192) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 19 0.09 (1,192) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:117:ASN:H 19 0.09 (1,19) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:127:HIS:H 9 0.09 (1,19) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:127:HIS:H 16 0.09 (1,19) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:127:HIS:H	(1,235)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:13:ASN:HD21	15	0.09
(1,219) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:74:GLU:H 11 0.09 (1,219) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:74:GLU:H 11 0.09 (1,210) 1:A:41:LEU:H 1:A:41:LEU:HD21 10 0.09 (1,210) 1:A:41:LEU:H 1:A:41:LEU:HD22 10 0.09 (1,210) 1:A:41:LEU:H 1:A:41:LEU:HD23 10 0.09 (1,192) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 19 0.09 (1,192) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:117:ASN:H 19 0.09 (1,192) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:127:HIS:H 9 0.09 (1,19) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:127:HIS:H 9 0.09 (1,19) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:127:HIS:H 9 0.09 (1,19) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:127:HIS:H 16 0.09 (1,19) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:127:HIS:H 16 0.09	(1,235)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:13:ASN:HD21	15	0.09
(1,219) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:74:GLU:H 11 0.09 (1,210) 1:A:41:LEU:H 1:A:41:LEU:HD21 10 0.09 (1,210) 1:A:41:LEU:H 1:A:41:LEU:HD22 10 0.09 (1,210) 1:A:41:LEU:H 1:A:41:LEU:HD23 10 0.09 (1,192) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 19 0.09 (1,192) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:117:ASN:H 19 0.09 (1,192) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:117:ASN:H 19 0.09 (1,19) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:127:HIS:H 9 0.09 (1,19) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:127:HIS:H 9 0.09 (1,19) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:127:HIS:H 9 0.09 (1,19) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:127:HIS:H 16 0.09 (1,19) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:127:HIS:H 16 0.09	(1,219)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:74:GLU:H	11	0.09
(1,210) 1:A:41:LEU:H 1:A:41:LEU:HD21 10 0.09 (1,210) 1:A:41:LEU:H 1:A:41:LEU:HD22 10 0.09 (1,210) 1:A:41:LEU:H 1:A:41:LEU:HD23 10 0.09 (1,192) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 19 0.09 (1,192) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:117:ASN:H 19 0.09 (1,192) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:117:ASN:H 19 0.09 (1,19) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:127:HIS:H 9 0.09 (1,19) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:127:HIS:H 9 0.09 (1,19) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:127:HIS:H 16 0.09 (1,19) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:127:HIS:H 16 0.09 (1,19) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:127:HIS:H 16 0.09	(1,219)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:74:GLU:H	11	0.09
(1,210) 1:A:41:LEU:H 1:A:41:LEU:HD22 10 0.09 (1,210) 1:A:41:LEU:H 1:A:41:LEU:HD23 10 0.09 (1,192) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 19 0.09 (1,192) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:117:ASN:H 19 0.09 (1,192) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:117:ASN:H 19 0.09 (1,19) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:127:HIS:H 9 0.09 (1,19) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:127:HIS:H 9 0.09 (1,19) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:127:HIS:H 9 0.09 (1,19) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:127:HIS:H 16 0.09 (1,19) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:127:HIS:H 16 0.09	(1,219)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:74:GLU:H	11	0.09
(1,210) 1:A:41:LEU:H 1:A:41:LEU:HD23 10 0.09 (1,192) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 19 0.09 (1,192) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:117:ASN:H 19 0.09 (1,192) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:117:ASN:H 19 0.09 (1,19) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:127:HIS:H 9 0.09 (1,19) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:127:HIS:H 9 0.09 (1,19) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:127:HIS:H 9 0.09 (1,19) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:127:HIS:H 16 0.09 (1,19) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:127:HIS:H 16 0.09	(1,210)	1:A:41:LEU:H	1:A:41:LEU:HD21	10	0.09
(1,192) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 19 0.09 (1,192) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:117:ASN:H 19 0.09 (1,192) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:117:ASN:H 19 0.09 (1,19) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:127:HIS:H 9 0.09 (1,19) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:127:HIS:H 9 0.09 (1,19) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:127:HIS:H 9 0.09 (1,19) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:127:HIS:H 16 0.09 (1,19) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:127:HIS:H 16 0.09	(1,210)	1:A:41:LEU:H	1:A:41:LEU:HD22	10	0.09
(1,192) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:117:ASN:H 19 0.09 (1,192) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:117:ASN:H 19 0.09 (1,19) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:127:HIS:H 9 0.09 (1,19) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:127:HIS:H 9 0.09 (1,19) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:127:HIS:H 9 0.09 (1,19) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:127:HIS:H 16 0.09 (1,19) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:127:HIS:H 16 0.09	(1,210)	1:A:41:LEU:H	1:A:41:LEU:HD23	10	0.09
(1,192) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:117:ASN:H 19 0.09 (1,19) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:127:HIS:H 9 0.09 (1,19) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:127:HIS:H 9 0.09 (1,19) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:127:HIS:H 9 0.09 (1,19) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:127:HIS:H 16 0.09 (1,19) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:127:HIS:H 16 0.09	(1,192)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:H	19	0.09
(1,19) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:127:HIS:H 9 0.09 (1,19) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:127:HIS:H 9 0.09 (1,19) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:127:HIS:H 9 0.09 (1,19) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:127:HIS:H 16 0.09 (1,19) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:127:HIS:H 16 0.09	(1,192)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:H	19	0.09
(1,19) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:127:HIS:H 9 0.09 (1,19) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:127:HIS:H 9 0.09 (1,19) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:127:HIS:H 16 0.09 (1,19) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:127:HIS:H 16 0.09	(1,192)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:H	19	0.09
(1,19) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:127:HIS:H 9 0.09 (1,19) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:127:HIS:H 16 0.09 (1,19) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:127:HIS:H 16 0.09	(1,19)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:127:HIS:H	9	0.09
(1,19) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:127:HIS:H 16 0.09 (1,19) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:127:HIS:H 16 0.09	(1,19)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:127:HIS:H	9	0.09
(1,19) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:127:HIS:H 16 0.09	(1,19)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:127:HIS:H	9	0.09
	(1,19)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:127:HIS:H	16	0.09
(1,19) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:127:HIS:H 16 0.09	(1,19)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:127:HIS:H	16	0.09
	(1,19)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:127:HIS:H	16	0.09
(1,189) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:124:VAL:HG21 11 0.09		1:A:41:LEU:HD11	1:A:124:VAL:HG21	11	0.09
(1,189) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:124:VAL:HG22 11 0.09		1:A:41:LEU:HD11	1:A:124:VAL:HG22	11	0.09
(1,189) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:124:VAL:HG23 11 0.09	(1,189)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:124:VAL:HG23	11	0.09
(1,189) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:124:VAL:HG21 11 0.09		1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:HG21	11	0.09
(1,189) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:124:VAL:HG22 11 0.09		1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:HG22	11	0.09
(1,189) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:124:VAL:HG23 11 0.09		1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:HG23	11	0.09
(1,189) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:HG21 11 0.09	(1,189)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:HG21	11	0.09
(1,189) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:HG22 11 0.09	, ,	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:HG22	11	0.09



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,189)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:HG23	11	0.09
(1,176)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:45:ILE:HD11	3	0.09
(1,176)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:45:ILE:HD12	3	0.09
(1,176)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:45:ILE:HD13	3	0.09
(1,176)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:45:ILE:HD11	3	0.09
(1,176)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:45:ILE:HD12	3	0.09
(1,176)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:45:ILE:HD13	3	0.09
(1,176)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:45:ILE:HD11	3	0.09
(1,176)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:45:ILE:HD12	3	0.09
(1,176)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:45:ILE:HD13	3	0.09
(1,172)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:20:THR:H	12	0.09
(1,172)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:20:THR:H	12	0.09
(1,172)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:20:THR:H	12	0.09
(1,17)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD21	17	0.09
(1,17)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD22	17	0.09
(1,17)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD23	17	0.09
(1,14)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD21	9	0.09
(1,14)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD22	9	0.09
(1,14)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD23	9	0.09
(1,14)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD21	11	0.09
(1,14)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD22	11	0.09
(1,14)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD23	11	0.09
(1,139)	1:A:46:VAL:H	1:A:48:GLY:H	11	0.09
(1,132)	1:A:16:GLN:H	1:A:19:VAL:H	15	0.09
(1,131)	1:A:17:TYR:H	1:A:19:VAL:H	3	0.09
(1,119)	1:A:88:THR:H	1:A:102:VAL:H	19	0.09
(1,115)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:H	18	0.09
(1,115)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:H	20	0.09
(1,106)	1:A:105:ASP:H	1:A:113:ARG:H	18	0.09
(1,102)	1:A:52:PHE:H	1:A:71:ILE:H	1	0.09
(1,99)	1:A:20:THR:H	1:A:23:ASN:H	12	0.08
(1,9)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:138:LEU:H	17	0.08
(1,9)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:138:LEU:H	17	0.08
(1,9)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:138:LEU:H	17	0.08
(1,81)	1:A:47:SER:H	1:A:48:GLY:H	4	0.08
(1,8)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:42:TYR:H	4	0.08
(1,8)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:42:TYR:H	4	0.08
(1,8)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:42:TYR:H	4	0.08
(1,79)	1:A:45:ILE:H	1:A:47:SER:H	7	0.08
(1,79)	1:A:45:ILE:H	1:A:47:SER:H	12	0.08
(1,78)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:H	3	0.08
(1,63)	1:A:54:SER:HG	1:A:57:LYS:H	5	0.08



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,63)	1:A:54:SER:HG	1:A:57:LYS:H	13	0.08
(1,623)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD11	3	0.08
(1,623)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD12	3	0.08
(1,623)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD13	3	0.08
(1,623)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD11	18	0.08
(1,623)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD12	18	0.08
(1,623)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD13	18	0.08
(1,614)	1:A:86:ILE:HD11	1:A:80:ASP:H	10	0.08
(1,614)	1:A:86:ILE:HD12	1:A:80:ASP:H	10	0.08
(1,614)	1:A:86:ILE:HD13	1:A:80:ASP:H	10	0.08
(1,610)	1:A:115:CYS:H	1:A:101:HIS:H	10	0.08
(1,608)	1:A:100:GLY:H	1:A:90:VAL:H	3	0.08
(1,590)	1:A:16:GLN:HE21	1:A:45:ILE:HD11	11	0.08
(1,590)	1:A:16:GLN:HE21	1:A:45:ILE:HD12	11	0.08
(1,590)	1:A:16:GLN:HE21	1:A:45:ILE:HD13	11	0.08
(1,590)	1:A:16:GLN:HE22	1:A:45:ILE:HD11	11	0.08
(1,590)	1:A:16:GLN:HE22	1:A:45:ILE:HD12	11	0.08
(1,590)	1:A:16:GLN:HE22	1:A:45:ILE:HD13	11	0.08
(1,584)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD11	20	0.08
(1,584)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD12	20	0.08
(1,584)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD13	20	0.08
(1,571)	1:A:140:LEU:HD11	1:A:141:PHE:H	3	0.08
(1,571)	1:A:140:LEU:HD12	1:A:141:PHE:H	3	0.08
(1,571)	1:A:140:LEU:HD13	1:A:141:PHE:H	3	0.08
(1,571)	1:A:140:LEU:HD11	1:A:141:PHE:H	9	0.08
(1,571)	1:A:140:LEU:HD12	1:A:141:PHE:H	9	0.08
(1,571)	1:A:140:LEU:HD13	1:A:141:PHE:H	9	0.08
(1,57)	1:A:112:LEU:HD11	1:A:113:ARG:H	17	0.08
(1,57)	1:A:112:LEU:HD12	1:A:113:ARG:H	17	0.08
(1,57)	1:A:112:LEU:HD13	1:A:113:ARG:H	17	0.08
(1,563)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:137:TYR:H	17	0.08
(1,563)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:137:TYR:H	17	0.08
(1,563)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:137:TYR:H	17	0.08
(1,558)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:132:GLU:H	14	0.08
(1,558)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:132:GLU:H	14	0.08
(1,558)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:132:GLU:H	14	0.08
(1,556)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD11	18	0.08
(1,556)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD12	18	0.08
(1,556)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD13	18	0.08
(1,555)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD11	15	0.08
(1,555)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD12	15	0.08
(1,555)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD13	15	0.08



 $Continued\ from\ previous\ page...$

(1,551) 1:A:124:VAL:H 1:A:129:LEU:HD11 19 0.08 (1,551) 1:A:124:VAL:H 1:A:129:LEU:HD12 19 0.08 (1,551) 1:A:124:VAL:H 1:A:129:LEU:HD13 19 0.08 (1,534) 1:A:101:HIS:H 1:A:102:VAL:HG12 10 0.08 (1,534) 1:A:101:HIS:H 1:A:102:VAL:HG13 10 0.08 (1,534) 1:A:101:HIS:H 1:A:102:VAL:HG13 10 0.08 (1,525) 1:A:98:HIS:H 1:A:99:LEU:HD21 14 0.08 (1,525) 1:A:98:HIS:H 1:A:99:LEU:HD21 14 0.08 (1,525) 1:A:98:HIS:H 1:A:99:LEU:HD23 14 0.08 (1,525) 1:A:98:HIS:H 1:A:99:LEU:HD23 14 0.08 (1,513) 1:A:79:LEU:HD11 1:A:87:ARG:H 1 0.08 (1,513) 1:A:79:LEU:HD12 1:A:87:ARG:H 1 0.08 (1,512) 1:A:79:LEU:HD21 1:A:87:ARG:H 18 0.08 (1,512) 1:A:79:LEU:HD21 1:A:87:ARG:H	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,55f) 1:A:124:VAL:H 1:A:129:LEU:HD13 19 0.08 (1,534) 1:A:101:HIS:H 1:A:102:VAL:HG11 10 0.08 (1,534) 1:A:101:HIS:H 1:A:102:VAL:HG12 10 0.08 (1,534) 1:A:101:HIS:H 1:A:102:VAL:HG13 10 0.08 (1,525) 1:A:98:HIS:H 1:A:99:LEU:HD21 14 0.08 (1,525) 1:A:98:HIS:H 1:A:99:LEU:HD22 14 0.08 (1,525) 1:A:98:HIS:H 1:A:99:LEU:HD23 14 0.08 (1,513) 1:A:79:LEU:HD11 1:A:87:ARG:H 1 0.08 (1,513) 1:A:79:LEU:HD12 1:A:87:ARG:H 1 0.08 (1,513) 1:A:79:LEU:HD13 1:A:87:ARG:H 1 0.08 (1,512) 1:A:79:LEU:HD21 1:A:87:ARG:H 1 0.08 (1,512) 1:A:79:LEU:HD22 1:A:87:ARG:H 18 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 3 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H	(1,551)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD11	19	0.08
(1,534) 1:A:101:HIS:H 1:A:102:VAL:HG11 10 0.08 (1,534) 1:A:101:HIS:H 1:A:102:VAL:HG12 10 0.08 (1,534) 1:A:101:HIS:H 1:A:102:VAL:HG13 10 0.08 (1,525) 1:A:98:HIS:H 1:A:99:LEU:HD21 14 0.08 (1,525) 1:A:98:HIS:H 1:A:99:LEU:HD21 14 0.08 (1,525) 1:A:98:HIS:H 1:A:99:LEU:HD22 14 0.08 (1,525) 1:A:98:HIS:H 1:A:99:LEU:HD23 14 0.08 (1,513) 1:A:79:LEU:HD11 1:A:87:ARG:H 1 0.08 (1,513) 1:A:79:LEU:HD12 1:A:87:ARG:H 1 0.08 (1,513) 1:A:79:LEU:HD12 1:A:87:ARG:H 1 0.08 (1,513) 1:A:79:LEU:HD13 1:A:87:ARG:H 1 0.08 (1,512) 1:A:79:LEU:HD21 1:A:87:ARG:H 18 0.08 (1,512) 1:A:79:LEU:HD22 1:A:87:ARG:H 18 0.08 (1,512) 1:A:79:LEU:HD23 1:A:87:ARG:H 18 0.08 (1,512) 1:A:79:LEU:HD23 1:A:87:ARG:H 18 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 3 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 3 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 3 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 3 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 6 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 6 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 6 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 10 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 10 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 11 0.08 (1,506) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 11 0.08 (1,507) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 11 0.08 (1,509) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 11 0.08 (1,490) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:64:TRP:HE1 2 0.08 (1,490) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:64:TRP:HE1 2 0.08 (1,490) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:64:TRP:HE1 1 0.08 (1,490) 1:A:51:LEU:HD11 1:A:52:PHE:H 15 0.08 (1,490) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:54:SER:H 4 0.08 (1,490) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:54:SER:H 4 0.08 (1,490) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:52:PHE:H 15 0.08 (1,490) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:51:LEU:H 9 0.08 (1,488) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:51:LEU:H 9 0.08 (1,488) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:51:LEU:H 9 0.08 (1,488) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:51:LEU:H 9 0.08 (1,488) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:51	(1,551)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD12	19	0.08
(1,534) 1:A:101:HIS:H 1:A:102:VAL:HG12 10 0.08 (1,534) 1:A:101:HIS:H 1:A:102:VAL:HG13 10 0.08 (1,525) 1:A:98:HIS:H 1:A:99:LEU:HD21 14 0.08 (1,525) 1:A:98:HIS:H 1:A:99:LEU:HD22 14 0.08 (1,525) 1:A:98:HIS:H 1:A:99:LEU:HD22 14 0.08 (1,525) 1:A:98:HIS:H 1:A:99:LEU:HD23 14 0.08 (1,513) 1:A:79:LEU:HD11 1:A:87:ARG:H 1 0.08 (1,513) 1:A:79:LEU:HD11 1:A:87:ARG:H 1 0.08 (1,513) 1:A:79:LEU:HD12 1:A:87:ARG:H 1 0.08 (1,513) 1:A:79:LEU:HD13 1:A:87:ARG:H 1 0.08 (1,513) 1:A:79:LEU:HD21 1:A:87:ARG:H 1 0.08 (1,512) 1:A:79:LEU:HD21 1:A:87:ARG:H 18 0.08 (1,512) 1:A:79:LEU:HD22 1:A:87:ARG:H 18 0.08 (1,512) 1:A:79:LEU:HD22 1:A:87:ARG:H 18 0.08 (1,512) 1:A:79:LEU:HD23 1:A:87:ARG:H 18 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 3 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 3 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 3 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 3 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 6 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 6 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 10 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 11 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 11 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 11 0.08 (1,506) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 11 0.08 (1,506) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 11 0.08 (1,490) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:64:TRP:HE1 2 0.08 (1,490) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:64:TRP:HE1 2 0.08 (1,490) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:64:TRP:HE1 9 0.08 (1,490) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:51:LEU:H 9 0.08 (1,488) 1:A:43:VAL:HG21 1:	(1,551)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD13	19	0.08
(1,534) 1:A:101:HIS:H 1:A:102:VAL:HG13 10 0.08 (1,525) 1:A:98:HIS:H 1:A:99:LEU:HD21 14 0.08 (1,525) 1:A:98:HIS:H 1:A:99:LEU:HD22 14 0.08 (1,525) 1:A:98:HIS:H 1:A:99:LEU:HD23 14 0.08 (1,513) 1:A:79:LEU:HD11 1:A:87:ARG:H 1 0.08 (1,513) 1:A:79:LEU:HD12 1:A:87:ARG:H 1 0.08 (1,513) 1:A:79:LEU:HD13 1:A:87:ARG:H 1 0.08 (1,512) 1:A:79:LEU:HD21 1:A:87:ARG:H 18 0.08 (1,512) 1:A:79:LEU:HD23 1:A:87:ARG:H 18 0.08 (1,512) 1:A:79:LEU:HD23 1:A:87:ARG:H 18 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 3 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 3 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 6 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 6<	(1,534)	1:A:101:HIS:H	1:A:102:VAL:HG11	10	0.08
(1,525) 1:A:98:HIS:H 1:A:99:LEU:HD21 14 0.08 (1,525) 1:A:98:HIS:H 1:A:99:LEU:HD22 14 0.08 (1,525) 1:A:98:HIS:H 1:A:99:LEU:HD23 14 0.08 (1,513) 1:A:79:LEU:HD11 1:A:87:ARG:H 1 0.08 (1,513) 1:A:79:LEU:HD12 1:A:87:ARG:H 1 0.08 (1,513) 1:A:79:LEU:HD13 1:A:87:ARG:H 1 0.08 (1,512) 1:A:79:LEU:HD21 1:A:87:ARG:H 18 0.08 (1,512) 1:A:79:LEU:HD22 1:A:87:ARG:H 18 0.08 (1,512) 1:A:79:LEU:HD23 1:A:87:CRG:H 18 0.08 (1,512) 1:A:79:LEU:HD23 1:A:87:CRG:H 18 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 3	(1,534)	1:A:101:HIS:H	1:A:102:VAL:HG12	10	0.08
(1,525) 1:A:98:HIS:H 1:A:99:LEU:HD22 14 0.08 (1,525) 1:A:98:HIS:H 1:A:99:LEU:HD23 14 0.08 (1,513) 1:A:79:LEU:HD11 1:A:87:ARG:H 1 0.08 (1,513) 1:A:79:LEU:HD12 1:A:87:ARG:H 1 0.08 (1,513) 1:A:79:LEU:HD13 1:A:87:ARG:H 1 0.08 (1,512) 1:A:79:LEU:HD21 1:A:87:ARG:H 18 0.08 (1,512) 1:A:79:LEU:HD22 1:A:87:ARG:H 18 0.08 (1,512) 1:A:79:LEU:HD23 1:A:87:ARG:H 18 0.08 (1,512) 1:A:79:LEU:HD23 1:A:87:ARG:H 18 0.08 (1,512) 1:A:79:LEU:HD23 1:A:87:ARG:H 18 0.08 (1,505) 1:A:79:LEU:HD23 1:A:87:ARG:H 18 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 3 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 6 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 1 </td <td>(1,534)</td> <td>1:A:101:HIS:H</td> <td>1:A:102:VAL:HG13</td> <td>10</td> <td>0.08</td>	(1,534)	1:A:101:HIS:H	1:A:102:VAL:HG13	10	0.08
(1,525) 1:A:98:HIS:H 1:A:99:LEU:HD23 14 0.08 (1,513) 1:A:79:LEU:HD11 1:A:87:ARG:H 1 0.08 (1,513) 1:A:79:LEU:HD12 1:A:87:ARG:H 1 0.08 (1,513) 1:A:79:LEU:HD13 1:A:87:ARG:H 1 0.08 (1,512) 1:A:79:LEU:HD21 1:A:87:ARG:H 18 0.08 (1,512) 1:A:79:LEU:HD22 1:A:87:ARG:H 18 0.08 (1,512) 1:A:79:LEU:HD23 1:A:87:ARG:H 18 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 3 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 3 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 3 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 3 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 6 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 1 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 1	(1,525)	1:A:98:HIS:H	1:A:99:LEU:HD21	14	0.08
(1,513) 1:A:79:LEU:HD11 1:A:87:ARG:H 1 0.08 (1,513) 1:A:79:LEU:HD12 1:A:87:ARG:H 1 0.08 (1,513) 1:A:79:LEU:HD13 1:A:87:ARG:H 1 0.08 (1,512) 1:A:79:LEU:HD21 1:A:87:ARG:H 18 0.08 (1,512) 1:A:79:LEU:HD22 1:A:87:ARG:H 18 0.08 (1,512) 1:A:79:LEU:HD23 1:A:87:ARG:H 18 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 3 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 3 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 3 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 6 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 6 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 1 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 1 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 1	(1,525)	1:A:98:HIS:H	1:A:99:LEU:HD22	14	0.08
(1,513) 1:A:79:LEU:HD12 1:A:87:ARG:H 1 0.08 (1,513) 1:A:79:LEU:HD13 1:A:87:ARG:H 1 0.08 (1,512) 1:A:79:LEU:HD21 1:A:87:ARG:H 18 0.08 (1,512) 1:A:79:LEU:HD22 1:A:87:ARG:H 18 0.08 (1,512) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 3 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 3 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 3 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 3 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 6 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 6 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 6 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 1 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 11 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 11	(1,525)	1:A:98:HIS:H	1:A:99:LEU:HD23	14	0.08
(1,513) 1:A:79:LEU:HD13 1:A:87:ARG:H 1 0.08 (1,512) 1:A:79:LEU:HD21 1:A:87:ARG:H 18 0.08 (1,512) 1:A:79:LEU:HD22 1:A:87:ARG:H 18 0.08 (1,512) 1:A:79:LEU:HD23 1:A:87:ARG:H 18 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 3 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 3 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 3 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 6 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 6 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 6 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 11 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 11 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 11 0.08 (1,505) 1:A:79:VAL:HG22 1:A:64:TRP:HE1 2 </td <td>(1,513)</td> <td>1:A:79:LEU:HD11</td> <td>1:A:87:ARG:H</td> <td>1</td> <td>0.08</td>	(1,513)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:87:ARG:H	1	0.08
(1,512) 1:A:79:LEU:HD21 1:A:87:ARG:H 18 0.08 (1,512) 1:A:79:LEU:HD22 1:A:87:ARG:H 18 0.08 (1,512) 1:A:79:LEU:HD23 1:A:87:ARG:H 18 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 3 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 3 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 6 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 6 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 6 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 6 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 11 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 11 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 11 0.08 (1,500) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:64:TRP:HE1 2 0.08 (1,496) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:54:SER:H 4 </td <td>(1,513)</td> <td>1:A:79:LEU:HD12</td> <td>1:A:87:ARG:H</td> <td>1</td> <td>0.08</td>	(1,513)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:87:ARG:H	1	0.08
(1,512) 1:A:79:LEU:HD22 1:A:87:ARG:H 18 0.08 (1,512) 1:A:79:LEU:HD23 1:A:87:ARG:H 18 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 3 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 3 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 6 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 6 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 6 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 1 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 11 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 11 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 11 0.08 (1,505) 1:A:79:VAL:HG23 1:A:64:TRP:HE1 2 0.08 (1,50) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:64:TRP:HE1 2 0.08 (1,496) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:54:SER:H 4 </td <td>(1,513)</td> <td>1:A:79:LEU:HD13</td> <td>1:A:87:ARG:H</td> <td>1</td> <td>0.08</td>	(1,513)	1:A:79:LEU:HD13	1:A:87:ARG:H	1	0.08
(1,512) 1:A:79:LEU:HD23 1:A:87:ARG:H 18 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 3 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 3 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 6 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 6 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 6 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 6 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 11 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 11 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 11 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 11 0.08 (1,500) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:64:TRP:HE1 2 0.08 (1,50) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:64:TRP:HE1 2 0.08 (1,496) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:54:SER:H 4 </td <td>(1,512)</td> <td>1:A:79:LEU:HD21</td> <td>1:A:87:ARG:H</td> <td>18</td> <td>0.08</td>	(1,512)	1:A:79:LEU:HD21	1:A:87:ARG:H	18	0.08
(1,512) 1:A:79:LEU:HD23 1:A:87:ARG:H 18 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 3 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 3 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 6 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 6 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 6 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 11 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 11 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 11 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 11 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 11 0.08 (1,500) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:64:TRP:HE1 2 0.08 (1,50) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:64:TRP:HE1 2 0.08 (1,496) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:54:SER:H 4<	(1,512)	1:A:79:LEU:HD22	1:A:87:ARG:H	18	0.08
(1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 3 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 3 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 6 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 6 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 6 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 1 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 11 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 11 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 11 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 11 0.08 (1,500) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:64:TRP:HE1 2 0.08 (1,50) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:64:TRP:HE1 2 0.08 (1,496) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:54:SER:H 4 0.08 (1,496) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:54:SER:H 4 <td>(1,512)</td> <td>1:A:79:LEU:HD23</td> <td>1:A:87:ARG:H</td> <td>18</td> <td>0.08</td>	(1,512)	1:A:79:LEU:HD23	1:A:87:ARG:H	18	0.08
(1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 3 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 6 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 6 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 6 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 11 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 11 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 11 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 11 0.08 (1,500) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:64:TRP:HE1 2 0.08 (1,50) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:64:TRP:HE1 2 0.08 (1,496) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:54:SER:H 4 0.08 (1,496) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:54:SER:H 4 0.08 (1,490) 1:A:51:LEU:HD11 1:A:52:PHE:H 15 0.08 (1,490) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:52:PHE:H 15<		1:A:75:VAL:HG21	1:A:76:GLU:H	3	0.08
(1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 6 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 6 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 6 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 11 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 11 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 11 0.08 (1,500) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:64:TRP:HE1 2 0.08 (1,50) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:64:TRP:HE1 2 0.08 (1,50) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:64:TRP:HE1 2 0.08 (1,496) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:54:SER:H 4 0.08 (1,496) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:54:SER:H 4 0.08 (1,490) 1:A:51:LEU:HD11 1:A:52:PHE:H 15 0.08 (1,490) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:52:PHE:H 15 0.08 (1,488) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:51:LEU:H 9<	(1,505)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:76:GLU:H	3	0.08
(1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 6 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 6 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 11 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 11 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 11 0.08 (1,500) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:64:TRP:HE1 2 0.08 (1,50) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:64:TRP:HE1 2 0.08 (1,50) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:64:TRP:HE1 2 0.08 (1,496) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:54:SER:H 4 0.08 (1,496) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:54:SER:H 4 0.08 (1,496) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:52:PHE:H 15 0.08 (1,490) 1:A:51:LEU:HD12 1:A:52:PHE:H 15 0.08 (1,490) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:52:PHE:H 15 0.08 (1,488) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:51:LEU:H 9	(1,505)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:76:GLU:H	3	0.08
(1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 6 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 11 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 11 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 11 0.08 (1,500) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:64:TRP:HE1 2 0.08 (1,50) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:64:TRP:HE1 2 0.08 (1,50) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:64:TRP:HE1 2 0.08 (1,496) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:54:SER:H 4 0.08 (1,496) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:54:SER:H 4 0.08 (1,496) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:54:SER:H 4 0.08 (1,490) 1:A:51:LEU:HD11 1:A:52:PHE:H 15 0.08 (1,490) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:52:PHE:H 15 0.08 (1,488) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:51:LEU:H 9 0.08 (1,488) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:51:LEU:H 9<	(1,505)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:76:GLU:H	6	0.08
(1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 11 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 11 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 11 0.08 (1,50) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:64:TRP:HE1 2 0.08 (1,50) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:64:TRP:HE1 2 0.08 (1,50) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:64:TRP:HE1 2 0.08 (1,496) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:54:SER:H 4 0.08 (1,496) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:54:SER:H 4 0.08 (1,496) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:54:SER:H 4 0.08 (1,490) 1:A:51:LEU:HD11 1:A:52:PHE:H 15 0.08 (1,490) 1:A:51:LEU:HD12 1:A:52:PHE:H 15 0.08 (1,490) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:52:PHE:H 15 0.08 (1,488) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:51:LEU:H 9 0.08 (1,488) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:51:LEU:H 19	(1,505)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:76:GLU:H	6	0.08
(1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 11 0.08 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 11 0.08 (1,50) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:64:TRP:HE1 2 0.08 (1,50) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:64:TRP:HE1 2 0.08 (1,50) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:64:TRP:HE1 2 0.08 (1,50) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:54:SER:H 4 0.08 (1,496) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:54:SER:H 4 0.08 (1,496) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:54:SER:H 4 0.08 (1,496) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:54:SER:H 4 0.08 (1,490) 1:A:51:LEU:HD11 1:A:52:PHE:H 15 0.08 (1,490) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:52:PHE:H 15 0.08 (1,488) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:51:LEU:H 9 0.08 (1,488) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:51:LEU:H 9 0.08 (1,488) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:51:LEU:H 13 <td>(1,505)</td> <td>1:A:75:VAL:HG23</td> <td>1:A:76:GLU:H</td> <td>6</td> <td>0.08</td>	(1,505)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:76:GLU:H	6	0.08
(1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 11 0.08 (1,50) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:64:TRP:HE1 2 0.08 (1,50) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:64:TRP:HE1 2 0.08 (1,50) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:64:TRP:HE1 2 0.08 (1,496) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:54:SER:H 4 0.08 (1,496) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:54:SER:H 4 0.08 (1,496) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:54:SER:H 4 0.08 (1,490) 1:A:51:LEU:HD11 1:A:52:PHE:H 15 0.08 (1,490) 1:A:51:LEU:HD12 1:A:52:PHE:H 15 0.08 (1,488) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:51:LEU:H 9 0.08 (1,488) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:51:LEU:H 9 0.08 (1,488) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:51:LEU:H 13 0.08 (1,488) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:51:LEU:H 13 0.08 (1,488) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:51:LEU:H 13<	(1,505)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:76:GLU:H	11	0.08
(1,50) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:64:TRP:HE1 2 0.08 (1,50) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:64:TRP:HE1 2 0.08 (1,50) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:64:TRP:HE1 2 0.08 (1,496) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:54:SER:H 4 0.08 (1,496) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:54:SER:H 4 0.08 (1,496) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:54:SER:H 4 0.08 (1,496) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:52:PHE:H 15 0.08 (1,490) 1:A:51:LEU:HD12 1:A:52:PHE:H 15 0.08 (1,490) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:52:PHE:H 15 0.08 (1,488) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:51:LEU:H 9 0.08 (1,488) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:51:LEU:H 9 0.08 (1,488) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:51:LEU:H 13 0.08 (1,488) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:51:LEU:H 13 0.08 (1,488) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:51:LEU:H 13<	(1,505)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:76:GLU:H	11	0.08
(1,50) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:64:TRP:HE1 2 0.08 (1,50) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:64:TRP:HE1 2 0.08 (1,496) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:54:SER:H 4 0.08 (1,496) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:54:SER:H 4 0.08 (1,496) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:54:SER:H 4 0.08 (1,490) 1:A:51:LEU:HD11 1:A:52:PHE:H 15 0.08 (1,490) 1:A:51:LEU:HD12 1:A:52:PHE:H 15 0.08 (1,490) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:52:PHE:H 15 0.08 (1,488) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:51:LEU:H 9 0.08 (1,488) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:51:LEU:H 9 0.08 (1,488) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:51:LEU:H 13 0.08 (1,488) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:51:LEU:H 13 0.08 (1,488) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:51:LEU:H 13 0.08	(1,505)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:76:GLU:H	11	0.08
(1,50) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:64:TRP:HE1 2 0.08 (1,496) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:54:SER:H 4 0.08 (1,496) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:54:SER:H 4 0.08 (1,496) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:54:SER:H 4 0.08 (1,490) 1:A:51:LEU:HD11 1:A:52:PHE:H 15 0.08 (1,490) 1:A:51:LEU:HD12 1:A:52:PHE:H 15 0.08 (1,490) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:52:PHE:H 15 0.08 (1,488) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:51:LEU:H 9 0.08 (1,488) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:51:LEU:H 9 0.08 (1,488) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:51:LEU:H 9 0.08 (1,488) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:51:LEU:H 13 0.08 (1,488) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:51:LEU:H 13 0.08	(1,50)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:64:TRP:HE1	2	0.08
(1,496) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:54:SER:H 4 0.08 (1,496) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:54:SER:H 4 0.08 (1,496) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:54:SER:H 4 0.08 (1,490) 1:A:51:LEU:HD11 1:A:52:PHE:H 15 0.08 (1,490) 1:A:51:LEU:HD12 1:A:52:PHE:H 15 0.08 (1,490) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:52:PHE:H 15 0.08 (1,488) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:51:LEU:H 9 0.08 (1,488) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:51:LEU:H 9 0.08 (1,488) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:51:LEU:H 9 0.08 (1,488) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:51:LEU:H 13 0.08 (1,488) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:51:LEU:H 13 0.08	(1,50)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:64:TRP:HE1	2	0.08
(1,496) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:54:SER:H 4 0.08 (1,496) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:54:SER:H 4 0.08 (1,490) 1:A:51:LEU:HD11 1:A:52:PHE:H 15 0.08 (1,490) 1:A:51:LEU:HD12 1:A:52:PHE:H 15 0.08 (1,490) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:52:PHE:H 15 0.08 (1,488) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:51:LEU:H 9 0.08 (1,488) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:51:LEU:H 9 0.08 (1,488) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:51:LEU:H 9 0.08 (1,488) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:51:LEU:H 13 0.08 (1,488) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:51:LEU:H 13 0.08	(1,50)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:64:TRP:HE1	2	0.08
(1,496) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:54:SER:H 4 0.08 (1,490) 1:A:51:LEU:HD11 1:A:52:PHE:H 15 0.08 (1,490) 1:A:51:LEU:HD12 1:A:52:PHE:H 15 0.08 (1,490) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:52:PHE:H 15 0.08 (1,488) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:51:LEU:H 9 0.08 (1,488) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:51:LEU:H 9 0.08 (1,488) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:51:LEU:H 9 0.08 (1,488) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:51:LEU:H 13 0.08 (1,488) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:51:LEU:H 13 0.08	(1,496)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:54:SER:H	4	0.08
(1,490) 1:A:51:LEU:HD11 1:A:52:PHE:H 15 0.08 (1,490) 1:A:51:LEU:HD12 1:A:52:PHE:H 15 0.08 (1,490) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:52:PHE:H 15 0.08 (1,488) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:51:LEU:H 9 0.08 (1,488) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:51:LEU:H 9 0.08 (1,488) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:51:LEU:H 9 0.08 (1,488) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:51:LEU:H 13 0.08 (1,488) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:51:LEU:H 13 0.08	(1,496)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:54:SER:H	4	0.08
(1,490) 1:A:51:LEU:HD11 1:A:52:PHE:H 15 0.08 (1,490) 1:A:51:LEU:HD12 1:A:52:PHE:H 15 0.08 (1,490) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:52:PHE:H 15 0.08 (1,488) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:51:LEU:H 9 0.08 (1,488) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:51:LEU:H 9 0.08 (1,488) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:51:LEU:H 9 0.08 (1,488) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:51:LEU:H 13 0.08 (1,488) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:51:LEU:H 13 0.08	(1,496)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:54:SER:H	4	0.08
(1,490) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:52:PHE:H 15 0.08 (1,488) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:51:LEU:H 9 0.08 (1,488) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:51:LEU:H 9 0.08 (1,488) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:51:LEU:H 9 0.08 (1,488) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:51:LEU:H 13 0.08 (1,488) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:51:LEU:H 13 0.08	(1,490)	1:A:51:LEU:HD11	1:A:52:PHE:H	15	0.08
(1,490) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:52:PHE:H 15 0.08 (1,488) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:51:LEU:H 9 0.08 (1,488) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:51:LEU:H 9 0.08 (1,488) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:51:LEU:H 9 0.08 (1,488) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:51:LEU:H 13 0.08 (1,488) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:51:LEU:H 13 0.08		1:A:51:LEU:HD12	1:A:52:PHE:H	15	0.08
(1,488) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:51:LEU:H 9 0.08 (1,488) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:51:LEU:H 9 0.08 (1,488) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:51:LEU:H 9 0.08 (1,488) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:51:LEU:H 13 0.08 (1,488) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:51:LEU:H 13 0.08	, ,	1:A:51:LEU:HD13	1:A:52:PHE:H	15	0.08
(1,488) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:51:LEU:H 9 0.08 (1,488) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:51:LEU:H 9 0.08 (1,488) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:51:LEU:H 13 0.08 (1,488) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:51:LEU:H 13 0.08	` '	1:A:43:VAL:HG21	1:A:51:LEU:H	9	0.08
(1,488) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:51:LEU:H 9 0.08 (1,488) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:51:LEU:H 13 0.08 (1,488) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:51:LEU:H 13 0.08		1:A:43:VAL:HG22	1:A:51:LEU:H	9	0.08
(1,488) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:51:LEU:H 13 0.08 (1,488) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:51:LEU:H 13 0.08		1:A:43:VAL:HG23	1:A:51:LEU:H	9	0.08
(1,488) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:51:LEU:H 13 0.08		1:A:43:VAL:HG21	1:A:51:LEU:H	13	0.08
		1:A:43:VAL:HG22	1:A:51:LEU:H	13	0.08
(1,100) $1.71.10.110.110.20$ $1.71.01.1120.11$ 1.0 $1.00.00$	(1,488)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:51:LEU:H	13	0.08
(1,475) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:44:ASP:H 15 0.08	(1,475)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:44:ASP:H	15	0.08
(1,475) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:44:ASP:H 15 0.08	(1,475)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:44:ASP:H	15	0.08
(1,475) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:44:ASP:H 15 0.08	/	1:A:43:VAL:HG13	1:A:44:ASP:H	15	0.08



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,47)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:115:CYS:H	10	0.08
(1,47)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:115:CYS:H	10	0.08
(1,47)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:115:CYS:H	10	0.08
(1,469)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:24:GLY:H	5	0.08
(1,469)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:24:GLY:H	5	0.08
(1,469)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:24:GLY:H	5	0.08
(1,469)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:24:GLY:H	13	0.08
(1,469)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:24:GLY:H	13	0.08
(1,469)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:24:GLY:H	13	0.08
(1,468)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:23:ASN:H	20	0.08
(1,468)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:23:ASN:H	20	0.08
(1,468)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:23:ASN:H	20	0.08
(1,465)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG11	7	0.08
(1,465)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG12	7	0.08
(1,465)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG13	7	0.08
(1,462)	1:A:45:ILE:HD11	1:A:46:VAL:H	4	0.08
(1,462)	1:A:45:ILE:HD12	1:A:46:VAL:H	4	0.08
(1,462)	1:A:45:ILE:HD13	1:A:46:VAL:H	4	0.08
(1,462)	1:A:45:ILE:HD11	1:A:46:VAL:H	20	0.08
(1,462)	1:A:45:ILE:HD12	1:A:46:VAL:H	20	0.08
(1,462)	1:A:45:ILE:HD13	1:A:46:VAL:H	20	0.08
(1,458)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:10:LYS:H	12	0.08
(1,458)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:10:LYS:H	12	0.08
(1,458)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:10:LYS:H	12	0.08
(1,458)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:10:LYS:H	20	0.08
(1,458)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:10:LYS:H	20	0.08
(1,458)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:10:LYS:H	20	0.08
(1,456)	1:A:9:ILE:H	1:A:12:LEU:HD21	16	0.08
(1,456)	1:A:9:ILE:H	1:A:12:LEU:HD22	16	0.08
(1,456)	1:A:9:ILE:H	1:A:12:LEU:HD23	16	0.08
(1,454)	1:A:134:TYR:H	1:A:138:LEU:HD21	7	0.08
(1,454)	1:A:134:TYR:H	1:A:138:LEU:HD22	7	0.08
(1,454)	1:A:134:TYR:H	1:A:138:LEU:HD23	7	0.08
(1,452)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG21	4	0.08
(1,452)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG22	4	0.08
(1,452)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG23	4	0.08
(1,452)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG21	15	0.08
(1,452)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG22	15	0.08
(1,452)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG23	15	0.08
(1,451)	1:A:75:VAL:HG11	1:A:91:ARG:H	15	0.08
(1,451)	1:A:75:VAL:HG12	1:A:91:ARG:H	15	0.08



 $Continued\ from\ previous\ page...$

(1,45) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD11 4 0.08 (1,45) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD13 4 0.08 (1,45) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD13 4 0.08 (1,447) 1:A:41:LEU:H 1:A:124:VAL:HG21 10 0.08 (1,447) 1:A:41:LEU:H 1:A:124:VAL:HG22 10 0.08 (1,447) 1:A:41:LEU:H 1:A:124:VAL:HG22 10 0.08 (1,447) 1:A:41:LEU:H 1:A:124:VAL:HG22 10 0.08 (1,445) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:113:ARG:H 16 0.08 (1,445) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:113:ARG:H 16 0.08 (1,445) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:113:ARG:H 18 0.08 (1,445) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:113:ARG:H 18 0.08 (1,445) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:100:GLY:H 10 0.08 (1,440) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:100:GLY:H 10 0.08 (1,440) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:100:GLY:H	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,45) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD13 4 0.08 (1,447) 1:A:41:LEU:H 1:A:124:VAL:HG21 10 0.08 (1,447) 1:A:41:LEU:H 1:A:124:VAL:HG22 10 0.08 (1,447) 1:A:41:LEU:H 1:A:124:VAL:HG22 10 0.08 (1,445) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:113:ARG:H 16 0.08 (1,445) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:113:ARG:H 16 0.08 (1,445) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:113:ARG:H 18 0.08 (1,445) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:113:ARG:H 18 0.08 (1,445) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:113:ARG:H 18 0.08 (1,445) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:100:GLY:H 10 0.08 (1,440) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:100:GLY:H 10 0.08 (1,440) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:100:GLY:H 20 0.08 (1,440) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:100:GLY:H 20 0.08 (1,440) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:100:GLY:	(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD11	4	0.08
(1,447)	(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD12	4	0.08
(1,447) 1:A:41:LEU:H 1:A:124:VAL:HG22 10 0.08 (1,447) 1:A:41:LEU:H 1:A:124:VAL:HG23 10 0.08 (1,447) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:113:ARG:H 16 0.08 (1,445) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:113:ARG:H 18 0.08 (1,445) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:113:ARG:H 18 0.08 (1,440) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:100:GLY:H 10 0.08 (1,440) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:100:GLY:H 10 0.08 (1,440) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:100:GLY:H 10 0.08 (1,440) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:100:GLY:H 20 0.08 (1,440) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:100:GLY:H 20 0.08 (1,440) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:100:GLY:H 20 0.08 (1,437) 1:A:46:VAL:HG11 1:A:48:GLY:H 17 0.08 (1,437) 1:A:46:VAL:HG11 1:A:48:GLY:H 17 0.08 (1,437) 1:A:46:VAL:HG12 1:A:48:GLY:H 17 0.08 (1,437) 1:A:46:VAL:HG12 1:A:26:GLU:H 18 0.08 (1,435) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:26:GLU:H 18 0.08 (1,435) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:26:GLU:H 18 0.08 (1,435) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:26:GLU:H 18 0.08 (1,435) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:26:GLU:H 18 0.08 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD21 10 0.08 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD21 10 0.08 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD21 6 0.08 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD22 6 0.08 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD23 10 0.08 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD23 11 0.08 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD23 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD21 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD21 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD21 11	(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD13	4	0.08
(1,447) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:113:ARG:H 16 0.08 (1,445) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:113:ARG:H 16 0.08 (1,445) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:113:ARG:H 16 0.08 (1,445) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:113:ARG:H 18 0.08 (1,445) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:113:ARG:H 18 0.08 (1,445) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:113:ARG:H 18 0.08 (1,445) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:113:ARG:H 18 0.08 (1,440) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:100:GLY:H 10 0.08 (1,440) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:100:GLY:H 10 0.08 (1,440) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:100:GLY:H 20 0.08 (1,440) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:100:GLY:H 20 0.08 (1,440) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:100:GLY:H 20 0.08 (1,447) 1:A:46:VAL:HG11 1:A:48:GLY:H 17 0.08 (1,437) 1:A:46:VAL:HG11 1:A:48:GL	(1,447)	1:A:41:LEU:H	1:A:124:VAL:HG21	10	0.08
(1,445) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:113:ARG:H 16 0.08 (1,445) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:113:ARG:H 16 0.08 (1,445) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:113:ARG:H 16 0.08 (1,445) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:113:ARG:H 18 0.08 (1,445) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:113:ARG:H 18 0.08 (1,445) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:113:ARG:H 18 0.08 (1,445) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:113:ARG:H 18 0.08 (1,445) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:113:ARG:H 18 0.08 (1,446) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:100:GLY:H 10 0.08 (1,440) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:100:GLY:H 10 0.08 (1,440) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:100:GLY:H 10 0.08 (1,440) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:100:GLY:H 20 0.08 (1,440) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:100:GLY:H 20 0.08 (1,440) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:100:GLY:H 20 0.08 (1,440) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:100:GLY:H 20 0.08 (1,440) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:100:GLY:H 20 0.08 (1,447) 1:A:46:VAL:HG11 1:A:48:GLY:H 17 0.08 (1,437) 1:A:46:VAL:HG13 1:A:48:GLY:H 17 0.08 (1,437) 1:A:46:VAL:HG13 1:A:48:GLY:H 17 0.08 (1,437) 1:A:46:VAL:HG13 1:A:48:GLY:H 17 0.08 (1,437) 1:A:46:VAL:HG12 1:A:48:GLY:H 17 0.08 (1,435) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:26:GLU:H 18 0.08 (1,435) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:26:GLU:H 18 0.08 (1,435) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:26:GLU:H 18 0.08 (1,435) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:26:GLU:H 18 0.08 (1,449) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD21 10 0.08 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD21 10 0.08 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD21 10 0.08 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD22 10 0.08 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD21 6 0.08 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD22 6 0.08 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD22 6 0.08 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD21 11 0.08 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD22 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD22 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD22 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD22 11 0.08 ((1,447)	1:A:41:LEU:H	1:A:124:VAL:HG22	10	0.08
(1,445) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:113:ARG:H 16 0.08 (1,445) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:113:ARG:H 16 0.08 (1,445) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:113:ARG:H 18 0.08 (1,445) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:113:ARG:H 18 0.08 (1,445) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:113:ARG:H 18 0.08 (1,445) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:113:ARG:H 18 0.08 (1,446) 1:A:90:VAL:HG31 1:A:100:GLY:H 10 0.08 (1,440) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:100:GLY:H 10 0.08 (1,440) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:100:GLY:H 10 0.08 (1,440) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:100:GLY:H 10 0.08 (1,440) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:100:GLY:H 20 0.08 (1,440) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:100:GLY:H 20 0.08 (1,440) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:100:GLY:H 20 0.08 (1,440) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:100:GLY:H 20 0.08 (1,440) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:100:GLY:H 20 0.08 (1,437) 1:A:46:VAL:HG13 1:A:100:GLY:H 20 0.08 (1,437) 1:A:46:VAL:HG13 1:A:100:GLY:H 17 0.08 (1,437) 1:A:46:VAL:HG13 1:A:48:GLY:H 17 0.08 (1,437) 1:A:46:VAL:HG13 1:A:48:GLY:H 17 0.08 (1,437) 1:A:46:VAL:HG13 1:A:48:GLY:H 17 0.08 (1,435) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:26:GLU:H 18 0.08 (1,435) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:26:GLU:H 18 0.08 (1,435) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:26:GLU:H 18 0.08 (1,435) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:26:GLU:H 18 0.08 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD21 10 0.08 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD21 10 0.08 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD21 10 0.08 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD22 10 0.08 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD22 6 0.08 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD22 11 0.08 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD22 11 0.08 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD23 11 0.08 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD23 11 0.08 (1,415) 1:A:19:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD22 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138	(1,447)	1:A:41:LEU:H	1:A:124:VAL:HG23	10	0.08
(1,445) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:113:ARG:H 16 0.08 (1,445) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:113:ARG:H 18 0.08 (1,445) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:113:ARG:H 18 0.08 (1,445) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:113:ARG:H 18 0.08 (1,440) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:100:GLY:H 10 0.08 (1,440) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:100:GLY:H 10 0.08 (1,440) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:100:GLY:H 20 0.08 (1,440) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:100:GLY:H 20 0.08 (1,440) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:100:GLY:H 20 0.08 (1,447) 1:A:46:VAL:HG13 1:A:100:GLY:H 20 0.08 (1,437) 1:A:46:VAL:HG11 1:A:48:GLY:H 17 0.08 (1,437) 1:A:46:VAL:HG13 1:A:48:GLY:H 17 0.08 (1,437) 1:A:46:VAL:HG13 1:A:48:GLY:H 17 0.08 (1,435) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:26:GLY:H </td <td>(1,445)</td> <td>1:A:102:VAL:HG21</td> <td>1:A:113:ARG:H</td> <td>16</td> <td>0.08</td>	(1,445)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:113:ARG:H	16	0.08
(1,445) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:113:ARG:H 18 0.08 (1,445) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:113:ARG:H 18 0.08 (1,445) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:113:ARG:H 18 0.08 (1,440) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:100:GLY:H 10 0.08 (1,440) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:100:GLY:H 10 0.08 (1,440) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:100:GLY:H 20 0.08 (1,440) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:100:GLY:H 20 0.08 (1,440) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:100:GLY:H 20 0.08 (1,447) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:100:GLY:H 20 0.08 (1,447) 1:A:46:VAL:HG13 1:A:100:GLY:H 20 0.08 (1,437) 1:A:46:VAL:HG13 1:A:48:GLY:H 17 0.08 (1,437) 1:A:46:VAL:HG12 1:A:48:GLY:H 17 0.08 (1,437) 1:A:46:VAL:HG13 1:A:48:GLY:H 17 0.08 (1,435) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:6:GLU:H <td>(1,445)</td> <td>1:A:102:VAL:HG22</td> <td>1:A:113:ARG:H</td> <td>16</td> <td>0.08</td>	(1,445)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:113:ARG:H	16	0.08
(1,445) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:113:ARG:H 18 0.08 (1,445) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:113:ARG:H 18 0.08 (1,440) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:100:GLY:H 10 0.08 (1,440) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:100:GLY:H 10 0.08 (1,440) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:100:GLY:H 20 0.08 (1,440) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:100:GLY:H 20 0.08 (1,440) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:100:GLY:H 20 0.08 (1,447) 1:A:48:GLY:H 17 0.08 0.08 (1,437) 1:A:46:VAL:HG13 1:A:48:GLY:H 17 0.08 (1,437) 1:A:46:VAL:HG13 1:A:48:GLY:H 17 0.08 (1,435) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:26:GLU:H <	(1,445)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:113:ARG:H	16	0.08
(1,445) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:113:ARG:H 18 0.08 (1,440) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:100:GLY:H 10 0.08 (1,440) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:100:GLY:H 10 0.08 (1,440) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:100:GLY:H 20 0.08 (1,440) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:100:GLY:H 20 0.08 (1,440) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:100:GLY:H 20 0.08 (1,440) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:100:GLY:H 20 0.08 (1,437) 1:A:46:VAL:HG11 1:A:48:GLY:H 17 0.08 (1,437) 1:A:46:VAL:HG12 1:A:48:GLY:H 17 0.08 (1,437) 1:A:46:VAL:HG12 1:A:48:GLY:H 17 0.08 (1,437) 1:A:46:VAL:HG13 1:A:48:GLY:H 17 0.08 (1,437) 1:A:46:VAL:HG13 1:A:48:GLY:H 17 0.08 (1,435) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:26:GLU:H 18 0.08 (1,435) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:26:GLU:H	(1,445)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:113:ARG:H	18	0.08
(1,440) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:100:GLY:H 10 0.08 (1,440) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:100:GLY:H 10 0.08 (1,440) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:100:GLY:H 10 0.08 (1,440) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:100:GLY:H 20 0.08 (1,440) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:100:GLY:H 20 0.08 (1,440) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:100:GLY:H 20 0.08 (1,440) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:100:GLY:H 20 0.08 (1,447) 1:A:46:VAL:HG13 1:A:100:GLY:H 20 0.08 (1,437) 1:A:46:VAL:HG11 1:A:48:GLY:H 17 0.08 (1,437) 1:A:46:VAL:HG12 1:A:48:GLY:H 17 0.08 (1,437) 1:A:46:VAL:HG12 1:A:48:GLY:H 17 0.08 (1,435) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:26:GLU:H 18 0.08 (1,435) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:26:GLU:H 18 0.08 (1,435) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:26:GLU:H 18 0.08 (1,435) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:26:GLU:H 18 0.08 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD21 10 0.08 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD22 10 0.08 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD22 10 0.08 (1,419) 1:A:19:VAL:HG 1:A:79:LEU:HD21 10 0.08 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD21 6 0.08 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD21 6 0.08 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD22 1 1 0.08 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD21 1 1 0.08 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD23 1 1 0.08 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD21 11 0.08 (1,416) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD21 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD21 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LE	(1,445)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:113:ARG:H	18	0.08
(1,440) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:100:GLY:H 10 0.08 (1,440) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:100:GLY:H 10 0.08 (1,440) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:100:GLY:H 20 0.08 (1,440) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:100:GLY:H 20 0.08 (1,440) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:100:GLY:H 20 0.08 (1,437) 1:A:46:VAL:HG11 1:A:48:GLY:H 17 0.08 (1,437) 1:A:46:VAL:HG12 1:A:48:GLY:H 17 0.08 (1,437) 1:A:46:VAL:HG13 1:A:48:GLY:H 17 0.08 (1,435) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:26:GLU:H 18 0.08 (1,435) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:26:GLU:H 18 0.08 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD22	(1,445)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:113:ARG:H	18	0.08
(1,440) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:100:GLY:H 10 0.08 (1,440) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:100:GLY:H 20 0.08 (1,440) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:100:GLY:H 20 0.08 (1,440) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:100:GLY:H 20 0.08 (1,437) 1:A:46:VAL:HG11 1:A:48:GLY:H 17 0.08 (1,437) 1:A:46:VAL:HG12 1:A:48:GLY:H 17 0.08 (1,437) 1:A:46:VAL:HG13 1:A:48:GLY:H 17 0.08 (1,437) 1:A:46:VAL:HG13 1:A:48:GLY:H 17 0.08 (1,437) 1:A:46:VAL:HG13 1:A:48:GLY:H 17 0.08 (1,435) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:26:GLU:H 18 0.08 (1,435) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:26:GLU:H 18 0.08 (1,435) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:26:GLU:H 18 0.08 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD21 10 0.08 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD22	(1,440)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:100:GLY:H	10	0.08
(1,440) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:100:GLY:H 10 0.08 (1,440) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:100:GLY:H 20 0.08 (1,440) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:100:GLY:H 20 0.08 (1,440) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:100:GLY:H 20 0.08 (1,437) 1:A:46:VAL:HG11 1:A:48:GLY:H 17 0.08 (1,437) 1:A:46:VAL:HG12 1:A:48:GLY:H 17 0.08 (1,437) 1:A:46:VAL:HG13 1:A:48:GLY:H 17 0.08 (1,435) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:48:GLY:H 17 0.08 (1,435) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:26:GLU:H 18 0.08 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD21 10 0.08 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD22	(1,440)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:100:GLY:H	10	0.08
(1,440) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:100:GLY:H 20 0.08 (1,440) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:100:GLY:H 20 0.08 (1,437) 1:A:46:VAL:HG11 1:A:48:GLY:H 17 0.08 (1,437) 1:A:46:VAL:HG12 1:A:48:GLY:H 17 0.08 (1,437) 1:A:46:VAL:HG13 1:A:48:GLY:H 17 0.08 (1,437) 1:A:46:VAL:HG13 1:A:48:GLY:H 17 0.08 (1,437) 1:A:46:VAL:HG13 1:A:48:GLY:H 17 0.08 (1,435) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:26:GLU:H 18 0.08 (1,435) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:26:GLU:H 18 0.08 (1,435) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:26:GLU:H 18 0.08 (1,435) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:26:GLU:H 18 0.08 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD21 10 0.08 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:79:LEU:HD22 10 0.08 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD21	(1,440)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:100:GLY:H	10	0.08
(1,440) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:100:GLY:H 20 0.08 (1,437) 1:A:46:VAL:HG11 1:A:48:GLY:H 17 0.08 (1,437) 1:A:46:VAL:HG12 1:A:48:GLY:H 17 0.08 (1,437) 1:A:46:VAL:HG13 1:A:48:GLY:H 17 0.08 (1,435) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:26:GLU:H 18 0.08 (1,435) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:26:GLU:H 18 0.08 (1,419) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:26:GLU:H 18 0.08 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:26:GLU:H 18 0.08 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD22 10 0.08 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD21 <	(1,440)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:100:GLY:H	20	0.08
(1,437) 1:A:46:VAL:HG11 1:A:48:GLY:H 17 0.08 (1,437) 1:A:46:VAL:HG12 1:A:48:GLY:H 17 0.08 (1,437) 1:A:46:VAL:HG13 1:A:48:GLY:H 17 0.08 (1,435) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:26:GLU:H 18 0.08 (1,435) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:26:GLU:H 18 0.08 (1,435) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:26:GLU:H 18 0.08 (1,435) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:26:GLU:H 18 0.08 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:26:GLU:HD22 10 0.08 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD22 10 0.08 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD23 10 0.08 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD21	(1,440)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:100:GLY:H	20	0.08
(1,437) 1:A:46:VAL:HG12 1:A:48:GLY:H 17 0.08 (1,437) 1:A:46:VAL:HG13 1:A:48:GLY:H 17 0.08 (1,435) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:26:GLU:H 18 0.08 (1,435) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:26:GLU:H 18 0.08 (1,435) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:26:GLU:H 18 0.08 (1,435) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:26:GLU:H 18 0.08 (1,435) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:26:GLU:H 18 0.08 (1,435) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:26:GLU:H 18 0.08 (1,419) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:26:GLU:H 18 0.08 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:26:GLU:HD21 10 0.08 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD23 10 0.08 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD21 6 0.08 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD23 6 0.08 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD22 <	(1,440)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:100:GLY:H	20	0.08
(1,437) 1:A:46:VAL:HG13 1:A:48:GLY:H 17 0.08 (1,435) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:26:GLU:H 18 0.08 (1,435) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:26:GLU:H 18 0.08 (1,435) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:26:GLU:H 18 0.08 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD21 10 0.08 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD22 10 0.08 (1,419) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD23 10 0.08 (1,419) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD21 6 0.08 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD22 6 0.08 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD23 6 0.08 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD21 11 0.08 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD22 11 0.08 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD22 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD21	(1,437)	1:A:46:VAL:HG11	1:A:48:GLY:H	17	0.08
(1,435) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:26:GLU:H 18 0.08 (1,435) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:26:GLU:H 18 0.08 (1,435) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:26:GLU:H 18 0.08 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD21 10 0.08 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD22 10 0.08 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD23 10 0.08 (1,419) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD21 6 0.08 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD22 6 0.08 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD23 6 0.08 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD21 11 0.08 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD22 11 0.08 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD22 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD23 <td>(1,437)</td> <td>1:A:46:VAL:HG12</td> <td>1:A:48:GLY:H</td> <td>17</td> <td>0.08</td>	(1,437)	1:A:46:VAL:HG12	1:A:48:GLY:H	17	0.08
(1,435) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:26:GLU:H 18 0.08 (1,435) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:26:GLU:H 18 0.08 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD21 10 0.08 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD22 10 0.08 (1,419) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD23 10 0.08 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD21 6 0.08 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD22 6 0.08 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD23 6 0.08 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD21 11 0.08 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD21 11 0.08 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD22 11 0.08 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD23 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD23	(1,437)	1:A:46:VAL:HG13	1:A:48:GLY:H	17	0.08
(1,435) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:26:GLU:H 18 0.08 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD21 10 0.08 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD22 10 0.08 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD23 10 0.08 (1,419) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD21 6 0.08 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD22 6 0.08 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD23 6 0.08 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD21 11 0.08 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD22 11 0.08 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD22 11 0.08 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD23 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD21 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD23 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD	(1,435)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:26:GLU:H	18	0.08
(1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD21 10 0.08 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD22 10 0.08 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD23 10 0.08 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD21 6 0.08 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD22 6 0.08 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD23 6 0.08 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD21 11 0.08 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD22 11 0.08 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD23 11 0.08 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD23 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD21 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD23 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD22 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD23 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13	(1,435)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:26:GLU:H	18	0.08
(1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD22 10 0.08 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD23 10 0.08 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD21 6 0.08 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD22 6 0.08 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD23 6 0.08 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD21 11 0.08 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD22 11 0.08 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD23 11 0.08 (1,415) 1:A:79:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD21 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD23 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD22 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD23 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:	(1,435)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:26:GLU:H	18	0.08
(1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD23 10 0.08 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD21 6 0.08 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD22 6 0.08 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD23 6 0.08 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD21 11 0.08 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD22 11 0.08 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD23 11 0.08 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:138:LEU:HD21 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD21 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD23 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD22 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD23 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD23 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD21 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13	(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD21	10	0.08
(1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD21 6 0.08 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD22 6 0.08 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD23 6 0.08 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD21 11 0.08 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD22 11 0.08 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD23 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD21 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD23 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD21 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD22 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD21 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD22 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD22 11 0.08	(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD22	10	0.08
(1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD22 6 0.08 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD23 6 0.08 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD21 11 0.08 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD22 11 0.08 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD23 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD21 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD21 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD22 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD23 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD21 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD22 11 0.08	(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD23	10	0.08
(1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD23 6 0.08 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD21 11 0.08 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD22 11 0.08 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD23 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD21 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD21 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD22 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD23 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD21 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD21 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD22 11 0.08	(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD21	6	0.08
(1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD21 11 0.08 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD22 11 0.08 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD23 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD21 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD23 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD22 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD23 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD21 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD21 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD22 11 0.08	(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD22	6	0.08
(1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD22 11 0.08 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD23 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD21 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD23 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD21 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD22 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD21 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD21 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD22 11 0.08	(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD23	6	0.08
(1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD23 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD21 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD23 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD21 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD22 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD21 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD21 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD22 11 0.08	(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD21	11	0.08
(1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD23 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD21 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD23 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD21 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD23 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD21 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD22 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD22 11 0.08	(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD22	11	0.08
(1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD23 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD21 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD22 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD23 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD21 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD22 11 0.08	(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD23	11	0.08
(1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD23 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD21 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD22 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD23 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD21 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD22 11 0.08	(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD21	11	0.08
(1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD21 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD22 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD23 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD21 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD22 11 0.08		1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD22	11	0.08
(1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD22 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD23 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD21 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD22 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD22 11 0.08		1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD23	11	0.08
(1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD23 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD21 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD22 11 0.08		1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD21	11	0.08
(1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD21 11 0.08 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD22 11 0.08	(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD22	11	0.08
(1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD22 11 0.08	(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD23	11	0.08
	(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD21	11	0.08
(1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD23 11 0.08	(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD22	11	0.08
	(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD23	11	0.08



 $Continued\ from\ previous\ page...$

(1,4) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:124:VAL:H 6 0.08 (1,4) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:124:VAL:H 6 0.08 (1,4) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:H 7 0.08 (1,4) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:H 7 0.08 (1,4) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:124:VAL:H 7 0.08 (1,4) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:124:VAL:H 7 0.08 (1,4) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:H 7 0.08 (1,3) 1:A:140:LEU:H 1:A:140:LEU:HD11 13 0.08 (1,39) 1:A:140:LEU:H 1:A:140:LEU:HD11 13 0.08 (1,39) 1:A:140:LEU:H 1:A:140:LEU:HD12 13 0.08 (1,39) 1:A:15:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG21 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG21 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG22 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG23 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG23 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG22 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG22 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG22 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG21 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG23 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG23 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,4) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:H 7 0.08 (1,4) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:124:VAL:H 7 0.08 (1,4) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:124:VAL:H 7 0.08 (1,3) 1:A:140:LEU:H 1:A:140:LEU:HD11 13 0.08 (1,39) 1:A:140:LEU:H 1:A:140:LEU:HD12 13 0.08 (1,39) 1:A:140:LEU:H 1:A:140:LEU:HD13 13 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG21 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG22 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG23 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG23 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG23 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG21 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG22 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG22 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG23 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG23 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG21 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG21 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG21 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG21 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG21 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG22 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG23 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 16 0.08 (1,387) 1:	(1,4)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:124:VAL:H	6	0.08
(1,4) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:124:VAL:H 7 0.08 (1,4) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:124:VAL:H 7 0.08 (1,3) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:H 7 0.08 (1,39) 1:A:140:LEU:H 1:A:140:LEU:HD11 13 0.08 (1,39) 1:A:140:LEU:H 1:A:140:LEU:HD12 13 0.08 (1,38) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG21 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG21 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG22 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG23 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG23 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG22 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG22 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG23 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG22 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG23 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG21 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG22 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG22 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG22 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG22 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG23 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG23 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG21 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG21 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG21 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG21 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG21 16 0.08 (1,387) 1:A:9:LE:HD11 1:A:13:ASN:HD21 16 0.08 (1,387) 1:A:9:LE:HD12 1:A:13:ASN:HD21 16 0.08 (1,387) 1:A:9:LE:HD13 1:A:13:ASN:HD21 16 0.08 (1,370) 1:A:9:LE:HD11 1:A:13:ASN:HD21 16 0.08 (1,371) 1:A:9:LE:HD13 1:A:13:ASN:HD21 16 0.08 (1,371) 1:A:9:LE:HD13 1:A:13:ASN:HD21 16 0.08 (1,371) 1:A:9:LE:HD13 1:A:13:ASN:HD21 16 0.08 (1,372) 1:A:79:LE:HD13 1:A:13:ASN:HD21 16 0.08 (1,371) 1:A:9:LE:HD13 1:A:13:ASN:HD21 16 0.08 (1,372) 1:A:79:LE:HD13 1:	(1,4)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:H	6	0.08
(1,4) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:124:VAL:H 7 0.08 (1,4) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:H 7 0.08 (1,39) 1:A:140:LEU:H 1:A:140:LEU:HD11 13 0.08 (1,39) 1:A:140:LEU:H 1:A:140:LEU:HD12 13 0.08 (1,39) 1:A:140:LEU:H 1:A:140:LEU:HD13 13 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG21 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG22 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG22 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG21 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG21 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG21 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG23 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG23 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG21 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG21 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG21 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG22 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG22 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG21 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG21 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG21 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG21 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG21 16 0.08 (1,3	(1,4)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:H	6	0.08
(1,4) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:H 7 0.08 (1,39) 1:A:140:LEU:H 1:A:140:LEU:HD11 13 0.08 (1,39) 1:A:140:LEU:H 1:A:140:LEU:HD12 13 0.08 (1,39) 1:A:140:LEU:H 1:A:140:LEU:HD12 13 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG21 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG21 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG22 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG23 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG23 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG21 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG21 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG21 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG22 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG23 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG21 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG21 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG21 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG22 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG23 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG21 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG21 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG22 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG22 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG23 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG21 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG22 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG22 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG21 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG21 1	(1,4)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:124:VAL:H	7	0.08
(1,39) 1:A:140:LEU:H 1:A:140:LEU:HD11 13 0.08 (1,39) 1:A:140:LEU:H 1:A:140:LEU:HD12 13 0.08 (1,39) 1:A:140:LEU:H 1:A:140:LEU:HD13 13 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG21 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG22 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG23 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG23 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG23 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG21 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG22 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG22 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG23 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG21 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG23 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG21 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG21 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG22 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG22 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG21 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG21 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG21 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG22 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG22 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG22 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG21 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:H	(1,4)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:H	7	0.08
(1,39) 1:A:140:LEU:H 1:A:140:LEU:HD12 13 0.08 (1,39) 1:A:140:LEU:H 1:A:140:LEU:HD13 13 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG21 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG22 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG22 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG21 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG22 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG23 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG21 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG22 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG21 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG21 16 0.08 (1,387) 1:A:90:VAL:HG23 16 0.08 (1,387) 1:A:90:VAL:HG21 16 0.08 (1,387) 1:A:90:VAL:HG23 16 0.08 (1,387) 1:A:90:VAL	(1,4)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:H	7	0.08
(1,39) 1:A:140:LEU:H 1:A:140:LEU:HD13 13 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG21 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG22 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG23 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG21 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG21 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG22 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG22 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG23 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG21 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG21 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG21 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG22 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG23 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG23 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG21 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG22 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG21 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG21 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG21 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG22 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG23 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG21 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG24 1.A:14:V	(1,39)	1:A:140:LEU:H	1:A:140:LEU:HD11	13	0.08
(1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG21 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG22 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG23 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG21 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG23 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG21 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG21 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG21 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG22 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG23 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG22 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22	(1,39)	1:A:140:LEU:H	1:A:140:LEU:HD12	13	0.08
(1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG23 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG23 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG21 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG22 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG21 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG22 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG21 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG23 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG23 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG23 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG23 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23	(1,39)	1:A:140:LEU:H	1:A:140:LEU:HD13	13	0.08
(1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG21 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG21 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG22 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG23 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG21 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG22 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG22 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG23 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG22 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG22 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23	(1,387)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:90:VAL:HG21	10	0.08
(1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG22 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG22 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG23 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG21 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG23 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG21 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG22 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG22 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG22 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG23 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23	(1,387)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:90:VAL:HG22	10	0.08
(1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG22 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG23 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG21 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG22 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG23 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG21 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG22 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG23 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG23 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG22 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG21 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG21 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23	(1,387)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:90:VAL:HG23	10	0.08
(1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG21 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG21 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG22 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG23 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG22 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG22 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG23 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG21 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG23 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG21 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG21 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG21 16 0.08 (1,381) 1:A:75:VAL:HG23	(1,387)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:90:VAL:HG21	10	0.08
(1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG21 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG21 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG22 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG23 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG22 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG22 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG23 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG21 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG23 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG21 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG21 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG21 16 0.08 (1,381) 1:A:75:VAL:HG23	, ,	1:A:75:VAL:HG22	1:A:90:VAL:HG22	10	0.08
(1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG22 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 10 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG21 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG22 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG23 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG21 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG22 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG23 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG21 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG22 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG22 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG22 16 0.08 (1,381) 1:A:140:LEU:H 1:A:142:ASN:H 1 0.08 (1,381) 1:A:14:140:LEU:H	(1,387)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:90:VAL:HG23	10	0.08
(1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG21 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG21 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG22 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG23 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG21 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG23 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG23 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG21 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG22 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 16 0.08 (1,381) 1:A:140:LEU:H 1:A:142:ASN:H 14 0.08 (1,381) 1:A:13:132:GLU:H 1:A:134:TYR:H 7 0.08 (1,374) 1:A:9:LE:HD11 <	(1,387)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG21	10	0.08
(1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG21 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG22 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG23 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG21 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG23 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG21 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG21 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG21 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG22 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG22 16 0.08 (1,381) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG22 16 0.08 (1,381) 1:A:74:10:EU:H 1:A:142:ASN:H 14 0.08 (1,374) 1:A:13:20:LU:H 1:A:13:43:TYR:H 7 0.08 (1,374) 1:A:9:ILE:HD11	(1,387)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG22	10	0.08
(1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG23 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG23 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG21 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG22 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG23 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG21 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG22 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 16 0.08 (1,381) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 16 0.08 (1,381) 1:A:74:10:EU:H 1:A:14:2:ASN:H 14 0.08 (1,374) 1:A:13:2:GU:H 1:A:13:4:TYR:H 7 0.08 (1,374) 1:A:13:2:GLU:H 1:A:13:ASN:HD21 16 0.08 (1,377) 1:A:9:ILE:HD13 <	(1,387)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG23	10	0.08
(1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG23 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG21 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG22 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG23 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG221 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG22 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 16 0.08 (1,381) 1:A:140:LEU:H 1:A:142:ASN:H 1 0.08 (1,374) 1:A:132:GLU:H 1:A:134:TYR:H 7 0.08 (1,374) 1:A:132:GLU:H 1:A:13:ASN:HD21 16 0.08 (1,37) 1:A:9:ILE:HD11 1:A:13:ASN:HD21 16 0.08 (1,37) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:13:ASN:HD21 16 0.08 (1,361) 1:A:45:ILE:H 1:A:122	(1,387)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:90:VAL:HG21	16	0.08
(1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG22 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG22 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG23 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG21 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG22 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 16 0.08 (1,381) 1:A:140:LEU:H 1:A:142:ASN:H 14 0.08 (1,381) 1:A:132:GLU:H 1:A:134:TYR:H 7 0.08 (1,374) 1:A:132:GLU:H 1:A:134:TYR:H 7 0.08 (1,374) 1:A:9:ILE:HD11 1:A:13:ASN:HD21 16 0.08 (1,37) 1:A:9:ILE:HD12 1:A:13:ASN:HD21 16 0.08 (1,37) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:13:ASN:HD21 16 0.08 (1,361) 1:A:45:ILE:H 1:A:12:2:AR	(1,387)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:90:VAL:HG22	16	0.08
(1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG22 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG23 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG21 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG22 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 16 0.08 (1,381) 1:A:140:LEU:H 1:A:142:ASN:H 14 0.08 (1,374) 1:A:132:GLU:H 1:A:134:TYR:H 7 0.08 (1,374) 1:A:132:GLU:H 1:A:134:TYR:H 1 0.08 (1,374) 1:A:132:GLU:H 1:A:13:ASN:HD21 16 0.08 (1,374) 1:A:9:ILE:HD11 1:A:13:ASN:HD21 16 0.08 (1,375) 1:A:9:ILE:HD12 1:A:13:ASN:HD21 16 0.08 (1,37) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:13:ASN:HD21 16 0.08 (1,361) 1:A:45:ILE:H 1:A:12:2:ARG:H 16 0.08 (1,360) 1:A:43:VAL:H 1:A:14:TYR:H <td>(1,387)</td> <td>1:A:75:VAL:HG21</td> <td>1:A:90:VAL:HG23</td> <td>16</td> <td>0.08</td>	(1,387)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:90:VAL:HG23	16	0.08
(1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG23 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG21 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG22 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 16 0.08 (1,381) 1:A:140:LEU:H 1:A:142:ASN:H 14 0.08 (1,374) 1:A:132:GLU:H 1:A:134:TYR:H 7 0.08 (1,374) 1:A:132:GLU:H 1:A:134:TYR:H 1 0.08 (1,374) 1:A:9:ILE:HD11 1:A:13:ASN:HD21 16 0.08 (1,374) 1:A:9:ILE:HD11 1:A:13:ASN:HD21 16 0.08 (1,37) 1:A:9:ILE:HD12 1:A:13:ASN:HD21 16 0.08 (1,37) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:13:ASN:HD21 16 0.08 (1,361) 1:A:45:ILE:H 1:A:122:ARG:H 16 0.08 (1,360) 1:A:43:VAL:H 1:A:122:ARG:H 20 0.08 (1,355) 1:A:67:PHE:H 1:A:14:TYR:H	(1,387)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:90:VAL:HG21	16	0.08
(1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG22 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG22 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 16 0.08 (1,381) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 16 0.08 (1,381) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 16 0.08 (1,381) 1:A:74:40:LEU:H 1:A:4142:ASN:H 14 0.08 (1,374) 1:A:132:GLU:H 1:A:134:TYR:H 7 0.08 (1,374) 1:A:132:GLU:H 1:A:134:TYR:H 11 0.08 (1,374) 1:A:9:ILE:HD11 1:A:13:ASN:HD21 16 0.08 (1,37) 1:A:9:ILE:HD12 1:A:13:ASN:HD21 16 0.08 (1,375) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:13:ASN:HD21 16 0.08 (1,361) 1:A:45:ILE:H 1:A:122:ARG:H 16 0.08 (1,360) 1:A:43:VAL:H 1:A:114:TYR:H 4 0.08 (1,329) 1:A:79:LEU:H 1:A:89:GLU:H	(1,387)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:90:VAL:HG22	16	0.08
(1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 16 0.08 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 16 0.08 (1,381) 1:A:140:LEU:H 1:A:142:ASN:H 14 0.08 (1,374) 1:A:132:GLU:H 1:A:134:TYR:H 7 0.08 (1,374) 1:A:132:GLU:H 1:A:134:TYR:H 11 0.08 (1,374) 1:A:9:ILE:HD11 1:A:13:ASN:HD21 16 0.08 (1,37) 1:A:9:ILE:HD12 1:A:13:ASN:HD21 16 0.08 (1,37) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:13:ASN:HD21 16 0.08 (1,37) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:13:ASN:HD21 16 0.08 (1,361) 1:A:45:ILE:H 1:A:122:ARG:H 16 0.08 (1,360) 1:A:43:VAL:H 1:A:122:ARG:H 20 0.08 (1,355) 1:A:67:PHE:H 1:A:89:GLU:H 7 0.08 (1,329) 1:A:78:LYS:H 1:A:89:GLU:H 3 0.08 (1,327) 1:A:78:LYS:H 1:A:89:GLU:H 4	(1,387)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:90:VAL:HG23	16	0.08
(1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 16 0.08 (1,381) 1:A:140:LEU:H 1:A:142:ASN:H 14 0.08 (1,374) 1:A:132:GLU:H 1:A:134:TYR:H 7 0.08 (1,374) 1:A:132:GLU:H 1:A:134:TYR:H 11 0.08 (1,37) 1:A:9:ILE:HD11 1:A:13:ASN:HD21 16 0.08 (1,37) 1:A:9:ILE:HD12 1:A:13:ASN:HD21 16 0.08 (1,37) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:13:ASN:HD21 16 0.08 (1,37) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:13:ASN:HD21 16 0.08 (1,361) 1:A:45:ILE:H 1:A:122:ARG:H 16 0.08 (1,360) 1:A:43:VAL:H 1:A:122:ARG:H 20 0.08 (1,355) 1:A:67:PHE:H 1:A:114:TYR:H 4 0.08 (1,329) 1:A:79:LEU:H 1:A:89:GLU:H 7 0.08 (1,328) 1:A:78:LYS:H 1:A:89:GLU:H 4 0.08 (1,327) 1:A:78:LYS:H 1:A:89:GLU:H 18	(1,387)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG21	16	0.08
(1,381) 1:A:140:LEU:H 1:A:142:ASN:H 14 0.08 (1,374) 1:A:132:GLU:H 1:A:134:TYR:H 7 0.08 (1,374) 1:A:132:GLU:H 1:A:134:TYR:H 11 0.08 (1,37) 1:A:9:ILE:HD11 1:A:13:ASN:HD21 16 0.08 (1,37) 1:A:9:ILE:HD12 1:A:13:ASN:HD21 16 0.08 (1,37) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:13:ASN:HD21 16 0.08 (1,37) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:13:ASN:HD21 16 0.08 (1,361) 1:A:49:ILE:HD13 1:A:12:ARG:H 16 0.08 (1,360) 1:A:43:VAL:H 1:A:122:ARG:H 20 0.08 (1,355) 1:A:67:PHE:H 1:A:114:TYR:H 4 0.08 (1,329) 1:A:79:LEU:H 1:A:89:GLU:H 7 0.08 (1,328) 1:A:78:LYS:H 1:A:89:GLU:H 4 0.08 (1,327) 1:A:78:LYS:H 1:A:89:GLU:H 18 0.08 (1,318) 1:A:44:ASP:H 1:A:48:GLY:H 18 <	(1,387)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG22	16	0.08
(1,374) 1:A:132:GLU:H 1:A:134:TYR:H 7 0.08 (1,374) 1:A:132:GLU:H 1:A:134:TYR:H 11 0.08 (1,37) 1:A:9:ILE:HD11 1:A:13:ASN:HD21 16 0.08 (1,37) 1:A:9:ILE:HD12 1:A:13:ASN:HD21 16 0.08 (1,37) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:13:ASN:HD21 16 0.08 (1,37) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:13:ASN:HD21 16 0.08 (1,361) 1:A:49:ILE:H 1:A:122:ARG:H 16 0.08 (1,360) 1:A:43:VAL:H 1:A:122:ARG:H 20 0.08 (1,355) 1:A:67:PHE:H 1:A:14:TYR:H 4 0.08 (1,329) 1:A:79:LEU:H 1:A:89:GLU:H 7 0.08 (1,328) 1:A:78:LYS:H 1:A:89:GLU:H 4 0.08 (1,327) 1:A:78:LYS:H 1:A:89:GLU:H 18 0.08 (1,318) 1:A:44:ASP:H 1:A:48:GLY:H 18 0.08	(1,387)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG23	16	0.08
(1,374) 1:A:132:GLU:H 1:A:134:TYR:H 11 0.08 (1,37) 1:A:9:ILE:HD11 1:A:13:ASN:HD21 16 0.08 (1,37) 1:A:9:ILE:HD12 1:A:13:ASN:HD21 16 0.08 (1,37) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:13:ASN:HD21 16 0.08 (1,361) 1:A:45:ILE:H 1:A:122:ARG:H 16 0.08 (1,360) 1:A:43:VAL:H 1:A:122:ARG:H 20 0.08 (1,355) 1:A:67:PHE:H 1:A:114:TYR:H 4 0.08 (1,329) 1:A:79:LEU:H 1:A:89:GLU:H 7 0.08 (1,328) 1:A:78:LYS:H 1:A:79:LEU:H 3 0.08 (1,327) 1:A:78:LYS:H 1:A:89:GLU:H 4 0.08 (1,318) 1:A:44:ASP:H 1:A:48:GLY:H 18 0.08	(1,381)	1:A:140:LEU:H	1:A:142:ASN:H	14	0.08
(1,374) 1:A:132:GLU:H 1:A:134:TYR:H 11 0.08 (1,37) 1:A:9:ILE:HD11 1:A:13:ASN:HD21 16 0.08 (1,37) 1:A:9:ILE:HD12 1:A:13:ASN:HD21 16 0.08 (1,37) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:13:ASN:HD21 16 0.08 (1,361) 1:A:45:ILE:H 1:A:122:ARG:H 16 0.08 (1,360) 1:A:43:VAL:H 1:A:122:ARG:H 20 0.08 (1,355) 1:A:67:PHE:H 1:A:114:TYR:H 4 0.08 (1,329) 1:A:79:LEU:H 1:A:89:GLU:H 7 0.08 (1,328) 1:A:78:LYS:H 1:A:79:LEU:H 3 0.08 (1,327) 1:A:78:LYS:H 1:A:89:GLU:H 4 0.08 (1,318) 1:A:44:ASP:H 1:A:48:GLY:H 18 0.08	(1,374)	1:A:132:GLU:H	1:A:134:TYR:H	7	0.08
(1,37) 1:A:9:ILE:HD11 1:A:13:ASN:HD21 16 0.08 (1,37) 1:A:9:ILE:HD12 1:A:13:ASN:HD21 16 0.08 (1,37) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:13:ASN:HD21 16 0.08 (1,361) 1:A:45:ILE:H 1:A:122:ARG:H 16 0.08 (1,360) 1:A:43:VAL:H 1:A:122:ARG:H 20 0.08 (1,355) 1:A:67:PHE:H 1:A:114:TYR:H 4 0.08 (1,329) 1:A:79:LEU:H 1:A:89:GLU:H 7 0.08 (1,328) 1:A:78:LYS:H 1:A:79:LEU:H 3 0.08 (1,327) 1:A:78:LYS:H 1:A:89:GLU:H 4 0.08 (1,318) 1:A:44:ASP:H 1:A:48:GLY:H 18 0.08	(1,374)	1:A:132:GLU:H	1:A:134:TYR:H	11	0.08
(1,37) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:13:ASN:HD21 16 0.08 (1,361) 1:A:45:ILE:H 1:A:122:ARG:H 16 0.08 (1,360) 1:A:43:VAL:H 1:A:122:ARG:H 20 0.08 (1,355) 1:A:67:PHE:H 1:A:114:TYR:H 4 0.08 (1,329) 1:A:79:LEU:H 1:A:89:GLU:H 7 0.08 (1,328) 1:A:78:LYS:H 1:A:79:LEU:H 3 0.08 (1,327) 1:A:78:LYS:H 1:A:89:GLU:H 4 0.08 (1,327) 1:A:78:LYS:H 1:A:89:GLU:H 18 0.08 (1,318) 1:A:44:ASP:H 1:A:48:GLY:H 18 0.08	(1,37)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:13:ASN:HD21	16	0.08
(1,361) 1:A:45:ILE:H 1:A:122:ARG:H 16 0.08 (1,360) 1:A:43:VAL:H 1:A:122:ARG:H 20 0.08 (1,355) 1:A:67:PHE:H 1:A:114:TYR:H 4 0.08 (1,329) 1:A:79:LEU:H 1:A:89:GLU:H 7 0.08 (1,328) 1:A:78:LYS:H 1:A:79:LEU:H 3 0.08 (1,327) 1:A:78:LYS:H 1:A:89:GLU:H 4 0.08 (1,327) 1:A:78:LYS:H 1:A:89:GLU:H 18 0.08 (1,318) 1:A:44:ASP:H 1:A:48:GLY:H 18 0.08		1:A:9:ILE:HD12	1:A:13:ASN:HD21	16	0.08
(1,361) 1:A:45:ILE:H 1:A:122:ARG:H 16 0.08 (1,360) 1:A:43:VAL:H 1:A:122:ARG:H 20 0.08 (1,355) 1:A:67:PHE:H 1:A:114:TYR:H 4 0.08 (1,329) 1:A:79:LEU:H 1:A:89:GLU:H 7 0.08 (1,328) 1:A:78:LYS:H 1:A:79:LEU:H 3 0.08 (1,327) 1:A:78:LYS:H 1:A:89:GLU:H 4 0.08 (1,327) 1:A:78:LYS:H 1:A:89:GLU:H 18 0.08 (1,318) 1:A:44:ASP:H 1:A:48:GLY:H 18 0.08	(1,37)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:13:ASN:HD21	16	0.08
(1,355) 1:A:67:PHE:H 1:A:114:TYR:H 4 0.08 (1,329) 1:A:79:LEU:H 1:A:89:GLU:H 7 0.08 (1,328) 1:A:78:LYS:H 1:A:79:LEU:H 3 0.08 (1,327) 1:A:78:LYS:H 1:A:89:GLU:H 4 0.08 (1,327) 1:A:78:LYS:H 1:A:89:GLU:H 18 0.08 (1,318) 1:A:44:ASP:H 1:A:48:GLY:H 18 0.08		1:A:45:ILE:H	1:A:122:ARG:H	16	0.08
(1,329) 1:A:79:LEU:H 1:A:89:GLU:H 7 0.08 (1,328) 1:A:78:LYS:H 1:A:79:LEU:H 3 0.08 (1,327) 1:A:78:LYS:H 1:A:89:GLU:H 4 0.08 (1,327) 1:A:78:LYS:H 1:A:89:GLU:H 18 0.08 (1,318) 1:A:44:ASP:H 1:A:48:GLY:H 18 0.08	(1,360)	1:A:43:VAL:H	1:A:122:ARG:H	20	0.08
(1,329) 1:A:79:LEU:H 1:A:89:GLU:H 7 0.08 (1,328) 1:A:78:LYS:H 1:A:79:LEU:H 3 0.08 (1,327) 1:A:78:LYS:H 1:A:89:GLU:H 4 0.08 (1,327) 1:A:78:LYS:H 1:A:89:GLU:H 18 0.08 (1,318) 1:A:44:ASP:H 1:A:48:GLY:H 18 0.08	(1,355)	1:A:67:PHE:H	1:A:114:TYR:H	4	0.08
(1,328) 1:A:78:LYS:H 1:A:79:LEU:H 3 0.08 (1,327) 1:A:78:LYS:H 1:A:89:GLU:H 4 0.08 (1,327) 1:A:78:LYS:H 1:A:89:GLU:H 18 0.08 (1,318) 1:A:44:ASP:H 1:A:48:GLY:H 18 0.08	/	1:A:79:LEU:H	1:A:89:GLU:H	7	0.08
(1,327) 1:A:78:LYS:H 1:A:89:GLU:H 4 0.08 (1,327) 1:A:78:LYS:H 1:A:89:GLU:H 18 0.08 (1,318) 1:A:44:ASP:H 1:A:48:GLY:H 18 0.08		1:A:78:LYS:H	1:A:79:LEU:H	3	0.08
(1,327) 1:A:78:LYS:H 1:A:89:GLU:H 18 0.08 (1,318) 1:A:44:ASP:H 1:A:48:GLY:H 18 0.08	, ,	1:A:78:LYS:H	1:A:89:GLU:H	4	0.08
(1,318) 1:A:44:ASP:H 1:A:48:GLY:H 18 0.08		1:A:78:LYS:H	1:A:89:GLU:H	18	0.08
		1:A:44:ASP:H	1:A:48:GLY:H	18	0.08
	(1,31)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:49:LYS:H		



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,31)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:49:LYS:H	13	0.08
(1,31)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:49:LYS:H	13	0.08
(1,308)	1:A:30:GLN:H	1:A:34:TRP:HE1	12	0.08
(1,299)	1:A:15:MET:H	1:A:18:GLU:H	3	0.08
(1,299)	1:A:15:MET:H	1:A:18:GLU:H	18	0.08
(1,281)	1:A:110:ASN:HD22	1:A:112:LEU:H	6	0.08
(1,279)	1:A:26:GLU:H	1:A:64:TRP:HE1	14	0.08
(1,279)	1:A:26:GLU:H	1:A:64:TRP:HE1	17	0.08
(1,274)	1:A:80:ASP:H	1:A:89:GLU:H	10	0.08
(1,274)	1:A:80:ASP:H	1:A:89:GLU:H	20	0.08
(1,267)	1:A:21:GLN:H	1:A:24:GLY:H	9	0.08
(1,266)	1:A:19:VAL:H	1:A:21:GLN:H	3	0.08
(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD11	4	0.08
(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD12	4	0.08
(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD13	4	0.08
(1,259)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD11	5	0.08
(1,259)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD12	5	0.08
(1,259)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD13	5	0.08
(1,259)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD11	5	0.08
(1,259)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD12	5	0.08
(1,259)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD13	5	0.08
(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD11	5	0.08
(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD12	5	0.08
(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD13	5	0.08
(1,259)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD11	10	0.08
(1,259)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD12	10	0.08
(1,259)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD13	10	0.08
(1,259)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD11	10	0.08
(1,259)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD12	10	0.08
(1,259)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD13	10	0.08
(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD11	10	0.08
(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD12	10	0.08
(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD13	10	0.08
(1,256)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD11	15	0.08
(1,256)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD12	15	0.08
(1,256)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD13	15	0.08
(1,256)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD11	15	0.08
(1,256)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD12	15	0.08
(1,256)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD13	15	0.08
(1,256)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD11	15	0.08
(1,256)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD12	15	0.08
(1,256)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD13	15	0.08



Continued from previous page...

(1,254) 1:A:9:ILE:HD11 1:A:46:VAL:HG11 19 0.08 (1,254) 1:A:9:ILE:HD11 1:A:46:VAL:HG13 19 0.08 (1,254) 1:A:9:ILE:HD12 1:A:46:VAL:HG11 19 0.08 (1,254) 1:A:9:ILE:HD12 1:A:46:VAL:HG11 19 0.08 (1,254) 1:A:9:ILE:HD12 1:A:46:VAL:HG11 19 0.08 (1,254) 1:A:9:ILE:HD12 1:A:46:VAL:HG13 19 0.08 (1,254) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:46:VAL:HG13 19 0.08 (1,254) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:46:VAL:HG11 19 0.08 (1,254) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:46:VAL:HG12 19 0.08 (1,254) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:46:VAL:HG13 19 0.08 (1,254) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:46:VAL:HG13 19 0.08 (1,254) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:46:VAL:HG13 19 0.08 (1,254) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:137:TYR:H 16 0.08 (1,22) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:137:TYR:H 16 0.08 (1,22) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:137:TYR:H 16 0.08 (1,22) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:137:TYR:H 16 0.08 (1,21) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD11 11 0.08 (1,21) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD12 11 0.08 (1,197) 1:A:13:ASN:HD21 1:A:46:VAL:HG11 13 0.08 (1,194) 1:A:42:TYR:H 1:A:43:VAL:HG11 13 0.08 (1,194) 1:A:42:TYR:H 1:A:43:VAL:HG11 13 0.08 (1,194) 1:A:42:TYR:H 1:A:43:VAL:HG13 13 0.08 (1,194) 1:A:42:TYR:H 1:A:43:VAL:HG12 13 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:124:VAL:HG22 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:124:VAL:HG22 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:HG22 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:HG23 6 0.08 (1,160) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD13 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD11 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD11 6 0	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,254) 1:A:9:ILE:HD11 1:A:46:VAL:HG13 19 0.08 (1,254) 1:A:9:ILE:HD12 1:A:46:VAL:HG11 19 0.08 (1,254) 1:A:9:ILE:HD12 1:A:46:VAL:HG12 19 0.08 (1,254) 1:A:9:ILE:HD12 1:A:46:VAL:HG13 19 0.08 (1,254) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:46:VAL:HG11 19 0.08 (1,254) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:46:VAL:HG13 19 0.08 (1,254) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:46:VAL:HG13 19 0.08 (1,254) 1:A:129:ILE:HD13 1:A:46:VAL:HG13 19 0.08 (1,22) 1:A:129:ILEU:HD11 1:A:17:TYR:H 16 0.08 (1,22) 1:A:129:ILEU:HD13 1:A:13:TYR:H 16 0.08 (1,21) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:ILEU:HD11 11 0.08 (1,21) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:ILEU:HD13 11 0.08 (1,191) 1:A:13:ASN:HD21 1:A:46:VAL:HG11 13 0.08 (1,197) 1:A:13:ASN:HD21 1	(1,254)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:46:VAL:HG11	19	0.08
(1,254) 1:A:9:ILE:HD12 1:A:46:VAL:HG11 19 0.08 (1,254) 1:A:9:ILE:HD12 1:A:46:VAL:HG12 19 0.08 (1,254) 1:A:9:ILE:HD12 1:A:46:VAL:HG13 19 0.08 (1,254) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:46:VAL:HG11 19 0.08 (1,254) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:46:VAL:HG13 19 0.08 (1,254) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:46:VAL:HG13 19 0.08 (1,22) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:137:TYR:H 16 0.08 (1,22) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:137:TYR:H 16 0.08 (1,21) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD11 11 0.08 (1,21) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD12 11 0.08 (1,21) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD13 11 0.08 (1,21) 1:A:13:ASN:HD21 1:A:46:VAL:HG11 13 0.08 (1,197) 1:A:13:ASN:HD21 1:A:46:VAL:HG12 13 0.08 (1,194) 1:A:42:TYR:H 1:A:43:	(1,254)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:46:VAL:HG12	19	0.08
(1,254) 1:A:9:ILE:HD12 1:A:46:VAL:HG12 19 0.08 (1,254) 1:A:9:ILE:HD12 1:A:46:VAL:HG13 19 0.08 (1,254) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:46:VAL:HG11 19 0.08 (1,254) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:46:VAL:HG12 19 0.08 (1,254) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:46:VAL:HG13 19 0.08 (1,254) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:137:TYR:H 16 0.08 (1,22) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:137:TYR:H 16 0.08 (1,22) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:137:TYR:H 16 0.08 (1,21) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD11 11 0.08 (1,21) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD12 11 0.08 (1,21) 1:A:13:ASN:HD21 1:A:46:VAL:HG11 13 0.08 (1,197) 1:A:13:ASN:HD21 1:A:46:VAL:HG13 13 0.08 (1,197) 1:A:13:ASN:HD21 1:A:46:VAL:HG13 13 0.08 (1,197) 1:A:13:ASN:HD21 1:A:	(1,254)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:46:VAL:HG13	19	0.08
(1,254) 1:A:9:ILE:HD12 1:A:46:VAL:HG13 19 0.08 (1,254) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:46:VAL:HG11 19 0.08 (1,254) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:46:VAL:HG12 19 0.08 (1,254) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:46:VAL:HG13 19 0.08 (1,22) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:137:TYR:H 16 0.08 (1,22) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:137:TYR:H 16 0.08 (1,21) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:137:TYR:H 16 0.08 (1,21) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD11 11 0.08 (1,21) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD12 11 0.08 (1,21) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD13 11 0.08 (1,21) 1:A:13:ASN:HD21 1:A:46:VAL:HG11 13 0.08 (1,197) 1:A:13:ASN:HD21 1:A:46:VAL:HG13 13 0.08 (1,194) 1:A:42:TYR:H 1:A:43:VAL:HG11 13 0.08 (1,194) 1:A:42:TYR:H 1:A:43:VAL:H	(1,254)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:46:VAL:HG11	19	0.08
(1,254) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:46:VAL:HG11 19 0.08 (1,254) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:46:VAL:HG12 19 0.08 (1,254) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:46:VAL:HG13 19 0.08 (1,22) 1:A:19:LEU:HD11 1:A:137:TYR:H 16 0.08 (1,22) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:137:TYR:H 16 0.08 (1,22) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:137:TYR:H 16 0.08 (1,21) 1:A:129:LEU:HD13 11 0.08 (1,21) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD12 11 0.08 (1,21) 1:A:13:ASN:HD21 1:A:46:VAL:HG11 13 0.08 (1,197) 1:A:13:ASN:HD21 1:A:46:VAL:HG12 13 0.08 (1,197) 1:A:13:ASN:HD21 1:A:46:VAL:HG13 13 0.08 (1,197) 1:A:43:ASN:HD21 1:A:46:VAL:HG13 13 0.08 (1,194) 1:A:42:TYR:H 1:A:43:VAL:HG13 13 0.08 (1,194) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:42:VAL:HG21 6 <td>(1,254)</td> <td>1:A:9:ILE:HD12</td> <td>1:A:46:VAL:HG12</td> <td>19</td> <td>0.08</td>	(1,254)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:46:VAL:HG12	19	0.08
(1,254) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:46:VAL:HG12 19 0.08 (1,254) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:46:VAL:HG13 19 0.08 (1,22) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:137:TYR:H 16 0.08 (1,22) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:137:TYR:H 16 0.08 (1,21) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:137:TYR:H 16 0.08 (1,21) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD11 11 0.08 (1,21) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD12 11 0.08 (1,21) 1:A:127:HIS:H 1:A:42:9:LEU:HD13 11 0.08 (1,21) 1:A:13:ASN:HD21 1:A:46:VAL:HG11 13 0.08 (1,197) 1:A:13:ASN:HD21 1:A:46:VAL:HG12 13 0.08 (1,197) 1:A:13:ASN:HD21 1:A:46:VAL:HG13 13 0.08 (1,194) 1:A:42:TYR:H 1:A:43:VAL:HG12 13 0.08 (1,194) 1:A:42:TYR:H 1:A:43:VAL:HG13 13 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:124:V	(1,254)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:46:VAL:HG13	19	0.08
(1,254) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:46:VAL:HG13 19 0.08 (1,22) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:137:TYR:H 16 0.08 (1,22) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:137:TYR:H 16 0.08 (1,22) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:137:TYR:H 16 0.08 (1,21) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD11 11 0.08 (1,21) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD12 11 0.08 (1,21) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD13 11 0.08 (1,21) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD13 11 0.08 (1,197) 1:A:13:ASN:HD21 1:A:46:VAL:HG11 13 0.08 (1,197) 1:A:13:ASN:HD21 1:A:46:VAL:HG12 13 0.08 (1,197) 1:A:13:ASN:HD21 1:A:46:VAL:HG12 13 0.08 (1,197) 1:A:13:ASN:HD21 1:A:46:VAL:HG13 13 0.08 (1,194) 1:A:42:TYR:H 1:A:43:VAL:HG11 13 0.08 (1,194) 1:A:42:TYR:H 1:A:43:VAL:HG11 13 0.08 (1,194) 1:A:42:TYR:H 1:A:43:VAL:HG12 13 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:124:VAL:HG21 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:124:VAL:HG22 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:124:VAL:HG22 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:124:VAL:HG23 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:124:VAL:HG22 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:124:VAL:HG22 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:HG23 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD11 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD11 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD11 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD11 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD11 6 0.08	(1,254)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:46:VAL:HG11	19	0.08
(1,22) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:137:TYR:H 16 0.08 (1,22) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:137:TYR:H 16 0.08 (1,22) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:137:TYR:H 16 0.08 (1,21) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD11 11 0.08 (1,21) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD12 11 0.08 (1,21) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD13 11 0.08 (1,21) 1:A:13:ASN:HD21 1:A:129:LEU:HD13 11 0.08 (1,197) 1:A:13:ASN:HD21 1:A:46:VAL:HG11 13 0.08 (1,197) 1:A:13:ASN:HD21 1:A:46:VAL:HG11 13 0.08 (1,197) 1:A:13:ASN:HD21 1:A:46:VAL:HG12 13 0.08 (1,197) 1:A:13:ASN:HD21 1:A:43:VAL:HG12 13 0.08 (1,194) 1:A:42:TYR:H 1:A:43:VAL:HG11 13 0.08 (1,194) 1:A:42:TYR:H 1:A:43:VAL:HG11 13 0.08 (1,194) 1:A:42:TYR:H 1:A:43:VAL:HG12 13 0.08 (1,199) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:124:VAL:HG2 13 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:124:VAL:HG2 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:124:VAL:HG2 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:124:VAL:HG2 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:124:VAL:HG2 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:124:VAL:HG2 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:124:VAL:HG2 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:124:VAL:HG2 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:124:VAL:HG2 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:124:VAL:HG2 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:124:VAL:HG2 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:124:VAL:HG2 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:124:VAL:HG2 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:124:VAL:HG2 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:124:VAL:HG2 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:HG2 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG2 1 1:A:45:ILE:HD11 6 0.08	(1,254)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:46:VAL:HG12	19	0.08
(1,22) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:137:TYR:H 16 0.08 (1,21) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:137:TYR:H 16 0.08 (1,21) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD11 11 0.08 (1,21) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD12 11 0.08 (1,21) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD13 11 0.08 (1,21) 1:A:13:ASN:HD21 1:A:46:VAL:HG11 13 0.08 (1,197) 1:A:13:ASN:HD21 1:A:46:VAL:HG12 13 0.08 (1,197) 1:A:13:ASN:HD21 1:A:46:VAL:HG13 13 0.08 (1,197) 1:A:13:ASN:HD21 1:A:46:VAL:HG13 13 0.08 (1,197) 1:A:13:ASN:HD21 1:A:43:VAL:HG11 13 0.08 (1,194) 1:A:42:TYR:H 1:A:43:VAL:HG11 13 0.08 (1,194) 1:A:42:TYR:H 1:A:43:VAL:HG11 13 0.08 (1,194) 1:A:42:TYR:H 1:A:43:VAL:HG12 13 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:124:VAL:HG21 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:124:VAL:HG22 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:124:VAL:HG22 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:124:VAL:HG23 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:124:VAL:HG21 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:124:VAL:HG21 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:124:VAL:HG22 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:124:VAL:HG21 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:124:VAL:HG22 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:124:VAL:HG23 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:124:VAL:HG23 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:HG23 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:HG23 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:HG21 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:HG21 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:HG21 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:HG22 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:HG21 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD11 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD11 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD11 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD11 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD11 8 0.08	(1,254)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:46:VAL:HG13	19	0.08
(1,22) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:137:TYR:H 16 0.08 (1,21) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD11 11 0.08 (1,21) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD12 11 0.08 (1,21) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD13 11 0.08 (1,21) 1:A:13:ASN:HD21 1:A:46:VAL:HG11 13 0.08 (1,197) 1:A:13:ASN:HD21 1:A:46:VAL:HG12 13 0.08 (1,197) 1:A:13:ASN:HD21 1:A:46:VAL:HG12 13 0.08 (1,197) 1:A:13:ASN:HD21 1:A:46:VAL:HG13 13 0.08 (1,194) 1:A:42:TYR:H 1:A:43:VAL:HG13 13 0.08 (1,194) 1:A:42:TYR:H 1:A:43:VAL:HG11 13 0.08 (1,194) 1:A:42:TYR:H 1:A:43:VAL:HG12 13 0.08 (1,194) 1:A:42:TYR:H 1:A:43:VAL:HG13 13 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:124:VAL:HG21 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:124:VAL:HG22 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:124:VAL:HG22 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:124:VAL:HG23 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:124:VAL:HG22 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:124:VAL:HG23 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:124:VAL:HG23 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:HG21 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD11 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD11 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD11 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD13 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD13 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD11 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD11 6 0.08	(1,22)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:137:TYR:H	16	0.08
(1,21) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD11 11 0.08 (1,21) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD12 11 0.08 (1,21) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD13 11 0.08 (1,197) 1:A:13:ASN:HD21 1:A:46:VAL:HG11 13 0.08 (1,197) 1:A:13:ASN:HD21 1:A:46:VAL:HG13 13 0.08 (1,197) 1:A:13:ASN:HD21 1:A:46:VAL:HG13 13 0.08 (1,194) 1:A:42:TYR:H 1:A:43:VAL:HG11 13 0.08 (1,194) 1:A:42:TYR:H 1:A:43:VAL:HG11 13 0.08 (1,194) 1:A:42:TYR:H 1:A:43:VAL:HG13 13 0.08 (1,194) 1:A:42:TYR:H 1:A:43:VAL:HG13 13 0.08 (1,194) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:41:VAL:HG21 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:124:VAL:HG22 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:124:VAL:HG23 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:	(1,22)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:137:TYR:H	16	0.08
(1,21) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD12 11 0.08 (1,21) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD13 11 0.08 (1,197) 1:A:13:ASN:HD21 1:A:46:VAL:HG11 13 0.08 (1,197) 1:A:13:ASN:HD21 1:A:46:VAL:HG12 13 0.08 (1,194) 1:A:42:TYR:H 1:A:43:VAL:HG13 13 0.08 (1,194) 1:A:42:TYR:H 1:A:43:VAL:HG12 13 0.08 (1,194) 1:A:42:TYR:H 1:A:43:VAL:HG13 13 0.08 (1,194) 1:A:42:TYR:H 1:A:43:VAL:HG13 13 0.08 (1,194) 1:A:42:TYR:H 1:A:43:VAL:HG13 13 0.08 (1,194) 1:A:42:TYR:H 1:A:43:VAL:HG21 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:41:VAL:HG21 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:124:VAL:HG23 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:124:VAL:HG21 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:H	(1,22)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:137:TYR:H	16	0.08
(1,21) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD13 11 0.08 (1,197) 1:A:13:ASN:HD21 1:A:46:VAL:HG11 13 0.08 (1,197) 1:A:13:ASN:HD21 1:A:46:VAL:HG12 13 0.08 (1,197) 1:A:13:ASN:HD21 1:A:46:VAL:HG13 13 0.08 (1,194) 1:A:42:TYR:H 1:A:43:VAL:HG11 13 0.08 (1,194) 1:A:42:TYR:H 1:A:43:VAL:HG12 13 0.08 (1,194) 1:A:42:TYR:H 1:A:43:VAL:HG13 13 0.08 (1,194) 1:A:42:TYR:H 1:A:43:VAL:HG13 13 0.08 (1,194) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:43:VAL:HG21 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:124:VAL:HG22 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:124:VAL:HG23 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:124:VAL:HG22 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:HG23 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:	(1,21)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD11	11	0.08
(1,197) 1:A:13:ASN:HD21 1:A:46:VAL:HG11 13 0.08 (1,197) 1:A:13:ASN:HD21 1:A:46:VAL:HG12 13 0.08 (1,197) 1:A:13:ASN:HD21 1:A:46:VAL:HG13 13 0.08 (1,194) 1:A:42:TYR:H 1:A:43:VAL:HG11 13 0.08 (1,194) 1:A:42:TYR:H 1:A:43:VAL:HG12 13 0.08 (1,194) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:43:VAL:HG13 13 0.08 (1,194) 1:A:42:TYR:H 1:A:43:VAL:HG13 13 0.08 (1,194) 1:A:42:TYR:H 1:A:43:VAL:HG21 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:41:VAL:HG21 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:124:VAL:HG23 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:124:VAL:HG21 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:HG21 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:HG21 6 0.08 (1,189) 1:A:43:VAL:HG21 1:A	(1,21)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD12	11	0.08
(1,197) 1:A:13:ASN:HD21 1:A:46:VAL:HG11 13 0.08 (1,197) 1:A:13:ASN:HD21 1:A:46:VAL:HG12 13 0.08 (1,197) 1:A:13:ASN:HD21 1:A:46:VAL:HG13 13 0.08 (1,194) 1:A:42:TYR:H 1:A:43:VAL:HG11 13 0.08 (1,194) 1:A:42:TYR:H 1:A:43:VAL:HG12 13 0.08 (1,194) 1:A:42:TYR:H 1:A:43:VAL:HG13 13 0.08 (1,194) 1:A:42:TYR:H 1:A:43:VAL:HG13 13 0.08 (1,194) 1:A:42:TYR:H 1:A:43:VAL:HG21 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:41:VAL:HG21 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:124:VAL:HG23 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:124:VAL:HG21 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:HG23 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:HG21 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:12	(1,21)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD13	11	0.08
(1,197) 1:A:13:ASN:HD21 1:A:46:VAL:HG13 13 0.08 (1,194) 1:A:42:TYR:H 1:A:43:VAL:HG11 13 0.08 (1,194) 1:A:42:TYR:H 1:A:43:VAL:HG12 13 0.08 (1,194) 1:A:42:TYR:H 1:A:43:VAL:HG13 13 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:124:VAL:HG21 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:124:VAL:HG22 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:124:VAL:HG23 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:124:VAL:HG21 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:124:VAL:HG23 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:HG21 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:HG22 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:HG22 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD11 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 <td< td=""><td></td><td>1:A:13:ASN:HD21</td><td>1:A:46:VAL:HG11</td><td>13</td><td>0.08</td></td<>		1:A:13:ASN:HD21	1:A:46:VAL:HG11	13	0.08
(1,194) 1:A:42:TYR:H 1:A:43:VAL:HG11 13 0.08 (1,194) 1:A:42:TYR:H 1:A:43:VAL:HG12 13 0.08 (1,194) 1:A:42:TYR:H 1:A:43:VAL:HG13 13 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:124:VAL:HG21 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:124:VAL:HG22 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:124:VAL:HG23 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:124:VAL:HG22 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:124:VAL:HG22 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:HG23 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:HG22 6 0.08 (1,189) 1:A:44:LEU:HD13 1:A:124:VAL:HG23 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD11 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD13 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22	(1,197)	1:A:13:ASN:HD21	1:A:46:VAL:HG12	13	0.08
(1,194) 1:A:42:TYR:H 1:A:43:VAL:HG12 13 0.08 (1,194) 1:A:42:TYR:H 1:A:43:VAL:HG13 13 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:124:VAL:HG21 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:124:VAL:HG22 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:124:VAL:HG23 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:124:VAL:HG21 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:124:VAL:HG22 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:HG21 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:HG22 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:HG22 6 0.08 (1,189) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD11 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD12 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD11 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 <t< td=""><td>· · /</td><td>1:A:13:ASN:HD21</td><td>1:A:46:VAL:HG13</td><td>13</td><td>0.08</td></t<>	· · /	1:A:13:ASN:HD21	1:A:46:VAL:HG13	13	0.08
(1,194) 1:A:42:TYR:H 1:A:43:VAL:HG13 13 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:124:VAL:HG21 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:124:VAL:HG22 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:124:VAL:HG23 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:124:VAL:HG21 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:124:VAL:HG22 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:HG23 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:HG22 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:HG22 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:42:VAL:HG23 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD11 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD11 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD11 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23	(1,194)	1:A:42:TYR:H	1:A:43:VAL:HG11	13	0.08
(1,189) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:124:VAL:HG21 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:124:VAL:HG22 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:124:VAL:HG23 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:124:VAL:HG21 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:124:VAL:HG22 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:HG21 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:HG21 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:HG22 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:42:VAL:HG22 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:45:ILE:HD11 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD11 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD11 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD11 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23	(1,194)	1:A:42:TYR:H	1:A:43:VAL:HG12	13	0.08
(1,189) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:124:VAL:HG22 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:124:VAL:HG23 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:124:VAL:HG21 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:124:VAL:HG22 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:HG21 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:HG22 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:HG22 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:42:VAL:HG23 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:45:ILE:HD11 6 0.08 (1,189) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD11 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD13 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD11 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD13 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23	(1,194)	1:A:42:TYR:H	1:A:43:VAL:HG13	13	0.08
(1,189) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:124:VAL:HG23 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:124:VAL:HG21 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:124:VAL:HG22 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:124:VAL:HG23 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:HG21 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:HG22 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:42:VAL:HG23 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD11 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD12 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD11 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD12 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD11 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD11 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23	(1,189)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:124:VAL:HG21	6	0.08
(1,189) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:124:VAL:HG21 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:124:VAL:HG22 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:124:VAL:HG23 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:HG21 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:HG22 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD11 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD12 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD13 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD11 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD12 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD11 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD11 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD12 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 <	(1,189)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:124:VAL:HG22	6	0.08
(1,189) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:124:VAL:HG22 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:124:VAL:HG23 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:HG21 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:HG22 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:42:VAL:HG23 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD11 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD12 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD11 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD12 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD13 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD11 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD12 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD13 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 <t< td=""><td>(1,189)</td><td>1:A:41:LEU:HD11</td><td>1:A:124:VAL:HG23</td><td>6</td><td>0.08</td></t<>	(1,189)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:124:VAL:HG23	6	0.08
(1,189) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:124:VAL:HG23 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:HG21 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:HG22 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:42:VAL:HG23 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD11 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD12 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD11 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD12 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD13 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD11 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD12 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD13 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD12 8 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 <td< td=""><td>(1,189)</td><td>1:A:41:LEU:HD12</td><td>1:A:124:VAL:HG21</td><td>6</td><td>0.08</td></td<>	(1,189)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:HG21	6	0.08
(1,189) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:HG21 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:HG22 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:42:VAL:HG23 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD11 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD12 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD13 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD12 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD13 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD11 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD12 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD13 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD11 8 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD11 8 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21	(1,189)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:HG22	6	0.08
(1,189) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:HG22 6 0.08 (1,189) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:HG23 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD11 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD12 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD13 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD11 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD12 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD11 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD12 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD13 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD13 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD11 8 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD12 8 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD12 8 0.08	(1,189)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:HG23	6	0.08
(1,189) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:HG23 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD11 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD12 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD13 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD11 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD13 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD11 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD12 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD13 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD13 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD11 8 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD11 8 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD12 8 0.08	(1,189)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:HG21	6	0.08
(1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD11 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD12 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD13 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD11 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD12 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD13 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD11 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD12 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD13 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD11 8 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD12 8 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD12 8 0.08	(1,189)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:HG22	6	0.08
(1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD11 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD12 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD13 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD11 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD12 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD11 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD12 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD13 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD11 8 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD11 8 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD12 8 0.08	(1,189)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:HG23	6	0.08
(1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD13 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD11 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD12 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD13 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD11 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD12 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD13 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD11 8 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD12 8 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD12 8 0.08	(1,176)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:45:ILE:HD11	6	0.08
(1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD13 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD11 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD12 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD13 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD11 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD12 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD13 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD11 8 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD12 8 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD12 8 0.08		1:A:43:VAL:HG21	1:A:45:ILE:HD12	6	0.08
(1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD11 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD12 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD13 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD11 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD12 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD13 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD11 8 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD12 8 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD12 8 0.08	. ,	1:A:43:VAL:HG21	1:A:45:ILE:HD13	6	0.08
(1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD12 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD13 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD11 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD12 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD13 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD11 8 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD12 8 0.08		1:A:43:VAL:HG22	1:A:45:ILE:HD11	6	0.08
(1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD13 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD11 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD12 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD13 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD11 8 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD12 8 0.08		1:A:43:VAL:HG22	1:A:45:ILE:HD12	6	0.08
(1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD11 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD12 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD13 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD11 8 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD12 8 0.08		1:A:43:VAL:HG22	1:A:45:ILE:HD13	6	0.08
(1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD12 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD13 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD11 8 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD12 8 0.08		1:A:43:VAL:HG23	1:A:45:ILE:HD11	6	0.08
(1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD13 6 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD11 8 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD12 8 0.08		1:A:43:VAL:HG23	1:A:45:ILE:HD12	6	0.08
(1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD11 8 0.08 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD12 8 0.08		1:A:43:VAL:HG23	1:A:45:ILE:HD13	6	0.08
(1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD12 8 0.08		1:A:43:VAL:HG21	1:A:45:ILE:HD11	8	0.08
	· · /	1:A:43:VAL:HG21	1:A:45:ILE:HD12	8	0.08
	(1,176)		1:A:45:ILE:HD13	8	



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,176)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:45:ILE:HD11	8	0.08
(1,176)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:45:ILE:HD12	8	0.08
(1,176)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:45:ILE:HD13	8	0.08
(1,176)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:45:ILE:HD11	8	0.08
(1,176)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:45:ILE:HD12	8	0.08
(1,176)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:45:ILE:HD13	8	0.08
(1,171)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG11	15	0.08
(1,171)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG12	15	0.08
(1,171)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG13	15	0.08
(1,17)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD21	14	0.08
(1,17)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD22	14	0.08
(1,17)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD23	14	0.08
(1,163)	1:A:15:MET:H	1:A:17:TYR:H	13	0.08
(1,15)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG11	3	0.08
(1,15)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG12	3	0.08
(1,15)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG13	3	0.08
(1,15)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG11	4	0.08
(1,15)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG12	4	0.08
(1,15)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG13	4	0.08
(1,148)	1:A:44:ASP:H	1:A:122:ARG:H	16	0.08
(1,147)	1:A:130:LYS:H	1:A:134:TYR:H	16	0.08
(1,132)	1:A:16:GLN:H	1:A:19:VAL:H	1	0.08
(1,131)	1:A:17:TYR:H	1:A:19:VAL:H	1	0.08
(1,131)	1:A:17:TYR:H	1:A:19:VAL:H	11	0.08
(1,13)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:131:GLU:H	5	0.08
(1,13)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:131:GLU:H	5	0.08
(1,13)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:131:GLU:H	5	0.08
(1,127)	1:A:21:GLN:H	1:A:23:ASN:H	12	0.08
(1,127)	1:A:21:GLN:H	1:A:23:ASN:H	20	0.08
(1,115)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:H	3	0.08
(1,115)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:H	6	0.08
(1,115)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:H	11	0.08
(1,115)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:H	13	0.08
(1,114)	1:A:29:PHE:H	1:A:31:ASN:H	14	0.08
(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD21	6	0.08
(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD22	6	0.08
(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD23	6	0.08
(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD21	11	0.08
(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD22	11	0.08
(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD23	11	0.08
(1,106)	1:A:105:ASP:H	1:A:113:ARG:H	10	0.08
(1,102)	1:A:52:PHE:H	1:A:71:ILE:H	9	0.08
. , ,	l	l		d on next nage



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,93)	1:A:8:LYS:H	1:A:10:LYS:H	9	0.07
(1,81)	1:A:47:SER:H	1:A:48:GLY:H	5	0.07
(1,8)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:42:TYR:H	18	0.07
(1,8)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:42:TYR:H	18	0.07
(1,8)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:42:TYR:H	18	0.07
(1,75)	1:A:29:PHE:H	1:A:30:GLN:H	20	0.07
(1,70)	1:A:16:GLN:HE21	1:A:46:VAL:H	5	0.07
(1,70)	1:A:16:GLN:HE21	1:A:46:VAL:H	15	0.07
(1,7)	1:A:41:LEU:H	1:A:41:LEU:HD11	14	0.07
(1,7)	1:A:41:LEU:H	1:A:41:LEU:HD12	14	0.07
(1,7)	1:A:41:LEU:H	1:A:41:LEU:HD13	14	0.07
(1,68)	1:A:34:TRP:H	1:A:36:HIS:H	6	0.07
(1,64)	1:A:47:SER:HG	1:A:49:LYS:H	17	0.07
(1,623)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD11	9	0.07
(1,623)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD12	9	0.07
(1,623)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD13	9	0.07
(1,623)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD11	16	0.07
(1,623)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD12	16	0.07
(1,623)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD13	16	0.07
(1,595)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD11	4	0.07
(1,595)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD12	4	0.07
(1,595)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD13	4	0.07
(1,595)	1:A:104:ASN:HD22	1:A:112:LEU:HD11	4	0.07
(1,595)	1:A:104:ASN:HD22	1:A:112:LEU:HD12	4	0.07
(1,595)	1:A:104:ASN:HD22	1:A:112:LEU:HD13	4	0.07
(1,592)	1:A:22:ASN:H	1:A:22:ASN:HD21	1	0.07
(1,592)	1:A:22:ASN:H	1:A:22:ASN:HD22	1	0.07
(1,584)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD11	12	0.07
(1,584)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD12	12	0.07
(1,584)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD13	12	0.07
(1,584)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD11	17	0.07
(1,584)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD12	17	0.07
(1,584)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD13	17	0.07
(1,581)	1:A:102:VAL:HG11	1:A:113:ARG:H	2	0.07
(1,581)	1:A:102:VAL:HG12	1:A:113:ARG:H	2	0.07
(1,581)	1:A:102:VAL:HG13	1:A:113:ARG:H	2	0.07
(1,580)	1:A:112:LEU:HD21	1:A:113:ARG:H	9	0.07
(1,580)	1:A:112:LEU:HD22	1:A:113:ARG:H	9	0.07
(1,580)	1:A:112:LEU:HD23	1:A:113:ARG:H	9	0.07
(1,572)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:141:PHE:H	4	0.07
(1,572)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:141:PHE:H	4	0.07
(1,572)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:141:PHE:H	4	0.07



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,572)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:141:PHE:H	13	0.07
(1,572)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:141:PHE:H	13	0.07
(1,572)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:141:PHE:H	13	0.07
(1,571)	1:A:140:LEU:HD11	1:A:141:PHE:H	6	0.07
(1,571)	1:A:140:LEU:HD12	1:A:141:PHE:H	6	0.07
(1,571)	1:A:140:LEU:HD13	1:A:141:PHE:H	6	0.07
(1,57)	1:A:112:LEU:HD11	1:A:113:ARG:H	8	0.07
(1,57)	1:A:112:LEU:HD12	1:A:113:ARG:H	8	0.07
(1,57)	1:A:112:LEU:HD13	1:A:113:ARG:H	8	0.07
(1,57)	1:A:112:LEU:HD11	1:A:113:ARG:H	12	0.07
(1,57)	1:A:112:LEU:HD12	1:A:113:ARG:H	12	0.07
(1,57)	1:A:112:LEU:HD13	1:A:113:ARG:H	12	0.07
(1,564)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:137:TYR:H	6	0.07
(1,564)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:137:TYR:H	6	0.07
(1,564)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:137:TYR:H	6	0.07
(1,564)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:137:TYR:H	7	0.07
(1,564)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:137:TYR:H	7	0.07
(1,564)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:137:TYR:H	7	0.07
(1,562)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD21	5	0.07
(1,562)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD22	5	0.07
(1,562)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD23	5	0.07
(1,562)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD21	20	0.07
(1,562)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD22	20	0.07
(1,562)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD23	20	0.07
(1,557)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:131:GLU:H	17	0.07
(1,557)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:131:GLU:H	17	0.07
(1,557)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:131:GLU:H	17	0.07
(1,552)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD21	18	0.07
(1,552)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD22	18	0.07
(1,552)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD23	18	0.07
(1,55)	1:A:110:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD11	15	0.07
(1,55)	1:A:110:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD12	15	0.07
(1,55)	1:A:110:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD13	15	0.07
(1,542)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD21	19	0.07
(1,542)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD22	19	0.07
(1,542)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD23	19	0.07
(1,536)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:102:VAL:H	13	0.07
(1,536)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:102:VAL:H	13	0.07
(1,536)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:102:VAL:H	13	0.07
(1,535)	1:A:101:HIS:H	1:A:116:ILE:HD11	10	0.07
(1,535)	1:A:101:HIS:H	1:A:116:ILE:HD12	10	0.07
(1,535)	1:A:101:HIS:H	1:A:116:ILE:HD13	10	0.07
()/	1			d on next mage



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,529)	1:A:99:LEU:H	1:A:116:ILE:HD11	11	0.07
(1,529)	1:A:99:LEU:H	1:A:116:ILE:HD12	11	0.07
(1,529)	1:A:99:LEU:H	1:A:116:ILE:HD13	11	0.07
(1,528)	1:A:105:ASP:H	1:A:112:LEU:HD21	12	0.07
(1,528)	1:A:105:ASP:H	1:A:112:LEU:HD22	12	0.07
(1,528)	1:A:105:ASP:H	1:A:112:LEU:HD23	12	0.07
(1,528)	1:A:105:ASP:H	1:A:112:LEU:HD21	19	0.07
(1,528)	1:A:105:ASP:H	1:A:112:LEU:HD22	19	0.07
(1,528)	1:A:105:ASP:H	1:A:112:LEU:HD23	19	0.07
(1,525)	1:A:98:HIS:H	1:A:99:LEU:HD21	10	0.07
(1,525)	1:A:98:HIS:H	1:A:99:LEU:HD22	10	0.07
(1,525)	1:A:98:HIS:H	1:A:99:LEU:HD23	10	0.07
(1,520)	1:A:90:VAL:H	1:A:90:VAL:HG11	10	0.07
(1,520)	1:A:90:VAL:H	1:A:90:VAL:HG12	10	0.07
(1,520)	1:A:90:VAL:H	1:A:90:VAL:HG13	10	0.07
(1,518)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD11	1	0.07
(1,518)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD12	1	0.07
(1,518)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD13	1	0.07
(1,518)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD11	12	0.07
(1,518)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD12	12	0.07
(1,518)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD13	12	0.07
(1,513)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:87:ARG:H	18	0.07
(1,513)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:87:ARG:H	18	0.07
(1,513)	1:A:79:LEU:HD13	1:A:87:ARG:H	18	0.07
(1,513)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:87:ARG:H	20	0.07
(1,513)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:87:ARG:H	20	0.07
(1,513)	1:A:79:LEU:HD13	1:A:87:ARG:H	20	0.07
(1,512)	1:A:79:LEU:HD21	1:A:87:ARG:H	15	0.07
(1,512)	1:A:79:LEU:HD22	1:A:87:ARG:H	15	0.07
(1,512)	1:A:79:LEU:HD23	1:A:87:ARG:H	15	0.07
(1,512)	1:A:79:LEU:HD21	1:A:87:ARG:H	19	0.07
(1,512)	1:A:79:LEU:HD22	1:A:87:ARG:H	19	0.07
(1,512)	1:A:79:LEU:HD23	1:A:87:ARG:H	19	0.07
(1,505)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:76:GLU:H	5	0.07
(1,505)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:76:GLU:H	5	0.07
(1,505)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:76:GLU:H	5	0.07
(1,503)	1:A:76:GLU:H	1:A:99:LEU:HD21	5	0.07
(1,503)	1:A:76:GLU:H	1:A:99:LEU:HD22	5	0.07
(1,503)	1:A:76:GLU:H	1:A:99:LEU:HD23	5	0.07
(1,499)	1:A:71:ILE:H	1:A:71:ILE:HD11	9	0.07
(1,499)	1:A:71:ILE:H	1:A:71:ILE:HD12	9	0.07
(1,499)	1:A:71:ILE:H	1:A:71:ILE:HD13	9	0.07



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	ea jrom previous page Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,493)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:52:PHE:H	5	0.07
(1,493)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:52:PHE:H	5	0.07
(1,493)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:52:PHE:H	5	0.07
(1,493)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:52:PHE:H	7	0.07
(1,493)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:52:PHE:H	7	0.07
(1,493)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:52:PHE:H	7	0.07
(1,491)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:52:PHE:H	2	0.07
(1,491)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:52:PHE:H	2	0.07
(1,491)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:52:PHE:H	2	0.07
(1,491)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:52:PHE:H	6	0.07
(1,491)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:52:PHE:H	6	0.07
(1,491)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:52:PHE:H	6	0.07
(1,49)	1:A:78:LYS:H	1:A:90:VAL:HG11	14	0.07
(1,49)	1:A:78:LYS:H	1:A:90:VAL:HG12	14	0.07
(1,49)	1:A:78:LYS:H	1:A:90:VAL:HG13	14	0.07
(1,473)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD11	8	0.07
(1,473)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD12	8	0.07
(1,473)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD13	8	0.07
(1,473)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD11	11	0.07
(1,473)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD12	11	0.07
(1,473)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD13	11	0.07
(1,472)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:42:TYR:H	1	0.07
(1,472)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:42:TYR:H	1	0.07
(1,472)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:42:TYR:H	1	0.07
(1,472)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:42:TYR:H	13	0.07
(1,472)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:42:TYR:H	13	0.07
(1,472)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:42:TYR:H	13	0.07
(1,472)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:42:TYR:H	14	0.07
(1,472)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:42:TYR:H	14	0.07
(1,472)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:42:TYR:H	14	0.07
(1,469)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:24:GLY:H	2	0.07
(1,469)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:24:GLY:H	2	0.07
(1,469)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:24:GLY:H	2	0.07
(1,468)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:23:ASN:H	4	0.07
(1,468)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:23:ASN:H	4	0.07
(1,468)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:23:ASN:H	4	0.07
(1,468)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:23:ASN:H	11	0.07
(1,468)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:23:ASN:H	11	0.07
(1,468)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:23:ASN:H	11	0.07
(1,468)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:23:ASN:H	13	0.07
(1,468)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:23:ASN:H	13	0.07
(1,468)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:23:ASN:H	13	0.07



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,465)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG11	4	0.07
(1,465)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG12	4	0.07
(1,465)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG13	4	0.07
(1,463)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:16:GLN:H	13	0.07
(1,463)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:16:GLN:H	13	0.07
(1,463)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:16:GLN:H	13	0.07
(1,462)	1:A:45:ILE:HD11	1:A:46:VAL:H	12	0.07
(1,462)	1:A:45:ILE:HD12	1:A:46:VAL:H	12	0.07
(1,462)	1:A:45:ILE:HD13	1:A:46:VAL:H	12	0.07
(1,458)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:10:LYS:H	16	0.07
(1,458)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:10:LYS:H	16	0.07
(1,458)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:10:LYS:H	16	0.07
(1,458)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:10:LYS:H	18	0.07
(1,458)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:10:LYS:H	18	0.07
(1,458)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:10:LYS:H	18	0.07
(1,458)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:10:LYS:H	19	0.07
(1,458)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:10:LYS:H	19	0.07
(1,458)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:10:LYS:H	19	0.07
(1,453)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG21	10	0.07
(1,453)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG22	10	0.07
(1,453)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG23	10	0.07
(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD11	2	0.07
(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD12	2	0.07
(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD13	2	0.07
(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD11	5	0.07
(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD12	5	0.07
(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD13	5	0.07
(1,448)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:89:GLU:H	14	0.07
(1,448)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:89:GLU:H	14	0.07
(1,448)	1:A:79:LEU:HD13	1:A:89:GLU:H	14	0.07
(1,445)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:113:ARG:H	7	0.07
(1,445)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:113:ARG:H	7	0.07
(1,445)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:113:ARG:H	7	0.07
(1,44)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:48:GLY:H	15	0.07
(1,44)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:48:GLY:H	15	0.07
(1,44)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:48:GLY:H	15	0.07
(1,431)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:103:PHE:H	9	0.07
(1,431)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:103:PHE:H	9	0.07
(1,431)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:103:PHE:H	9	0.07
(1,430)	1:A:46:VAL:HG11	1:A:47:SER:H	15	0.07
(1 400)	1 A AC VAT TIO10	1:A:47:SER:H	15	0.07
(1,430)	1:A:46:VAL:HG12	1.A.47.SER.H	1.0	0.07



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,42)	1:A:15:MET:H	1:A:19:VAL:HG21	6	0.07
(1,42)	1:A:15:MET:H	1:A:19:VAL:HG22	6	0.07
(1,42)	1:A:15:MET:H	1:A:19:VAL:HG23	6	0.07
(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD21	16	0.07
(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD22	16	0.07
(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD23	16	0.07
(1,41)	1:A:45:ILE:H	1:A:46:VAL:HG21	9	0.07
(1,41)	1:A:45:ILE:H	1:A:46:VAL:HG22	9	0.07
(1,41)	1:A:45:ILE:H	1:A:46:VAL:HG23	9	0.07
(1,407)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:46:VAL:HG21	2	0.07
(1,407)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:46:VAL:HG22	2	0.07
(1,407)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:46:VAL:HG23	2	0.07
(1,407)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:46:VAL:HG21	2	0.07
(1,407)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:46:VAL:HG22	2	0.07
(1,407)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:46:VAL:HG23	2	0.07
(1,407)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:46:VAL:HG21	2	0.07
(1,407)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:46:VAL:HG22	2	0.07
(1,407)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:46:VAL:HG23	2	0.07
(1,407)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:46:VAL:HG21	18	0.07
(1,407)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:46:VAL:HG22	18	0.07
(1,407)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:46:VAL:HG23	18	0.07
(1,407)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:46:VAL:HG21	18	0.07
(1,407)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:46:VAL:HG22	18	0.07
(1,407)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:46:VAL:HG23	18	0.07
(1,407)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:46:VAL:HG21	18	0.07
(1,407)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:46:VAL:HG22	18	0.07
(1,407)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:46:VAL:HG23	18	0.07
(1,40)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:97:SER:H	11	0.07
(1,40)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:97:SER:H	11	0.07
(1,40)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:97:SER:H	11	0.07
(1,379)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:H	8	0.07
(1,374)	1:A:132:GLU:H	1:A:134:TYR:H	6	0.07
(1,368)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:H	15	0.07
(1,366)	1:A:41:LEU:H	1:A:126:LYS:H	3	0.07
(1,366)	1:A:41:LEU:H	1:A:126:LYS:H	4	0.07
(1,361)	1:A:45:ILE:H	1:A:122:ARG:H	12	0.07
(1,36)	1:A:12:LEU:HD21	1:A:47:SER:H	15	0.07
(1,36)	1:A:12:LEU:HD22	1:A:47:SER:H	15	0.07
(1,36)	1:A:12:LEU:HD23	1:A:47:SER:H	15	0.07
(1,351)	1:A:108:GLY:H	1:A:112:LEU:H	8	0.07
(1,351)	1:A:108:GLY:H	1:A:112:LEU:H	15	0.07
(1,349)	1:A:106:GLY:H	1:A:113:ARG:H	8	0.07



 $Continued\ from\ previous\ page...$

(1,341) 1:A:99-LEU:H 1:A:100:GIY:H 19 0.07 (1,331) 1:A:80:ASP:H 1:A:88:THR:H 8 0.07 (1,329) 1:A:79:LEU:H 1:A:88:THR:H 10.07 (1,302) 1:A:44:ASP:H 1:A:89:GLV:H 15 0.07 (1,305) 1:A:25:THR:H 1:A:26:GLU:H 12 0.07 (1,300) 1:A:106:GLY:H 1:A:112:LEU:HD22 19 0.07 (1,300) 1:A:16:GCLY:H 1:A:112:LEU:HD23 19 0.07 (1,301) 1:A:16:GCLY:H 1:A:112:LEU:HD23 19 0.07 (1,298) 1:A:14:ARG:H 1:A:17:TYR:H 6 0.07 (1,284) 1:A:6:GLU:H 1:A:8:LYS:H 16 0.07 (1,283) 1:A:131:GLU:H 1:A:6:TYR:H 14 0.07 (1,279) 1:A:26:GLU:H 1:A:6:TYR:H 14 0.07 (1,274) 1:A:80:ASP:H 1:A:6:TRE:H 14 0.07 (1,274) 1:A:80:ASP:H 1:A:6:TRE:H 3 0.07	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,329) 1:A:79:LEU:H 1:A:89:GLU:H 11 0.07 (1,318) 1:A:44:ASP:H 1:A:48:GIY:H 15 0.07 (1,305) 1:A:25:THR:H 1:A:26:GLU:H 12 0.07 (1,30) 1:A:106:GLY:H 1:A:112:LEU:HD22 19 0.07 (1,30) 1:A:106:GLY:H 1:A:112:LEU:HD23 19 0.07 (1,288) 1:A:14:ARG:H 1:A:17:TYR:H 6 0.07 (1,288) 1:A:13:GU:H 1:A:8:LYS:H 16 0.07 (1,284) 1:A:6:GLU:H 1:A:3:4:TYR:H 14 0.07 (1,281) 1:A:13:GU:H 1:A:4:4:ATP:HE1 10 0.07 (1,279) 1:A:2:GLU:H 1:A:3:4:GLU:H 14 0.07 (1,274) 1:A:3:0:ASO:SP:H 1:A:3:4:GLV:H 3 0.07 (1,267) 1:A:2:1:GLN:H 1:A:24:GLY:H 3 0.07 (1,267) 1:A:3:1:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD11 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD11 3 <t< td=""><td>(1,341)</td><td>1:A:99:LEU:H</td><td>1:A:100:GLY:H</td><td>19</td><td>0.07</td></t<>	(1,341)	1:A:99:LEU:H	1:A:100:GLY:H	19	0.07
(1,318) 1:A:44:ASP:H 1:A:26:GLU:H 12 0.07 (1,305) 1:A:25:THR:H 1:A:26:GLU:H 12 0.07 (1,30) 1:A:106:GLY:H 1:A:112:LEU:HD21 19 0.07 (1,30) 1:A:106:GLY:H 1:A:112:LEU:HD22 19 0.07 (1,30) 1:A:106:GLY:H 1:A:112:LEU:HD23 19 0.07 (1,298) 1:A:14:ARG:H 1:A:17:TYR:H 6 0.07 (1,284) 1:A:6:GLU:H 1:A:8:LYS:H 16 0.07 (1,283) 1:A:131:GLU:H 1:A:64:TRP:HE1 10 0.07 (1,279) 1:A:26:GLU:H 1:A:64:TRP:HE1 10 0.07 (1,279) 1:A:26:GLU:H 1:A:64:TRP:HE1 10 0.07 (1,279) 1:A:21:GLN:H 1:A:24:GLY:H 3 0.07 (1,267) 1:A:21:GLN:H 1:A:24:GLY:H 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD11 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD11 3	(1,331)	1:A:80:ASP:H	1:A:88:THR:H	8	0.07
(1,305) 1:A:25:THR:H 1:A:26:GLU:H 12 0.07 (1,30) 1:A:106:GLY:H 1:A:112:LEU:HD21 19 0.07 (1,30) 1:A:106:GLY:H 1:A:112:LEU:HD22 19 0.07 (1,30) 1:A:106:GLY:H 1:A:112:LEU:HD23 19 0.07 (1,298) 1:A:106:GLY:H 1:A:112:LEU:HD23 19 0.07 (1,298) 1:A:14:ARG:H 1:A:17:TYR:H 6 0.07 (1,284) 1:A:6:GLU:H 1:A:8:LYS:H 16 0.07 (1,283) 1:A:131:GLU:H 1:A:134:TYR:H 14 0.07 (1,279) 1:A:26:GLU:H 1:A:64:TRP:HE1 10 0.07 (1,274) 1:A:80:ASP:H 1:A:89:GLU:H 14 0.07 (1,274) 1:A:19:VAL:H 1:A:24:GLY:H 3 0.07 (1,266) 1:A:19:VAL:H 1:A:21:GLN:H 4 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD11 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD11 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD11 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD13 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD11 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD11 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 3 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:75:VAL:HG21 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD11 1:A:75:VAL:HG21 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD11 1:A:75:VAL:HG21 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD11 1:A:75:VAL:HG21 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD12 1:A:75:VAL:HG21 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD11 1:A:75:VAL:HG21 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:75:VAL:HG21 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:75:VAL:HG21 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD11 1:A:75:VAL:HG21 12 0.07 (1,247	(1,329)	1:A:79:LEU:H	1:A:89:GLU:H	11	0.07
(1,30) 1:A:106:GLY:H 1:A:112:LEU:HD21 19 0.07 (1,30) 1:A:106:GLY:H 1:A:112:LEU:HD22 19 0.07 (1,30) 1:A:106:GLY:H 1:A:112:LEU:HD23 19 0.07 (1,298) 1:A:106:GLY:H 1:A:112:LEU:HD23 19 0.07 (1,298) 1:A:4:ARG:H 1:A:17:TYR:H 6 0.07 (1,284) 1:A:6:GLU:H 1:A:8:LYS:H 16 0.07 (1,283) 1:A:131:GLU:H 1:A:134:TYR:H 14 0.07 (1,283) 1:A:131:GLU:H 1:A:134:TYR:H 14 0.07 (1,279) 1:A:26:GLU:H 1:A:64:TRP:HE1 10 0.07 (1,274) 1:A:80:ASP:H 1:A:89:GLU:H 14 0.07 (1,267) 1:A:21:GLN:H 1:A:24:GLY:H 3 0.07 (1,266) 1:A:19:VAL:H 1:A:21:GLN:H 4 0.07 (1,266) 1:A:19:VAL:H 1:A:21:GLN:H 4 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD11 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD11 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD11 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD11 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD11 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD11 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD11 3 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD11 3 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD12 1:A:75:VAL:HG21 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD11 1:A:75:VAL:HG21 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD11 1:A:75:VAL:HG21 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD11 1:A:75:VAL:HG21 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD12 1:A:75:VAL:HG21 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 3 0.07 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 3 0.07 (1,247) 1:A:12	(1,318)	1:A:44:ASP:H	1:A:48:GLY:H	15	0.07
(1,30) 1:A:106:GLY:H 1:A:112:LEU:HD22 19 0.07 (1,30) 1:A:106:GLY:H 1:A:112:LEU:HD23 19 0.07 (1,298) 1:A:14:ARG:H 1:A:17:TYR:H 6 0.07 (1,284) 1:A:6:GLU:H 1:A:8:LYS:H 16 0.07 (1,283) 1:A:131:GLU:H 1:A:134:TYR:H 14 0.07 (1,279) 1:A:26:GLU:H 1:A:64:TRP:HE1 10 0.07 (1,274) 1:A:26:GLU:H 14 0.07 (1,274) 1:A:38:ASP:H 1:A:389:GLU:H 14 0.07 (1,266) 1:A:41:GLN:H 1:A:21:GLN:H 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:LE:HD11 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:LE:HD13 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:LE:HD11 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:LE:HD13 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:LE:HD11 3 0.07	(1,305)	1:A:25:THR:H	1:A:26:GLU:H	12	0.07
(1,30)	(1,30)	1:A:106:GLY:H	1:A:112:LEU:HD21	19	0.07
(1,298) 1:A:14:ARG:H 1:A:17:TYR:H 6 0.07 (1,284) 1:A:6:GLU:H 1:A:8:LYS:H 16 0.07 (1,283) 1:A:131:GLU:H 1:A:134:TYR:H 14 0.07 (1,279) 1:A:26:GLU:H 1:A:64:TRP:HE1 10 0.07 (1,274) 1:A:80:ASP:H 1:A:89:LU:H 14 0.07 (1,267) 1:A:19:VAL:H 1:A:24:GLY:H 3 0.07 (1,266) 1:A:19:VAL:H 1:A:21:GLN:H 4 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD11 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD13 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD13 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD13 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD13 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 3	(1,30)	1:A:106:GLY:H	1:A:112:LEU:HD22	19	0.07
(1,284) 1:A:6:GLU:H 1:A:8:LYS:H 16 0.07 (1,283) 1:A:131:GLU:H 1:A:134:TYR:H 14 0.07 (1,279) 1:A:26:GLU:H 1:A:64:TRP:HE1 10 0.07 (1,274) 1:A:80:ASP:H 1:A:89:GLU:H 14 0.07 (1,267) 1:A:21:GLN:H 1:A:24:GLY:H 3 0.07 (1,266) 1:A:19:VAL:H 1:A:21:GLN:H 4 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD11 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD12 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD13 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD13 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD13 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 <td< td=""><td>(1,30)</td><td>1:A:106:GLY:H</td><td>1:A:112:LEU:HD23</td><td>19</td><td>0.07</td></td<>	(1,30)	1:A:106:GLY:H	1:A:112:LEU:HD23	19	0.07
(1,283) 1:A:131:GLU:H 1:A:134:TYR:H 14 0.07 (1,279) 1:A:26:GLU:H 1:A:64:TRP:HE1 10 0.07 (1,274) 1:A:80:ASP:H 1:A:89:GLU:H 14 0.07 (1,267) 1:A:21:GLN:H 1:A:24:GLY:H 3 0.07 (1,266) 1:A:19:VAL:H 1:A:71:ILE:HD11 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD12 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD13 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD13 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD13 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD13 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13	(1,298)	1:A:14:ARG:H	1:A:17:TYR:H	6	0.07
(1,279) 1:A:26:GLU:H 1:A:64:TRP:HE1 10 0.07 (1,274) 1:A:80:ASP:H 1:A:89:GLU:H 14 0.07 (1,267) 1:A:21:GLN:H 1:A:24:GLY:H 3 0.07 (1,266) 1:A:19:VAL:H 1:A:21:GLN:H 4 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD11 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD12 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD13 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD13 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD13 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 3 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD11 1:A:75:VAL:HG21	(1,284)	1:A:6:GLU:H	1:A:8:LYS:H	16	0.07
(1,274) 1:A:80:ASP:H 1:A:89:GLU:H 14 0.07 (1,267) 1:A:21:GLN:H 1:A:24:GLY:H 3 0.07 (1,266) 1:A:19:VAL:H 1:A:21:GLN:H 4 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD11 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD12 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD13 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD12 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD13 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD13 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 3 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 3 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD11 1:A:75:VAL:HG21 <td>(1,283)</td> <td>1:A:131:GLU:H</td> <td>1:A:134:TYR:H</td> <td>14</td> <td>0.07</td>	(1,283)	1:A:131:GLU:H	1:A:134:TYR:H	14	0.07
(1,267) 1:A:21:GLN:H 1:A:24:GLY:H 3 0.07 (1,266) 1:A:19:VAL:H 1:A:21:GLN:H 4 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD11 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD12 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD13 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD11 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD13 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD11 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 3 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:75:VAL:HG21 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD11 1:A:75:VAL:HG	(1,279)	1:A:26:GLU:H	1:A:64:TRP:HE1	10	0.07
(1,266) 1:A:19:VAL:H 1:A:21:GLN:H 4 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD11 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD12 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD13 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD11 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD13 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD11 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:75:VAL:HG21 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD11 1:A:75:VAL:HG22 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD12 1:A:75	(1,274)	1:A:80:ASP:H	1:A:89:GLU:H	14	0.07
(1,266) 1:A:19:VAL:H 1:A:21:GLN:H 4 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD11 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD12 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD13 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD11 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD13 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD11 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 3 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:75:VAL:HG21 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD11 1:A:75:VAL:HG22 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD12 1:A:75	(1,267)	1:A:21:GLN:H	1:A:24:GLY:H	3	0.07
(1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD11 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD12 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD13 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD11 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD13 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD12 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 3 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD11 1:A:75:VAL:HG21 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD12 1:A:75:VAL:HG23 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD13	(1,266)	1:A:19:VAL:H	1:A:21:GLN:H	4	0.07
(1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD13 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD11 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD12 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD12 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 3 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:75:VAL:HG21 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD11 1:A:75:VAL:HG22 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD12 1:A:75:VAL:HG21 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD12 1:A:75:VAL:HG22 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:75:VAL:HG23 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD13 <		1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD11	3	0.07
(1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD11 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD12 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD13 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD11 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 3 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:75:VAL:HG21 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD11 1:A:75:VAL:HG22 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD12 1:A:75:VAL:HG23 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD12 1:A:75:VAL:HG22 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:75:VAL:HG23 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:75:VAL:HG23 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD13	(1,259)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD12	3	0.07
(1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD12 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD13 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD11 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD12 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD11 1:A:75:VAL:HG21 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD11 1:A:75:VAL:HG22 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD12 1:A:75:VAL:HG21 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD12 1:A:75:VAL:HG22 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:75:VAL:HG23 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:75:VAL:HG23 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:75:VAL:HG23 12 0.07 (1,247) 1:A:51:LEU:HD13	(1,259)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD13	3	0.07
(1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD13 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD11 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD12 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 3 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD11 1:A:75:VAL:HG21 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD11 1:A:75:VAL:HG22 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD12 1:A:75:VAL:HG23 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD12 1:A:75:VAL:HG22 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD12 1:A:75:VAL:HG23 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:75:VAL:HG23 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:75:VAL:HG21 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:75:VAL:HG21 12 0.07 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:75:VAL:HG23 12 0.07 (1,247) 1:A:51:LEU:HD13	(1,259)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD11	3	0.07
(1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD11 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD12 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 3 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD11 1:A:75:VAL:HG21 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD11 1:A:75:VAL:HG22 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD11 1:A:75:VAL:HG23 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD12 1:A:75:VAL:HG21 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD12 1:A:75:VAL:HG22 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD12 1:A:75:VAL:HG23 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:75:VAL:HG21 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:75:VAL:HG23 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:75:VAL:HG23 12 0.07 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:75:VAL:HG23 12 0.07 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13	(1,259)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD12	3	0.07
(1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD12 3 0.07 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 3 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD11 1:A:75:VAL:HG21 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD11 1:A:75:VAL:HG22 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD12 1:A:75:VAL:HG23 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD12 1:A:75:VAL:HG21 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD12 1:A:75:VAL:HG22 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:75:VAL:HG23 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:75:VAL:HG21 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:75:VAL:HG23 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:75:VAL:HG23 12 0.07 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:75:VAL:HG23 12 0.07 (1,247) 1:A:121:LEU:HD14 1:A:122:ARG:H 3 0.07 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13	(1,259)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD13	3	0.07
(1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 3 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD11 1:A:75:VAL:HG21 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD11 1:A:75:VAL:HG22 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD11 1:A:75:VAL:HG23 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD12 1:A:75:VAL:HG21 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD12 1:A:75:VAL:HG22 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD12 1:A:75:VAL:HG23 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:75:VAL:HG21 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:75:VAL:HG22 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:75:VAL:HG23 12 0.07 (1,247) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:75:VAL:HG23 12 0.07 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 3 0.07 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 3 0.07 (1,247) 1:A:51:LEU:HD13	(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD11	3	0.07
(1,257) 1:A:51:LEU:HD11 1:A:75:VAL:HG21 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD11 1:A:75:VAL:HG22 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD11 1:A:75:VAL:HG23 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD12 1:A:75:VAL:HG21 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD12 1:A:75:VAL:HG22 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD12 1:A:75:VAL:HG23 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:75:VAL:HG21 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:75:VAL:HG22 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:75:VAL:HG23 12 0.07 (1,247) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:75:VAL:HG23 12 0.07 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 3 0.07 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 3 0.07 (1,247) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:74:GLU:H 15 0.07 (1,219) 1:A:51:LEU:HD23	(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD12	3	0.07
(1,257) 1:A:51:LEU:HD11 1:A:75:VAL:HG22 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD11 1:A:75:VAL:HG23 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD12 1:A:75:VAL:HG21 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD12 1:A:75:VAL:HG22 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD12 1:A:75:VAL:HG23 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:75:VAL:HG21 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:75:VAL:HG22 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:75:VAL:HG23 12 0.07 (1,247) 1:A:51:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 3 0.07 (1,247) 1:A:121:LEU:HD12 1:A:122:ARG:H 3 0.07 (1,247) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:74:GLU:H 15 0.07 (1,219) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:74:GLU:H 15 0.07 (1,219) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:74:GLU:H 15 0.07 (1,212) 1:A:41:LEU:HD21 1:A	(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD13	3	0.07
(1,257) 1:A:51:LEU:HD11 1:A:75:VAL:HG23 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD12 1:A:75:VAL:HG21 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD12 1:A:75:VAL:HG22 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD12 1:A:75:VAL:HG23 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:75:VAL:HG21 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:75:VAL:HG22 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:75:VAL:HG23 12 0.07 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 3 0.07 (1,247) 1:A:121:LEU:HD12 1:A:122:ARG:H 3 0.07 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 3 0.07 (1,219) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:74:GLU:H 15 0.07 (1,219) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:74:GLU:H 15 0.07 (1,212) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:129:LEU:HD11 12 0.07 (1,212) 1:A:41:LEU:HD21	(1,257)	1:A:51:LEU:HD11	1:A:75:VAL:HG21	12	0.07
(1,257) 1:A:51:LEU:HD12 1:A:75:VAL:HG21 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD12 1:A:75:VAL:HG22 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD12 1:A:75:VAL:HG23 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:75:VAL:HG21 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:75:VAL:HG22 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:75:VAL:HG23 12 0.07 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 3 0.07 (1,247) 1:A:121:LEU:HD12 1:A:122:ARG:H 3 0.07 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 3 0.07 (1,247) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:74:GLU:H 15 0.07 (1,219) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:74:GLU:H 15 0.07 (1,219) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:129:LEU:HD11 12 0.07 (1,212) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:129:LEU:HD12 12 0.07	(1,257)	1:A:51:LEU:HD11	1:A:75:VAL:HG22	12	0.07
(1,257) 1:A:51:LEU:HD12 1:A:75:VAL:HG22 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD12 1:A:75:VAL:HG23 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:75:VAL:HG21 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:75:VAL:HG22 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:75:VAL:HG23 12 0.07 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 3 0.07 (1,247) 1:A:121:LEU:HD12 1:A:122:ARG:H 3 0.07 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 3 0.07 (1,247) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:74:GLU:H 15 0.07 (1,219) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:74:GLU:H 15 0.07 (1,219) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:74:GLU:H 15 0.07 (1,212) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:129:LEU:HD11 12 0.07 (1,212) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:129:LEU:HD12 12 0.07	(1,257)	1:A:51:LEU:HD11	1:A:75:VAL:HG23	12	0.07
(1,257) 1:A:51:LEU:HD12 1:A:75:VAL:HG23 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:75:VAL:HG21 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:75:VAL:HG22 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:75:VAL:HG23 12 0.07 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 3 0.07 (1,247) 1:A:121:LEU:HD12 1:A:122:ARG:H 3 0.07 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 3 0.07 (1,247) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:74:GLU:H 15 0.07 (1,219) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:74:GLU:H 15 0.07 (1,219) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:74:GLU:H 15 0.07 (1,212) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:129:LEU:HD11 12 0.07 (1,212) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:129:LEU:HD12 12 0.07	(1,257)	1:A:51:LEU:HD12	1:A:75:VAL:HG21	12	0.07
(1,257) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:75:VAL:HG21 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:75:VAL:HG22 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:75:VAL:HG23 12 0.07 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 3 0.07 (1,247) 1:A:121:LEU:HD12 1:A:122:ARG:H 3 0.07 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 3 0.07 (1,247) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:74:GLU:H 15 0.07 (1,219) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:74:GLU:H 15 0.07 (1,219) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:74:GLU:H 15 0.07 (1,212) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:129:LEU:HD11 12 0.07 (1,212) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:129:LEU:HD12 12 0.07	(1,257)	1:A:51:LEU:HD12	1:A:75:VAL:HG22	12	0.07
(1,257) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:75:VAL:HG22 12 0.07 (1,257) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:75:VAL:HG23 12 0.07 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 3 0.07 (1,247) 1:A:121:LEU:HD12 1:A:122:ARG:H 3 0.07 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 3 0.07 (1,219) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:74:GLU:H 15 0.07 (1,219) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:74:GLU:H 15 0.07 (1,219) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:74:GLU:H 15 0.07 (1,212) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:129:LEU:HD11 12 0.07 (1,212) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:129:LEU:HD12 12 0.07	(1,257)	1:A:51:LEU:HD12	1:A:75:VAL:HG23	12	0.07
(1,257) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:75:VAL:HG23 12 0.07 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 3 0.07 (1,247) 1:A:121:LEU:HD12 1:A:122:ARG:H 3 0.07 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 3 0.07 (1,219) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:74:GLU:H 15 0.07 (1,219) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:74:GLU:H 15 0.07 (1,219) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:74:GLU:H 15 0.07 (1,219) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:129:LEU:HD11 12 0.07 (1,212) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:129:LEU:HD12 12 0.07	(1,257)	1:A:51:LEU:HD13	1:A:75:VAL:HG21	12	0.07
(1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 3 0.07 (1,247) 1:A:121:LEU:HD12 1:A:122:ARG:H 3 0.07 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 3 0.07 (1,247) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:74:GLU:H 15 0.07 (1,219) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:74:GLU:H 15 0.07 (1,219) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:74:GLU:H 15 0.07 (1,212) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:129:LEU:HD11 12 0.07 (1,212) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:129:LEU:HD12 12 0.07	(1,257)	1:A:51:LEU:HD13	1:A:75:VAL:HG22	12	0.07
(1,247) 1:A:121:LEU:HD12 1:A:122:ARG:H 3 0.07 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 3 0.07 (1,219) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:74:GLU:H 15 0.07 (1,219) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:74:GLU:H 15 0.07 (1,219) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:74:GLU:H 15 0.07 (1,212) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:129:LEU:HD11 12 0.07 (1,212) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:129:LEU:HD12 12 0.07	(1,257)	1:A:51:LEU:HD13	1:A:75:VAL:HG23	12	0.07
(1,247) 1:A:121:LEU:HD12 1:A:122:ARG:H 3 0.07 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 3 0.07 (1,219) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:74:GLU:H 15 0.07 (1,219) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:74:GLU:H 15 0.07 (1,219) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:74:GLU:H 15 0.07 (1,212) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:129:LEU:HD11 12 0.07 (1,212) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:129:LEU:HD12 12 0.07	(1,247)	1:A:121:LEU:HD11	1:A:122:ARG:H	3	0.07
(1,219) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:74:GLU:H 15 0.07 (1,219) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:74:GLU:H 15 0.07 (1,219) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:74:GLU:H 15 0.07 (1,212) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:129:LEU:HD11 12 0.07 (1,212) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:129:LEU:HD12 12 0.07		1:A:121:LEU:HD12	1:A:122:ARG:H	3	0.07
(1,219) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:74:GLU:H 15 0.07 (1,219) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:74:GLU:H 15 0.07 (1,219) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:74:GLU:H 15 0.07 (1,212) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:129:LEU:HD11 12 0.07 (1,212) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:129:LEU:HD12 12 0.07	(1,247)	1:A:121:LEU:HD13	1:A:122:ARG:H	3	0.07
(1,219) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:74:GLU:H 15 0.07 (1,212) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:129:LEU:HD11 12 0.07 (1,212) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:129:LEU:HD12 12 0.07		1:A:51:LEU:HD21	1:A:74:GLU:H	15	0.07
(1,212) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:129:LEU:HD11 12 0.07 (1,212) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:129:LEU:HD12 12 0.07	(1,219)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:74:GLU:H	15	0.07
(1,212) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:129:LEU:HD12 12 0.07	(1,219)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:74:GLU:H	15	0.07
	(1,212)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:129:LEU:HD11	12	0.07
(1.010) 1.4.41.1.01.1.1.001.1.1.1.1.1.1.1.1.1.1.	(1,212)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:129:LEU:HD12	12	0.07
(1,212) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:129:LEU:HD13 12 0.07	(1,212)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:129:LEU:HD13	12	0.07



 $Continued\ from\ previous\ page...$

(1,212) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:129:LEU:HD11 12 0.07 (1,212) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:129:LEU:HD12 12 0.07 (1,212) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:129:LEU:HD13 12 0.07 (1,212) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:129:LEU:HD11 12 0.07 (1,212) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:129:LEU:HD13 12 0.07 (1,212) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:129:LEU:HD13 12 0.07 (1,19) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:127:HIS:H 14 0.07 (1,19) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:127:HIS:H 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD11 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD12 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD13 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD13 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD13 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VA	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,212) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:129:LEU:HD13 12 0.07 (1,212) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:129:LEU:HD11 12 0.07 (1,212) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:129:LEU:HD12 12 0.07 (1,212) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:129:LEU:HD13 12 0.07 (1,19) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:127:HIS:H 14 0.07 (1,19) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:127:HIS:H 14 0.07 (1,19) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:127:HIS:H 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD11 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD13 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD13 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD11 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD11 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD13 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:	(1,212)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:129:LEU:HD11	12	0.07
(1,212) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:412:LEU:HD12 12 0.07 (1,212) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:129:LEU:HD12 12 0.07 (1,212) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:129:LEU:HD13 12 0.07 (1,19) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:127:HIS:H 14 0.07 (1,19) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:127:HIS:H 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD11 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD12 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD13 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD13 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD13 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD12 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD13 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD13 14 0.07 (1,184) 1:A:102	(1,212)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:129:LEU:HD12	12	0.07
(1,212) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:129:LEU:HD12 12 0.07 (1,212) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:129:LEU:HD13 12 0.07 (1,19) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:127:HIS:H 14 0.07 (1,19) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:127:HIS:H 14 0.07 (1,19) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:127:HIS:H 14 0.07 (1,19) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD11 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD11 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD12 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD13 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD13 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD11 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD11 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD11 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD12 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD13 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD11 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD11 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD11 14 0.07 (1,184) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD11 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD11 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD11 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD11 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD11 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD11 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD11 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD11 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD11 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD11 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD11 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD11 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD11 20 0.07 (1,176) 1	(1,212)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:129:LEU:HD13	12	0.07
(1,212) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:129:LEU:HD13 12 0.07 (1,19) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:127:HIS:H 14 0.07 (1,19) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:127:HIS:H 14 0.07 (1,19) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:127:HIS:H 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD11 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD12 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD13 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD13 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD13 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD13 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD11 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD11 14 0.07 (1,184) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD11 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:	(1,212)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:129:LEU:HD11	12	0.07
(1,19) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:127:HIS:H 14 0.07 (1,19) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:127:HIS:H 14 0.07 (1,19) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:127:HIS:H 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD11 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD12 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD13 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD11 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD12 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD13 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD11 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD11 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD11 14 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD11 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL	(1,212)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:129:LEU:HD12	12	0.07
(1,19) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:127:HIS:H 14 0.07 (1,19) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:127:HIS:H 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD11 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD12 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD13 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD13 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD11 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD11 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD12 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD13 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD13 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD11 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD12 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD12 14 0.07 (1,166) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD11 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD11 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD11 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD13 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD11 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD11 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD13 20 0.07 (1,176) 1:	(1,212)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:129:LEU:HD13	12	0.07
(1,19) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:127:HIS:H 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD11 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD12 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD13 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD11 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD12 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD13 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD13 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD12 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD13 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD13 14 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD11 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD13 19 0.07 (1,176) 1:A:	(1,19)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:127:HIS:H	14	0.07
(1,184) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD11 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD12 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD13 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD11 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD12 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD13 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD11 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD12 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD13 14 0.07 (1,184) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD11 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD13 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD11 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD13 19 0.07 (1,176) 1:A:	(1,19)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:127:HIS:H	14	0.07
(1,184) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD12 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD13 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD11 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD12 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD13 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD11 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD12 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD12 14 0.07 (1,184) 1:A:402:VAL:HG23 1:A:412:LEU:HD13 14 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD11 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD13 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD11 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD13 19 0.07 (1,176) 1:A:	(1,19)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:127:HIS:H	14	0.07
(1,184) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD13 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD11 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD12 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD13 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD11 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD12 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD13 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:12:LEU:HD13 14 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD11 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD13 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD11 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD13 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD13 19 0.07 (1,176) 1:A:43:	(1,184)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:112:LEU:HD11	14	0.07
(1,184) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD11 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD12 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD13 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD11 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD12 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD13 14 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD11 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD12 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD13 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD11 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD11 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD11 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD11 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL	(1,184)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:112:LEU:HD12	14	0.07
(1,184) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD12 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD13 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD11 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD12 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD13 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD13 14 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD11 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD13 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD11 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD13 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD11 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD11 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD12 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL	(1,184)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:112:LEU:HD13	14	0.07
(1,184) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD13 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD11 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD12 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD13 14 0.07 (1,184) 1:A:402:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD11 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD12 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD13 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD12 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD13 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD11 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD11 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD12 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD11 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG	(1,184)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:112:LEU:HD11	14	0.07
(1,184) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD13 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD11 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD12 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD13 14 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD11 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD12 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD11 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD12 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD13 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD11 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD11 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD11 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD11 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG2	· · /	1:A:102:VAL:HG22	1:A:112:LEU:HD12	14	0.07
(1,184) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD12 14 0.07 (1,184) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD13 14 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD11 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD12 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD13 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD11 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD12 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD11 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD11 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD12 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD13 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD11 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD12 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 <td>(1,184)</td> <td>1:A:102:VAL:HG22</td> <td>1:A:112:LEU:HD13</td> <td>14</td> <td>0.07</td>	(1,184)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:112:LEU:HD13	14	0.07
(1,184) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD13 14 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD11 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD12 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD13 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD11 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD12 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD11 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD12 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD12 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD13 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD11 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD13 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD11 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22	(1,184)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:112:LEU:HD11	14	0.07
(1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD11 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD12 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD13 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD11 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD12 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD13 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD12 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD13 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD11 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD12 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD13 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD11 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD11 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23	(1,184)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:112:LEU:HD12	14	0.07
(1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD12 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD13 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD11 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD12 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD13 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD12 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD13 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD13 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD11 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD13 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD11 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD11 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD12 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23	(1,184)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:112:LEU:HD13	14	0.07
(1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD13 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD11 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD12 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD13 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD11 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD12 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD13 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD11 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD13 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD11 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD12 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD13 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD11 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23	(1,176)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:45:ILE:HD11	19	0.07
(1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD11 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD12 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD13 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD11 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD12 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD13 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD11 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD13 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD11 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD12 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD13 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD11 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD11 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23	(1,176)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:45:ILE:HD12	19	0.07
(1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD12 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD13 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD11 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD12 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD13 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD11 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD12 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD11 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD12 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD13 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD11 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD11 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD11 20 0.07	(1,176)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:45:ILE:HD13	19	0.07
(1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD13 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD11 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD12 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD13 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD11 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD12 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD11 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD12 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD13 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD11 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD11 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD11 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD12 20 0.07	(1,176)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:45:ILE:HD11	19	0.07
(1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD11 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD12 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD13 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD11 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD12 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD13 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD11 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD12 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD11 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD11 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD11 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD12 20 0.07	(1,176)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:45:ILE:HD12	19	0.07
(1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD12 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD13 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD11 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD12 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD13 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD11 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD12 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD11 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD11 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD11 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD12 20 0.07	(1,176)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:45:ILE:HD13	19	0.07
(1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD13 19 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD11 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD12 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD13 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD11 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD12 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD11 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD11 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD11 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD12 20 0.07	(1,176)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:45:ILE:HD11	19	0.07
(1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD11 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD12 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD13 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD11 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD12 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD13 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD11 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD12 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD12 20 0.07	(1,176)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:45:ILE:HD12	19	0.07
(1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD12 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD13 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD11 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD12 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD13 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD11 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD12 20 0.07	(1,176)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:45:ILE:HD13	19	0.07
(1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD13 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD11 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD12 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD13 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD11 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD12 20 0.07	(1,176)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:45:ILE:HD11	20	0.07
(1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD11 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD12 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD13 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD11 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD12 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD12 20 0.07	(1,176)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:45:ILE:HD12	20	0.07
(1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD12 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD13 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD11 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD12 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD12 20 0.07	(1,176)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:45:ILE:HD13	20	0.07
(1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD13 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD11 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD12 20 0.07	(1,176)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:45:ILE:HD11	20	0.07
(1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD11 20 0.07 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD12 20 0.07	(1,176)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:45:ILE:HD12	20	0.07
(1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD12 20 0.07	(1,176)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:45:ILE:HD13	20	0.07
(1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD12 20 0.07	(1,176)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:45:ILE:HD11	20	0.07
(1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD13 20 0.07		1:A:43:VAL:HG23	1:A:45:ILE:HD12	20	0.07
		1:A:43:VAL:HG23	1:A:45:ILE:HD13	20	0.07
(1,172) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:20:THR:H 6 0.07	(1,172)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:20:THR:H	6	0.07
(1,172) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:20:THR:H 6 0.07	(1,172)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:20:THR:H	6	0.07
(1,172) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:20:THR:H 6 0.07	(1,172)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:20:THR:H	6	0.07
(1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG11 19 0.07	(1,171)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG11	19	0.07
(1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG12 19 0.07	(1,171)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG12	19	0.07
(1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG13 19 0.07	(1,171)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG13	19	0.07



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,163)	1:A:15:MET:H	1:A:17:TYR:H	10	0.07
(1,162)	1:A:92:SER:H	1:A:96:ASP:H	15	0.07
(1,160)	1:A:54:SER:H	1:A:56:ASP:H	4	0.07
(1,147)	1:A:130:LYS:H	1:A:134:TYR:H	18	0.07
(1,146)	1:A:130:LYS:H	1:A:132:GLU:H	4	0.07
(1,14)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD21	14	0.07
(1,14)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD22	14	0.07
(1,14)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD23	14	0.07
(1,133)	1:A:7:GLU:H	1:A:9:ILE:H	6	0.07
(1,127)	1:A:21:GLN:H	1:A:23:ASN:H	17	0.07
(1,115)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:H	14	0.07
(1,115)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:H	17	0.07
(1,84)	1:A:10:LYS:H	1:A:12:LEU:H	10	0.06
(1,83)	1:A:9:ILE:H	1:A:12:LEU:H	18	0.06
(1,72)	1:A:22:ASN:H	1:A:23:ASN:H	17	0.06
(1,70)	1:A:16:GLN:HE21	1:A:46:VAL:H	12	0.06
(1,64)	1:A:47:SER:HG	1:A:49:LYS:H	18	0.06
(1,63)	1:A:54:SER:HG	1:A:57:LYS:H	16	0.06
(1,63)	1:A:54:SER:HG	1:A:57:LYS:H	18	0.06
(1,614)	1:A:86:ILE:HD11	1:A:80:ASP:H	18	0.06
(1,614)	1:A:86:ILE:HD12	1:A:80:ASP:H	18	0.06
(1,614)	1:A:86:ILE:HD13	1:A:80:ASP:H	18	0.06
(1,609)	1:A:102:VAL:H	1:A:88:THR:H	3	0.06
(1,608)	1:A:100:GLY:H	1:A:90:VAL:H	18	0.06
(1,59)	1:A:132:GLU:H	1:A:138:LEU:HD11	10	0.06
(1,59)	1:A:132:GLU:H	1:A:138:LEU:HD12	10	0.06
(1,59)	1:A:132:GLU:H	1:A:138:LEU:HD13	10	0.06
(1,584)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD11	9	0.06
(1,584)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD12	9	0.06
(1,584)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD13	9	0.06
(1,583)	1:A:90:VAL:H	1:A:102:VAL:HG21	5	0.06
(1,583)	1:A:90:VAL:H	1:A:102:VAL:HG22	5	0.06
(1,583)	1:A:90:VAL:H	1:A:102:VAL:HG23	5	0.06
(1,581)	1:A:102:VAL:HG11	1:A:113:ARG:H	11	0.06
(1,581)	1:A:102:VAL:HG12	1:A:113:ARG:H	11	0.06
(1,581)	1:A:102:VAL:HG13	1:A:113:ARG:H	11	0.06
(1,580)	1:A:112:LEU:HD21	1:A:113:ARG:H	18	0.06
(1,580)	1:A:112:LEU:HD22	1:A:113:ARG:H	18	0.06
(1,580)	1:A:112:LEU:HD23	1:A:113:ARG:H	18	0.06
(1,577)	1:A:111:GLY:H	1:A:112:LEU:HD21	11	0.06
(1,577)	1:A:111:GLY:H	1:A:112:LEU:HD22	11	0.06



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,575)	1:A:144:LEU:HD21	1:A:145:GLU:H	15	0.06
(1,575)	1:A:144:LEU:HD22	1:A:145:GLU:H	15	0.06
(1,575)	1:A:144:LEU:HD23	1:A:145:GLU:H	15	0.06
(1,571)	1:A:140:LEU:HD11	1:A:141:PHE:H	7	0.06
(1,571)	1:A:140:LEU:HD12	1:A:141:PHE:H	7	0.06
(1,571)	1:A:140:LEU:HD13	1:A:141:PHE:H	7	0.06
(1,571)	1:A:140:LEU:HD11	1:A:141:PHE:H	12	0.06
(1,571)	1:A:140:LEU:HD12	1:A:141:PHE:H	12	0.06
(1,571)	1:A:140:LEU:HD13	1:A:141:PHE:H	12	0.06
(1,570)	1:A:140:LEU:H	1:A:140:LEU:HD21	6	0.06
(1,570)	1:A:140:LEU:H	1:A:140:LEU:HD22	6	0.06
(1,570)	1:A:140:LEU:H	1:A:140:LEU:HD23	6	0.06
(1,565)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:H	6	0.06
(1,565)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:H	6	0.06
(1,565)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:H	6	0.06
(1,564)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:137:TYR:H	20	0.06
(1,564)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:137:TYR:H	20	0.06
(1,564)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:137:TYR:H	20	0.06
(1,562)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD21	7	0.06
(1,562)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD22	7	0.06
(1,562)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD23	7	0.06
(1,562)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD21	15	0.06
(1,562)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD22	15	0.06
(1,562)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD23	15	0.06
(1,556)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD11	3	0.06
(1,556)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD12	3	0.06
(1,556)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD13	3	0.06
(1,550)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG21	9	0.06
(1,550)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG22	9	0.06
(1,550)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG23	9	0.06
(1,549)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD21	4	0.06
(1,549)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD22	4	0.06
(1,549)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD23	4	0.06
(1,549)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD21	16	0.06
(1,549)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD22	16	0.06
(1,549)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD23	16	0.06
(1,548)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD11	12	0.06
(1,548)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD12	12	0.06
(1,548)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD13	12	0.06
(1,544)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:120:ALA:H	19	0.06
(1,544)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:120:ALA:H	19	0.06
(1,544)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:120:ALA:H	19	0.06



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,542)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD21	3	0.06
(1,542)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD22	3	0.06
(1,542)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD23	3	0.06
(1,542)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD21	9	0.06
(1,542)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD22	9	0.06
(1,542)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD23	9	0.06
(1,536)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:102:VAL:H	7	0.06
(1,536)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:102:VAL:H	7	0.06
(1,536)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:102:VAL:H	7	0.06
(1,516)	1:A:89:GLU:H	1:A:90:VAL:HG11	1	0.06
(1,516)	1:A:89:GLU:H	1:A:90:VAL:HG12	1	0.06
(1,516)	1:A:89:GLU:H	1:A:90:VAL:HG13	1	0.06
(1,513)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:87:ARG:H	4	0.06
(1,513)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:87:ARG:H	4	0.06
(1,513)	1:A:79:LEU:HD13	1:A:87:ARG:H	4	0.06
(1,512)	1:A:79:LEU:HD21	1:A:87:ARG:H	1	0.06
(1,512)	1:A:79:LEU:HD22	1:A:87:ARG:H	1	0.06
(1,512)	1:A:79:LEU:HD23	1:A:87:ARG:H	1	0.06
(1,507)	1:A:75:VAL:HG11	1:A:77:GLU:H	8	0.06
(1,507)	1:A:75:VAL:HG12	1:A:77:GLU:H	8	0.06
(1,507)	1:A:75:VAL:HG13	1:A:77:GLU:H	8	0.06
(1,505)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:76:GLU:H	18	0.06
(1,505)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:76:GLU:H	18	0.06
(1,505)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:76:GLU:H	18	0.06
(1,503)	1:A:76:GLU:H	1:A:99:LEU:HD21	20	0.06
(1,503)	1:A:76:GLU:H	1:A:99:LEU:HD22	20	0.06
(1,503)	1:A:76:GLU:H	1:A:99:LEU:HD23	20	0.06
(1,499)	1:A:71:ILE:H	1:A:71:ILE:HD11	5	0.06
(1,499)	1:A:71:ILE:H	1:A:71:ILE:HD12	5	0.06
(1,499)	1:A:71:ILE:H	1:A:71:ILE:HD13	5	0.06
(1,497)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:H	8	0.06
(1,497)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:H	8	0.06
(1,497)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:H	8	0.06
(1,497)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:H	13	0.06
(1,497)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:H	13	0.06
(1,497)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:H	13	0.06
(1,496)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:54:SER:H	3	0.06
(1,496)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:54:SER:H	3	0.06
(1,496)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:54:SER:H	3	0.06
(1,493)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:52:PHE:H	10	0.06
(1,493)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:52:PHE:H	10	0.06
(1,493)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:52:PHE:H	10	0.06



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	ea jrom previous page Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,491)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:52:PHE:H	19	0.06
(1,491)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:52:PHE:H	19	0.06
(1,491)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:52:PHE:H	19	0.06
(1,488)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:51:LEU:H	3	0.06
(1,488)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:51:LEU:H	3	0.06
(1,488)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:51:LEU:H	3	0.06
(1,483)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:49:LYS:H	20	0.06
(1,483)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:49:LYS:H	20	0.06
(1,483)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:49:LYS:H	20	0.06
(1,473)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD11	15	0.06
(1,473)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD12	15	0.06
(1,473)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD13	15	0.06
(1,473)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD11	16	0.06
(1,473)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD12	16	0.06
(1,473)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD13	16	0.06
(1,468)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:23:ASN:H	14	0.06
(1,468)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:23:ASN:H	14	0.06
(1,468)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:23:ASN:H	14	0.06
(1,465)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG11	14	0.06
(1,465)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG12	14	0.06
(1,465)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG13	14	0.06
(1,464)	1:A:16:GLN:H	1:A:46:VAL:HG11	16	0.06
(1,464)	1:A:16:GLN:H	1:A:46:VAL:HG12	16	0.06
(1,464)	1:A:16:GLN:H	1:A:46:VAL:HG13	16	0.06
(1,458)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:10:LYS:H	6	0.06
(1,458)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:10:LYS:H	6	0.06
(1,458)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:10:LYS:H	6	0.06
(1,458)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:10:LYS:H	14	0.06
(1,458)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:10:LYS:H	14	0.06
(1,458)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:10:LYS:H	14	0.06
(1,458)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:10:LYS:H	17	0.06
(1,458)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:10:LYS:H	17	0.06
(1,458)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:10:LYS:H	17	0.06
(1,455)	1:A:8:LYS:H	1:A:9:ILE:HD11	6	0.06
(1,455)	1:A:8:LYS:H	1:A:9:ILE:HD12	6	0.06
(1,455)	1:A:8:LYS:H	1:A:9:ILE:HD13	6	0.06
(1,453)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG21	2	0.06
(1,453)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG22	2	0.06
(1,453)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG23	2	0.06
(1,452)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG21	10	0.06
(1,452)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG22	10	0.06
(1,452)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG23	10	0.06



 $Continued\ from\ previous\ page...$

(1,451) 1:A:75:VAL:HG12 1:A:91:ARG:H 7 0.06 (1,451) 1:A:75:VAL:HG12 1:A:91:ARG:H 7 0.06 (1,451) 1:A:75:VAL:HG13 1:A:91:ARG:H 7 0.06 (1,45) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD11 14 0.06 (1,45) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD12 14 0.06 (1,45) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD13 14 0.06 (1,448) 1:A:79:LEU:HD11 1:A:89:GLU:H 10 0.06 (1,448) 1:A:79:LEU:HD13 1:A:89:GLU:H 10 0.06 (1,448) 1:A:79:LEU:HD13 1:A:89:GLU:H 20 0.06 (1,448) 1:A:79:LEU:HD11 1:A:89:GLU:H 20 0.06 (1,448) 1:A:79:LEU:HD13 1:A:89:GLU:H 20 0.06 (1,448) 1:A:79:LEU:HD12 1:A:89:GLU:H 20 0.06 (1,448) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:113:ARG:H 12 0.06 (1,445) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:113:ARG:H	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,45) 1:A:75:VAL:HG13 1:A:91:ARG:H 7 0.06 (1,45) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD11 14 0.06 (1,45) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD12 14 0.06 (1,45) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD13 14 0.06 (1,448) 1:A:79:LEU:HD11 1:A:89:GLU:H 10 0.06 (1,448) 1:A:79:LEU:HD12 1:A:89:GLU:H 10 0.06 (1,448) 1:A:79:LEU:HD13 1:A:89:GLU:H 10 0.06 (1,448) 1:A:79:LEU:HD11 1:A:89:GLU:H 20 0.06 (1,448) 1:A:79:LEU:HD13 1:A:89:GLU:H 20 0.06 (1,448) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:113:ARG:H 12 0.06 (1,445) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:113:ARG:H <th< td=""><td>(1,451)</td><td>1:A:75:VAL:HG11</td><td>1:A:91:ARG:H</td><td>7</td><td>0.06</td></th<>	(1,451)	1:A:75:VAL:HG11	1:A:91:ARG:H	7	0.06
(1,45) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD11 14 0.06 (1,45) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD12 14 0.06 (1,45) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD13 14 0.06 (1,448) 1:A:79:LEU:HD11 1:A:89:GLU:H 10 0.06 (1,448) 1:A:79:LEU:HD12 1:A:89:GLU:H 10 0.06 (1,448) 1:A:79:LEU:HD13 1:A:89:GLU:H 20 0.06 (1,448) 1:A:79:LEU:HD11 1:A:89:GLU:H 20 0.06 (1,448) 1:A:79:LEU:HD13 1:A:89:GLU:H 20 0.06 (1,448) 1:A:79:LEU:HD13 1:A:89:GLU:H 20 0.06 (1,448) 1:A:79:LEU:HD13 1:A:89:GLU:H 20 0.06 (1,445) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:113:ARG:H 12 0.06 (1,445) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:113:ARG:H 12 0.06 (1,445) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:113:ARG:H 19 0.06 (1,445) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:113:ARG:H	(1,451)	1:A:75:VAL:HG12	1:A:91:ARG:H	7	0.06
(1,45) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD12 14 0.06 (1,45) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD13 14 0.06 (1,448) 1:A:79:LEU:HD11 1:A:89:GLU:H 10 0.06 (1,448) 1:A:79:LEU:HD12 1:A:89:GLU:H 10 0.06 (1,448) 1:A:79:LEU:HD13 1:A:89:GLU:H 10 0.06 (1,448) 1:A:79:LEU:HD13 1:A:89:GLU:H 10 0.06 (1,448) 1:A:79:LEU:HD11 1:A:89:GLU:H 20 0.06 (1,448) 1:A:79:LEU:HD11 1:A:89:GLU:H 20 0.06 (1,448) 1:A:79:LEU:HD12 1:A:89:GLU:H 20 0.06 (1,448) 1:A:79:LEU:HD12 1:A:89:GLU:H 20 0.06 (1,448) 1:A:79:LEU:HD13 1:A:89:GLU:H 20 0.06 (1,445) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:13:ARG:H 12 0.06 (1,445) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:13:ARG:H 12 0.06 (1,445) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:13:ARG:H 12 0.06 (1,445) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:13:ARG:H 12 0.06 (1,445) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:13:ARG:H 19 0.06 (1,445) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:13:ARG:H 19 0.06 (1,445) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:13:ARG:H 19 0.06 (1,445) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:13:ARG:H 19 0.06 (1,445) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:13:ARG:H 19 0.06 (1,446) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:13:ARG:H 19 0.06 (1,447) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG11 13 0.06 (1,442) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG11 13 0.06 (1,442) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG13 13 0.06 (1,441) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:124:VAL:H 15 0.06 (1,441) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:124:VAL:H 15 0.06 (1,441) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:124:VAL:H 15 0.06 (1,443) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:120:ALA:H 15 0.06 (1,438) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:120:ALA:H 15 0.06 (1,438) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:120:ALA:H 15 0.06 (1,438) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:26:GLU:H 9 0.06 (1,435) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:26:GLU:H 10 0.06 (1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 11 0.06	(1,451)	1:A:75:VAL:HG13	1:A:91:ARG:H	7	0.06
(1,45) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD13 14 0.06 (1,448) 1:A:79:LEU:HD11 1:A:89:GLU:H 10 0.06 (1,448) 1:A:79:LEU:HD12 1:A:89:GLU:H 10 0.06 (1,448) 1:A:79:LEU:HD13 1:A:89:GLU:H 10 0.06 (1,448) 1:A:79:LEU:HD11 1:A:89:GLU:H 20 0.06 (1,448) 1:A:79:LEU:HD12 1:A:89:GLU:H 20 0.06 (1,4448) 1:A:79:LEU:HD12 1:A:89:GLU:H 20 0.06 (1,4445) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:113:ARG:H 12 0.06 (1,445) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:113:ARG:H 19 0.06 (1,445) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:113:ARG:H 19 0.06 (1,445) 1:A:71:LE:H 1:A:75:VAL:HG11	(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD11	14	0.06
(1,448) 1:A:79:LEU:HD11 1:A:89:GLU:H 10 0.06 (1,448) 1:A:79:LEU:HD12 1:A:89:GLU:H 10 0.06 (1,448) 1:A:79:LEU:HD13 1:A:89:GLU:H 10 0.06 (1,448) 1:A:79:LEU:HD11 1:A:89:GLU:H 20 0.06 (1,448) 1:A:79:LEU:HD12 1:A:89:GLU:H 20 0.06 (1,448) 1:A:79:LEU:HD13 1:A:89:GLU:H 20 0.06 (1,445) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:113:ARG:H 12 0.06 (1,445) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:113:ARG:H 19 0.06 (1,445) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:113:ARG:H 19 0.06 (1,445) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:113:ARG:H 19 0.06 (1,445) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:113:ARG:H	(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD12	14	0.06
(1,448) 1:A:79:LEU:HD12 1:A:89:GLU:H 10 0.06 (1,448) 1:A:79:LEU:HD13 1:A:89:GLU:H 10 0.06 (1,448) 1:A:79:LEU:HD11 1:A:89:GLU:H 20 0.06 (1,448) 1:A:79:LEU:HD12 1:A:89:GLU:H 20 0.06 (1,448) 1:A:79:LEU:HD13 1:A:89:GLU:H 20 0.06 (1,448) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:13:ARG:H 12 0.06 (1,445) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:113:ARG:H 12 0.06 (1,445) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:113:ARG:H 19 0.06 (1,445) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:113:ARG:H 19 0.06 (1,445) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:113:ARG:H 19 0.06 (1,445) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:113:ARG:H 19 0.06 (1,445) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:113:ARG:H 19 0.06 (1,445) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:113:ARG:H 19 0.06 (1,445) 1:A:162:VAL:HG23 1:A:113:ARG:	(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD13	14	0.06
(1,448) 1:A:79:LEU:HD13 1:A:89:GLU:H 10 0.06 (1,448) 1:A:79:LEU:HD11 1:A:89:GLU:H 20 0.06 (1,448) 1:A:79:LEU:HD12 1:A:89:GLU:H 20 0.06 (1,448) 1:A:79:LEU:HD13 1:A:89:GLU:H 20 0.06 (1,445) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:113:ARG:H 12 0.06 (1,445) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:113:ARG:H 12 0.06 (1,445) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:113:ARG:H 12 0.06 (1,445) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:113:ARG:H 19 0.06 (1,445) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:113:ARG:H 19 0.06 (1,445) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:113:ARG:H 19 0.06 (1,445) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:113:ARG:H 19 0.06 (1,445) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:113:ARG:H 19 0.06 (1,442) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG11 13 0.06 (1,442) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG12	(1,448)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:89:GLU:H	10	0.06
(1,448) 1:A:79:LEU:HD11 1:A:89:GLU:H 20 0.06 (1,448) 1:A:79:LEU:HD12 1:A:89:GLU:H 20 0.06 (1,448) 1:A:79:LEU:HD13 1:A:89:GLU:H 20 0.06 (1,445) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:113:ARG:H 12 0.06 (1,445) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:113:ARG:H 12 0.06 (1,445) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:113:ARG:H 19 0.06 (1,445) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:113:ARG:H 19 0.06 (1,445) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:113:ARG:H 19 0.06 (1,445) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:113:ARG:H 19 0.06 (1,442) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG11 13 0.06 (1,442) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG	(1,448)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:89:GLU:H	10	0.06
(1,448) 1:A:79:LEU:HD12 1:A:89:GLU:H 20 0.06 (1,448) 1:A:79:LEU:HD13 1:A:89:GLU:H 20 0.06 (1,445) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:113:ARG:H 12 0.06 (1,445) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:113:ARG:H 12 0.06 (1,445) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:113:ARG:H 19 0.06 (1,445) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:113:ARG:H 19 0.06 (1,445) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:113:ARG:H 19 0.06 (1,445) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:113:ARG:H 19 0.06 (1,445) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:113:ARG:H 19 0.06 (1,445) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:113:ARG:H 19 0.06 (1,442) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG11 13 0.06 (1,442) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG12 13 0.06 (1,441) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:124:VAL:H 15 0.06 (1,441) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:120:VAL	(1,448)	1:A:79:LEU:HD13	1:A:89:GLU:H	10	0.06
(1,448) 1:A:79:LEU:HD13 1:A:89:GLU:H 20 0.06 (1,445) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:113:ARG:H 12 0.06 (1,445) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:113:ARG:H 12 0.06 (1,445) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:113:ARG:H 19 0.06 (1,445) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:113:ARG:H 19 0.06 (1,445) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:113:ARG:H 19 0.06 (1,445) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:113:ARG:H 19 0.06 (1,444) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:113:ARG:H 19 0.06 (1,442) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG11 13 0.06 (1,441) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:124:VAL:H 15 0.06 (1,441) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:124	(1,448)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:89:GLU:H	20	0.06
(1,445) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:113:ARG:H 12 0.06 (1,445) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:113:ARG:H 12 0.06 (1,445) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:113:ARG:H 19 0.06 (1,445) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:113:ARG:H 19 0.06 (1,445) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:113:ARG:H 19 0.06 (1,445) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:113:ARG:H 19 0.06 (1,445) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:113:ARG:H 19 0.06 (1,445) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:113:ARG:H 19 0.06 (1,445) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:113:ARG:H 19 0.06 (1,444) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG11 13 0.06 (1,442) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG12 13 0.06 (1,441) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:124:VAL:H 15 0.06 (1,441) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:124:VAL:H 15 0.06 (1,438) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:120:	(1,448)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:89:GLU:H	20	0.06
(1,445) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:113:ARG:H 12 0.06 (1,445) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:113:ARG:H 12 0.06 (1,445) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:113:ARG:H 19 0.06 (1,445) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:113:ARG:H 19 0.06 (1,445) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:113:ARG:H 19 0.06 (1,442) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG11 13 0.06 (1,442) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG13 13 0.06 (1,441) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:124:VAL:H 15 0.06 (1,441) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:124:VAL:H 15 0.06 (1,438) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:120:	(1,448)	1:A:79:LEU:HD13	1:A:89:GLU:H	20	0.06
(1,445) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:113:ARG:H 12 0.06 (1,445) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:113:ARG:H 19 0.06 (1,445) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:113:ARG:H 19 0.06 (1,445) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:113:ARG:H 19 0.06 (1,445) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:113:ARG:H 19 0.06 (1,445) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:113:ARG:H 19 0.06 (1,444) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:113:ARG:H 19 0.06 (1,442) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG12 13 0.06 (1,442) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG13 13 0.06 (1,442) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:124:VAL:H 15 0.06 (1,441) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:124:VAL:H 15 0.06 (1,441) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:120:ALA:H 15 0.06 (1,438) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:120:ALA:H 15 0.06 (1,438) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:26:GLU	(1,445)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:113:ARG:H	12	0.06
(1,445) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:113:ARG:H 12 0.06 (1,445) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:113:ARG:H 19 0.06 (1,445) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:113:ARG:H 19 0.06 (1,445) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:113:ARG:H 19 0.06 (1,445) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG11 13 0.06 (1,442) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG12 13 0.06 (1,442) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG13 13 0.06 (1,442) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG13 13 0.06 (1,442) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:124:VAL:H 15 0.06 (1,441) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:124:VAL:H 15 0.06 (1,441) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:120:ALA:H 15 0.06 (1,438) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:120:ALA:H 15 0.06 (1,438) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:120:ALA:H 15 0.06 (1,435) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:26:GLU:H <td>(1,445)</td> <td>1:A:102:VAL:HG22</td> <td>1:A:113:ARG:H</td> <td>12</td> <td>0.06</td>	(1,445)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:113:ARG:H	12	0.06
(1,445) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:113:ARG:H 19 0.06 (1,445) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:113:ARG:H 19 0.06 (1,442) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG11 13 0.06 (1,442) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG12 13 0.06 (1,442) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG13 13 0.06 (1,441) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:124:VAL:H 15 0.06 (1,441) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:124:VAL:H 15 0.06 (1,441) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:120:ALA:H 15 0.06 (1,441) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:120:ALA:H 15 0.06 (1,438) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:120:ALA:H 15 0.06 (1,438) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:120:ALA:H 15 0.06 (1,438) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:26:GLU:H 9 0.06 (1,435) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:26:GLU:H 9 0.06 (1,435) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:26:GLU:H	(1,445)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:113:ARG:H	12	0.06
(1,445) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:113:ARG:H 19 0.06 (1,445) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:113:ARG:H 19 0.06 (1,442) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG11 13 0.06 (1,442) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG12 13 0.06 (1,442) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG13 13 0.06 (1,441) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:124:VAL:H 15 0.06 (1,441) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:124:VAL:H 15 0.06 (1,441) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:124:VAL:H 15 0.06 (1,441) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:120:ALA:H 15 0.06 (1,438) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:120:ALA:H 15 0.06 (1,438) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:120:ALA:H 15 0.06 (1,438) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:26:GLU:H 9 0.06 (1,435) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:26:GLU:H 9 0.06 (1,435) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:26:GLU:H	(1,445)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:113:ARG:H	19	0.06
(1,442) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG11 13 0.06 (1,442) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG12 13 0.06 (1,442) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG13 13 0.06 (1,442) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG13 13 0.06 (1,441) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:124:VAL:H 15 0.06 (1,441) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:124:VAL:H 15 0.06 (1,438) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:120:ALA:H 15 0.06 (1,438) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:120:ALA:H 15 0.06 (1,438) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:120:ALA:H 15 0.06 (1,435) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:26:GLU:H 9 0.06 (1,435) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:26:GLU:H 9 0.06 (1,435) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:26:GLU:H 10 0.06 (1,435) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:26:GLU:H 10 0.06 (1,435) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:26:GLU:H	(1,445)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:113:ARG:H	19	0.06
(1,442) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG12 13 0.06 (1,442) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG13 13 0.06 (1,441) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:124:VAL:H 15 0.06 (1,441) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:124:VAL:H 15 0.06 (1,441) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:124:VAL:H 15 0.06 (1,438) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:120:ALA:H 15 0.06 (1,438) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:120:ALA:H 15 0.06 (1,438) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:120:ALA:H 15 0.06 (1,438) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:26:GLU:H 9 0.06 (1,435) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:26:GLU:H 9 0.06 (1,435) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:26:GLU:H 10 0.06 (1,435) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:26:GLU:H 10 0.06 (1,435) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:26:GLU:H 10 0.06 (1,435) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:103:PHE:H	(1,445)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:113:ARG:H	19	0.06
(1,442) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG13 13 0.06 (1,441) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:124:VAL:H 15 0.06 (1,441) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:124:VAL:H 15 0.06 (1,441) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:124:VAL:H 15 0.06 (1,438) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:120:ALA:H 15 0.06 (1,438) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:120:ALA:H 15 0.06 (1,438) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:120:ALA:H 15 0.06 (1,438) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:26:GLU:H 9 0.06 (1,435) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:26:GLU:H 9 0.06 (1,435) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:26:GLU:H 10 0.06 (1,435) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:26:GLU:H 10 0.06 (1,435) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:26:GLU:H 10 0.06 (1,435) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 11 0.06 (1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H	(1,442)	1:A:71:ILE:H	1:A:75:VAL:HG11	13	0.06
(1,441) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:124:VAL:H 15 0.06 (1,441) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:124:VAL:H 15 0.06 (1,441) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:124:VAL:H 15 0.06 (1,438) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:120:ALA:H 15 0.06 (1,438) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:120:ALA:H 15 0.06 (1,438) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:120:ALA:H 15 0.06 (1,438) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:26:GLU:H 9 0.06 (1,435) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:26:GLU:H 9 0.06 (1,435) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:26:GLU:H 9 0.06 (1,435) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:26:GLU:H 10 0.06 (1,435) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:26:GLU:H 10 0.06 (1,435) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:26:GLU:H 10 0.06 (1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 11 0.06 (1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H	(1,442)	1:A:71:ILE:H	1:A:75:VAL:HG12	13	0.06
(1,441) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:124:VAL:H 15 0.06 (1,441) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:124:VAL:H 15 0.06 (1,438) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:120:ALA:H 15 0.06 (1,438) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:120:ALA:H 15 0.06 (1,438) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:120:ALA:H 15 0.06 (1,438) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:26:GLU:H 9 0.06 (1,435) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:26:GLU:H 9 0.06 (1,435) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:26:GLU:H 10 0.06 (1,435) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:26:GLU:H 10 0.06 (1,435) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:26:GLU:H 10 0.06 (1,435) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:26:GLU:H 10 0.06 (1,431) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:103:PHE:H 11 0.06 (1,431) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:103:PHE:H 11 0.06 (1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H	(1,442)	1:A:71:ILE:H	1:A:75:VAL:HG13	13	0.06
(1,441) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:124:VAL:H 15 0.06 (1,438) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:120:ALA:H 15 0.06 (1,438) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:120:ALA:H 15 0.06 (1,438) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:120:ALA:H 15 0.06 (1,435) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:26:GLU:H 9 0.06 (1,435) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:26:GLU:H 9 0.06 (1,435) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:26:GLU:H 9 0.06 (1,435) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:26:GLU:H 10 0.06 (1,435) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:26:GLU:H 10 0.06 (1,435) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:26:GLU:H 10 0.06 (1,435) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 11 0.06 (1,431) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:103:PHE:H 11 0.06 (1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 11 0.06	(1,441)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:124:VAL:H	15	0.06
(1,438) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:120:ALA:H 15 0.06 (1,438) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:120:ALA:H 15 0.06 (1,438) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:120:ALA:H 15 0.06 (1,435) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:26:GLU:H 9 0.06 (1,435) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:26:GLU:H 9 0.06 (1,435) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:26:GLU:H 9 0.06 (1,435) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:26:GLU:H 10 0.06 (1,435) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:26:GLU:H 10 0.06 (1,435) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:26:GLU:H 10 0.06 (1,435) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 11 0.06 (1,431) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:103:PHE:H 11 0.06 (1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 11 0.06 (1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 11 0.06	(1,441)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:124:VAL:H	15	0.06
(1,438) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:120:ALA:H 15 0.06 (1,438) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:120:ALA:H 15 0.06 (1,435) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:26:GLU:H 9 0.06 (1,435) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:26:GLU:H 9 0.06 (1,435) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:26:GLU:H 9 0.06 (1,435) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:26:GLU:H 10 0.06 (1,435) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:26:GLU:H 10 0.06 (1,435) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:26:GLU:H 10 0.06 (1,435) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 11 0.06 (1,431) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:103:PHE:H 11 0.06 (1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 11 0.06	(1,441)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:124:VAL:H	15	0.06
(1,438) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:120:ALA:H 15 0.06 (1,435) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:26:GLU:H 9 0.06 (1,435) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:26:GLU:H 9 0.06 (1,435) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:26:GLU:H 9 0.06 (1,435) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:26:GLU:H 10 0.06 (1,435) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:26:GLU:H 10 0.06 (1,435) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:26:GLU:H 10 0.06 (1,435) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 11 0.06 (1,431) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:103:PHE:H 11 0.06 (1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 11 0.06	(1,438)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:120:ALA:H	15	0.06
(1,435) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:26:GLU:H 9 0.06 (1,435) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:26:GLU:H 9 0.06 (1,435) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:26:GLU:H 9 0.06 (1,435) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:26:GLU:H 10 0.06 (1,435) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:26:GLU:H 10 0.06 (1,435) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:26:GLU:H 10 0.06 (1,435) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 11 0.06 (1,431) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:103:PHE:H 11 0.06 (1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 11 0.06 (1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 11 0.06	(1,438)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:120:ALA:H	15	0.06
(1,435) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:26:GLU:H 9 0.06 (1,435) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:26:GLU:H 9 0.06 (1,435) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:26:GLU:H 10 0.06 (1,435) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:26:GLU:H 10 0.06 (1,435) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:26:GLU:H 10 0.06 (1,435) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 11 0.06 (1,431) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:103:PHE:H 11 0.06 (1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 11 0.06 (1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 11 0.06	(1,438)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:120:ALA:H	15	0.06
(1,435) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:26:GLU:H 9 0.06 (1,435) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:26:GLU:H 10 0.06 (1,435) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:26:GLU:H 10 0.06 (1,435) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:26:GLU:H 10 0.06 (1,431) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:103:PHE:H 11 0.06 (1,431) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:103:PHE:H 11 0.06 (1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 11 0.06	(1,435)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:26:GLU:H	9	0.06
(1,435) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:26:GLU:H 10 0.06 (1,435) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:26:GLU:H 10 0.06 (1,435) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:26:GLU:H 10 0.06 (1,431) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:103:PHE:H 11 0.06 (1,431) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:103:PHE:H 11 0.06 (1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 11 0.06	(1,435)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:26:GLU:H	9	0.06
(1,435) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:26:GLU:H 10 0.06 (1,435) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:26:GLU:H 10 0.06 (1,431) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:103:PHE:H 11 0.06 (1,431) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:103:PHE:H 11 0.06 (1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 11 0.06	(1,435)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:26:GLU:H	9	0.06
(1,435) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:26:GLU:H 10 0.06 (1,431) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:103:PHE:H 11 0.06 (1,431) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:103:PHE:H 11 0.06 (1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 11 0.06	(1,435)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:26:GLU:H	10	0.06
(1,435) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:26:GLU:H 10 0.06 (1,431) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:103:PHE:H 11 0.06 (1,431) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:103:PHE:H 11 0.06 (1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 11 0.06	(1,435)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:26:GLU:H	10	0.06
(1,431) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:103:PHE:H 11 0.06 (1,431) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:103:PHE:H 11 0.06 (1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 11 0.06		1:A:19:VAL:HG23	1:A:26:GLU:H	10	0.06
(1,431) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:103:PHE:H 11 0.06 (1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 11 0.06		1:A:102:VAL:HG21	1:A:103:PHE:H	11	0.06
		1:A:102:VAL:HG22	1:A:103:PHE:H	11	0.06
(1.420) 1.4.46.VAI.HC11 1.4.47.SED.H 2 0.06	(1,431)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:103:PHE:H	11	0.06
$\lfloor (1,450) \rfloor \perp 1.A.40. \forall AL. \PiG11 \mid = 1.A.47. \exists LR. \Pi = \mid = 2 \mid = 0.00$	(1,430)	1:A:46:VAL:HG11	1:A:47:SER:H	2	0.06
(1,430) 1:A:46:VAL:HG12 1:A:47:SER:H 2 0.06		1:A:46:VAL:HG12	1:A:47:SER:H	2	0.06
(1,430) 1:A:46:VAL:HG13 1:A:47:SER:H 2 0.06	(1,430)	1:A:46:VAL:HG13	1:A:47:SER:H	2	0.06
(1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD21 7 0.06	(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD21	7	0.06
(1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD22 7 0.06	(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD22	7	0.06
(1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD23 7 0.06	(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD23	7	0.06



 $Continued\ from\ previous\ page...$

(1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD21 8 0.06 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD22 8 0.06 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD21 13 0.06 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD21 13 0.06 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD22 13 0.06 (1,414) 1:A:12:LEU:H 1:A:79:LEU:HD21 20 0.06 (1,414) 1:A:12:LEU:H 1:A:12:LEU:HD22 20 0.06 (1,414) 1:A:12:LEU:H 1:A:12:LEU:HD22 20 0.06 (1,414) 1:A:12:LEU:HD11 1:A:12:LEU:HD22 20 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD11 1:A:12:LEU:HD12 16 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD11 1:A:12:LEU:HD13 16 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD12 1:A:12:LEU:HD13 16 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:12:LEU:HD13 16 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:12:LEU:HD13	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD21 13 0.06 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD21 13 0.06 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD22 13 0.06 (1,414) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD23 3 0.06 (1,414) 1:A:12:LEU:H 1:A:12:LEU:HD21 20 0.06 (1,414) 1:A:12:LEU:H 1:A:12:LEU:HD22 20 0.06 (1,414) 1:A:12:LEU:HD11 1:A:12:LEU:HD23 20 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD11 1:A:12:LEU:HD12 16 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD11 1:A:12:LEU:HD12 16 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD12 1:A:12:LEU:HD13 16 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD12 1:A:12:LEU:HD13 16 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:12:LEU:HD11 16 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:12:LEU:HD11 16 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:12:L	(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD21	8	0.06
(1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD21 13 0.06 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD22 13 0.06 (1,414) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD23 13 0.06 (1,414) 1:A:12:LEU:H 1:A:79:LEU:HD22 20 0.06 (1,414) 1:A:12:LEU:H 1:A:12:LEU:HD22 20 0.06 (1,414) 1:A:12:LEU:HD11 1:A:12:LEU:HD23 20 0.06 (1,414) 1:A:51:LEU:HD11 1:A:12:LEU:HD12 16 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD11 1:A:12:LEU:HD12 16 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD11 1:A:12:LEU:HD12 16 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD12 1:A:12:LEU:HD13 16 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD12 1:A:12:LEU:HD13 16 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:12:LEU:HD13 16 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:12:LEU:HD12 16 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:	(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD22	8	0.06
(1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD22 13 0.06 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD23 13 0.06 (1,414) 1:A:12:LEU:H 1:A:12:LEU:HD21 20 0.06 (1,414) 1:A:12:LEU:H 1:A:12:LEU:HD22 20 0.06 (1,414) 1:A:12:LEU:H 1:A:12:LEU:HD23 20 0.06 (1,414) 1:A:51:LEU:HD11 1:A:12:LEU:HD12 16 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD11 1:A:121:LEU:HD12 16 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD11 1:A:121:LEU:HD13 16 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD12 1:A:121:LEU:HD13 16 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD12 1:A:121:LEU:HD13 16 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:121:LEU:HD12 16 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:121:LEU:HD13 16 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:121:LEU:HD12 16 0.06 (1,413) 1:A:45:LEU:HD13 <	(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD23	8	0.06
(1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD23 13 0.06 (1,414) 1:A:12:LEU:H 1:A:12:LEU:HD21 20 0.06 (1,414) 1:A:12:LEU:H 1:A:12:LEU:HD22 20 0.06 (1,414) 1:A:12:LEU:H 1:A:12:LEU:HD23 20 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD11 1:A:12:LEU:HD11 16 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD11 1:A:12:LEU:HD12 16 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD11 1:A:12:LEU:HD13 16 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD12 1:A:12:LEU:HD13 16 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD12 1:A:12:LEU:HD13 16 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:12:LEU:HD13 16 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:12:LEU:HD12 16 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:12:LEU:HD12 16 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:12:LEU:HD12 16 0.06 (1,414) 1:A:45:LE:H 1:A:4	(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD21	13	0.06
(1,414) 1:A:12:LEU:H 1:A:12:LEU:HD21 20 0.06 (1,414) 1:A:12:LEU:H 1:A:12:LEU:HD22 20 0.06 (1,414) 1:A:12:LEU:H 1:A:12:LEU:HD23 20 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD11 1:A:12:LEU:HD11 16 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD11 1:A:12:LEU:HD12 16 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD12 1:A:12:LEU:HD13 16 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD12 1:A:12:LEU:HD13 16 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD12 1:A:12:LEU:HD13 16 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:12:LEU:HD13 16 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:12:LEU:HD13 16 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:12:LEU:HD12 16 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:12:LEU:HD13 16 0.06 (1,413) 1:A:45:LEU:HD13 1:A:412:LEU:HD13 1:A:00:G 0.06 (1,414) 1:A:45:LEU:HD13	(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD22	13	0.06
(1,414) 1:A:12:LEU:H 1:A:12:LEU:HD22 20 0.06 (1,414) 1:A:12:LEU:HD11 1:A:12:LEU:HD23 20 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD11 1:A:12:LEU:HD11 16 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD11 1:A:12:LEU:HD12 16 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD11 1:A:12:LEU:HD13 16 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD12 1:A:12:LEU:HD11 16 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD12 1:A:12:LEU:HD12 16 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD12 1:A:12:LEU:HD13 16 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:12:LEU:HD13 16 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:12:LEU:HD11 16 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:12:LEU:HD13 16 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:42:LEU:HD13 16 0.06 (1,414) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG21 1 0.06 (1,411) 1:A:45:ILE:H <td< td=""><td>(1,415)</td><td>1:A:79:LEU:H</td><td>1:A:79:LEU:HD23</td><td>13</td><td>0.06</td></td<>	(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD23	13	0.06
(1,414) 1:A:12:LEU:H 1:A:12:LEU:HD12 20 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD11 1:A:121:LEU:HD11 16 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD11 1:A:121:LEU:HD12 16 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD12 1:A:121:LEU:HD13 16 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD12 1:A:121:LEU:HD11 16 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD12 1:A:121:LEU:HD13 16 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD12 1:A:121:LEU:HD13 16 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:121:LEU:HD13 16 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:121:LEU:HD12 16 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:121:LEU:HD12 16 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:121:LEU:HD12 16 0.06 (1,414) 1:A:45:LE:H 1:A:46:VAL:HG21 1 0.06 (1,41) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG23 1 0.06 (1,41) 1:A:45:ILE:H	(1,414)	1:A:12:LEU:H	1:A:12:LEU:HD21	20	0.06
(1,413) 1:A:51:LEU:HD11 1:A:121:LEU:HD11 16 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD11 1:A:121:LEU:HD12 16 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD11 1:A:121:LEU:HD13 16 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD12 1:A:121:LEU:HD11 16 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD12 1:A:121:LEU:HD13 16 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD12 1:A:121:LEU:HD13 16 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:121:LEU:HD11 16 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:121:LEU:HD13 16 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:121:LEU:HD13 16 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:121:LEU:HD13 16 0.06 (1,413) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG21 1 0.06 (1,414) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG22 1 0.06 (1,41) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG23 1 0.06 (1,41) 1:A:45:ILE:H	(1,414)	1:A:12:LEU:H	1:A:12:LEU:HD22	20	0.06
(1,413) 1:A:51:LEU:HD11 1:A:121:LEU:HD12 16 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD11 1:A:121:LEU:HD13 16 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD12 1:A:121:LEU:HD11 16 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD12 1:A:121:LEU:HD13 16 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:121:LEU:HD13 16 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:121:LEU:HD11 16 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:121:LEU:HD12 16 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:121:LEU:HD12 16 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:121:LEU:HD13 16 0.06 (1,414) 1:A:45:LEU:HD13 1:A:121:LEU:HD13 16 0.06 (1,414) 1:A:45:LEU:H 1:A:46:VAL:HG22 1 0.06 (1,414) 1:A:45:LEU:H 1:A:46:VAL:HG23 1 0.06 (1,414) 1:A:45:LEU:H 1:A:46:VAL:HG22 8 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD11	(1,414)	1:A:12:LEU:H	1:A:12:LEU:HD23	20	0.06
(1,413) 1:A:51:LEU:HD11 1:A:121:LEU:HD13 16 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD12 1:A:121:LEU:HD11 16 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD12 1:A:121:LEU:HD12 16 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD12 1:A:121:LEU:HD13 16 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:121:LEU:HD11 16 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:121:LEU:HD12 16 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:121:LEU:HD13 16 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:121:LEU:HD13 16 0.06 (1,414) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG21 1 0.06 (1,414) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG22 1 0.06 (1,414) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG21 8 0.06 (1,414) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG22 8 0.06 (1,414) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG23 8 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD11 1	(1,413)	1:A:51:LEU:HD11	1:A:121:LEU:HD11	16	0.06
(1,413) 1:A:51:LEU:HD12 1:A:121:LEU:HD11 16 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD12 1:A:121:LEU:HD12 16 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD12 1:A:121:LEU:HD13 16 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:121:LEU:HD11 16 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:121:LEU:HD12 16 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:121:LEU:HD13 16 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:121:LEU:HD13 16 0.06 (1,414) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG21 1 0.06 (1,41) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG23 1 0.06 (1,41) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG21 8 0.06 (1,41) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG22 8 0.06 (1,41) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG23 8 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD11 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:13	(1,413)	1:A:51:LEU:HD11	1:A:121:LEU:HD12	16	0.06
(1,413) 1:A:51:LEU:HD12 1:A:121:LEU:HD13 16 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD12 1:A:121:LEU:HD13 16 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:121:LEU:HD11 16 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:121:LEU:HD12 16 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:121:LEU:HD13 16 0.06 (1,414) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG21 1 0.06 (1,41) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG22 1 0.06 (1,41) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG23 1 0.06 (1,41) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG21 8 0.06 (1,41) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG22 8 0.06 (1,41) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG23 8 0.06 (1,40) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD11 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD13 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD	(1,413)	1:A:51:LEU:HD11	1:A:121:LEU:HD13	16	0.06
(1,413) 1:A:51:LEU:HD12 1:A:121:LEU:HD13 16 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:121:LEU:HD11 16 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:121:LEU:HD13 16 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:006 0.06 0.06 (1,41) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG21 1 0.06 (1,41) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG22 1 0.06 (1,41) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG23 1 0.06 (1,41) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG21 8 0.06 (1,41) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG22 8 0.06 (1,41) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG23 8 0.06 (1,41) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG23 8 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD11 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD13 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD13	(1,413)	1:A:51:LEU:HD12	1:A:121:LEU:HD11	16	0.06
(1,413) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:121:LEU:HD11 16 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:121:LEU:HD13 16 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD13 16 0.06 (1,41) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG21 1 0.06 (1,41) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG22 1 0.06 (1,41) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG23 1 0.06 (1,41) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG21 8 0.06 (1,41) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG22 8 0.06 (1,41) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG23 8 0.06 (1,41) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG23 8 0.06 (1,40) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG23 8 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD11 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD13 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD13 1 0.06 <td>(1,413)</td> <td>1:A:51:LEU:HD12</td> <td>1:A:121:LEU:HD12</td> <td>16</td> <td>0.06</td>	(1,413)	1:A:51:LEU:HD12	1:A:121:LEU:HD12	16	0.06
(1,413) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:121:LEU:HD13 16 0.06 (1,413) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:121:LEU:HD13 16 0.06 (1,41) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG21 1 0.06 (1,41) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG22 1 0.06 (1,41) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG23 1 0.06 (1,41) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG21 8 0.06 (1,41) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG22 8 0.06 (1,41) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG23 8 0.06 (1,41) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG23 8 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD11 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD12 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD13 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD13 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD13	(1,413)	1:A:51:LEU:HD12	1:A:121:LEU:HD13	16	0.06
(1,413) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:121:LEU:HD13 16 0.06 (1,41) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG21 1 0.06 (1,41) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG22 1 0.06 (1,41) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG23 1 0.06 (1,41) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG21 8 0.06 (1,41) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG22 8 0.06 (1,41) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG23 8 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD11 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD12 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD13 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD12 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD13 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD13 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD13 </td <td>(1,413)</td> <td>1:A:51:LEU:HD13</td> <td>1:A:121:LEU:HD11</td> <td>16</td> <td>0.06</td>	(1,413)	1:A:51:LEU:HD13	1:A:121:LEU:HD11	16	0.06
(1,41) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG21 1 0.06 (1,41) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG22 1 0.06 (1,41) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG23 1 0.06 (1,41) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG21 8 0.06 (1,41) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG22 8 0.06 (1,41) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG23 8 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD11 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD12 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD11 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD12 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD13 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD11 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD13 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:H	(1,413)	1:A:51:LEU:HD13	1:A:121:LEU:HD12	16	0.06
(1,41) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG22 1 0.06 (1,41) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG23 1 0.06 (1,41) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG21 8 0.06 (1,41) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG22 8 0.06 (1,41) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG23 8 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD11 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD12 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD13 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD13 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD13 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD11 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD13 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:H 15 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:H <td>(1,413)</td> <td>1:A:51:LEU:HD13</td> <td>1:A:121:LEU:HD13</td> <td>16</td> <td>0.06</td>	(1,413)	1:A:51:LEU:HD13	1:A:121:LEU:HD13	16	0.06
(1,41) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG23 1 0.06 (1,41) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG21 8 0.06 (1,41) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG22 8 0.06 (1,41) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG23 8 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:438:LEU:HD11 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD12 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD13 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD12 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD13 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:L	(1,41)	1:A:45:ILE:H	1:A:46:VAL:HG21	1	0.06
(1,41) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG21 8 0.06 (1,41) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG22 8 0.06 (1,41) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG23 8 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD11 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD12 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD11 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD12 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD13 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD13 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD11 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD12 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD13 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:H 15 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:12	(1,41)	1:A:45:ILE:H	1:A:46:VAL:HG22	1	0.06
(1,41) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG22 8 0.06 (1,41) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG23 8 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD11 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD12 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD13 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD12 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD13 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD11 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD12 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD13 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:H 15 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:124:VAL:H 15 0.06 (1,393) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:H 15 0.06 (1,393) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:4	(1,41)	1:A:45:ILE:H	1:A:46:VAL:HG23	1	0.06
(1,41) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG23 8 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD11 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD12 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD13 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD11 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD13 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD11 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD12 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD12 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD13 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:H 15 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:124:VAL:H 15 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:124:VAL:H 15 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12	(1,41)	1:A:45:ILE:H	1:A:46:VAL:HG21	8	0.06
(1,408) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD11 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD12 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD13 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD11 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD13 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD11 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD12 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD12 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD13 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:H 15 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:H 15 0.06 (1,49) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:124:VAL:H 15 0.06 (1,4) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:H 15 0.06 (1,393) 1:A:12:LEU:HD21	(1,41)	1:A:45:ILE:H	1:A:46:VAL:HG22	8	0.06
(1,408) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD12 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD13 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD11 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD12 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD11 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD12 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD12 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD13 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:H 15 0.06 (1,4) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:124:VAL:H 15 0.06 (1,4) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:46:VAL:HG11 10 0.06 (1,393) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:46:VAL:HG12 10 0.06 (1,393) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG11 10 0.06 (1,393) 1:A:12:LEU:HD22 <	(1,41)	1:A:45:ILE:H	1:A:46:VAL:HG23	8	0.06
(1,408) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD13 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD11 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD12 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD13 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD12 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD12 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:H 15 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:124:VAL:H 15 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:H 15 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:4124:VAL:H 15 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:426:VAL:H 15 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:46:VAL:HG11 10 0.06	(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD11	1	0.06
(1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD11 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD12 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD13 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD12 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD12 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD13 1 0.06 (1,4) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:124:VAL:H 15 0.06 (1,4) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:124:VAL:H 15 0.06 (1,4) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:H 15 0.06 (1,393) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:46:VAL:HG11 10 0.06 (1,393) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:46:VAL:HG13 10 0.06 (1,393) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG11 10 0.06 (1,393) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG11 10 0.06	(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD12	1	0.06
(1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD12 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD13 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD11 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD12 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD13 1 0.06 (1,4) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:124:VAL:H 15 0.06 (1,4) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:124:VAL:H 15 0.06 (1,4) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:H 15 0.06 (1,393) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:46:VAL:HG11 10 0.06 (1,393) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:46:VAL:HG12 10 0.06 (1,393) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:46:VAL:HG13 10 0.06 (1,393) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG11 10 0.06	(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD13	1	0.06
(1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD13 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD11 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD12 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD13 1 0.06 (1,4) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:124:VAL:H 15 0.06 (1,4) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:124:VAL:H 15 0.06 (1,4) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:H 15 0.06 (1,393) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:46:VAL:HG11 10 0.06 (1,393) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:46:VAL:HG12 10 0.06 (1,393) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:46:VAL:HG13 10 0.06 (1,393) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG11 10 0.06	(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD11	1	0.06
(1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD13 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD11 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD12 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD13 1 0.06 (1,4) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:124:VAL:H 15 0.06 (1,4) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:124:VAL:H 15 0.06 (1,4) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:H 15 0.06 (1,393) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:46:VAL:HG11 10 0.06 (1,393) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:46:VAL:HG12 10 0.06 (1,393) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:46:VAL:HG13 10 0.06 (1,393) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG11 10 0.06	(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD12	1	0.06
(1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD11 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD12 1 0.06 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD13 1 0.06 (1,4) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:124:VAL:H 15 0.06 (1,4) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:124:VAL:H 15 0.06 (1,4) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:H 15 0.06 (1,393) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:46:VAL:HG11 10 0.06 (1,393) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:46:VAL:HG12 10 0.06 (1,393) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:46:VAL:HG13 10 0.06 (1,393) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG11 10 0.06	(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD13	1	0.06
(1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD13 1 0.06 (1,4) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:124:VAL:H 15 0.06 (1,4) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:124:VAL:H 15 0.06 (1,4) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:H 15 0.06 (1,393) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:46:VAL:HG11 10 0.06 (1,393) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:46:VAL:HG12 10 0.06 (1,393) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:46:VAL:HG13 10 0.06 (1,393) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG11 10 0.06		1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD11	1	0.06
(1,4) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:124:VAL:H 15 0.06 (1,4) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:124:VAL:H 15 0.06 (1,4) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:H 15 0.06 (1,393) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:46:VAL:HG11 10 0.06 (1,393) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:46:VAL:HG12 10 0.06 (1,393) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:46:VAL:HG13 10 0.06 (1,393) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG11 10 0.06	(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD12	1	0.06
(1,4) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:124:VAL:H 15 0.06 (1,4) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:124:VAL:H 15 0.06 (1,4) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:H 15 0.06 (1,393) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:46:VAL:HG11 10 0.06 (1,393) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:46:VAL:HG12 10 0.06 (1,393) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:46:VAL:HG13 10 0.06 (1,393) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG11 10 0.06		1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD13	1	0.06
(1,4) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:124:VAL:H 15 0.06 (1,4) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:H 15 0.06 (1,393) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:46:VAL:HG11 10 0.06 (1,393) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:46:VAL:HG12 10 0.06 (1,393) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:46:VAL:HG13 10 0.06 (1,393) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG11 10 0.06		1:A:41:LEU:HD11	1:A:124:VAL:H	15	0.06
(1,4) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:H 15 0.06 (1,393) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:46:VAL:HG11 10 0.06 (1,393) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:46:VAL:HG12 10 0.06 (1,393) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:46:VAL:HG13 10 0.06 (1,393) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG11 10 0.06		1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:H	15	0.06
(1,393) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:46:VAL:HG11 10 0.06 (1,393) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:46:VAL:HG12 10 0.06 (1,393) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:46:VAL:HG13 10 0.06 (1,393) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG11 10 0.06		1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:H	15	0.06
(1,393) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:46:VAL:HG12 10 0.06 (1,393) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:46:VAL:HG13 10 0.06 (1,393) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG11 10 0.06	_ ` /	1:A:12:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HG11	10	0.06
(1,393) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:46:VAL:HG13 10 0.06 (1,393) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG11 10 0.06		1:A:12:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HG12	10	0.06
(1,393) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG11 10 0.06		1:A:12:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HG13	10	0.06
		1:A:12:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HG11	10	0.06
	(1,393)	1:A:12:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HG12	10	0.06
(1,393) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG13 10 0.06		1:A:12:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HG13	10	0.06



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,393)	1:A:12:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HG11	10	0.06
(1,393)	1:A:12:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HG12	10	0.06
(1,393)	1:A:12:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HG13	10	0.06
(1,384)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:99:LEU:HD21	8	0.06
(1,384)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:99:LEU:HD22	8	0.06
(1,384)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:99:LEU:HD23	8	0.06
(1,384)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:99:LEU:HD21	8	0.06
(1,384)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:99:LEU:HD22	8	0.06
(1,384)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:99:LEU:HD23	8	0.06
(1,384)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:99:LEU:HD21	8	0.06
(1,384)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:99:LEU:HD22	8	0.06
(1,384)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:99:LEU:HD23	8	0.06
(1,384)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:99:LEU:HD21	12	0.06
(1,384)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:99:LEU:HD22	12	0.06
(1,384)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:99:LEU:HD23	12	0.06
(1,384)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:99:LEU:HD21	12	0.06
(1,384)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:99:LEU:HD22	12	0.06
(1,384)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:99:LEU:HD23	12	0.06
(1,384)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:99:LEU:HD21	12	0.06
(1,384)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:99:LEU:HD22	12	0.06
(1,384)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:99:LEU:HD23	12	0.06
(1,375)	1:A:131:GLU:H	1:A:133:GLY:H	4	0.06
(1,375)	1:A:131:GLU:H	1:A:133:GLY:H	11	0.06
(1,368)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:H	4	0.06
(1,365)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:H	13	0.06
(1,357)	1:A:119:ALA:H	1:A:121:LEU:H	18	0.06
(1,355)	1:A:67:PHE:H	1:A:114:TYR:H	12	0.06
(1,353)	1:A:104:ASN:H	1:A:106:GLY:H	4	0.06
(1,351)	1:A:108:GLY:H	1:A:112:LEU:H	16	0.06
(1,351)	1:A:108:GLY:H	1:A:112:LEU:H	20	0.06
(1,345)	1:A:103:PHE:H	1:A:105:ASP:H	17	0.06
(1,345)	1:A:103:PHE:H	1:A:105:ASP:H	18	0.06
(1,341)	1:A:99:LEU:H	1:A:100:GLY:H	12	0.06
(1,339)	1:A:92:SER:H	1:A:98:HIS:H	9	0.06
(1,336)	1:A:90:VAL:H	1:A:101:HIS:H	17	0.06
(1,331)	1:A:80:ASP:H	1:A:88:THR:H	16	0.06
(1,329)	1:A:79:LEU:H	1:A:89:GLU:H	9	0.06
(1,32)	1:A:103:PHE:H	1:A:112:LEU:HD21	6	0.06
(1,32)	1:A:103:PHE:H	1:A:112:LEU:HD22	6	0.06
(1,32)	1:A:103:PHE:H	1:A:112:LEU:HD23	6	0.06
(1,317)	1:A:46:VAL:H	1:A:49:LYS:H	7	0.06
(1,312)	1:A:41:LEU:H	1:A:124:VAL:H	20	0.06



 $Continued\ from\ previous\ page...$

(1,308) 1:A:30:GLN:H 1:A:34:TRP:HE1 1 0.06 (1,308) 1:A:30:GLN:H 1:A:34:TRP:HE1 15 0.06 (1,305) 1:A:25:THR:H 1:A:26:GLU:H 1 0.06 (1,303) 1:A:18:GLU:H 1:A:20:THR:H 5 0.06 (1,299) 1:A:15:MET:H 1:A:18:GLU:H 5 0.06 (1,299) 1:A:14:ARG:H 1:A:17:TYR:H 15 0.06 (1,298) 1:A:14:ARG:H 1:A:17:TYR:H 15 0.06 (1,298) 1:A:14:ARG:H 1:A:17:TYR:H 18 0.06 (1,288) 1:A:14:ARG:H 1:A:17:TYR:H 18 0.06 (1,288) 1:A:14:ARG:H 1:A:17:TYR:H 18 0.06 (1,281) 1:A:31:GLN:H 1:A:21:GLN:H 15 0.06 (1,281) 1:A:110:ASN:HD22 1:A:41:LEU:H 1 0.06 (1,267) 1:A:21:GLN:H 1:A:22:GLN:H 17 0.06 (1,267) 1:A:21:EU:HD21 1:A:29:LEU:HD21 18 0.06	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,305) 1:A:25:THR:H 1:A:26:GLU:H 1 0.06 (1,303) 1:A:18:GLU:H 1:A:20:THR:H 5 0.06 (1,303) 1:A:18:GLU:H 1:A:20:THR:H 13 0.06 (1,299) 1:A:15:MET:H 1:A:18:GLU:H 8 0.06 (1,298) 1:A:14:ARG:H 1:A:17:TYR:H 15 0.06 (1,298) 1:A:14:ARG:H 1:A:17:TYR:H 15 0.06 (1,288) 1:A:14:ARG:H 1:A:17:TYR:H 18 0.06 (1,288) 1:A:44:ARG:H 1:A:17:TYR:H 15 0.06 (1,281) 1:A:10:ASN:HD22 1:A:21:TYPR:H 15 0.06 (1,281) 1:A:21:GLN:H 1:A:24:GLY:H 1 0.06 (1,267) 1:A:21:GLN:H 1:A:24:GLY:H 13 0.06 (1,267) 1:A:21:CLN:H 1:A:24:GLY:H 13 0.06 (1,267) 1:A:19:LEU:HD21 1:A:29:LEU:HD21 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:99:LEU:HD22 18 0.06 <td>(1,308)</td> <td>1:A:30:GLN:H</td> <td>1:A:34:TRP:HE1</td> <td>1</td> <td>0.06</td>	(1,308)	1:A:30:GLN:H	1:A:34:TRP:HE1	1	0.06
(1,303) 1:A:18:GLU:H 1:A:20:THR:H 5 0.06 (1,303) 1:A:18:GLU:H 1:A:20:THR:H 13 0.06 (1,299) 1:A:15:MET:H 1:A:18:GLU:H 5 0.06 (1,299) 1:A:15:MET:H 1:A:18:GLU:H 8 0.06 (1,299) 1:A:15:MET:H 1:A:18:GLU:H 8 0.06 (1,298) 1:A:14:ARG:H 1:A:17:TYR:H 15 0.06 (1,298) 1:A:14:ARG:H 1:A:17:TYR:H 15 0.06 (1,285) 1:A:44:ASP:H 1:A:16:GVAL:H 15 0.06 (1,284) 1:A:6:GU:H 1:A:8:LYS:H 9 0.06 (1,284) 1:A:10:ASN:HD22 1:A:112:LEU:H 1 0.06 (1,281) 1:A:110:ASN:HD22 1:A:112:LEU:H 1 0.06 (1,267) 1:A:21:GLN:H 1:A:24:GLY:H 13 0.06 (1,267) 1:A:21:GLN:H 1:A:24:GLY:H 17 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:99:LEU:HD21 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:99:LEU:HD22 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:99:LEU:HD22 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:99:LEU:HD23 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:99:LEU:HD24 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:99:LEU:HD24 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:99:LEU:HD23 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:99:LEU:HD24 18 0.06 (1,261) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD14 18 0.06 (1,262) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:99:LEU:HD14 18 0.06 (1,263) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:99:LEU:HD14 18 0.06 (1,264) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD14 18 0.06 (1,265) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:99:LEU:HD14 18 0.06 (1,265) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:99:LEU:HD14 18 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:99:LEU:HD14 18 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:99:LEU:HD14 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:99:LEU:HD11 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:99:LEU:HD14 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:99:LEU:HD14 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:99:LEU:HD14 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:99:LEU:HD14 17 0.06 (1,252) 1:A:4:	(1,308)	1:A:30:GLN:H	1:A:34:TRP:HE1	15	0.06
(1,303) 1:A:18:GLU:H 1:A:20:THR:H 13 0.06 (1,299) 1:A:15:MET:H 1:A:18:GLU:H 5 0.06 (1,299) 1:A:15:MET:H 1:A:18:GLU:H 8 0.06 (1,298) 1:A:14:ARG:H 1:A:17:TYR:H 15 0.06 (1,298) 1:A:14:ARG:H 1:A:17:TYR:H 15 0.06 (1,298) 1:A:14:ARG:H 1:A:17:TYR:H 15 0.06 (1,285) 1:A:14:ARG:H 1:A:17:TYR:H 18 0.06 (1,285) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:H 15 0.06 (1,284) 1:A:6:GLU:H 1:A:8:LYS:H 9 0.06 (1,281) 1:A:110:ASN:HD22 1:A:112:LEU:H 1 0.06 (1,267) 1:A:21:GLN:H 1:A:24:GLY:H 13 0.06 (1,267) 1:A:21:GLN:H 1:A:24:GLY:H 17 0.06 (1,266) 1:A:19:VAL:H 1:A:29:LEU:HD21 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:99:LEU:HD21 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:99:LEU:HD22 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:99:LEU:HD22 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:99:LEU:HD21 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:99:LEU:HD21 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:99:LEU:HD21 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:99:LEU:HD22 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:99:LEU:HD22 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:99:LEU:HD21 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:99:LEU:HD22 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:99:LEU:HD22 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:99:LEU:HD21 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:99:LEU:HD23 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:99:LEU:HD23 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:99:LEU:HD23 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:99:LEU:HD11 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:99:LEU:HD11 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:99:LEU:HD11 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:99:LEU:HD11 17 0.06 (1,252) 1:	(1,305)	1:A:25:THR:H	1:A:26:GLU:H	1	0.06
(1,299) 1:A:15:MET:H 1:A:18:GLU:H 5 0.06 (1,299) 1:A:15:MET:H 1:A:18:GLU:H 8 0.06 (1,298) 1:A:14:ARG:H 1:A:17:TYR:H 15 0.06 (1,298) 1:A:14:ARG:H 1:A:17:TYR:H 18 0.06 (1,285) 1:A:46:ABP:H 1:A:46:VAL:H 15 0.06 (1,284) 1:A:6:GLU:H 1:A:46:VAL:H 15 0.06 (1,281) 1:A:110:ASN:HD22 1:A:112:LEU:H 1 0.06 (1,267) 1:A:21:GLN:H 1:A:24:GLY:H 13 0.06 (1,267) 1:A:21:GLN:H 1:A:24:GLY:H 17 0.06 (1,266) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:29:LEU:HD21 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:99:LEU:HD22 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:99:LEU:HD22 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:99:LEU:HD23 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:99:LEU:HD21 18	(1,303)	1:A:18:GLU:H	1:A:20:THR:H	5	0.06
(1,299) 1:A:15:MET:H 1:A:17:TYR:H 15 0.06 (1,298) 1:A:14:ARG:H 1:A:17:TYR:H 15 0.06 (1,298) 1:A:14:ARG:H 1:A:17:TYR:H 18 0.06 (1,285) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:H 15 0.06 (1,284) 1:A:6:GLU:H 1:A:8:LYS:H 9 0.06 (1,281) 1:A:10:ASS:HD22 1:A:112:LEU:H 1 0.06 (1,267) 1:A:21:GLN:H 1:A:24:GLY:H 13 0.06 (1,267) 1:A:21:GLN:H 1:A:21:GLN:H 17 0.06 (1,266) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:99:LEU:HD21 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:99:LEU:HD22 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:99:LEU:HD23 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:99:LEU:HD23 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:99:LEU:HD21 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:99:LEU:HD21 18 </td <td>(1,303)</td> <td>1:A:18:GLU:H</td> <td>1:A:20:THR:H</td> <td>13</td> <td>0.06</td>	(1,303)	1:A:18:GLU:H	1:A:20:THR:H	13	0.06
(1,298) 1:A:14:ARG:H 1:A:17:TYR:H 15 0.06 (1,298) 1:A:14:ARG:H 1:A:17:TYR:H 18 0.06 (1,285) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:H 15 0.06 (1,284) 1:A:6:GLU:H 1:A:46:VAL:H 15 0.06 (1,281) 1:A:110:ASN:HD22 1:A:112:LEU:H 1 0.06 (1,267) 1:A:21:GLN:H 1:A:24:GLY:H 13 0.06 (1,266) 1:A:19:VAL:H 1:A:24:GLY:H 17 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:99:LEU:HD21 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:99:LEU:HD22 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:99:LEU:HD23 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:99:LEU:HD21 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:99:LEU:HD23 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:99:LEU:HD23 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:99:LEU:HD11	(1,299)	1:A:15:MET:H	1:A:18:GLU:H	5	0.06
(1,298) 1:A:14:ARG:H 1:A:17:TYR:H 18 0.06 (1,285) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:H 15 0.06 (1,284) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:H 15 0.06 (1,284) 1:A:44:ASP:H 1:A:48:LYS:H 9 0.06 (1,281) 1:A:110:ASN:HD22 1:A:112:LEU:H 1 0.06 (1,267) 1:A:21:GLN:H 1:A:24:GLY:H 17 0.06 (1,267) 1:A:21:GLN:H 1:A:21:GLN:H 12 0.06 (1,266) 1:A:19:VAL:H 1:A:21:GLN:H 12 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:29:LEU:HD21 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:99:LEU:HD23 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:99:LEU:HD21 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:99:LEU:HD22 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:99:LEU:HD21 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:99:LEU:HD12 1	(1,299)	1:A:15:MET:H	1:A:18:GLU:H	8	0.06
(1,285) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:H 15 0.06 (1,284) 1:A:6:GLU:H 1:A:8:LYS:H 9 0.06 (1,281) 1:A:110:ASN:HD22 1:A:112:LEU:H 1 0.06 (1,267) 1:A:21:GLN:H 1:A:24:GLY:H 13 0.06 (1,267) 1:A:21:GLN:H 1:A:24:GLY:H 17 0.06 (1,266) 1:A:31:VAL:H 1:A:21:GLN:H 12 0.06 (1,266) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:99:LEU:HD21 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:99:LEU:HD22 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:99:LEU:HD23 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:99:LEU:HD22 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:99:LEU:HD23 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:99:LEU:HD23 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:99:LEU:HD23 18 0.06 (1,260) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD13	(1,298)	1:A:14:ARG:H	1:A:17:TYR:H	15	0.06
(1,284) 1:A:6:GLU:H 1:A:8:LYS:H 9 0.06 (1,281) 1:A:110:ASN:HD22 1:A:112:LEU:H 1 0.06 (1,267) 1:A:21:GLN:H 1:A:24:GLY:H 13 0.06 (1,267) 1:A:21:GLN:H 1:A:24:GLY:H 17 0.06 (1,266) 1:A:19:VAL:HD21 1:A:29:LEU:HD21 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:99:LEU:HD21 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:99:LEU:HD22 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:99:LEU:HD23 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:99:LEU:HD21 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:99:LEU:HD22 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:99:LEU:HD23 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:99:LEU:HD21 18 0.06 (1,260) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD12 18 0.06 (1,260) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD1	(1,298)	1:A:14:ARG:H	1:A:17:TYR:H	18	0.06
(1,281) 1:A:110:ASN:HD22 1:A:112:LEU:H 1 0.06 (1,267) 1:A:21:GLN:H 1:A:24:GLY:H 13 0.06 (1,267) 1:A:21:GLN:H 1:A:24:GLY:H 17 0.06 (1,266) 1:A:19:VAL:H 1:A:21:GLN:H 12 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:99:LEU:HD21 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:99:LEU:HD22 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:99:LEU:HD23 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:99:LEU:HD21 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:99:LEU:HD21 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:99:LEU:HD23 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:99:LEU:HD23 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:99:LEU:HD21 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:99:LEU:HD23 18 0.06 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:	(1,285)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:H	15	0.06
(1,267) 1:A:21:GLN:H 1:A:24:GLY:H 13 0.06 (1,267) 1:A:21:GLN:H 1:A:24:GLY:H 17 0.06 (1,266) 1:A:19:VAL:H 1:A:29:LEU:HD21 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:99:LEU:HD22 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:99:LEU:HD23 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:99:LEU:HD23 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:99:LEU:HD21 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:99:LEU:HD23 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:99:LEU:HD23 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:99:LEU:HD23 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:99:LEU:HD21 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:99:LEU:HD23 18 0.06 (1,260) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD12 18 0.06 (1,260) 1:A:128:LYS:H 1:A:129	(1,284)	1:A:6:GLU:H	1:A:8:LYS:H	9	0.06
(1,267) 1:A:21:GLN:H 1:A:24:GLY:H 17 0.06 (1,266) 1:A:19:VAL:H 1:A:29:LEU:HD21 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:99:LEU:HD22 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:99:LEU:HD22 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:99:LEU:HD23 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:99:LEU:HD21 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:99:LEU:HD22 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:99:LEU:HD23 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:99:LEU:HD21 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:99:LEU:HD22 18 0.06 (1,260) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 18 0.06 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD13 18 0.06 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD11 18 0.06 (1,25) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:	(1,281)	1:A:110:ASN:HD22	1:A:112:LEU:H	1	0.06
(1,266) 1:A:19:VAL:H 1:A:99:LEU:HD21 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:99:LEU:HD21 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:99:LEU:HD22 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:99:LEU:HD23 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:99:LEU:HD21 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:99:LEU:HD22 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:99:LEU:HD23 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:99:LEU:HD21 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:99:LEU:HD22 18 0.06 (1,260) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 18 0.06 (1,260) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD13 18 0.06 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD11 18 0.06 (1,25) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:99:LEU:HD12 18 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG21 <	(1,267)	1:A:21:GLN:H	1:A:24:GLY:H	13	0.06
(1,260) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:99:LEU:HD21 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:99:LEU:HD22 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:99:LEU:HD23 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:99:LEU:HD21 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:99:LEU:HD23 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:99:LEU:HD21 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:99:LEU:HD21 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:99:LEU:HD22 18 0.06 (1,260) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 18 0.06 (1,260) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD13 18 0.06 (1,261) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD11 18 0.06 (1,262) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD11 18 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:99:LEU:HD11 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG22	(1,267)	1:A:21:GLN:H	1:A:24:GLY:H	17	0.06
(1,260) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:99:LEU:HD22 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:99:LEU:HD23 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:99:LEU:HD21 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:99:LEU:HD22 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:99:LEU:HD23 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:99:LEU:HD22 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:99:LEU:HD23 18 0.06 (1,260) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 18 0.06 (1,260) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD13 18 0.06 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD11 18 0.06 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD12 18 0.06 (1,25) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:99:LEU:HD13 18 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:99:LEU:HD13 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG22		1:A:19:VAL:H	1:A:21:GLN:H	12	0.06
(1,260) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:99:LEU:HD21 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:99:LEU:HD21 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:99:LEU:HD22 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:99:LEU:HD23 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:99:LEU:HD21 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:99:LEU:HD22 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:99:LEU:HD23 18 0.06 (1,260) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD13 18 0.06 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD11 18 0.06 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD12 18 0.06 (1,250) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:99:LEU:HD13 18 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:99:LEU:HD13 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:99:LEU:HD11 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG22	(1,260)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:99:LEU:HD21	18	0.06
(1,260) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:99:LEU:HD21 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:99:LEU:HD22 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:99:LEU:HD23 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:99:LEU:HD21 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:99:LEU:HD22 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:99:LEU:HD23 18 0.06 (1,260) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD13 18 0.06 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD11 18 0.06 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD12 18 0.06 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD13 18 0.06 (1,26) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:99:LEU:HD13 18 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:99:LEU:HD12 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:99:LEU:HD13 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG23 <	(1,260)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:99:LEU:HD22	18	0.06
(1,260) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:99:LEU:HD22 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:99:LEU:HD23 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:99:LEU:HD21 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:99:LEU:HD22 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:99:LEU:HD23 18 0.06 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD11 18 0.06 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD12 18 0.06 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD12 18 0.06 (1,26) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:99:LEU:HD13 18 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:99:LEU:HD11 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:99:LEU:HD13 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:99:LEU:HD11 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:99:LEU:HD13 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG23	(1,260)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:99:LEU:HD23	18	0.06
(1,260) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:99:LEU:HD23 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:99:LEU:HD21 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:99:LEU:HD22 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:99:LEU:HD23 18 0.06 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD11 18 0.06 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD12 18 0.06 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD12 18 0.06 (1,26) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:99:LEU:HD13 18 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:99:LEU:HD12 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:99:LEU:HD13 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:99:LEU:HD11 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:99:LEU:HD13 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:99:LEU:HD13 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG23	(1,260)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:99:LEU:HD21	18	0.06
(1,260) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:99:LEU:HD21 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:99:LEU:HD23 18 0.06 (1,260) 1:A:128:LYS:H 1:A:99:LEU:HD13 18 0.06 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD11 18 0.06 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD12 18 0.06 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD13 18 0.06 (1,26) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:99:LEU:HD13 18 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:99:LEU:HD11 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:99:LEU:HD13 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:99:LEU:HD11 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:99:LEU:HD13 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:99:LEU:HD11 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:99:LEU:HD12 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG23 <t< td=""><td>(1,260)</td><td>1:A:51:LEU:HD22</td><td>1:A:99:LEU:HD22</td><td>18</td><td>0.06</td></t<>	(1,260)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:99:LEU:HD22	18	0.06
(1,260) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:99:LEU:HD23 18 0.06 (1,260) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:99:LEU:HD23 18 0.06 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD11 18 0.06 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD12 18 0.06 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD13 18 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:99:LEU:HD11 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:99:LEU:HD12 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:99:LEU:HD13 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:99:LEU:HD12 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:99:LEU:HD13 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:99:LEU:HD11 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:99:LEU:HD11 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:99:LEU:HD13 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG23	(1,260)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:99:LEU:HD23	18	0.06
(1,260) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:99:LEU:HD23 18 0.06 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD11 18 0.06 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD12 18 0.06 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD13 18 0.06 (1,26) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:99:LEU:HD11 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:99:LEU:HD12 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:99:LEU:HD13 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:99:LEU:HD12 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:99:LEU:HD13 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:99:LEU:HD11 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:99:LEU:HD12 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:99:LEU:HD13 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:99:LEU:HD13 17 0.06 (1,24) 1:A:129:LEU:HD11	(1,260)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:99:LEU:HD21	18	0.06
(1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD11 18 0.06 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD12 18 0.06 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD13 18 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:99:LEU:HD11 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:99:LEU:HD12 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:99:LEU:HD13 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:99:LEU:HD11 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:99:LEU:HD13 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:99:LEU:HD11 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:99:LEU:HD12 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:99:LEU:HD13 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:99:LEU:HD13 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:99:LEU:HD13 17 0.06 (1,24) 1:A:75:VAL:HG23	(1,260)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:99:LEU:HD22	18	0.06
(1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD12 18 0.06 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD13 18 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:99:LEU:HD11 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:99:LEU:HD12 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:99:LEU:HD13 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:99:LEU:HD11 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:99:LEU:HD13 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:99:LEU:HD11 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:99:LEU:HD12 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:99:LEU:HD12 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:99:LEU:HD13 17 0.06 (1,24) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:134:TYR:H 5 0.06 (1,24) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:134:TYR:H 5 0.06 (1,24) 1:A:43:VAL:HG11	(1,260)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:99:LEU:HD23	18	0.06
(1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD13 18 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:99:LEU:HD11 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:99:LEU:HD12 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:99:LEU:HD13 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:99:LEU:HD11 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:99:LEU:HD12 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:99:LEU:HD13 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:99:LEU:HD11 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:99:LEU:HD12 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:99:LEU:HD13 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:99:LEU:HD13 17 0.06 (1,24) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:134:TYR:H 5 0.06 (1,24) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:134:TYR:H 5 0.06 (1,24) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD11 5 0.06 (1,225) 1:A:43:VAL:HG1	(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD11	18	0.06
(1,252) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:99:LEU:HD11 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:99:LEU:HD12 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:99:LEU:HD13 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:99:LEU:HD11 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:99:LEU:HD12 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:99:LEU:HD13 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:99:LEU:HD11 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:99:LEU:HD12 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:99:LEU:HD13 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:99:LEU:HD13 17 0.06 (1,24) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:134:TYR:H 5 0.06 (1,24) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:134:TYR:H 5 0.06 (1,24) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD11 5 0.06 (1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD12 5 0.06	(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD12	18	0.06
(1,252) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:99:LEU:HD12 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:99:LEU:HD13 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:99:LEU:HD11 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:99:LEU:HD12 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:99:LEU:HD13 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:99:LEU:HD11 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:99:LEU:HD12 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:99:LEU:HD13 17 0.06 (1,24) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:134:TYR:H 5 0.06 (1,24) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:134:TYR:H 5 0.06 (1,24) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:134:TYR:H 5 0.06 (1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD11 5 0.06 (1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD12 5 0.06	(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD13	18	0.06
(1,252) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:99:LEU:HD12 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:99:LEU:HD13 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:99:LEU:HD11 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:99:LEU:HD12 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:99:LEU:HD13 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:99:LEU:HD11 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:99:LEU:HD12 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:99:LEU:HD13 17 0.06 (1,24) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:134:TYR:H 5 0.06 (1,24) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:134:TYR:H 5 0.06 (1,24) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:134:TYR:H 5 0.06 (1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD11 5 0.06 (1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD12 5 0.06	(1,252)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:99:LEU:HD11	17	0.06
(1,252) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:99:LEU:HD13 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:99:LEU:HD11 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:99:LEU:HD12 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:99:LEU:HD13 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:99:LEU:HD11 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:99:LEU:HD12 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:99:LEU:HD13 17 0.06 (1,24) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:134:TYR:H 5 0.06 (1,24) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:134:TYR:H 5 0.06 (1,24) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:134:TYR:H 5 0.06 (1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD11 5 0.06 (1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD12 5 0.06	(1,252)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:99:LEU:HD12	17	0.06
(1,252) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:99:LEU:HD12 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:99:LEU:HD13 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:99:LEU:HD11 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:99:LEU:HD12 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:99:LEU:HD13 17 0.06 (1,24) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:134:TYR:H 5 0.06 (1,24) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:134:TYR:H 5 0.06 (1,24) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:134:TYR:H 5 0.06 (1,24) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD11 5 0.06 (1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD12 5 0.06	(1,252)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:99:LEU:HD13	17	0.06
(1,252) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:99:LEU:HD13 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:99:LEU:HD11 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:99:LEU:HD12 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:99:LEU:HD13 17 0.06 (1,24) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:134:TYR:H 5 0.06 (1,24) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:134:TYR:H 5 0.06 (1,24) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:134:TYR:H 5 0.06 (1,24) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD11 5 0.06 (1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD12 5 0.06	(1,252)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:99:LEU:HD11	17	0.06
(1,252) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:99:LEU:HD11 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:99:LEU:HD12 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:99:LEU:HD13 17 0.06 (1,24) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:134:TYR:H 5 0.06 (1,24) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:134:TYR:H 5 0.06 (1,24) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:134:TYR:H 5 0.06 (1,24) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD11 5 0.06 (1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD12 5 0.06	(1,252)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:99:LEU:HD12	17	0.06
(1,252) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:99:LEU:HD11 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:99:LEU:HD12 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:99:LEU:HD13 17 0.06 (1,24) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:134:TYR:H 5 0.06 (1,24) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:134:TYR:H 5 0.06 (1,24) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:134:TYR:H 5 0.06 (1,24) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD11 5 0.06 (1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD12 5 0.06		1:A:75:VAL:HG22	1:A:99:LEU:HD13	17	0.06
(1,252) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:99:LEU:HD12 17 0.06 (1,252) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:99:LEU:HD13 17 0.06 (1,24) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:134:TYR:H 5 0.06 (1,24) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:134:TYR:H 5 0.06 (1,24) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:134:TYR:H 5 0.06 (1,24) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD11 5 0.06 (1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD12 5 0.06		1:A:75:VAL:HG23	1:A:99:LEU:HD11	17	0.06
(1,252) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:99:LEU:HD13 17 0.06 (1,24) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:134:TYR:H 5 0.06 (1,24) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:134:TYR:H 5 0.06 (1,24) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:134:TYR:H 5 0.06 (1,24) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD11 5 0.06 (1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD12 5 0.06		1:A:75:VAL:HG23	1:A:99:LEU:HD12	17	0.06
(1,24) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:134:TYR:H 5 0.06 (1,24) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:134:TYR:H 5 0.06 (1,24) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:134:TYR:H 5 0.06 (1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD11 5 0.06 (1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD12 5 0.06	· · /	1:A:75:VAL:HG23	1:A:99:LEU:HD13	17	
(1,24) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:134:TYR:H 5 0.06 (1,24) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:134:TYR:H 5 0.06 (1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD11 5 0.06 (1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD12 5 0.06		1:A:129:LEU:HD11	1:A:134:TYR:H	5	
(1,24) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:134:TYR:H 5 0.06 (1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD11 5 0.06 (1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD12 5 0.06		1:A:129:LEU:HD12	1:A:134:TYR:H	5	0.06
(1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD11 5 0.06 (1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD12 5 0.06	. ,	1:A:129:LEU:HD13	1:A:134:TYR:H		
(1,225) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD12 5 0.06	_ ` ′	1:A:43:VAL:HG11	1:A:71:ILE:HD11	5	0.06
	· · /	1:A:43:VAL:HG11	1:A:71:ILE:HD12		
	(1,225)				



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,225)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:71:ILE:HD11	5	0.06
(1,225)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:71:ILE:HD12	5	0.06
(1,225)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:71:ILE:HD13	5	0.06
(1,225)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:71:ILE:HD11	5	0.06
(1,225)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:71:ILE:HD12	5	0.06
(1,225)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:71:ILE:HD13	5	0.06
(1,225)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:71:ILE:HD11	20	0.06
(1,225)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:71:ILE:HD12	20	0.06
(1,225)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:71:ILE:HD13	20	0.06
(1,225)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:71:ILE:HD11	20	0.06
(1,225)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:71:ILE:HD12	20	0.06
(1,225)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:71:ILE:HD13	20	0.06
(1,225)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:71:ILE:HD11	20	0.06
(1,225)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:71:ILE:HD12	20	0.06
(1,225)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:71:ILE:HD13	20	0.06
(1,2)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:114:TYR:H	12	0.06
(1,2)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:114:TYR:H	12	0.06
(1,2)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:114:TYR:H	12	0.06
(1,195)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:124:VAL:HG21	12	0.06
(1,195)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:124:VAL:HG22	12	0.06
(1,195)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:124:VAL:HG23	12	0.06
(1,195)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:124:VAL:HG21	12	0.06
(1,195)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:124:VAL:HG22	12	0.06
(1,195)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:124:VAL:HG23	12	0.06
(1,195)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:124:VAL:HG21	12	0.06
(1,195)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:124:VAL:HG22	12	0.06
(1,195)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:124:VAL:HG23	12	0.06
(1,19)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:127:HIS:H	12	0.06
(1,19)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:127:HIS:H	12	0.06
(1,19)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:127:HIS:H	12	0.06
(1,184)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:112:LEU:HD11	7	0.06
(1,184)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:112:LEU:HD12	7	0.06
(1,184)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:112:LEU:HD13	7	0.06
(1,184)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:112:LEU:HD11	7	0.06
(1,184)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:112:LEU:HD12	7	0.06
(1,184)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:112:LEU:HD13	7	0.06
(1,184)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:112:LEU:HD11	7	0.06
(1,184)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:112:LEU:HD12	7	0.06
(1,184)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:112:LEU:HD13	7	0.06
(1,184)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:112:LEU:HD11	17	0.06
(1,184)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:112:LEU:HD12	17	0.06
(1,184)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:112:LEU:HD13	17	0.06



 $Continued\ from\ previous\ page...$

(1,184) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD11 17 0.06 (1,184) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD12 17 0.06 (1,184) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD13 17 0.06 (1,184) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD11 17 0.06 (1,184) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD12 17 0.06 (1,184) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD13 17 0.06 (1,183) 1:A:90:VAL:HG21 1:A:102:VAL:HG21 11 0.06 (1,183) 1:A:90:VAL:HG21 1:A:102:VAL:HG23 11 0.06 (1,183) 1:A:90:VAL:HG22 1:A:102:VAL:HG22 11 0.06 (1,183) 1:A:90:VAL:HG22 1:A:102:VAL:HG23 11 0.06 (1,183) 1:A:90:VAL:HG22 1:A:102:VAL:HG23 11 0.06 (1,183) 1:A:90:VAL:HG23 1:A:102:VAL:HG23 11 0.06 (1,183) 1:A:90:VAL:HG23 1:A:102:VAL:HG23 11 0.06 (1,183) 1:A	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,184) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD13 17 0.06 (1,184) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD11 17 0.06 (1,184) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD13 17 0.06 (1,184) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD13 17 0.06 (1,183) 1:A:90:VAL:HG21 1:A:102:VAL:HG22 11 0.06 (1,183) 1:A:90:VAL:HG21 1:A:102:VAL:HG23 11 0.06 (1,183) 1:A:90:VAL:HG22 1:A:102:VAL:HG23 11 0.06 (1,183) 1:A:90:VAL:HG22 1:A:102:VAL:HG22 11 0.06 (1,183) 1:A:90:VAL:HG22 1:A:102:VAL:HG22 11 0.06 (1,183) 1:A:90:VAL:HG23 1:A:102:VAL:HG22 11 0.06 (1,183) 1:A:90:VAL:HG23 1:A:102:VAL:HG22 11 0.06 (1,183) 1:A:90:VAL:HG23 1:A:102:VAL:HG23 11 0.06 (1,183) 1:A:90:VAL:HG23 1:A:100:VAL:HG23 11 0.06 (1,183) 1:A:1	(1,184)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:112:LEU:HD11	17	0.06
(1,184) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD11 17 0.06 (1,184) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD12 17 0.06 (1,184) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD13 17 0.06 (1,183) 1:A:90:VAL:HG21 1:A:102:VAL:HG21 11 0.06 (1,183) 1:A:90:VAL:HG21 1:A:102:VAL:HG22 11 0.06 (1,183) 1:A:90:VAL:HG21 1:A:102:VAL:HG23 11 0.06 (1,183) 1:A:90:VAL:HG22 1:A:102:VAL:HG23 11 0.06 (1,183) 1:A:90:VAL:HG23 1:A:102:VAL:HG23 11 0.06 (1,184) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LYS:H 1 0.06 (1,185) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LYS:H 1 0.06 (1,181) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LYS:H 1 0.06 (1,181) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG11 14 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG11 14 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG13 14 0.06 (1,171) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 10.06 (1,171) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD21 17 0.06 (1,144) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD21 17 0.06 (1,144) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD21 17 0.06 (1,144) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD22 17 0.06 (1,144) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD22 17 0.06	(1,184)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:112:LEU:HD12	17	0.06
(1,184) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD12 17 0.06 (1,184) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD13 17 0.06 (1,183) 1:A:90:VAL:HG21 1:A:102:VAL:HG21 11 0.06 (1,183) 1:A:90:VAL:HG21 1:A:102:VAL:HG22 11 0.06 (1,183) 1:A:90:VAL:HG21 1:A:102:VAL:HG23 11 0.06 (1,183) 1:A:90:VAL:HG21 1:A:102:VAL:HG23 11 0.06 (1,183) 1:A:90:VAL:HG22 1:A:102:VAL:HG21 11 0.06 (1,183) 1:A:90:VAL:HG23 1:A:102:VAL:HG21 11 0.06 (1,184) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:102:VAL:HG23 11 0.06 (1,185) 1:A:90:VAL:HG23 1:A:102:VAL:HG23 11 0.06 (1,186) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LYS:H 1 0.06 (1,187) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LYS:H 1 0.06 (1,188) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LYS:H 1 0.06 (1,189) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LYS:H 1 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG11 14 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG11 14 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG13 18 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG13 18 0.06 (1,171) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 1 0.06 (1,171) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 1 0.06 (1,171) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 1 0.06 (1,171) 1:A:126:LYS:H	(1,184)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:112:LEU:HD13	17	0.06
(1,184) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD13 17 0.06 (1,183) 1:A:90:VAL:HG21 1:A:102:VAL:HG21 11 0.06 (1,183) 1:A:90:VAL:HG21 1:A:102:VAL:HG22 11 0.06 (1,183) 1:A:90:VAL:HG21 1:A:102:VAL:HG23 11 0.06 (1,183) 1:A:90:VAL:HG21 1:A:102:VAL:HG23 11 0.06 (1,183) 1:A:90:VAL:HG22 1:A:102:VAL:HG21 11 0.06 (1,183) 1:A:90:VAL:HG22 1:A:102:VAL:HG22 11 0.06 (1,183) 1:A:90:VAL:HG22 1:A:102:VAL:HG22 11 0.06 (1,183) 1:A:90:VAL:HG22 1:A:102:VAL:HG23 11 0.06 (1,183) 1:A:90:VAL:HG23 1:A:102:VAL:HG23 11 0.06 (1,181) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LYS:H 1 0.06 (1,181) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LYS:H 1 0.06 (1,181) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LYS:H 1 0.06 (1,181) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LYS:H 1 0.06 (1,181) 1:A:126:LU:H 1:A:90:VAL:HG11 14 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG11 14 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG11 14 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG11 18 0.06 (1,171) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 1 0.06 (1,171) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 1 0.06 (1,171) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 1 0.06 (1,171) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 1 0.06 (1,171) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 1 0	(1,184)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:112:LEU:HD11	17	0.06
(1,183) 1:A:90:VAL:HG21 1:A:102:VAL:HG21 11 0.06 (1,183) 1:A:90:VAL:HG21 1:A:102:VAL:HG22 11 0.06 (1,183) 1:A:90:VAL:HG21 1:A:102:VAL:HG23 11 0.06 (1,183) 1:A:90:VAL:HG22 1:A:102:VAL:HG21 11 0.06 (1,183) 1:A:90:VAL:HG22 1:A:102:VAL:HG22 11 0.06 (1,183) 1:A:90:VAL:HG22 1:A:102:VAL:HG22 11 0.06 (1,183) 1:A:90:VAL:HG23 1:A:102:VAL:HG23 11 0.06 (1,183) 1:A:90:VAL:HG23 1:A:102:VAL:HG23 11 0.06 (1,183) 1:A:90:VAL:HG23 1:A:102:VAL:HG21 11 0.06 (1,183) 1:A:90:VAL:HG23 1:A:102:VAL:HG22 11 0.06 (1,183) 1:A:90:VAL:HG23 1:A:102:VAL:HG22 11 0.06 (1,183) 1:A:90:VAL:HG23 1:A:102:VAL:HG23 11 0.06 (1,184) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LYS:H 1 0.06 (1,188) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LYS:H 1 0.06 (1,18) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LYS:H 1 0.06 (1,18) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LYS:H 1 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG11 14 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG11 14 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG11 14 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG11 18 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG11 18 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG11 18 0.06 (1,171) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 1 0.06 (1,171) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 1 0.06 (1,171) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 1 0.06 (1,171) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 1 0.06 (1,144) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD21 1 1 0.06 (1,144) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD22 17 0.06 (1,144) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD2	(1,184)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:112:LEU:HD12	17	0.06
(1,183) 1:A:90:VAL:HG21 1:A:102:VAL:HG22 11 0.06 (1,183) 1:A:90:VAL:HG21 1:A:102:VAL:HG23 11 0.06 (1,183) 1:A:90:VAL:HG22 1:A:102:VAL:HG21 11 0.06 (1,183) 1:A:90:VAL:HG22 1:A:102:VAL:HG22 11 0.06 (1,183) 1:A:90:VAL:HG22 1:A:102:VAL:HG22 11 0.06 (1,183) 1:A:90:VAL:HG22 1:A:102:VAL:HG23 11 0.06 (1,183) 1:A:90:VAL:HG23 1:A:102:VAL:HG23 11 0.06 (1,183) 1:A:90:VAL:HG23 1:A:102:VAL:HG21 11 0.06 (1,183) 1:A:90:VAL:HG23 1:A:102:VAL:HG22 11 0.06 (1,183) 1:A:90:VAL:HG23 1:A:102:VAL:HG22 11 0.06 (1,184) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LYS:H 1 0.06 (1,18) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LYS:H 1 0.06 (1,18) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LYS:H 1 0.06 (1,18) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LYS:H 1 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG11 14 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG11 14 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG13 14 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG11 18 0.06 (1,171) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 1 0.06 (1,171) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 1 0.06 (1,171) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 2 0 0.06 (1,15) 1:A:78:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 2 0 0.06 (1,15) 1:A:78:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 2 0 0.06 (1,15) 1:A:78:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 1 0.06 (1,144) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD21 13 0.06 (1,144) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD21 17 0.06 (1,144) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD21 17 0.06	(1,184)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:112:LEU:HD13	17	0.06
(1,183) 1:A:90:VAL:HG21 1:A:102:VAL:HG23 11 0.06 (1,183) 1:A:90:VAL:HG22 1:A:102:VAL:HG21 11 0.06 (1,183) 1:A:90:VAL:HG22 1:A:102:VAL:HG22 11 0.06 (1,183) 1:A:90:VAL:HG22 1:A:102:VAL:HG23 11 0.06 (1,183) 1:A:90:VAL:HG23 1:A:102:VAL:HG23 11 0.06 (1,183) 1:A:90:VAL:HG23 1:A:102:VAL:HG21 11 0.06 (1,183) 1:A:90:VAL:HG23 1:A:102:VAL:HG21 11 0.06 (1,183) 1:A:90:VAL:HG23 1:A:102:VAL:HG22 11 0.06 (1,188) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:120:VAL:HG23 11 0.06 (1,18) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LYS:H 1 0.06 (1,18) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LYS:H 1 0.06 (1,18) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LYS:H 1 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG11 14 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG11 14 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG13 14 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG13 14 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG11 18 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG11 18 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG11 10 0.06 (1,171) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 10 0.06 (1,171) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 11 0.066 (1,171) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:L	(1,183)	1:A:90:VAL:HG21	1:A:102:VAL:HG21	11	0.06
(1,183) 1:A:90:VAL:HG22 1:A:102:VAL:HG22 11 0.06 (1,183) 1:A:90:VAL:HG22 1:A:102:VAL:HG22 11 0.06 (1,183) 1:A:90:VAL:HG22 1:A:102:VAL:HG23 11 0.06 (1,183) 1:A:90:VAL:HG23 1:A:102:VAL:HG21 11 0.06 (1,183) 1:A:90:VAL:HG23 1:A:102:VAL:HG22 11 0.06 (1,183) 1:A:90:VAL:HG23 1:A:102:VAL:HG23 11 0.06 (1,183) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LYS:H 1 0.06 (1,18) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LYS:H 1 0.06 (1,18) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LYS:H 1 0.06 (1,18) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LYS:H 1 0.06 (1,18) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LYS:H 1 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG11 14 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG13 14 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90	(1,183)	1:A:90:VAL:HG21	1:A:102:VAL:HG22	11	0.06
(1,183) 1:A:90:VAL:HG22 1:A:102:VAL:HG22 11 0.06 (1,183) 1:A:90:VAL:HG22 1:A:102:VAL:HG23 11 0.06 (1,183) 1:A:90:VAL:HG23 1:A:102:VAL:HG21 11 0.06 (1,183) 1:A:90:VAL:HG23 1:A:102:VAL:HG21 11 0.06 (1,183) 1:A:90:VAL:HG23 1:A:102:VAL:HG22 11 0.06 (1,183) 1:A:90:VAL:HG23 1:A:102:VAL:HG23 11 0.06 (1,183) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:102:VAL:HG23 11 0.06 (1,18) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LYS:H 1 0.06 (1,18) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LYS:H 1 0.06 (1,18) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LYS:H 1 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG11 14 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG11 14 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG13 14 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG11 18 0.06 (1,171) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 1 0.06 (1,171) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 1 0.06 (1,171) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 1 0.06 (1,171) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 1 0.06 (1,171) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 1 0.06 (1,171) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 20 0.06 (1,171) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 20 0.06 (1,171) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 20 0.06 (1,171) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 20 0.06 (1,171) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 20 0.06 (1,171) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 20 0.06 (1,171) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 20 0.06 (1,171) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD23 13 0.06 (1,171) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD23 13 0.06 (1,171) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD23 13 0.06 (1,171) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD23 17 0.06	(1,183)	1:A:90:VAL:HG21	1:A:102:VAL:HG23	11	0.06
(1,183) 1:A:90:VAL:HG22 1:A:102:VAL:HG23 11 0.06 (1,183) 1:A:90:VAL:HG23 1:A:102:VAL:HG21 11 0.06 (1,183) 1:A:90:VAL:HG23 1:A:102:VAL:HG22 11 0.06 (1,183) 1:A:90:VAL:HG23 1:A:102:VAL:HG23 11 0.06 (1,183) 1:A:90:VAL:HG23 1:A:102:VAL:HG23 11 0.06 (1,18) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LYS:H 1 0.06 (1,18) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LYS:H 1 0.06 (1,18) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LYS:H 1 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG11 14 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG11 14 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG13 14 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG13 14 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG11 18 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG11 18 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG12 18 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG12 18 0.06 (1,171) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 1 0.06 (1,171) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 1 0.06 (1,171) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 1 0.06 (1,171) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 1 0.06 (1,171) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 1 0.06 (1,171) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 1 0.06 (1,171) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 20 0.06 (1,171) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 20 0.06 (1,171) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 20 0.06 (1,171) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 20 0.06 (1,144) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD23 13 0.06 (1,144) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD23 17 0.06 (1,144) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD23 17 0.06 (1,144) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD23 17 0.06	(1,183)	1:A:90:VAL:HG22	1:A:102:VAL:HG21	11	0.06
(1,183) 1:A:90:VAL:HG23 1:A:102:VAL:HG22 11 0.06 (1,183) 1:A:90:VAL:HG23 1:A:102:VAL:HG22 11 0.06 (1,183) 1:A:90:VAL:HG23 1:A:102:VAL:HG23 11 0.06 (1,18) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LYS:H 1 0.06 (1,18) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LYS:H 1 0.06 (1,18) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LYS:H 1 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG11 14 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG13 14 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG11 18 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG11 18 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG12 18 0.06 (1,171) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD12 18 0.06 (1,171) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 1 0.06 (1,17) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23	(1,183)	1:A:90:VAL:HG22	1:A:102:VAL:HG22	11	0.06
(1,183) 1:A:90:VAL:HG23 1:A:102:VAL:HG23 11 0.06 (1,183) 1:A:90:VAL:HG23 1:A:102:VAL:HG23 11 0.06 (1,18) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LYS:H 1 0.06 (1,18) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LYS:H 1 0.06 (1,18) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LYS:H 1 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG11 14 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG13 14 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG13 14 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG11 18 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG12 18 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG13 18 0.06 (1,171) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 1 0.06 (1,171) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 1 0.06 (1,17) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21	(1,183)	1:A:90:VAL:HG22	1:A:102:VAL:HG23	11	0.06
(1,183) 1:A:90:VAL:HG23 1:A:102:VAL:HG23 11 0.06 (1,18) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LYS:H 1 0.06 (1,18) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LYS:H 1 0.06 (1,18) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LYS:H 1 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG11 14 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG12 14 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG13 14 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG11 18 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG11 18 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG13 18 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG13 18 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG13 18 0.06 (1,171) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 1 0.06 (1,171) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22	(1,183)	1:A:90:VAL:HG23	1:A:102:VAL:HG21	11	0.06
(1,183) 1:A:190:VAL:HG23 1:A:102:VAL:HG23 11 0.06 (1,18) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LYS:H 1 0.06 (1,18) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LYS:H 1 0.06 (1,18) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LYS:H 1 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG11 14 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG12 14 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG13 14 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG13 14 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG11 18 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG13 18 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:129:LEU:HD21 1 0.06 (1,171) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 1 0.06 (1,171) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 1 0.06 (1,17) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22	(1,183)	1:A:90:VAL:HG23	1:A:102:VAL:HG22	11	0.06
(1,18) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LYS:H 1 0.06 (1,18) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LYS:H 1 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG11 14 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG12 14 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG13 14 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG11 18 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG12 18 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG13 18 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG13 18 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG12 18 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:192:LEU:HD21 1 0.06 (1,171) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 1 0.06 (1,17) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 1 0.06 (1,17) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23	(1,183)	1:A:90:VAL:HG23	1:A:102:VAL:HG23	11	0.06
(1,18) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LYS:H 1 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG11 14 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG12 14 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG13 14 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG11 18 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG12 18 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG13 18 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG13 18 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG13 18 0.06 (1,171) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 1 0.06 (1,17) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 1 0.06 (1,17) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 20 0.06 (1,17) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 20 0.06 (1,17) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23	(1,18)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:128:LYS:H	1	0.06
(1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG11 14 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG12 14 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG13 14 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG11 18 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG12 18 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG13 18 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG13 18 0.06 (1,171) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 1 0.06 (1,17) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 1 0.06 (1,17) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 1 0.06 (1,17) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 20 0.06 (1,17) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 20 0.06 (1,17) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 20 0.06 (1,17) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23	(1,18)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:128:LYS:H	1	0.06
(1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG12 14 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG13 14 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG11 18 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG12 18 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG13 18 0.06 (1,171) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 1 0.06 (1,17) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 1 0.06 (1,17) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 1 0.06 (1,17) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 20 0.06 (1,17) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 20 0.06 (1,17) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 20 0.06 (1,17) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 20 0.06 (1,17) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 20 0.06 (1,15) 1:A:78:LYS:H 1:A:102:VAL:HG11	(1,18)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:128:LYS:H	1	0.06
(1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG13 14 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG11 18 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG12 18 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG13 18 0.06 (1,17) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 1 0.06 (1,17) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 1 0.06 (1,17) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 1 0.06 (1,17) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 20 0.06 (1,17) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 20 0.06 (1,17) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 20 0.06 (1,17) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 20 0.06 (1,17) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 20 0.06 (1,15) 1:A:78:LYS:H 1:A:102:VAL:HG11 2 0.06 (1,15) 1:A:A:78:LYS:H 1:A:102:VAL:HG13	(1,171)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG11	14	0.06
(1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG11 18 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG12 18 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG13 18 0.06 (1,17) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 1 0.06 (1,17) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 1 0.06 (1,17) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 1 0.06 (1,17) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 20 0.06 (1,17) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 20 0.06 (1,17) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 20 0.06 (1,15) 1:A:78:LYS:H 1:A:102:VAL:HG11 2 0.06 (1,15) 1:A:44:ASP:H 1:A:102:VAL:HG13	(1,171)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG12	14	0.06
(1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG12 18 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG13 18 0.06 (1,17) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 1 0.06 (1,17) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 1 0.06 (1,17) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 1 0.06 (1,17) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 20 0.06 (1,17) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 20 0.06 (1,17) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 20 0.06 (1,17) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 20 0.06 (1,17) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:VAL:HG11 2 0.06 (1,15) 1:A:78:LYS:H 1:A:102:VAL:HG11 2 0.06 (1,15) 1:A:78:LYS:H 1:A:102:VAL:HG12 2 0.06 (1,148) 1:A:44:ASP:H 1:A:129:LEU:HD21 3 0.06 (1,144) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD22	(1,171)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG13	14	0.06
(1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG13 18 0.06 (1,17) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 1 0.06 (1,17) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 1 0.06 (1,17) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 1 0.06 (1,17) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 20 0.06 (1,17) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 20 0.06 (1,17) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 20 0.06 (1,17) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 20 0.06 (1,17) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:VAL:HG11 2 0.06 (1,15) 1:A:78:LYS:H 1:A:102:VAL:HG11 2 0.06 (1,15) 1:A:78:LYS:H 1:A:102:VAL:HG13 2 0.06 (1,148) 1:A:44:ASP:H 1:A:122:ARG:H 5 0.06 (1,148) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD21 13 0.06 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD23	(1,171)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG11	18	0.06
(1,17) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 1 0.06 (1,17) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 1 0.06 (1,17) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 1 0.06 (1,17) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 20 0.06 (1,17) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 20 0.06 (1,17) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 20 0.06 (1,17) 1:A:78:LYS:H 1:A:102:VAL:HG11 2 0.06 (1,15) 1:A:78:LYS:H 1:A:102:VAL:HG12 2 0.06 (1,15) 1:A:78:LYS:H 1:A:102:VAL:HG13 2 0.06 (1,14) 1:A:78:LYS:H 1:A:122:ARG:H 5 0.06 (1,148) 1:A:44:ASP:H 1:A:122:ARG:H 5 0.06 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD21 13 0.06 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD23 13 0.06 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD22 17	(1,171)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG12	18	0.06
(1,17) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 1 0.06 (1,17) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 1 0.06 (1,17) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 20 0.06 (1,17) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 20 0.06 (1,17) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 20 0.06 (1,17) 1:A:126:LYS:H 1:A:102:VAL:HG11 2 0.06 (1,15) 1:A:78:LYS:H 1:A:102:VAL:HG11 2 0.06 (1,15) 1:A:78:LYS:H 1:A:102:VAL:HG13 2 0.06 (1,14) 1:A:78:LYS:H 1:A:102:VAL:HG13 2 0.06 (1,148) 1:A:44:ASP:H 1:A:122:ARG:H 5 0.06 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD21 13 0.06 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD23 13 0.06 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD21 17 0.06 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD22 <	(1,171)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG13	18	0.06
(1,17) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 1 0.06 (1,17) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 20 0.06 (1,17) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 20 0.06 (1,17) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 20 0.06 (1,17) 1:A:78:LYS:H 1:A:102:VAL:HG11 2 0.06 (1,15) 1:A:78:LYS:H 1:A:102:VAL:HG12 2 0.06 (1,15) 1:A:78:LYS:H 1:A:102:VAL:HG13 2 0.06 (1,14) 1:A:78:LYS:H 1:A:122:ARG:H 5 0.06 (1,148) 1:A:44:ASP:H 1:A:122:ARG:H 5 0.06 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD21 13 0.06 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD23 13 0.06 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD21 17 0.06 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD22 17 0.06 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD23	(1,17)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD21	1	0.06
(1,17) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 20 0.06 (1,17) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 20 0.06 (1,17) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 20 0.06 (1,15) 1:A:78:LYS:H 1:A:102:VAL:HG11 2 0.06 (1,15) 1:A:78:LYS:H 1:A:102:VAL:HG12 2 0.06 (1,15) 1:A:78:LYS:H 1:A:102:VAL:HG13 2 0.06 (1,15) 1:A:78:LYS:H 1:A:102:VAL:HG13 2 0.06 (1,14) 1:A:44:ASP:H 1:A:122:ARG:H 5 0.06 (1,148) 1:A:44:ASP:H 1:A:122:ARG:H 5 0.06 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD21 13 0.06 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD23 13 0.06 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD21 17 0.06 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD22 17 0.06 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD23 17 0.06	(1,17)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD22	1	0.06
(1,17) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 20 0.06 (1,17) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 20 0.06 (1,15) 1:A:78:LYS:H 1:A:102:VAL:HG11 2 0.06 (1,15) 1:A:78:LYS:H 1:A:102:VAL:HG12 2 0.06 (1,15) 1:A:78:LYS:H 1:A:102:VAL:HG13 2 0.06 (1,14) 1:A:44:ASP:H 1:A:122:ARG:H 5 0.06 (1,148) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD21 13 0.06 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD22 13 0.06 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD23 13 0.06 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD21 17 0.06 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD22 17 0.06 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD23 17 0.06 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD23 17 0.06	(1,17)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD23	1	0.06
(1,17) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 20 0.06 (1,15) 1:A:78:LYS:H 1:A:102:VAL:HG11 2 0.06 (1,15) 1:A:78:LYS:H 1:A:102:VAL:HG12 2 0.06 (1,15) 1:A:78:LYS:H 1:A:102:VAL:HG13 2 0.06 (1,148) 1:A:44:ASP:H 1:A:122:ARG:H 5 0.06 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD21 13 0.06 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD22 13 0.06 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD23 13 0.06 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD21 17 0.06 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD22 17 0.06 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD23 17 0.06 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD23 17 0.06	(1,17)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD21	20	0.06
(1,15) 1:A:78:LYS:H 1:A:102:VAL:HG11 2 0.06 (1,15) 1:A:78:LYS:H 1:A:102:VAL:HG12 2 0.06 (1,15) 1:A:78:LYS:H 1:A:102:VAL:HG13 2 0.06 (1,14) 1:A:44:ASP:H 1:A:122:ARG:H 5 0.06 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD21 13 0.06 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD22 13 0.06 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD23 13 0.06 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD21 17 0.06 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD22 17 0.06 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD23 17 0.06 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD23 17 0.06	(1,17)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD22	20	0.06
(1,15) 1:A:78:LYS:H 1:A:102:VAL:HG12 2 0.06 (1,15) 1:A:78:LYS:H 1:A:102:VAL:HG13 2 0.06 (1,148) 1:A:44:ASP:H 1:A:122:ARG:H 5 0.06 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD21 13 0.06 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD22 13 0.06 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD23 13 0.06 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD21 17 0.06 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD22 17 0.06 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD23 17 0.06 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD23 17 0.06	(1,17)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD23	20	0.06
(1,15) 1:A:78:LYS:H 1:A:102:VAL:HG13 2 0.06 (1,148) 1:A:44:ASP:H 1:A:122:ARG:H 5 0.06 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD21 13 0.06 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD22 13 0.06 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD23 13 0.06 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD21 17 0.06 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD22 17 0.06 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD23 17 0.06 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD23 17 0.06	(1,15)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG11	2	0.06
(1,148) 1:A:44:ASP:H 1:A:122:ARG:H 5 0.06 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD21 13 0.06 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD22 13 0.06 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD23 13 0.06 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD21 17 0.06 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD22 17 0.06 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD23 17 0.06 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD23 17 0.06	(1,15)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG12	2	0.06
(1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD21 13 0.06 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD22 13 0.06 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD23 13 0.06 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD21 17 0.06 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD22 17 0.06 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD23 17 0.06	(1,15)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG13	2	0.06
(1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD22 13 0.06 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD23 13 0.06 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD21 17 0.06 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD22 17 0.06 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD23 17 0.06 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD23 17 0.06	(1,148)	1:A:44:ASP:H	1:A:122:ARG:H	5	0.06
(1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD23 13 0.06 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD21 17 0.06 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD22 17 0.06 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD23 17 0.06 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD23 17 0.06	(1,14)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD21	13	0.06
(1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD21 17 0.06 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD22 17 0.06 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD23 17 0.06	(1,14)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD22	13	0.06
(1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD22 17 0.06 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD23 17 0.06	(1,14)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD23	13	0.06
(1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD23 17 0.06	(1,14)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD21	17	0.06
	(1,14)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD22	17	0.06
(1,131) 1:A:17:TYR:H 1:A:19:VAL:H 9 0.06	(1,14)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD23	17	0.06
	(1,131)	1:A:17:TYR:H	1:A:19:VAL:H	9	0.06
(1,127) 1:A:21:GLN:H 1:A:23:ASN:H 4 0.06	(1,127)	1:A:21:GLN:H	1:A:23:ASN:H	4	0.06



 $Continued\ from\ previous\ page...$

(1,124) 1:A:5:LYS:H 1:A:7:GLU:H 7 0.06 (1,115) 1:A:89:GLU:H 1:A:102:VAL:H 4 0.06 (1,115) 1:A:89:GLU:H 1:A:102:VAL:H 7 0.06 (1,89) 1:A:55:LYS:H 1:A:57:LYS:H 6 0.05 (1,89) 1:A:55:LYS:H 1:A:57:LYS:H 12 0.05 (1,89) 1:A:55:LYS:H 1:A:57:LYS:H 16 0.05 (1,89) 1:A:55:LYS:H 1:A:48:GLY:H 1 0.05 (1,81) 1:A:47:SER:H 1:A:48:GLY:H 1 0.05 (1,8) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:42:TYR:H 7 0.05 (1,8) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:42:TYR:H 7 0.05 (1,8) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:42:TYR:H 13 0.05 (1,8) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:42:TYR:H 13 0.05 (1,8) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:42:TYR:H 13 0.05 (1,8) 1:A:41:Di:HD13 1:A:42:TYR:H 13 0.05	
(1,115) 1:A:89:GLU:H 1:A:102:VAL:H 7 0.06 (1,89) 1:A:55:LYS:H 1:A:57:LYS:H 6 0.05 (1,89) 1:A:55:LYS:H 1:A:57:LYS:H 12 0.05 (1,89) 1:A:55:LYS:H 1:A:57:LYS:H 16 0.05 (1,81) 1:A:47:SER:H 1:A:48:GLY:H 1 0.05 (1,8) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:42:TYR:H 7 0.05 (1,8) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:42:TYR:H 7 0.05 (1,8) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:42:TYR:H 7 0.05 (1,8) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:42:TYR:H 13 0.05 (1,8) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:42:TYR:H 13 0.05 (1,8) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:42:TYR:H 13 0.05 (1,8) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:42:TYR:H 13 0.05 (1,8) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:42:TYR:H 13 0.05 (1,70) 1:A:16:GLYS:H 1:A:13:10:GLY:H 8 0.05	
(1,89) 1:A:55:LYS:H 1:A:57:LYS:H 6 0.05 (1,89) 1:A:55:LYS:H 1:A:57:LYS:H 12 0.05 (1,89) 1:A:55:LYS:H 1:A:57:LYS:H 16 0.05 (1,81) 1:A:47:SER:H 1:A:48:GLY:H 1 0.05 (1,8) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:42:TYR:H 7 0.05 (1,8) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:42:TYR:H 7 0.05 (1,8) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:42:TYR:H 7 0.05 (1,8) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:42:TYR:H 13 0.05 (1,8) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:42:TYR:H 13 0.05 (1,8) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:42:TYR:H 13 0.05 (1,8) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:42:TYR:H 13 0.05 (1,8) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:42:TYR:H 13 0.05 (1,70) 1:A:16:GLN:HE21 1:A:46:VAL:H 3 0.05 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 2 0.05 <td></td>	
(1,89) 1:A:55:LYS:H 1:A:57:LYS:H 12 0.05 (1,89) 1:A:55:LYS:H 1:A:57:LYS:H 16 0.05 (1,81) 1:A:47:SER:H 1:A:48:GLY:H 1 0.05 (1,8) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:42:TYR:H 7 0.05 (1,8) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:42:TYR:H 7 0.05 (1,8) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:42:TYR:H 7 0.05 (1,8) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:42:TYR:H 13 0.05 (1,8) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:42:TYR:H 13 0.05 (1,8) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:42:TYR:H 13 0.05 (1,8) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:42:TYR:H 13 0.05 (1,78) 1:A:16:GLN:HE21 1:A:46:VAL:H 13 0.05 (1,70) 1:A:16:GLN:HE21 1:A:46:VAL:H 3 0.05 (1,68) 1:A:34:TRP:H 1:A:36:HIS:H 12 0.05 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 2 0.05 </td <td></td>	
(1,89) 1:A:55:LYS:H 1:A:57:LYS:H 16 0.05 (1,81) 1:A:47:SER:H 1:A:48:GLY:H 1 0.05 (1,8) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:42:TYR:H 7 0.05 (1,8) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:42:TYR:H 7 0.05 (1,8) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:42:TYR:H 7 0.05 (1,8) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:42:TYR:H 13 0.05 (1,8) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:42:TYR:H 13 0.05 (1,8) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:42:TYR:H 13 0.05 (1,8) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:42:TYR:H 13 0.05 (1,78) 1:A:16:GLN:HE21 1:A:46:VAL:H 8 0.05 (1,70) 1:A:16:GLN:HE21 1:A:46:VAL:H 3 0.05 (1,68) 1:A:34:TRP:H 1:A:36:HIS:H 12 0.05 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 2 0.05 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD12 2 0.05	
(1,81) 1:A:47:SER:H 1:A:48:GLY:H 1 0.05 (1,8) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:42:TYR:H 7 0.05 (1,8) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:42:TYR:H 7 0.05 (1,8) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:42:TYR:H 7 0.05 (1,8) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:42:TYR:H 13 0.05 (1,8) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:42:TYR:H 13 0.05 (1,8) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:42:TYR:H 13 0.05 (1,8) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:42:TYR:H 13 0.05 (1,8) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:42:TYR:H 13 0.05 (1,70) 1:A:16:GLN:HE21 1:A:46:VAL:H 3 0.05 (1,68) 1:A:16:GLN:HE21 1:A:46:VAL:H 13 0.05 (1,68) 1:A:16:GLN:HE21 1:A:46:VAL:H 13 0.05 (1,68) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 2 0.05 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 2 0.05	
(1,8) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:42:TYR:H 7 0.05 (1,8) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:42:TYR:H 7 0.05 (1,8) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:42:TYR:H 7 0.05 (1,8) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:42:TYR:H 13 0.05 (1,8) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:42:TYR:H 13 0.05 (1,8) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:42:TYR:H 13 0.05 (1,8) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:42:TYR:H 13 0.05 (1,70) 1:A:12:G:LYS:H 1:A:129:LEU:H 8 0.05 (1,70) 1:A:16:GLN:HE21 1:A:46:VAL:H 3 0.05 (1,68) 1:A:34:TRP:H 1:A:36:HIS:H 12 0.05 (1,68) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 2 0.05 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 2 0.05 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 15 0.05 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 15 0.05 </td <td></td>	
(1,8) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:42:TYR:H 7 0.05 (1,8) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:42:TYR:H 7 0.05 (1,8) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:42:TYR:H 13 0.05 (1,8) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:42:TYR:H 13 0.05 (1,8) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:42:TYR:H 13 0.05 (1,70) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:42:TYR:H 13 0.05 (1,70) 1:A:16:GLN:HE21 1:A:46:VAL:H 3 0.05 (1,70) 1:A:16:GLN:HE21 1:A:46:VAL:H 13 0.05 (1,70) 1:A:16:GLN:HE21 1:A:46:VAL:H 13 0.05 (1,68) 1:A:16:GLN:HE21 1:A:46:VAL:H 13 0.05 (1,68) 1:A:16:GLN:HE21 1:A:46:VAL:H 13 0.05 (1,68) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 2 0.05 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 2 0.05 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD12 15	
(1,8) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:42:TYR:H 7 0.05 (1,8) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:42:TYR:H 13 0.05 (1,8) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:42:TYR:H 13 0.05 (1,8) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:42:TYR:H 13 0.05 (1,78) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:42:TYR:H 13 0.05 (1,70) 1:A:16:GLN:HE21 1:A:46:VAL:H 3 0.05 (1,70) 1:A:16:GLN:HE21 1:A:46:VAL:H 3 0.05 (1,70) 1:A:16:GLN:HE21 1:A:46:VAL:H 13 0.05 (1,68) 1:A:16:GLN:HE21 1:A:46:VAL:H 13 0.05 (1,68) 1:A:16:GLN:HE21 1:A:46:VAL:H 13 0.05 (1,68) 1:A:17:TYR:H 1:A:36:HIS:H 12 0.05 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 2 0.05 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD12 15 0.05 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 15	
(1,8) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:42:TYR:H 13 0.05 (1,8) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:42:TYR:H 13 0.05 (1,8) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:42:TYR:H 13 0.05 (1,78) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:H 8 0.05 (1,70) 1:A:16:GLN:HE21 1:A:46:VAL:H 3 0.05 (1,70) 1:A:16:GLN:HE21 1:A:46:VAL:H 13 0.05 (1,70) 1:A:16:GLN:HE21 1:A:46:VAL:H 13 0.05 (1,68) 1:A:34:TRP:H 1:A:36:HIS:H 12 0.05 (1,68) 1:A:34:TRP:H 1:A:12:LEU:HD11 2 0.05 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD12 2 0.05 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 15 0.05 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD12 15 0.05 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 15 0.05 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:101:HIS:H 2 0	
(1,8) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:42:TYR:H 13 0.05 (1,8) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:42:TYR:H 13 0.05 (1,78) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:H 8 0.05 (1,70) 1:A:16:GLN:HE21 1:A:46:VAL:H 3 0.05 (1,70) 1:A:16:GLN:HE21 1:A:46:VAL:H 13 0.05 (1,68) 1:A:17:TYR:H 1:A:36:HIS:H 12 0.05 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD12 2 0.05 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD12 15 0.05 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 15 0.05 (1,600) 1:A:115:CYS:H 1:A:101:HIS:H 2 <th< td=""><td></td></th<>	
(1,8) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:42:TYR:H 13 0.05 (1,78) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:H 8 0.05 (1,70) 1:A:16:GLN:HE21 1:A:46:VAL:H 3 0.05 (1,70) 1:A:16:GLN:HE21 1:A:46:VAL:H 13 0.05 (1,68) 1:A:34:TRP:H 1:A:36:HIS:H 12 0.05 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 2 0.05 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD12 2 0.05 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 2 0.05 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 15 0.05 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD12 15 0.05 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:10:HIS:H 2 0.05 (1,600) 1:A:115:CYS:H 1:A:101:HIS:H 2 0.05 (1,608) 1:A:100:GLY:H 1:A:90:VAL:H 6 0.05 (1,608) 1:A:100:GLY:H 1:A:90:VAL:H 7 0.05<	
(1,78) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:H 8 0.05 (1,70) 1:A:16:GLN:HE21 1:A:46:VAL:H 3 0.05 (1,70) 1:A:16:GLN:HE21 1:A:46:VAL:H 13 0.05 (1,68) 1:A:34:TRP:H 1:A:36:HIS:H 12 0.05 (1,68) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 2 0.05 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD12 2 0.05 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 2 0.05 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 15 0.05 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD12 15 0.05 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 15 0.05 (1,610) 1:A:115:CYS:H 1:A:101:HIS:H 2 0.05 (1,608) 1:A:100:GLY:H 1:A:90:VAL:H 6 0.05 (1,608) 1:A:100:GLY:H 1:A:90:VAL:H 7 0.05	
(1,70) 1:A:16:GLN:HE21 1:A:46:VAL:H 3 0.05 (1,70) 1:A:16:GLN:HE21 1:A:46:VAL:H 13 0.05 (1,68) 1:A:34:TRP:H 1:A:36:HIS:H 12 0.05 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 2 0.05 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD12 2 0.05 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 2 0.05 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 15 0.05 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD12 15 0.05 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 15 0.05 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:10:HIS:H 2 0.05 (1,610) 1:A:115:CYS:H 1:A:101:HIS:H 2 0.05 (1,608) 1:A:100:GLY:H 1:A:90:VAL:H 6 0.05 (1,608) 1:A:100:GLY:H 1:A:90:VAL:H 7 0.05	
(1,70) 1:A:16:GLN:HE21 1:A:46:VAL:H 13 0.05 (1,68) 1:A:34:TRP:H 1:A:36:HIS:H 12 0.05 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 2 0.05 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD12 2 0.05 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 2 0.05 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 15 0.05 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD12 15 0.05 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 15 0.05 (1,610) 1:A:115:CYS:H 1:A:101:HIS:H 2 0.05 (1,610) 1:A:115:CYS:H 1:A:101:HIS:H 19 0.05 (1,608) 1:A:100:GLY:H 1:A:90:VAL:H 6 0.05 (1,608) 1:A:100:GLY:H 1:A:90:VAL:H 7 0.05	
(1,68) 1:A:34:TRP:H 1:A:36:HIS:H 12 0.05 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 2 0.05 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD12 2 0.05 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 2 0.05 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 15 0.05 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD12 15 0.05 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 15 0.05 (1,610) 1:A:115:CYS:H 1:A:101:HIS:H 2 0.05 (1,610) 1:A:100:GLY:H 1:A:90:VAL:H 6 0.05 (1,608) 1:A:100:GLY:H 1:A:90:VAL:H 7 0.05	
(1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 2 0.05 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD12 2 0.05 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 2 0.05 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 15 0.05 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD12 15 0.05 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 15 0.05 (1,610) 1:A:115:CYS:H 1:A:101:HIS:H 2 0.05 (1,610) 1:A:115:CYS:H 1:A:101:HIS:H 19 0.05 (1,608) 1:A:100:GLY:H 1:A:90:VAL:H 6 0.05 (1,608) 1:A:100:GLY:H 1:A:90:VAL:H 7 0.05	
(1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD12 2 0.05 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 2 0.05 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 15 0.05 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD12 15 0.05 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 15 0.05 (1,610) 1:A:115:CYS:H 1:A:101:HIS:H 2 0.05 (1,610) 1:A:15:CYS:H 1:A:101:HIS:H 19 0.05 (1,608) 1:A:100:GLY:H 1:A:90:VAL:H 6 0.05 (1,608) 1:A:100:GLY:H 1:A:90:VAL:H 7 0.05	
(1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD12 2 0.05 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 2 0.05 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 15 0.05 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD12 15 0.05 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 15 0.05 (1,610) 1:A:115:CYS:H 1:A:101:HIS:H 2 0.05 (1,610) 1:A:115:CYS:H 1:A:101:HIS:H 19 0.05 (1,608) 1:A:100:GLY:H 1:A:90:VAL:H 6 0.05 (1,608) 1:A:100:GLY:H 1:A:90:VAL:H 7 0.05	
(1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 15 0.05 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD12 15 0.05 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 15 0.05 (1,610) 1:A:115:CYS:H 1:A:101:HIS:H 2 0.05 (1,610) 1:A:115:CYS:H 1:A:101:HIS:H 19 0.05 (1,608) 1:A:100:GLY:H 1:A:90:VAL:H 6 0.05 (1,608) 1:A:100:GLY:H 1:A:90:VAL:H 7 0.05	
(1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD12 15 0.05 (1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 15 0.05 (1,610) 1:A:115:CYS:H 1:A:101:HIS:H 2 0.05 (1,610) 1:A:115:CYS:H 1:A:101:HIS:H 19 0.05 (1,608) 1:A:100:GLY:H 1:A:90:VAL:H 6 0.05 (1,608) 1:A:100:GLY:H 1:A:90:VAL:H 7 0.05	
(1,623) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 15 0.05 (1,610) 1:A:115:CYS:H 1:A:101:HIS:H 2 0.05 (1,610) 1:A:115:CYS:H 1:A:101:HIS:H 19 0.05 (1,608) 1:A:100:GLY:H 1:A:90:VAL:H 6 0.05 (1,608) 1:A:100:GLY:H 1:A:90:VAL:H 7 0.05	-
(1,610) 1:A:115:CYS:H 1:A:101:HIS:H 2 0.05 (1,610) 1:A:115:CYS:H 1:A:101:HIS:H 19 0.05 (1,608) 1:A:100:GLY:H 1:A:90:VAL:H 6 0.05 (1,608) 1:A:100:GLY:H 1:A:90:VAL:H 7 0.05	
(1,610) 1:A:115:CYS:H 1:A:101:HIS:H 19 0.05 (1,608) 1:A:100:GLY:H 1:A:90:VAL:H 6 0.05 (1,608) 1:A:100:GLY:H 1:A:90:VAL:H 7 0.05	
(1,608) 1:A:100:GLY:H 1:A:90:VAL:H 6 0.05 (1,608) 1:A:100:GLY:H 1:A:90:VAL:H 7 0.05	
(1,608) 1:A:100:GLY:H 1:A:90:VAL:H 7 0.05	
(1,601) 1:A:142:ASN:HD21 1:A:144:LEU:HD11 1 0.05	
(1,601) 1:A:142:ASN:HD21 1:A:144:LEU:HD12 1 0.05	
(1,601) 1:A:142:ASN:HD21 1:A:144:LEU:HD13 1 0.05	
(1,601) 1:A:142:ASN:HD21 1:A:144:LEU:HD21 1 0.05	
(1,601) 1:A:142:ASN:HD21 1:A:144:LEU:HD22 1 0.05	
(1,601) 1:A:142:ASN:HD21 1:A:144:LEU:HD23 1 0.05	
(1,601) 1:A:142:ASN:HD22 1:A:144:LEU:HD11 1 0.05	
(1,601) 1:A:142:ASN:HD22 1:A:144:LEU:HD12 1 0.05	
(1,601) 1:A:142:ASN:HD22 1:A:144:LEU:HD13 1 0.05	
(1,601) 1:A:142:ASN:HD22 1:A:144:LEU:HD21 1 0.05	
(1,601) 1:A:142:ASN:HD22 1:A:144:LEU:HD22 1 0.05	
(1,601) 1:A:142:ASN:HD22 1:A:144:LEU:HD23 1 0.05	
(1,595) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD11 2 0.05	
(1,595) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD12 2 0.05	
(1,595) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD13 2 0.05	



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,595)	1:A:104:ASN:HD22	1:A:112:LEU:HD11	2	0.05
(1,595)	1:A:104:ASN:HD22	1:A:112:LEU:HD12	2	0.05
(1,595)	1:A:104:ASN:HD22	1:A:112:LEU:HD13	2	0.05
(1,595)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD11	16	0.05
(1,595)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD12	16	0.05
(1,595)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD13	16	0.05
(1,595)	1:A:104:ASN:HD22	1:A:112:LEU:HD11	16	0.05
(1,595)	1:A:104:ASN:HD22	1:A:112:LEU:HD12	16	0.05
(1,595)	1:A:104:ASN:HD22	1:A:112:LEU:HD13	16	0.05
(1,592)	1:A:22:ASN:H	1:A:22:ASN:HD21	13	0.05
(1,592)	1:A:22:ASN:H	1:A:22:ASN:HD22	13	0.05
(1,581)	1:A:102:VAL:HG11	1:A:113:ARG:H	5	0.05
(1,581)	1:A:102:VAL:HG12	1:A:113:ARG:H	5	0.05
(1,581)	1:A:102:VAL:HG13	1:A:113:ARG:H	5	0.05
(1,575)	1:A:144:LEU:HD21	1:A:145:GLU:H	12	0.05
(1,575)	1:A:144:LEU:HD22	1:A:145:GLU:H	12	0.05
(1,575)	1:A:144:LEU:HD23	1:A:145:GLU:H	12	0.05
(1,572)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:141:PHE:H	18	0.05
(1,572)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:141:PHE:H	18	0.05
(1,572)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:141:PHE:H	18	0.05
(1,571)	1:A:140:LEU:HD11	1:A:141:PHE:H	4	0.05
(1,571)	1:A:140:LEU:HD12	1:A:141:PHE:H	4	0.05
(1,571)	1:A:140:LEU:HD13	1:A:141:PHE:H	4	0.05
(1,571)	1:A:140:LEU:HD11	1:A:141:PHE:H	11	0.05
(1,571)	1:A:140:LEU:HD12	1:A:141:PHE:H	11	0.05
(1,571)	1:A:140:LEU:HD13	1:A:141:PHE:H	11	0.05
(1,570)	1:A:140:LEU:H	1:A:140:LEU:HD21	8	0.05
(1,570)	1:A:140:LEU:H	1:A:140:LEU:HD22	8	0.05
(1,570)	1:A:140:LEU:H	1:A:140:LEU:HD23	8	0.05
(1,565)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:H	13	0.05
(1,565)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:H	13	0.05
(1,565)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:H	13	0.05
(1,561)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:134:TYR:H	11	0.05
(1,561)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:134:TYR:H	11	0.05
(1,561)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:134:TYR:H	11	0.05
(1,558)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:132:GLU:H	8	0.05
(1,558)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:132:GLU:H	8	0.05
(1,558)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:132:GLU:H	8	0.05
(1,551)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD11	10	0.05
(1,551)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD12	10	0.05
(1,551)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD13	10	0.05
(1,550)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG21	8	0.05
()===)				d on next mage



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,550)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG22	8	0.05
(1,550)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG23	8	0.05
(1,548)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD11	3	0.05
(1,548)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD12	3	0.05
(1,548)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD13	3	0.05
(1,542)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD21	2	0.05
(1,542)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD22	2	0.05
(1,542)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD23	2	0.05
(1,536)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:102:VAL:H	1	0.05
(1,536)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:102:VAL:H	1	0.05
(1,536)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:102:VAL:H	1	0.05
(1,535)	1:A:101:HIS:H	1:A:116:ILE:HD11	17	0.05
(1,535)	1:A:101:HIS:H	1:A:116:ILE:HD12	17	0.05
(1,535)	1:A:101:HIS:H	1:A:116:ILE:HD13	17	0.05
(1,53)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD21	5	0.05
(1,53)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD22	5	0.05
(1,53)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD23	5	0.05
(1,512)	1:A:79:LEU:HD21	1:A:87:ARG:H	10	0.05
(1,512)	1:A:79:LEU:HD22	1:A:87:ARG:H	10	0.05
(1,512)	1:A:79:LEU:HD23	1:A:87:ARG:H	10	0.05
(1,511)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:122:ARG:H	2	0.05
(1,511)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:122:ARG:H	2	0.05
(1,511)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:122:ARG:H	2	0.05
(1,505)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:76:GLU:H	14	0.05
(1,505)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:76:GLU:H	14	0.05
(1,505)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:76:GLU:H	14	0.05
(1,505)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:76:GLU:H	15	0.05
(1,505)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:76:GLU:H	15	0.05
(1,505)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:76:GLU:H	15	0.05
(1,501)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG21	6	0.05
(1,501)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG22	6	0.05
(1,501)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG23	6	0.05
(1,499)	1:A:71:ILE:H	1:A:71:ILE:HD11	4	0.05
(1,499)	1:A:71:ILE:H	1:A:71:ILE:HD12	4	0.05
(1,499)	1:A:71:ILE:H	1:A:71:ILE:HD13	4	0.05
(1,499)	1:A:71:ILE:H	1:A:71:ILE:HD11	14	0.05
(1,499)	1:A:71:ILE:H	1:A:71:ILE:HD12	14	0.05
(1,499)	1:A:71:ILE:H	1:A:71:ILE:HD13	14	0.05
(1,496)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:54:SER:H	9	0.05
(1,496)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:54:SER:H	9	0.05
(1,496)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:54:SER:H	9	0.05
(1,488)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:51:LEU:H	19	0.05



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,488)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:51:LEU:H	19	0.05
(1,488)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:51:LEU:H	19	0.05
(1,48)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:88:THR:H	20	0.05
(1,48)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:88:THR:H	20	0.05
(1,48)	1:A:79:LEU:HD13	1:A:88:THR:H	20	0.05
(1,473)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD11	5	0.05
(1,473)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD12	5	0.05
(1,473)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD13	5	0.05
(1,464)	1:A:16:GLN:H	1:A:46:VAL:HG11	13	0.05
(1,464)	1:A:16:GLN:H	1:A:46:VAL:HG12	13	0.05
(1,464)	1:A:16:GLN:H	1:A:46:VAL:HG13	13	0.05
(1,462)	1:A:45:ILE:HD11	1:A:46:VAL:H	1	0.05
(1,462)	1:A:45:ILE:HD12	1:A:46:VAL:H	1	0.05
(1,462)	1:A:45:ILE:HD13	1:A:46:VAL:H	1	0.05
(1,458)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:10:LYS:H	5	0.05
(1,458)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:10:LYS:H	5	0.05
(1,458)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:10:LYS:H	5	0.05
(1,456)	1:A:9:ILE:H	1:A:12:LEU:HD21	1	0.05
(1,456)	1:A:9:ILE:H	1:A:12:LEU:HD22	1	0.05
(1,456)	1:A:9:ILE:H	1:A:12:LEU:HD23	1	0.05
(1,455)	1:A:8:LYS:H	1:A:9:ILE:HD11	10	0.05
(1,455)	1:A:8:LYS:H	1:A:9:ILE:HD12	10	0.05
(1,455)	1:A:8:LYS:H	1:A:9:ILE:HD13	10	0.05
(1,454)	1:A:134:TYR:H	1:A:138:LEU:HD21	10	0.05
(1,454)	1:A:134:TYR:H	1:A:138:LEU:HD22	10	0.05
(1,454)	1:A:134:TYR:H	1:A:138:LEU:HD23	10	0.05
(1,451)	1:A:75:VAL:HG11	1:A:91:ARG:H	20	0.05
(1,451)	1:A:75:VAL:HG12	1:A:91:ARG:H	20	0.05
(1,451)	1:A:75:VAL:HG13	1:A:91:ARG:H	20	0.05
(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD11	1	0.05
(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD12	1	0.05
(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD13	1	0.05
(1,448)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:89:GLU:H	3	0.05
(1,448)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:89:GLU:H	3	0.05
(1,448)	1:A:79:LEU:HD13	1:A:89:GLU:H	3	0.05
(1,445)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:113:ARG:H	2	0.05
(1,445)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:113:ARG:H	2	0.05
(1,445)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:113:ARG:H	2	0.05
(1,445)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:113:ARG:H	17	0.05
(1,445)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:113:ARG:H	17	0.05
	4 A 400 TIAT TIGO	1 A 119 A D.C. II	17	0.05
(1,445)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:113:ARG:H	17	0.05



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,443)	1:A:90:VAL:HG22	1:A:101:HIS:H	1	0.05
(1,443)	1:A:90:VAL:HG23	1:A:101:HIS:H	1	0.05
(1,443)	1:A:90:VAL:HG21	1:A:101:HIS:H	8	0.05
(1,443)	1:A:90:VAL:HG22	1:A:101:HIS:H	8	0.05
(1,443)	1:A:90:VAL:HG23	1:A:101:HIS:H	8	0.05
(1,443)	1:A:90:VAL:HG21	1:A:101:HIS:H	9	0.05
(1,443)	1:A:90:VAL:HG22	1:A:101:HIS:H	9	0.05
(1,443)	1:A:90:VAL:HG23	1:A:101:HIS:H	9	0.05
(1,440)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:100:GLY:H	7	0.05
(1,440)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:100:GLY:H	7	0.05
(1,440)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:100:GLY:H	7	0.05
(1,44)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:48:GLY:H	6	0.05
(1,44)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:48:GLY:H	6	0.05
(1,44)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:48:GLY:H	6	0.05
(1,44)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:48:GLY:H	9	0.05
(1,44)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:48:GLY:H	9	0.05
(1,44)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:48:GLY:H	9	0.05
(1,44)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:48:GLY:H	20	0.05
(1,44)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:48:GLY:H	20	0.05
(1,44)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:48:GLY:H	20	0.05
(1,438)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:120:ALA:H	3	0.05
(1,438)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:120:ALA:H	3	0.05
(1,438)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:120:ALA:H	3	0.05
(1,436)	1:A:13:ASN:HD22	1:A:46:VAL:HG11	12	0.05
(1,436)	1:A:13:ASN:HD22	1:A:46:VAL:HG12	12	0.05
(1,436)	1:A:13:ASN:HD22	1:A:46:VAL:HG13	12	0.05
(1,435)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:26:GLU:H	15	0.05
(1,435)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:26:GLU:H	15	0.05
(1,435)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:26:GLU:H	15	0.05
(1,424)	1:A:90:VAL:HG21	1:A:115:CYS:H	7	0.05
(1,424)	1:A:90:VAL:HG22	1:A:115:CYS:H	7	0.05
(1,424)	1:A:90:VAL:HG23	1:A:115:CYS:H	7	0.05
(1,421)	1:A:43:VAL:H	1:A:43:VAL:HG11	19	0.05
(1,421)	1:A:43:VAL:H	1:A:43:VAL:HG12	19	0.05
(1,421)	1:A:43:VAL:H	1:A:43:VAL:HG13	19	0.05
(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD21	2	0.05
(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD22	2	0.05
(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD23	2	0.05
(1,416)	1:A:86:ILE:H	1:A:86:ILE:HD11	17	0.05
(1,416)	1:A:86:ILE:H	1:A:86:ILE:HD12	17	0.05
(1,416)	1:A:86:ILE:H	1:A:86:ILE:HD13	17	0.05
(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD21	1	0.05



 $Continued\ from\ previous\ page...$

(1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD23 1 0.05 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD23 1 0.05 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD21 4 0.05 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD22 4 0.05 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD23 4 0.05 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD21 5 0.05 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD22 5 0.05 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD23 5 0.05 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD21 14 0.05 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD22 14 0.05 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD23 14 0.05 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD23 14 0.05 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD23 14 0.05 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD22 20 <th>Key</th> <th>Atom-1</th> <th>Atom-2</th> <th>Model</th> <th>Violation (Å)</th>	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD21 4 0.05 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD22 4 0.05 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD23 4 0.05 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD21 5 0.05 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD22 5 0.05 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD23 5 0.05 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD21 14 0.05 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD21 14 0.05 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD22 14 0.05 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD23 14 0.05 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD23 14 0.05 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD23 12 0.05 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD23 20 0.05 (1,415) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:79:LEU:HD22 2	(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD22	1	0.05
(1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD22 4 0.05 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD23 4 0.05 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD21 5 0.05 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD22 5 0.05 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD23 5 0.05 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD21 14 0.05 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD22 14 0.05 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD23 14 0.05 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD23 14 0.05 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD21 20 0.05 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD22 20 0.05 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD23 20 0.05 (1,415) 1:A:46:VAL:HG21 2 0.05 (1,417) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG221 5 0.05	(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD23	1	0.05
(1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD23 4 0.05 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD21 5 0.05 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD22 5 0.05 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD23 5 0.05 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD21 14 0.05 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD22 14 0.05 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD23 14 0.05 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD23 14 0.05 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD21 20 0.05 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD21 20 0.05 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD22 20 0.05 (1,414) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG21 5 0.05 (1,41) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG22 5 0.05 (1,40) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:99:VAL:HG23 5 </td <td>(1,415)</td> <td>1:A:79:LEU:H</td> <td>1:A:79:LEU:HD21</td> <td>4</td> <td>0.05</td>	(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD21	4	0.05
(1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD21 5 0.05 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD22 5 0.05 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD23 5 0.05 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD21 14 0.05 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD22 14 0.05 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD23 14 0.05 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD23 14 0.05 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD21 20 0.05 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD22 20 0.05 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD23 20 0.05 (1,415) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG21 5 0.05 (1,411) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG22 5 0.05 (1,41) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:97:SER:H 14 0.05 (1,41) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:97:SER:H 14 <td>(1,415)</td> <td>1:A:79:LEU:H</td> <td>1:A:79:LEU:HD22</td> <td>4</td> <td>0.05</td>	(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD22	4	0.05
(1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD22 5 0.05 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD23 5 0.05 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD21 14 0.05 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD22 14 0.05 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD23 14 0.05 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD21 20 0.05 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD22 20 0.05 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD23 20 0.05 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD23 20 0.05 (1,414) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG21 5 0.05 (1,41) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG22 5 0.05 (1,41) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:97:SER:H 14 0.05 (1,40) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:97:SER:H 14 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG21 5<	(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD23	4	0.05
(1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD23 5 0.05 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD21 14 0.05 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD22 14 0.05 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD23 14 0.05 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD21 20 0.05 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD22 20 0.05 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD23 20 0.05 (1,41) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD23 20 0.05 (1,41) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG21 5 0.05 (1,41) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG22 5 0.05 (1,41) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:97:SER:H 14 0.05 (1,40) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:97:SER:H 14 0.05 (1,40) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:97:SER:H 14 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG21 5 <td>(1,415)</td> <td>1:A:79:LEU:H</td> <td>1:A:79:LEU:HD21</td> <td>5</td> <td>0.05</td>	(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD21	5	0.05
(1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD21 14 0.05 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD22 14 0.05 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD23 14 0.05 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD21 20 0.05 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD22 20 0.05 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD23 20 0.05 (1,411) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG21 5 0.05 (1,41) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG22 5 0.05 (1,41) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG23 5 0.05 (1,40) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:97:SER:H 14 0.05 (1,40) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:97:SER:H 14 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG21 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG23 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG23 <t< td=""><td>(1,415)</td><td>1:A:79:LEU:H</td><td>1:A:79:LEU:HD22</td><td>5</td><td>0.05</td></t<>	(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD22	5	0.05
(1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD22 14 0.05 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD23 14 0.05 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD21 20 0.05 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD22 20 0.05 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD23 20 0.05 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD23 20 0.05 (1,411) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG21 5 0.05 (1,41) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG23 5 0.05 (1,41) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:97:SER:H 14 0.05 (1,40) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:97:SER:H 14 0.05 (1,40) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:97:SER:H 14 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG21 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG23 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG23 <	(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD23	5	0.05
(1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD23 14 0.05 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD21 20 0.05 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD22 20 0.05 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD23 20 0.05 (1,41) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG21 5 0.05 (1,41) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG22 5 0.05 (1,41) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG23 5 0.05 (1,41) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG23 5 0.05 (1,40) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:97:SER:H 14 0.05 (1,40) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:97:SER:H 14 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG21 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG22 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG23 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 <td< td=""><td>(1,415)</td><td>1:A:79:LEU:H</td><td>1:A:79:LEU:HD21</td><td>14</td><td>0.05</td></td<>	(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD21	14	0.05
(1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD21 20 0.05 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD22 20 0.05 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD23 20 0.05 (1,41) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG21 5 0.05 (1,41) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG22 5 0.05 (1,41) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG23 5 0.05 (1,41) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG23 5 0.05 (1,40) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG23 5 0.05 (1,40) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:97:SER:H 14 0.05 (1,40) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:97:SER:H 14 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG21 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG23 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG23 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 5	(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD22	14	0.05
(1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD22 20 0.05 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD23 20 0.05 (1,41) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG21 5 0.05 (1,41) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG22 5 0.05 (1,41) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG23 5 0.05 (1,40) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG23 5 0.05 (1,40) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:97:SER:H 14 0.05 (1,40) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:97:SER:H 14 0.05 (1,40) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:97:SER:H 14 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG21 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG23 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG23 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 <t< td=""><td>(1,415)</td><td>1:A:79:LEU:H</td><td>1:A:79:LEU:HD23</td><td>14</td><td>0.05</td></t<>	(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD23	14	0.05
(1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD23 20 0.05 (1,41) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG21 5 0.05 (1,41) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG22 5 0.05 (1,41) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG23 5 0.05 (1,40) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:97:SER:H 14 0.05 (1,40) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:97:SER:H 14 0.05 (1,40) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:97:SER:H 14 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG21 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG23 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG21 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG23 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG21 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG21	(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD21	20	0.05
(1,41) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG21 5 0.05 (1,41) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG22 5 0.05 (1,41) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG23 5 0.05 (1,40) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:97:SER:H 14 0.05 (1,40) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:97:SER:H 14 0.05 (1,40) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:97:SER:H 14 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG21 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG23 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG21 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG23 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG21 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG22	(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD22	20	0.05
(1,41) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG22 5 0.05 (1,41) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG23 5 0.05 (1,40) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:97:SER:H 14 0.05 (1,40) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:97:SER:H 14 0.05 (1,40) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:97:SER:H 14 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG21 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG22 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG21 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG22 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG23 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG22 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG21 13 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG22 13 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG22 </td <td>(1,415)</td> <td>1:A:79:LEU:H</td> <td>1:A:79:LEU:HD23</td> <td>20</td> <td>0.05</td>	(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD23	20	0.05
(1,41) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG23 5 0.05 (1,40) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:97:SER:H 14 0.05 (1,40) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:97:SER:H 14 0.05 (1,40) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:97:SER:H 14 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG21 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG22 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG21 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG22 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG21 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG21 13 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG22 13 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG23 13 0.05	(1,41)	1:A:45:ILE:H	1:A:46:VAL:HG21	5	0.05
(1,40) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:97:SER:H 14 0.05 (1,40) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:97:SER:H 14 0.05 (1,40) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:97:SER:H 14 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG21 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG22 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG21 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG22 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG23 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG22 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG22 13 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG23 13 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG23 13 0.05	(1,41)	1:A:45:ILE:H	1:A:46:VAL:HG22	5	0.05
(1,40) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:97:SER:H 14 0.05 (1,40) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:97:SER:H 14 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG21 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG22 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG23 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG21 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG23 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG21 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG21 13 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG22 13 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG23 13 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG23 13 0.05	(1,41)	1:A:45:ILE:H	1:A:46:VAL:HG23	5	0.05
(1,40) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:97:SER:H 14 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG21 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG22 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG23 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG21 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG23 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG21 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG21 13 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG22 13 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG23 13 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG23 13 0.05	(1,40)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:97:SER:H	14	0.05
(1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG21 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG22 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG23 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG21 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG23 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG21 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG22 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG21 13 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG22 13 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG23 13 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG23 13 0.05	(1,40)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:97:SER:H	14	0.05
(1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG22 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG23 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG21 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG22 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG21 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG22 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG21 13 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG22 13 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG23 13 0.05	(1,40)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:97:SER:H	14	0.05
(1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG23 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG21 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG22 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG23 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG21 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG21 13 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG22 13 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG23 13 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG23 13 0.05	(1,387)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:90:VAL:HG21	5	0.05
(1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG21 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG22 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG23 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG21 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG21 13 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG22 13 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG23 13 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG23 13 0.05	(1,387)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:90:VAL:HG22	5	0.05
(1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG22 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG23 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG21 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG22 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG21 13 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG22 13 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG23 13 0.05	(1,387)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:90:VAL:HG23	5	0.05
(1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG23 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG21 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG22 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG21 13 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG22 13 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG23 13 0.05	(1,387)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:90:VAL:HG21	5	0.05
(1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG21 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG22 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG21 13 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG22 13 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG23 13 0.05	(1,387)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:90:VAL:HG22	5	0.05
(1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG22 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG21 13 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG22 13 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG23 13 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG23 13 0.05	(1,387)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:90:VAL:HG23	5	0.05
(1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG21 13 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG22 13 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG23 13 0.05	(1,387)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG21	5	0.05
(1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 5 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG21 13 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG22 13 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG23 13 0.05	(1,387)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG22	5	0.05
(1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG21 13 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG22 13 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG23 13 0.05	(1,387)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG23	5	0.05
(1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG22 13 0.05 (1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG23 13 0.05		1:A:75:VAL:HG21	1:A:90:VAL:HG21	13	0.05
		1:A:75:VAL:HG21	1:A:90:VAL:HG22	13	0.05
	(1,387)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:90:VAL:HG23	13	0.05
(1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG21 13 0.05	(1,387)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:90:VAL:HG21	13	0.05
(1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG22 13 0.05		1:A:75:VAL:HG22	1:A:90:VAL:HG22	13	0.05
(1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG23 13 0.05		1:A:75:VAL:HG22	1:A:90:VAL:HG23	13	0.05
(1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG21 13 0.05	` /	1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG21	13	0.05
(1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG22 13 0.05	· · /	1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG22	13	0.05
(1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 13 0.05		1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG23	13	0.05
(1,377) 1:A:134:TYR:H 1:A:135:GLU:H 6 0.05		1:A:134:TYR:H	1:A:135:GLU:H	6	0.05
(1,370) 1:A:129:LEU:H 1:A:130:LYS:H 17 0.05		1:A:129:LEU:H	1:A:130:LYS:H	17	0.05
(1,361) 1:A:45:ILE:H 1:A:122:ARG:H 11 0.05	(1,361)	1:A:45:ILE:H	1:A:122:ARG:H	11	0.05
(1,355) 1:A:67:PHE:H 1:A:114:TYR:H 15 0.05	· · /	1:A:67:PHE:H	1:A:114:TYR:H	15	0.05



 $Continued\ from\ previous\ page...$

(1,355) 1:A:67:PHE:H 1:A:114:TYR:H 20 (1,337) 1:A:76:GLU:H 1:A:91:ARG:H 12 (1,337) 1:A:76:GLU:H 1:A:91:ARG:H 13 (1,337) 1:A:76:GLU:H 1:A:91:ARG:H 18 (1,332) 1:A:85:MET:H 1:A:86:ILE:H 19 (1,331) 1:A:80:ASP:H 1:A:88:THR:H 14 (1,329) 1:A:79:LEU:H 1:A:89:GLU:H 12	0.05 0.05 0.05 0.05 0.05 0.05 0.05 0.05
(1,337) 1:A:76:GLU:H 1:A:91:ARG:H 13 (1,337) 1:A:76:GLU:H 1:A:91:ARG:H 18 (1,332) 1:A:85:MET:H 1:A:86:ILE:H 19 (1,331) 1:A:80:ASP:H 1:A:88:THR:H 14	0.05 0.05 0.05 0.05 0.05
(1,337) 1:A:76:GLU:H 1:A:91:ARG:H 18 (1,332) 1:A:85:MET:H 1:A:86:ILE:H 19 (1,331) 1:A:80:ASP:H 1:A:88:THR:H 14	0.05 0.05 0.05 0.05
(1,332) 1:A:85:MET:H 1:A:86:ILE:H 19 (1,331) 1:A:80:ASP:H 1:A:88:THR:H 14	0.05 0.05 0.05
(1,331) 1:A:80:ASP:H 1:A:88:THR:H 14	0.05
· / /	0.05
(1,329) 1:A:79:LEU:H 1:A:89:GLU:H 12	
1	0.05
(1,327) 1:A:78:LYS:H 1:A:89:GLU:H 2	
(1,32) 1:A:103:PHE:H 1:A:112:LEU:HD21 10	0.05
(1,32) 1:A:103:PHE:H 1:A:112:LEU:HD22 10	0.05
(1,32) 1:A:103:PHE:H 1:A:112:LEU:HD23 10	0.05
(1,312) 1:A:41:LEU:H 1:A:124:VAL:H 4	0.05
(1,31) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:49:LYS:H 19	0.05
(1,31) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:49:LYS:H 19	0.05
(1,31) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:49:LYS:H 19	0.05
(1,309) 1:A:33:TYR:H 1:A:36:HIS:H 12	0.05
(1,307) 1:A:32:GLU:H 1:A:34:TRP:H 8	0.05
(1,307) 1:A:32:GLU:H 1:A:34:TRP:H 11	0.05
(1,306) 1:A:31:ASN:H 1:A:32:GLU:H 20	0.05
(1,30) 1:A:106:GLY:H 1:A:112:LEU:HD21 11	0.05
(1,30) 1:A:106:GLY:H 1:A:112:LEU:HD22 11	0.05
(1,30) 1:A:106:GLY:H 1:A:112:LEU:HD23 11	0.05
(1,299) 1:A:15:MET:H 1:A:18:GLU:H 20	0.05
(1,285) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:H 6	0.05
(1,279) 1:A:26:GLU:H 1:A:64:TRP:HE1 5	0.05
(1,267) 1:A:21:GLN:H 1:A:24:GLY:H 12	0.05
(1,267) 1:A:21:GLN:H 1:A:24:GLY:H 15	0.05
(1,266) 1:A:19:VAL:H 1:A:21:GLN:H 8	0.05
(1,266) 1:A:19:VAL:H 1:A:21:GLN:H 11	0.05
(1,266) 1:A:19:VAL:H 1:A:21:GLN:H 15	0.05
(1,266) 1:A:19:VAL:H 1:A:21:GLN:H 18	0.05
(1,261) 1:A:99:LEU:HD21 1:A:116:ILE:HD11 18	0.05
(1,261) 1:A:99:LEU:HD21 1:A:116:ILE:HD12 18	0.05
(1,261) 1:A:99:LEU:HD21 1:A:116:ILE:HD13 18	0.05
(1,261) 1:A:99:LEU:HD22 1:A:116:ILE:HD11 18	0.05
(1,261) 1:A:99:LEU:HD22 1:A:116:ILE:HD12 18	0.05
(1,261) 1:A:99:LEU:HD22 1:A:116:ILE:HD13 18	0.05
(1,261) 1:A:99:LEU:HD23 1:A:116:ILE:HD11 18	0.05
(1,261) 1:A:99:LEU:HD23 1:A:116:ILE:HD12 18	0.05
(1,261) 1:A:99:LEU:HD23 1:A:116:ILE:HD13 18	0.05
(1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD11 12	0.05
(1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD12 12	0.05



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD13	12	0.05
(1,259)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD11	4	0.05
(1,259)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD12	4	0.05
(1,259)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD13	4	0.05
(1,259)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD11	4	0.05
(1,259)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD12	4	0.05
(1,259)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD13	4	0.05
(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD11	4	0.05
(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD12	4	0.05
(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD13	4	0.05
(1,25)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:123:PHE:H	17	0.05
(1,25)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:123:PHE:H	17	0.05
(1,25)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:123:PHE:H	17	0.05
(1,244)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:130:LYS:H	19	0.05
(1,244)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:130:LYS:H	19	0.05
(1,244)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:130:LYS:H	19	0.05
(1,244)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:130:LYS:H	20	0.05
(1,244)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:130:LYS:H	20	0.05
(1,244)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:130:LYS:H	20	0.05
(1,24)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:134:TYR:H	2	0.05
(1,24)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:134:TYR:H	2	0.05
(1,24)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:134:TYR:H	2	0.05
(1,24)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:134:TYR:H	13	0.05
(1,24)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:134:TYR:H	13	0.05
(1,24)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:134:TYR:H	13	0.05
(1,211)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:138:LEU:HD11	9	0.05
(1,211)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:138:LEU:HD12	9	0.05
(1,211)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:138:LEU:HD13	9	0.05
(1,211)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:138:LEU:HD11	9	0.05
(1,211)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:138:LEU:HD12	9	0.05
(1,211)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:138:LEU:HD13	9	0.05
(1,211)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:138:LEU:HD11	9	0.05
(1,211)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:138:LEU:HD12	9	0.05
(1,211)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:138:LEU:HD13	9	0.05
(1,2)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:114:TYR:H	13	0.05
(1,2)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:114:TYR:H	13	0.05
(1,2)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:114:TYR:H	13	0.05
(1,193)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:HD22	13	0.05
(1,193)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:HD22	13	0.05
(1,193)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:HD22	13	0.05
(1,19)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:127:HIS:H	6	0.05
(1,19)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:127:HIS:H	6	0.05
	5: 			d on next mage



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,19)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:127:HIS:H	6	0.05
(1,184)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:112:LEU:HD11	2	0.05
(1,184)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:112:LEU:HD12	2	0.05
(1,184)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:112:LEU:HD13	2	0.05
(1,184)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:112:LEU:HD11	2	0.05
(1,184)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:112:LEU:HD12	2	0.05
(1,184)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:112:LEU:HD13	2	0.05
(1,184)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:112:LEU:HD11	2	0.05
(1,184)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:112:LEU:HD12	2	0.05
(1,184)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:112:LEU:HD13	2	0.05
(1,180)	1:A:90:VAL:HG21	1:A:91:ARG:H	14	0.05
(1,180)	1:A:90:VAL:HG22	1:A:91:ARG:H	14	0.05
(1,180)	1:A:90:VAL:HG23	1:A:91:ARG:H	14	0.05
(1,171)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG11	2	0.05
(1,171)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG12	2	0.05
(1,171)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG13	2	0.05
(1,171)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG11	6	0.05
(1,171)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG12	6	0.05
(1,171)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG13	6	0.05
(1,171)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG11	7	0.05
(1,171)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG12	7	0.05
(1,171)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG13	7	0.05
(1,166)	1:A:40:GLY:H	1:A:54:SER:H	15	0.05
(1,164)	1:A:76:GLU:H	1:A:77:GLU:H	4	0.05
(1,163)	1:A:15:MET:H	1:A:17:TYR:H	6	0.05
(1,163)	1:A:15:MET:H	1:A:17:TYR:H	16	0.05
(1,161)	1:A:133:GLY:H	1:A:135:GLU:H	2	0.05
(1,161)	1:A:133:GLY:H	1:A:135:GLU:H	3	0.05
(1,16)	1:A:102:VAL:H	1:A:102:VAL:HG11	2	0.05
(1,16)	1:A:102:VAL:H	1:A:102:VAL:HG12	2	0.05
(1,16)	1:A:102:VAL:H	1:A:102:VAL:HG13	2	0.05
(1,16)	1:A:102:VAL:H	1:A:102:VAL:HG11	4	0.05
(1,16)	1:A:102:VAL:H	1:A:102:VAL:HG12	4	0.05
(1,16)	1:A:102:VAL:H	1:A:102:VAL:HG13	4	0.05
(1,16)	1:A:102:VAL:H	1:A:102:VAL:HG11	7	0.05
(1,16)	1:A:102:VAL:H	1:A:102:VAL:HG12	7	0.05
(1,16)	1:A:102:VAL:H	1:A:102:VAL:HG13	7	0.05
(1,16)	1:A:102:VAL:H	1:A:102:VAL:HG11	13	0.05
(1,16)	1:A:102:VAL:H	1:A:102:VAL:HG12	13	0.05
(1,16)	1:A:102:VAL:H	1:A:102:VAL:HG13	13	0.05
(1,150)	1:A:81:THR:H	1:A:82:SER:H	2	0.05
(1,148)	1:A:44:ASP:H	1:A:122:ARG:H	10	0.05



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,148)	1:A:44:ASP:H	1:A:122:ARG:H	19	0.05
(1,147)	1:A:130:LYS:H	1:A:134:TYR:H	5	0.05
(1,146)	1:A:130:LYS:H	1:A:132:GLU:H	5	0.05
(1,146)	1:A:130:LYS:H	1:A:132:GLU:H	9	0.05
(1,145)	1:A:128:LYS:H	1:A:130:LYS:H	8	0.05
(1,14)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD21	2	0.05
(1,14)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD22	2	0.05
(1,14)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD23	2	0.05
(1,14)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD21	4	0.05
(1,14)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD22	4	0.05
(1,14)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD23	4	0.05
(1,139)	1:A:46:VAL:H	1:A:48:GLY:H	2	0.05
(1,13)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:131:GLU:H	3	0.05
(1,13)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:131:GLU:H	3	0.05
(1,13)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:131:GLU:H	3	0.05
(1,119)	1:A:88:THR:H	1:A:102:VAL:H	16	0.05
(1,114)	1:A:29:PHE:H	1:A:31:ASN:H	20	0.05
(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD21	10	0.05
(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD22	10	0.05
(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD23	10	0.05
(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD21	18	0.05
(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD22	18	0.05
(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD23	18	0.05
(1,99)	1:A:20:THR:H	1:A:23:ASN:H	16	0.04
(1,98)	1:A:31:ASN:H	1:A:34:TRP:H	20	0.04
(1,90)	1:A:63:GLY:H	1:A:64:TRP:H	18	0.04
(1,87)	1:A:31:ASN:H	1:A:34:TRP:HE1	14	0.04
(1,84)	1:A:10:LYS:H	1:A:12:LEU:H	1	0.04
(1,84)	1:A:10:LYS:H	1:A:12:LEU:H	7	0.04
(1,83)	1:A:9:ILE:H	1:A:12:LEU:H	10	0.04
(1,83)	1:A:9:ILE:H	1:A:12:LEU:H	14	0.04
(1,8)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:42:TYR:H	8	0.04
(1,8)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:42:TYR:H	8	0.04
(1,8)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:42:TYR:H	8	0.04
(1,78)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:H	17	0.04
(1,7)	1:A:41:LEU:H	1:A:41:LEU:HD11	8	0.04
(1,7)	1:A:41:LEU:H	1:A:41:LEU:HD12	8	0.04
(1,7)	1:A:41:LEU:H	1:A:41:LEU:HD13	8	0.04
(1,7)	1:A:41:LEU:H	1:A:41:LEU:HD11	10	0.04
(1,7)	1:A:41:LEU:H	1:A:41:LEU:HD12	10	0.04
(1,7)	1:A:41:LEU:H	1:A:41:LEU:HD13	10	0.04
(1,63)	1:A:54:SER:HG	1:A:57:LYS:H	3	0.04
() - /		·-		d on next nage



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,63)	1:A:54:SER:HG	1:A:57:LYS:H	19	0.04
(1,610)	1:A:115:CYS:H	1:A:101:HIS:H	15	0.04
(1,609)	1:A:102:VAL:H	1:A:88:THR:H	18	0.04
(1,608)	1:A:100:GLY:H	1:A:90:VAL:H	5	0.04
(1,608)	1:A:100:GLY:H	1:A:90:VAL:H	16	0.04
(1,598)	1:A:110:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD11	4	0.04
(1,598)	1:A:110:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD12	4	0.04
(1,598)	1:A:110:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD13	4	0.04
(1,598)	1:A:110:ASN:HD22	1:A:112:LEU:HD11	4	0.04
(1,598)	1:A:110:ASN:HD22	1:A:112:LEU:HD12	4	0.04
(1,598)	1:A:110:ASN:HD22	1:A:112:LEU:HD13	4	0.04
(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG11	15	0.04
(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG12	15	0.04
(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG13	15	0.04
(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG11	20	0.04
(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG12	20	0.04
(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG13	20	0.04
(1,583)	1:A:90:VAL:H	1:A:102:VAL:HG21	17	0.04
(1,583)	1:A:90:VAL:H	1:A:102:VAL:HG22	17	0.04
(1,583)	1:A:90:VAL:H	1:A:102:VAL:HG23	17	0.04
(1,581)	1:A:102:VAL:HG11	1:A:113:ARG:H	17	0.04
(1,581)	1:A:102:VAL:HG12	1:A:113:ARG:H	17	0.04
(1,581)	1:A:102:VAL:HG13	1:A:113:ARG:H	17	0.04
(1,565)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:H	20	0.04
(1,565)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:H	20	0.04
(1,565)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:H	20	0.04
(1,564)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:137:TYR:H	17	0.04
(1,564)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:137:TYR:H	17	0.04
(1,564)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:137:TYR:H	17	0.04
(1,559)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:132:GLU:H	2	0.04
(1,559)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:132:GLU:H	2	0.04
(1,559)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:132:GLU:H	2	0.04
(1,558)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:132:GLU:H	17	0.04
(1,558)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:132:GLU:H	17	0.04
(1,558)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:132:GLU:H	17	0.04
(1,556)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD11	10	0.04
(1,556)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD12	10	0.04
(1,556)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD13	10	0.04
(1,550)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG21	17	0.04
(1,550)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG22	17	0.04
(1,550)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG23	17	0.04
(1,536)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:102:VAL:H	12	0.04



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,536)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:102:VAL:H	12	0.04
(1,536)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:102:VAL:H	12	0.04
(1,536)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:102:VAL:H	15	0.04
(1,536)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:102:VAL:H	15	0.04
(1,536)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:102:VAL:H	15	0.04
(1,535)	1:A:101:HIS:H	1:A:116:ILE:HD11	2	0.04
(1,535)	1:A:101:HIS:H	1:A:116:ILE:HD12	2	0.04
(1,535)	1:A:101:HIS:H	1:A:116:ILE:HD13	2	0.04
(1,534)	1:A:101:HIS:H	1:A:102:VAL:HG11	15	0.04
(1,534)	1:A:101:HIS:H	1:A:102:VAL:HG12	15	0.04
(1,534)	1:A:101:HIS:H	1:A:102:VAL:HG13	15	0.04
(1,518)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD11	2	0.04
(1,518)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD12	2	0.04
(1,518)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD13	2	0.04
(1,518)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD11	6	0.04
(1,518)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD12	6	0.04
(1,518)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD13	6	0.04
(1,518)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD11	14	0.04
(1,518)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD12	14	0.04
(1,518)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD13	14	0.04
(1,518)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD11	15	0.04
(1,518)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD12	15	0.04
(1,518)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD13	15	0.04
(1,518)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD11	18	0.04
(1,518)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD12	18	0.04
(1,518)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD13	18	0.04
(1,512)	1:A:79:LEU:HD21	1:A:87:ARG:H	8	0.04
(1,512)	1:A:79:LEU:HD22	1:A:87:ARG:H	8	0.04
(1,512)	1:A:79:LEU:HD23	1:A:87:ARG:H	8	0.04
(1,507)	1:A:75:VAL:HG11	1:A:77:GLU:H	6	0.04
(1,507)	1:A:75:VAL:HG12	1:A:77:GLU:H	6	0.04
(1,507)	1:A:75:VAL:HG13	1:A:77:GLU:H	6	0.04
(1,507)	1:A:75:VAL:HG11	1:A:77:GLU:H	13	0.04
(1,507)	1:A:75:VAL:HG12	1:A:77:GLU:H	13	0.04
(1,507)	1:A:75:VAL:HG13	1:A:77:GLU:H	13	0.04
(1,497)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:H	10	0.04
(1,497)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:H	10	0.04
(1,497)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:H	10	0.04
(1,496)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:54:SER:H	10	0.04
(1,496)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:54:SER:H	10	0.04
(1,496)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:54:SER:H	10	0.04
(1,496)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:54:SER:H	18	0.04



 $Continued\ from\ previous\ page...$

(1,496) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:54:SER:H 18 0.04 (1,496) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:54:SER:H 18 0.04 (1,494) 1:A:52:PHE:H 1:A:71:ILE:HD11 10 0.04 (1,494) 1:A:52:PHE:H 1:A:71:ILE:HD12 10 0.04 (1,494) 1:A:52:PHE:H 1:A:71:ILE:HD13 10 0.04 (1,493) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:52:PHE:H 8 0.04 (1,493) 1:A:73:VAL:HG12 1:A:52:PHE:H 8 0.04 (1,493) 1:A:78:LYS:H 1:A:90:VAL:HG11 20 0.04 (1,49) 1:A:78:LYS:H 1:A:90:VAL:HG12 20 0.04 (1,49) 1:A:78:LYS:H 1:A:90:VAL:HG13 20 0.04 (1,49) 1:A:78:LYS:H 1:A:90:VAL:HG13 20 0.04 (1,476) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:44:ASP:H 15 0.04 (1,476) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:44:ASP:H 15 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD11 4<	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,494) 1:A:52:PHE:H 1:A:71:ILE:HD11 10 0.04 (1,494) 1:A:52:PHE:H 1:A:71:ILE:HD12 10 0.04 (1,494) 1:A:52:PHE:H 1:A:71:ILE:HD13 10 0.04 (1,493) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:52:PHE:H 8 0.04 (1,493) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:52:PHE:H 8 0.04 (1,493) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:52:PHE:H 8 0.04 (1,499) 1:A:78:LYS:H 1:A:90:VAL:HG12 20 0.04 (1,49) 1:A:78:LYS:H 1:A:90:VAL:HG12 20 0.04 (1,49) 1:A:78:LYS:H 1:A:90:VAL:HG12 20 0.04 (1,49) 1:A:78:LYS:H 1:A:90:VAL:HG12 20 0.04 (1,476) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:44:ASP:H 15 0.04 (1,476) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:44:ASP:H 15 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD11 4 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD13 4 </td <td>(1,496)</td> <td>1:A:41:LEU:HD22</td> <td>1:A:54:SER:H</td> <td>18</td> <td>0.04</td>	(1,496)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:54:SER:H	18	0.04
(1,494) 1:A:52:PHE:H 1:A:71:ILE:HD12 10 0.04 (1,494) 1:A:52:PHE:H 1:A:71:ILE:HD13 10 0.04 (1,493) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:52:PHE:H 8 0.04 (1,493) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:52:PHE:H 8 0.04 (1,493) 1:A:78:LYS:H 1:A:90:VAL:HG11 20 0.04 (1,49) 1:A:78:LYS:H 1:A:90:VAL:HG12 20 0.04 (1,49) 1:A:78:LYS:H 1:A:90:VAL:HG13 20 0.04 (1,49) 1:A:78:LYS:H 1:A:90:VAL:HG13 20 0.04 (1,476) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:44:ASP:H 15 0.04 (1,476) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:44:ASP:H 15 0.04 (1,476) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD11 4 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD13 4 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD11 12 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD13 1	(1,496)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:54:SER:H	18	0.04
(1,494) 1:A:52:PHE:H 1:A:71:ILE:HD13 10 0.04 (1,493) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:52:PHE:H 8 0.04 (1,493) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:52:PHE:H 8 0.04 (1,493) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:52:PHE:H 8 0.04 (1,49) 1:A:78:LYS:H 1:A:90:VAL:HG12 20 0.04 (1,49) 1:A:78:LYS:H 1:A:90:VAL:HG13 20 0.04 (1,49) 1:A:78:LYS:H 1:A:90:VAL:HG13 20 0.04 (1,49) 1:A:78:LYS:H 1:A:90:VAL:HG13 20 0.04 (1,476) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:44:ASP:H 15 0.04 (1,476) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:44:ASP:H 15 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD11 4 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD13 4 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD13 4 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD13 12 </td <td>(1,494)</td> <td>1:A:52:PHE:H</td> <td>1:A:71:ILE:HD11</td> <td>10</td> <td>0.04</td>	(1,494)	1:A:52:PHE:H	1:A:71:ILE:HD11	10	0.04
(1,493) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:52:PHE:H 8 0.04 (1,493) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:52:PHE:H 8 0.04 (1,493) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:52:PHE:H 8 0.04 (1,499) 1:A:78:LYS:H 1:A:90:VAL:HG11 20 0.04 (1,49) 1:A:78:LYS:H 1:A:90:VAL:HG12 20 0.04 (1,476) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:44:ASP:H 15 0.04 (1,476) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:44:ASP:H 15 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD11 4 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD13 4 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD13 12 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD13 12<	(1,494)	1:A:52:PHE:H	1:A:71:ILE:HD12	10	0.04
(1,493) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:52:PHE:H 8 0.04 (1,493) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:52:PHE:H 8 0.04 (1,49) 1:A:78:LYS:H 1:A:90:VAL:HG11 20 0.04 (1,49) 1:A:78:LYS:H 1:A:90:VAL:HG12 20 0.04 (1,476) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:44:ASP:H 15 0.04 (1,476) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:44:ASP:H 15 0.04 (1,476) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:44:ASP:H 15 0.04 (1,476) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:44:ASP:H 15 0.04 (1,476) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD11 4 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD13 4 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD11 12 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD11 12 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD13 12 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD13 <t< td=""><td>(1,494)</td><td>1:A:52:PHE:H</td><td>1:A:71:ILE:HD13</td><td>10</td><td>0.04</td></t<>	(1,494)	1:A:52:PHE:H	1:A:71:ILE:HD13	10	0.04
(1,493) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:52:PHE:H 8 0.04 (1,49) 1:A:78:LYS:H 1:A:90:VAL:HG11 20 0.04 (1,49) 1:A:78:LYS:H 1:A:90:VAL:HG12 20 0.04 (1,49) 1:A:78:LYS:H 1:A:90:VAL:HG13 20 0.04 (1,476) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:44:ASP:H 15 0.04 (1,476) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:44:ASP:H 15 0.04 (1,476) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:44:ASP:H 15 0.04 (1,476) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:44:ASP:H 15 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD11 4 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD12 4 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD11 12 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD12 12 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD13 12 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD13 <t< td=""><td>(1,493)</td><td>1:A:43:VAL:HG11</td><td>1:A:52:PHE:H</td><td>8</td><td>0.04</td></t<>	(1,493)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:52:PHE:H	8	0.04
(1,49) 1:A:78:LYS:H 1:A:90:VAL:HG11 20 0.04 (1,49) 1:A:78:LYS:H 1:A:90:VAL:HG12 20 0.04 (1,49) 1:A:78:LYS:H 1:A:90:VAL:HG13 20 0.04 (1,476) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:44:ASP:H 15 0.04 (1,476) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:44:ASP:H 15 0.04 (1,476) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:44:ASP:H 15 0.04 (1,476) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:44:ASP:H 15 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD11 4 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD12 4 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD12 4 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD13 4 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD11 12 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD11 12 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD12 12 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD13 13 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD13 13 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD14 13 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD14 13 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD14 13 0.04 (1,473) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:42:TYR:H 6 0.04 (1,472) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:42:TYR:H 6 0.04 (1,472) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:42:TYR:H 6 0.04 (1,472) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:42:TYR:H 6 0.04 (1,471) 1:A:19:VAL:HG14 1:A:25:THR:H 1 0.04 (1,471) 1:A:19:VAL:HG14 1:A:25:THR:H 1 0.04 (1,471) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:25:THR:H 1 0.04 (1,471) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:42:TYR:H 15 0.04 (1,469) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:23:ASN:H 1 0.04 (1,468) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:23:ASN:H 1 0.04 (1,468) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:23:	(1,493)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:52:PHE:H	8	0.04
(1,49) 1:A:78:LYS:H 1:A:90:VAL:HG12 20 0.04 (1,49) 1:A:78:LYS:H 1:A:90:VAL:HG13 20 0.04 (1,476) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:44:ASP:H 15 0.04 (1,476) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:44:ASP:H 15 0.04 (1,476) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:44:ASP:H 15 0.04 (1,476) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:44:ASP:H 15 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:42:LEU:HD11 4 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD11 4 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD12 4 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD13 4 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD11 12 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD11 12 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD12 12 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD13 12 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD13 12 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD11 13 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD13 13 0.04 (1,472) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:42:TYR:H 6 0.04 (1,472) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:42:TYR:H 6 0.04 (1,472) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:42:TYR:H 6 0.04 (1,472) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:42:TYR:H 6 0.04 (1,471) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:25:THR:H 1 0.04 (1,471) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:25:THR:H 1 0.04 (1,471) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:25:THR:H 1 0.04 (1,471) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:23:ASN:H 1 0.04 (1,468) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:23:ASN:H 15 0.04 (1,468) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:23:ASN:H 15 0.04 (1,468) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:23:ASN:H 15 0.04 (1,468) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:23:ASN:H 1 0.04 (1,468) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:23:ASN:H 1 0.04 (1,468) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:23:ASN:H 1 0.04 (1,468) 1:A:45:ILE:HD11 1:A:46:VA	(1,493)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:52:PHE:H	8	0.04
(1,49) 1:A:78:LYS:H 1:A:90:VAL:HG13 20 0.04 (1,476) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:44:ASP:H 15 0.04 (1,476) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:44:ASP:H 15 0.04 (1,476) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:44:ASP:H 15 0.04 (1,476) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:44:ASP:H 15 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD11 4 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD12 4 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD12 4 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD13 4 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD11 12 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD11 12 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD12 12 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD13 12 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD13 12 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD13 12 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD11 13 0.04 (1,473) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:42:TYR:H 6 0.04 (1,472) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:42:TYR:H 6 0.04 (1,472) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:42:TYR:H 6 0.04 (1,471) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:25:THR:H 1 0.04 (1,471) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:25:THR:H 1 0.04 (1,471) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:25:THR:H 1 0.04 (1,471) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:15:CYS:H 16 0.04 (1,471) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:15:CYS:H 16 0.04 (1,471) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:25:THR:H 1 0.04 (1,471) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:25:THR:H 1 0.04 (1,471) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:23:ASN:H 1 0.04 (1,468) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:23:ASN:H 15 0.04 (1,468) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:23:ASN:H 15 0.04 (1,468) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:23:ASN:H 1 0.04 (1,468) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:23:ASN:H 1 0.04 (1,468) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:23:ASN:H 1 0.04 (1,468) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:23:ASN:H 1 0.04 (1,468) 1:A:45:ILE:HD11 1:A:23:ASN:H 1 0.04 (1,468) 1:A:45:ILE:HD11 1:A:23:ASN:H 1 0.04 (1,468) 1:A:45:ILE:HD11 1:	(1,49)	1:A:78:LYS:H	1:A:90:VAL:HG11	20	0.04
(1,476) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:44:ASP:H 15 0.04 (1,476) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:44:ASP:H 15 0.04 (1,476) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:44:ASP:H 15 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD11 4 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD12 4 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD13 4 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD11 12 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD12 12 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD13 12 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD13 12 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD11 13 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD13 13 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD13 13 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD13	(1,49)	1:A:78:LYS:H	1:A:90:VAL:HG12	20	0.04
(1,476) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:44:ASP:H 15 0.04 (1,476) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:44:ASP:H 15 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD11 4 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD12 4 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD13 4 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD11 12 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD12 12 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD12 12 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD13 12 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD13 12 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD12 13 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD13 13 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD13 13 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD13	(1,49)	1:A:78:LYS:H	1:A:90:VAL:HG13	20	0.04
(1,476) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:44:ASP:H 15 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD11 4 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD12 4 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD13 4 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD11 12 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD12 12 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD13 12 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD11 13 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD12 13 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD12 13 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD13 13 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD13 13 0.04 (1,474) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:42:TYR:H 6 0.04 (1,472) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:42:TYR:H	(1,476)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:44:ASP:H	15	0.04
(1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD11 4 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD12 4 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD13 4 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD11 12 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD12 12 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD13 12 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD11 13 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD12 13 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD12 13 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD12 13 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD13 13 0.04 (1,474) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:42:TYR:H 6 0.04 (1,472) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:42:TYR:H 6 0.04 (1,471) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:25:THR:H	(1,476)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:44:ASP:H	15	0.04
(1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD11 4 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD12 4 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD13 4 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD11 12 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD12 12 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD13 12 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD11 13 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD12 13 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD12 13 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD12 13 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD13 13 0.04 (1,474) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:42:TYR:H 6 0.04 (1,472) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:42:TYR:H 6 0.04 (1,471) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:25:THR:H	(1,476)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:44:ASP:H	15	0.04
(1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD12 4 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD13 4 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD11 12 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD12 12 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD13 12 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD11 13 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD12 13 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD12 13 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD12 13 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD13 13 0.04 (1,472) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:42:TYR:H 6 0.04 (1,472) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:42:TYR:H 6 0.04 (1,471) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:25:THR:H 1 0.04 (1,471) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:15:CYS:H	(1,473)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD11	4	0.04
(1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD11 12 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD12 12 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD13 12 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD11 13 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD12 13 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD13 13 0.04 (1,474) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:42:TYR:H 6 0.04 (1,472) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:42:TYR:H 6 0.04 (1,471) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:42:TYR:H 6 0.04 (1,471) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:25:THR:H 1 0.04 (1,471) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:15:CYS:H		1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD12	4	0.04
(1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD12 12 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD13 12 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD11 13 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD12 13 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD13 13 0.04 (1,472) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:42:TYR:H 6 0.04 (1,472) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:42:TYR:H 6 0.04 (1,471) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:25:THR:H 1 0.04 (1,471) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:25:THR:H 1 0.04 (1,47) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:115:CYS:H 16 0.04 (1,47) 1:A:90:VAL:HG21 1:A:24:GLY:H	(1,473)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD13	4	0.04
(1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD13 12 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD11 13 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD12 13 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD12 13 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD13 13 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:42:TYR:H 6 0.04 (1,472) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:42:TYR:H 6 0.04 (1,472) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:42:TYR:H 6 0.04 (1,472) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:42:TYR:H 6 0.04 (1,471) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:25:THR:H 1 0.04 (1,471) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:25:THR:H 1 0.04 (1,471) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:115:CYS:H 16 0.04 (1,47) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:115:CYS:H 16 0.04 (1,469) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:24:GLY:H 1	(1,473)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD11	12	0.04
(1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD11 13 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD12 13 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD13 13 0.04 (1,472) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:42:TYR:H 6 0.04 (1,472) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:42:TYR:H 6 0.04 (1,472) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:42:TYR:H 6 0.04 (1,472) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:42:TYR:H 6 0.04 (1,471) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:25:THR:H 1 0.04 (1,471) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:25:THR:H 1 0.04 (1,47) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:115:CYS:H 16 0.04 (1,47) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:115:CYS:H 16 0.04 (1,469) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:24:GLY:H 15 0.04 (1,469) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:24:GLY:H 15 0.04 (1,468) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:23:ASN:H 1	(1,473)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD12	12	0.04
(1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD12 13 0.04 (1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD13 13 0.04 (1,472) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:42:TYR:H 6 0.04 (1,472) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:42:TYR:H 6 0.04 (1,472) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:42:TYR:H 6 0.04 (1,472) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:42:TYR:H 6 0.04 (1,472) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:42:TYR:H 6 0.04 (1,471) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:25:THR:H 1 0.04 (1,471) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:15:CYS:H 16 0.04 (1,47) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:115:CYS:H 16 0.04 (1,47) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:15:CYS:H 16 0.04 (1,469) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:24:GLY:H 15 0.04 (1,469) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:24:GLY:H 15 0.04 (1,468) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:23:ASN:H 1 </td <td>(1,473)</td> <td>1:A:43:VAL:H</td> <td>1:A:121:LEU:HD13</td> <td>12</td> <td>0.04</td>	(1,473)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD13	12	0.04
(1,473) 1:A:43:VAL:H 1:A:121:LEU:HD13 13 0.04 (1,472) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:42:TYR:H 6 0.04 (1,472) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:42:TYR:H 6 0.04 (1,472) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:42:TYR:H 6 0.04 (1,472) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:42:TYR:H 6 0.04 (1,471) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:25:THR:H 1 0.04 (1,471) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:25:THR:H 1 0.04 (1,47) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:15:CYS:H 16 0.04 (1,47) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:15:CYS:H 16 0.04 (1,47) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:15:CYS:H 16 0.04 (1,469) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:24:GLY:H 15 0.04 (1,469) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:24:GLY:H 15 0.04 (1,468) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:23:ASN:H 1 0.04 (1,468) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:23:ASN:H 1	(1,473)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD11	13	0.04
(1,472) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:42:TYR:H 6 0.04 (1,472) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:42:TYR:H 6 0.04 (1,472) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:42:TYR:H 6 0.04 (1,471) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:25:THR:H 1 0.04 (1,471) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:25:THR:H 1 0.04 (1,471) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:25:THR:H 1 0.04 (1,47) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:115:CYS:H 16 0.04 (1,47) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:115:CYS:H 16 0.04 (1,47) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:115:CYS:H 16 0.04 (1,469) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:24:GLY:H 15 0.04 (1,469) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:24:GLY:H 15 0.04 (1,468) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:23:ASN:H 1 0.04 (1,468) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:23:ASN:H 1 0.04 (1,468) 1:A:45:ILE:HD11 1:A:46:VAL:H 2	(1,473)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD12	13	0.04
(1,472) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:42:TYR:H 6 0.04 (1,472) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:42:TYR:H 6 0.04 (1,471) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:25:THR:H 1 0.04 (1,471) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:25:THR:H 1 0.04 (1,471) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:25:THR:H 1 0.04 (1,471) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:115:CYS:H 16 0.04 (1,47) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:115:CYS:H 16 0.04 (1,47) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:15:CYS:H 16 0.04 (1,469) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:24:GLY:H 15 0.04 (1,469) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:24:GLY:H 15 0.04 (1,469) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:24:GLY:H 15 0.04 (1,468) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:23:ASN:H 1 0.04 (1,468) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:23:ASN:H 1 0.04 (1,468) 1:A:45:ILE:HD11 1:A:46:VAL:H 2 0.04	(1,473)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD13	13	0.04
(1,472) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:42:TYR:H 6 0.04 (1,471) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:25:THR:H 1 0.04 (1,471) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:25:THR:H 1 0.04 (1,471) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:25:THR:H 1 0.04 (1,47) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:115:CYS:H 16 0.04 (1,47) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:115:CYS:H 16 0.04 (1,47) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:115:CYS:H 16 0.04 (1,469) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:24:GLY:H 15 0.04 (1,469) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:24:GLY:H 15 0.04 (1,469) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:24:GLY:H 15 0.04 (1,468) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:23:ASN:H 1 0.04 (1,468) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:23:ASN:H 1 0.04 (1,462) 1:A:45:ILE:HD11 1:A:46:VAL:H 2 0.04	(1,472)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:42:TYR:H	6	0.04
(1,471) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:25:THR:H 1 0.04 (1,471) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:25:THR:H 1 0.04 (1,471) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:25:THR:H 1 0.04 (1,47) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:115:CYS:H 16 0.04 (1,47) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:115:CYS:H 16 0.04 (1,47) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:115:CYS:H 16 0.04 (1,47) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:24:GLY:H 15 0.04 (1,469) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:24:GLY:H 15 0.04 (1,469) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:24:GLY:H 15 0.04 (1,468) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:23:ASN:H 1 0.04 (1,468) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:23:ASN:H 1 0.04 (1,468) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:23:ASN:H 1 0.04 (1,462) 1:A:45:ILE:HD11 1:A:46:VAL:H 2 0.04	(1,472)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:42:TYR:H	6	0.04
(1,471) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:25:THR:H 1 0.04 (1,471) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:25:THR:H 1 0.04 (1,47) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:115:CYS:H 16 0.04 (1,47) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:115:CYS:H 16 0.04 (1,47) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:115:CYS:H 16 0.04 (1,469) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:24:GLY:H 15 0.04 (1,469) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:24:GLY:H 15 0.04 (1,469) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:24:GLY:H 15 0.04 (1,468) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:23:ASN:H 1 0.04 (1,468) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:23:ASN:H 1 0.04 (1,468) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:23:ASN:H 1 0.04 (1,462) 1:A:45:ILE:HD11 1:A:46:VAL:H 2 0.04	(1,472)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:42:TYR:H	6	0.04
(1,471) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:25:THR:H 1 0.04 (1,47) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:115:CYS:H 16 0.04 (1,47) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:115:CYS:H 16 0.04 (1,47) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:115:CYS:H 16 0.04 (1,469) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:24:GLY:H 15 0.04 (1,469) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:24:GLY:H 15 0.04 (1,469) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:24:GLY:H 15 0.04 (1,468) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:23:ASN:H 1 0.04 (1,468) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:23:ASN:H 1 0.04 (1,468) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:23:ASN:H 1 0.04 (1,462) 1:A:45:ILE:HD11 1:A:46:VAL:H 2 0.04	(1,471)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:25:THR:H	1	0.04
(1,47) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:115:CYS:H 16 0.04 (1,47) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:115:CYS:H 16 0.04 (1,47) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:115:CYS:H 16 0.04 (1,469) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:24:GLY:H 15 0.04 (1,469) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:24:GLY:H 15 0.04 (1,469) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:24:GLY:H 15 0.04 (1,468) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:23:ASN:H 1 0.04 (1,468) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:23:ASN:H 1 0.04 (1,468) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:23:ASN:H 1 0.04 (1,462) 1:A:45:ILE:HD11 1:A:46:VAL:H 2 0.04	(1,471)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:25:THR:H	1	0.04
(1,47) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:115:CYS:H 16 0.04 (1,47) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:115:CYS:H 16 0.04 (1,469) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:24:GLY:H 15 0.04 (1,469) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:24:GLY:H 15 0.04 (1,469) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:24:GLY:H 15 0.04 (1,468) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:23:ASN:H 1 0.04 (1,468) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:23:ASN:H 1 0.04 (1,468) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:23:ASN:H 1 0.04 (1,462) 1:A:45:ILE:HD11 1:A:46:VAL:H 2 0.04	(1,471)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:25:THR:H	1	0.04
(1,47) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:115:CYS:H 16 0.04 (1,469) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:24:GLY:H 15 0.04 (1,469) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:24:GLY:H 15 0.04 (1,469) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:24:GLY:H 15 0.04 (1,468) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:23:ASN:H 1 0.04 (1,468) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:23:ASN:H 1 0.04 (1,468) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:23:ASN:H 1 0.04 (1,462) 1:A:45:ILE:HD11 1:A:46:VAL:H 2 0.04	(1,47)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:115:CYS:H	16	0.04
(1,469) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:24:GLY:H 15 0.04 (1,469) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:24:GLY:H 15 0.04 (1,469) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:24:GLY:H 15 0.04 (1,468) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:23:ASN:H 1 0.04 (1,468) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:23:ASN:H 1 0.04 (1,468) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:23:ASN:H 1 0.04 (1,462) 1:A:45:ILE:HD11 1:A:46:VAL:H 2 0.04	(1,47)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:115:CYS:H	16	0.04
(1,469) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:24:GLY:H 15 0.04 (1,469) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:24:GLY:H 15 0.04 (1,468) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:23:ASN:H 1 0.04 (1,468) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:23:ASN:H 1 0.04 (1,468) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:23:ASN:H 1 0.04 (1,462) 1:A:45:ILE:HD11 1:A:46:VAL:H 2 0.04	(1,47)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:115:CYS:H	16	0.04
(1,469) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:24:GLY:H 15 0.04 (1,469) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:24:GLY:H 15 0.04 (1,468) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:23:ASN:H 1 0.04 (1,468) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:23:ASN:H 1 0.04 (1,468) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:23:ASN:H 1 0.04 (1,462) 1:A:45:ILE:HD11 1:A:46:VAL:H 2 0.04	(1,469)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:24:GLY:H	15	0.04
(1,468) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:23:ASN:H 1 0.04 (1,468) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:23:ASN:H 1 0.04 (1,468) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:23:ASN:H 1 0.04 (1,462) 1:A:45:ILE:HD11 1:A:46:VAL:H 2 0.04	(1,469)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:24:GLY:H	15	0.04
(1,468) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:23:ASN:H 1 0.04 (1,468) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:23:ASN:H 1 0.04 (1,462) 1:A:45:ILE:HD11 1:A:46:VAL:H 2 0.04	(1,469)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:24:GLY:H	15	0.04
(1,468) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:23:ASN:H 1 0.04 (1,462) 1:A:45:ILE:HD11 1:A:46:VAL:H 2 0.04	(1,468)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:23:ASN:H	1	0.04
(1,468) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:23:ASN:H 1 0.04 (1,462) 1:A:45:ILE:HD11 1:A:46:VAL:H 2 0.04	(1,468)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:23:ASN:H	1	0.04
		1:A:19:VAL:HG13	1:A:23:ASN:H	1	0.04
(1.462) 1.A.45.H.E.HD12 1.A.46.VAL.H 2 0.04	(1,462)	1:A:45:ILE:HD11	1:A:46:VAL:H	2	0.04
(1,102) $ (1,102) $ $ (1,102) $ $ (1,102) $	(1,462)	1:A:45:ILE:HD12	1:A:46:VAL:H	2	0.04
(1,462) 1:A:45:ILE:HD13 1:A:46:VAL:H 2 0.04	(1,462)	1:A:45:ILE:HD13	1:A:46:VAL:H	2	0.04
(1,462) 1:A:45:ILE:HD11 1:A:46:VAL:H 9 0.04	(1,462)	1:A:45:ILE:HD11	1:A:46:VAL:H	9	0.04



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	ea jrom previous page Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,462)	1:A:45:ILE:HD12	1:A:46:VAL:H	9	0.04
(1,462)	1:A:45:ILE:HD13	1:A:46:VAL:H	9	0.04
(1,458)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:10:LYS:H	1	0.04
(1,458)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:10:LYS:H	1	0.04
(1,458)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:10:LYS:H	1	0.04
(1,458)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:10:LYS:H	2	0.04
(1,458)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:10:LYS:H	2	0.04
(1,458)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:10:LYS:H	2	0.04
(1,456)	1:A:9:ILE:H	1:A:12:LEU:HD21	5	0.04
(1,456)	1:A:9:ILE:H	1:A:12:LEU:HD22	5	0.04
(1,456)	1:A:9:ILE:H	1:A:12:LEU:HD23	5	0.04
(1,455)	1:A:8:LYS:H	1:A:9:ILE:HD11	16	0.04
(1,455)	1:A:8:LYS:H	1:A:9:ILE:HD12	16	0.04
(1,455)	1:A:8:LYS:H	1:A:9:ILE:HD13	16	0.04
(1,452)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG21	2	0.04
(1,452)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG22	2	0.04
(1,452)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG23	2	0.04
(1,452)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG21	8	0.04
(1,452)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG22	8	0.04
(1,452)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG23	8	0.04
(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD11	18	0.04
(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD12	18	0.04
(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD13	18	0.04
(1,447)	1:A:41:LEU:H	1:A:124:VAL:HG21	13	0.04
(1,447)	1:A:41:LEU:H	1:A:124:VAL:HG22	13	0.04
(1,447)	1:A:41:LEU:H	1:A:124:VAL:HG23	13	0.04
(1,446)	1:A:45:ILE:H	1:A:121:LEU:HD21	12	0.04
(1,446)	1:A:45:ILE:H	1:A:121:LEU:HD22	12	0.04
(1,446)	1:A:45:ILE:H	1:A:121:LEU:HD23	12	0.04
(1,446)	1:A:45:ILE:H	1:A:121:LEU:HD21	15	0.04
(1,446)	1:A:45:ILE:H	1:A:121:LEU:HD22	15	0.04
(1,446)	1:A:45:ILE:H	1:A:121:LEU:HD23	15	0.04
(1,443)	1:A:90:VAL:HG21	1:A:101:HIS:H	16	0.04
(1,443)	1:A:90:VAL:HG22	1:A:101:HIS:H	16	0.04
(1,443)	1:A:90:VAL:HG23	1:A:101:HIS:H	16	0.04
(1,440)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:100:GLY:H	6	0.04
(1,440)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:100:GLY:H	6	0.04
(1,440)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:100:GLY:H	6	0.04
(1,44)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:48:GLY:H	16	0.04
(1,44)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:48:GLY:H	16	0.04
(1,44)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:48:GLY:H	16	0.04
(1,438)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:120:ALA:H	17	0.04



 $Continued\ from\ previous\ page...$

(1,438) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:120:ALA:H 17 0.0 (1,437) 1:A:46:VAL:HG11 1:A:48:GLY:H 2 0.0 (1,437) 1:A:46:VAL:HG12 1:A:48:GLY:H 2 0.0 (1,437) 1:A:46:VAL:HG13 1:A:48:GLY:H 2 0.0 (1,437) 1:A:46:VAL:HG11 1:A:48:GLY:H 4 0.0 (1,437) 1:A:46:VAL:HG12 1:A:48:GLY:H 4 0.0 (1,437) 1:A:46:VAL:HG13 1:A:48:GLY:H 4 0.0 (1,437) 1:A:46:VAL:HG13 1:A:48:GLY:H 4 0.0 (1,431) 1:A:102:VAL:HG13 1:A:103:PHE:H 16 0.0 (1,431) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:103:PHE:H 16 0.0 (1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 16 0.0 (1,426) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:13:ASN:H 7 0.0 (1,426) 1:A:12:LEU:HD23 1:A:13:ASN:H 7 0.0 (1,421) 1:A:43:VAL:H 1:A:43:VAL:HG11 5	04 04 04 04 04 04 04 04 04 04
(1,437) 1:A:46:VAL:HG11 1:A:48:GLY:H 2 0.0 (1,437) 1:A:46:VAL:HG12 1:A:48:GLY:H 2 0.0 (1,437) 1:A:46:VAL:HG13 1:A:48:GLY:H 2 0.0 (1,437) 1:A:46:VAL:HG11 1:A:48:GLY:H 4 0.0 (1,437) 1:A:46:VAL:HG12 1:A:48:GLY:H 4 0.0 (1,437) 1:A:46:VAL:HG13 1:A:48:GLY:H 4 0.0 (1,437) 1:A:46:VAL:HG13 1:A:48:GLY:H 4 0.0 (1,431) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:103:PHE:H 16 0.0 (1,431) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:103:PHE:H 16 0.0 (1,426) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:13:ASN:H 7 0.0 (1,426) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:13:ASN:H 7 0.0 (1,426) 1:A:43:VAL:H 1:A:43:VAL:HG11 5 0.0	04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04
(1,437) 1:A:46:VAL:HG12 1:A:48:GLY:H 2 0.4 (1,437) 1:A:46:VAL:HG13 1:A:48:GLY:H 2 0.4 (1,437) 1:A:46:VAL:HG11 1:A:48:GLY:H 4 0.4 (1,437) 1:A:46:VAL:HG12 1:A:48:GLY:H 4 0.4 (1,437) 1:A:46:VAL:HG13 1:A:48:GLY:H 4 0.4 (1,437) 1:A:102:VAL:HG13 1:A:103:PHE:H 16 0.6 (1,431) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:103:PHE:H 16 0.6 (1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 16 0.6 (1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 16 0.6 (1,426) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:13:ASN:H 7 0.6 (1,426) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:13:ASN:H 7 0.6 (1,426) 1:A:12:LEU:HD23 1:A:13:ASN:H 7 0.6 (1,421) 1:A:43:VAL:H 1:A:43:VAL:HG11 5 0.6	04 04 04 04 04 04 04 04 04 04
(1,437) 1:A:46:VAL:HG13 1:A:48:GLY:H 2 0.0 (1,437) 1:A:46:VAL:HG11 1:A:48:GLY:H 4 0.0 (1,437) 1:A:46:VAL:HG12 1:A:48:GLY:H 4 0.0 (1,437) 1:A:46:VAL:HG13 1:A:48:GLY:H 4 0.0 (1,437) 1:A:46:VAL:HG13 1:A:48:GLY:H 4 0.0 (1,431) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:103:PHE:H 16 0.0 (1,431) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:103:PHE:H 16 0.0 (1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 16 0.0 (1,426) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:13:ASN:H 7 0.0 (1,426) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:13:ASN:H 7 0.0 (1,426) 1:A:12:LEU:HD23 1:A:13:ASN:H 7 0.0 (1,421) 1:A:43:VAL:H 1:A:43:VAL:HG11 5 0.0	04 04 04 04 04 04 04 04 04
(1,437) 1:A:46:VAL:HG11 1:A:48:GLY:H 4 0.4 (1,437) 1:A:46:VAL:HG12 1:A:48:GLY:H 4 0.4 (1,437) 1:A:46:VAL:HG13 1:A:48:GLY:H 4 0.4 (1,437) 1:A:102:VAL:HG13 1:A:103:PHE:H 16 0.4 (1,431) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:103:PHE:H 16 0.4 (1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 16 0.6 (1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 16 0.6 (1,426) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:13:ASN:H 7 0.6 (1,426) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:13:ASN:H 7 0.6 (1,426) 1:A:12:LEU:HD23 1:A:13:ASN:H 7 0.6 (1,421) 1:A:43:VAL:H 1:A:43:VAL:HG11 5 0.6	04 04 04 04 04 04 04 04
(1,437) 1:A:46:VAL:HG12 1:A:48:GLY:H 4 0.0 (1,437) 1:A:46:VAL:HG13 1:A:48:GLY:H 4 0.0 (1,431) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:103:PHE:H 16 0.0 (1,431) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:103:PHE:H 16 0.0 (1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 16 0.0 (1,426) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:13:ASN:H 7 0.0 (1,426) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:13:ASN:H 7 0.0 (1,426) 1:A:12:LEU:HD23 1:A:13:ASN:H 7 0.0 (1,421) 1:A:43:VAL:H 1:A:43:VAL:HG11 5 0.0	04 04 04 04 04 04 04
(1,437) 1:A:46:VAL:HG13 1:A:48:GLY:H 4 0.0 (1,431) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:103:PHE:H 16 0.0 (1,431) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:103:PHE:H 16 0.0 (1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 16 0.0 (1,426) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:13:ASN:H 7 0.0 (1,426) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:13:ASN:H 7 0.0 (1,426) 1:A:12:LEU:HD23 1:A:13:ASN:H 7 0.0 (1,421) 1:A:43:VAL:H 1:A:43:VAL:HG11 5 0.0	04 04 04 04 04 04
(1,431) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:103:PHE:H 16 0.0 (1,431) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:103:PHE:H 16 0.0 (1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 16 0.0 (1,426) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:13:ASN:H 7 0.0 (1,426) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:13:ASN:H 7 0.0 (1,426) 1:A:12:LEU:HD23 1:A:13:ASN:H 7 0.0 (1,421) 1:A:43:VAL:H 1:A:43:VAL:HG11 5 0.0	04 04 04 04 04
(1,431) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:103:PHE:H 16 0.0 (1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 16 0.0 (1,426) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:13:ASN:H 7 0.0 (1,426) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:13:ASN:H 7 0.0 (1,426) 1:A:12:LEU:HD23 1:A:13:ASN:H 7 0.0 (1,426) 1:A:43:VAL:H 1:A:43:VAL:HG11 5 0.0	04 04 04 04
(1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 16 0.0 (1,426) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:13:ASN:H 7 0.0 (1,426) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:13:ASN:H 7 0.0 (1,426) 1:A:12:LEU:HD23 1:A:13:ASN:H 7 0.0 (1,426) 1:A:43:VAL:H 1:A:43:VAL:HG11 5 0.0	04 04 04
(1,426) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:13:ASN:H 7 0.0 (1,426) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:13:ASN:H 7 0.0 (1,426) 1:A:12:LEU:HD23 1:A:13:ASN:H 7 0.0 (1,421) 1:A:43:VAL:H 1:A:43:VAL:HG11 5 0.0	04
(1,426) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:13:ASN:H 7 0.0 (1,426) 1:A:12:LEU:HD23 1:A:13:ASN:H 7 0.0 (1,421) 1:A:43:VAL:H 1:A:43:VAL:HG11 5 0.0	04
(1,426) 1:A:12:LEU:HD23 1:A:13:ASN:H 7 0.0 (1,421) 1:A:43:VAL:H 1:A:43:VAL:HG11 5 0.0	
(1,421) 1:A:43:VAL:H 1:A:43:VAL:HG11 5 0.0	04
	~ -
	04
	04
(1,421) 1:A:43:VAL:H 1:A:43:VAL:HG13 5 0.0	04
(1,420) 1:A:19:VAL:H 1:A:19:VAL:HG11 1 0.0	04
(1,420) 1:A:19:VAL:H 1:A:19:VAL:HG12 1 0.0	04
(1,420) 1:A:19:VAL:H 1:A:19:VAL:HG13 1 0.0	04
(1,42) 1:A:15:MET:H 1:A:19:VAL:HG21 1 0.	04
(1,42) 1:A:15:MET:H 1:A:19:VAL:HG22 1 0.0	04
(1,42) 1:A:15:MET:H 1:A:19:VAL:HG23 1 0.	04
(1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD21 2 0.0	04
(1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD22 2 0.0	04
(1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD23 2 0.0	04
(1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD21 10 0.0	04
(1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD22 10 0.0	04
(1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD23 10 0.0	04
(1,4) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:124:VAL:H 3 0.	04
(1,4) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:124:VAL:H 3 0.0	04
(1,4) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:H 3 0.0	04
(1,4) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:124:VAL:H 9 0.0	04
(1,4) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:124:VAL:H 9 0.0	04
(1,4) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:H 9 0.0	04
(1,399) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:129:LEU:HD21 17 0.	04
(1,399) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:129:LEU:HD22 17 0.	04
	04
	04
(1,399) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:129:LEU:HD22 17 0.	04
(1,399) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:129:LEU:HD23 17 0.0	04
	04



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,399)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:129:LEU:HD22	17	0.04
(1,399)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:129:LEU:HD23	17	0.04
(1,397)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:12:LEU:HD21	9	0.04
(1,397)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:12:LEU:HD22	9	0.04
(1,397)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:12:LEU:HD23	9	0.04
(1,397)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:12:LEU:HD21	9	0.04
(1,397)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:12:LEU:HD22	9	0.04
(1,397)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:12:LEU:HD23	9	0.04
(1,397)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:12:LEU:HD21	9	0.04
(1,397)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:12:LEU:HD22	9	0.04
(1,397)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:12:LEU:HD23	9	0.04
(1,393)	1:A:12:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HG11	15	0.04
(1,393)	1:A:12:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HG12	15	0.04
(1,393)	1:A:12:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HG13	15	0.04
(1,393)	1:A:12:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HG11	15	0.04
(1,393)	1:A:12:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HG12	15	0.04
(1,393)	1:A:12:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HG13	15	0.04
(1,393)	1:A:12:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HG11	15	0.04
(1,393)	1:A:12:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HG12	15	0.04
(1,393)	1:A:12:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HG13	15	0.04
(1,39)	1:A:140:LEU:H	1:A:140:LEU:HD11	12	0.04
(1,39)	1:A:140:LEU:H	1:A:140:LEU:HD12	12	0.04
(1,39)	1:A:140:LEU:H	1:A:140:LEU:HD13	12	0.04
(1,39)	1:A:140:LEU:H	1:A:140:LEU:HD11	18	0.04
(1,39)	1:A:140:LEU:H	1:A:140:LEU:HD12	18	0.04
(1,39)	1:A:140:LEU:H	1:A:140:LEU:HD13	18	0.04
(1,375)	1:A:131:GLU:H	1:A:133:GLY:H	1	0.04
(1,375)	1:A:131:GLU:H	1:A:133:GLY:H	13	0.04
(1,374)	1:A:132:GLU:H	1:A:134:TYR:H	15	0.04
(1,374)	1:A:132:GLU:H	1:A:134:TYR:H	17	0.04
(1,370)	1:A:129:LEU:H	1:A:130:LYS:H	8	0.04
(1,368)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:H	9	0.04
(1,368)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:H	17	0.04
(1,368)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:H	18	0.04
(1,361)	1:A:45:ILE:H	1:A:122:ARG:H	4	0.04
(1,361)	1:A:45:ILE:H	1:A:122:ARG:H	5	0.04
(1,361)	1:A:45:ILE:H	1:A:122:ARG:H	19	0.04
(1,360)	1:A:43:VAL:H	1:A:122:ARG:H	19	0.04
(1,351)	1:A:108:GLY:H	1:A:112:LEU:H	19	0.04
(1,337)	1:A:76:GLU:H	1:A:91:ARG:H	9	0.04
(1,332)	1:A:85:MET:H	1:A:86:ILE:H	1	0.04
(1,322)	1:A:54:SER:H	1:A:57:LYS:H	15	0.04



 $Continued\ from\ previous\ page...$

(1,32) (1,32)	1:A:103:PHE:H			Violation (Å)
(1.32)	1.7.100.1 111.11	1:A:112:LEU:HD21	4	0.04
1 (-;)	1:A:103:PHE:H	1:A:112:LEU:HD22	4	0.04
(1,32)	1:A:103:PHE:H	1:A:112:LEU:HD23	4	0.04
(1,32)	1:A:103:PHE:H	1:A:112:LEU:HD21	5	0.04
(1,32)	1:A:103:PHE:H	1:A:112:LEU:HD22	5	0.04
(1,32)	1:A:103:PHE:H	1:A:112:LEU:HD23	5	0.04
(1,312)	1:A:41:LEU:H	1:A:124:VAL:H	10	0.04
(1,31)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:49:LYS:H	15	0.04
(1,31)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:49:LYS:H	15	0.04
(1,31)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:49:LYS:H	15	0.04
(1,308)	1:A:30:GLN:H	1:A:34:TRP:HE1	11	0.04
(1,307)	1:A:32:GLU:H	1:A:34:TRP:H	13	0.04
(1,305)	1:A:25:THR:H	1:A:26:GLU:H	15	0.04
(1,303)	1:A:18:GLU:H	1:A:20:THR:H	3	0.04
(1,299)	1:A:15:MET:H	1:A:18:GLU:H	2	0.04
(1,29)	1:A:78:LYS:H	1:A:90:VAL:HG21	13	0.04
(1,29)	1:A:78:LYS:H	1:A:90:VAL:HG22	13	0.04
(1,29)	1:A:78:LYS:H	1:A:90:VAL:HG23	13	0.04
(1,281)	1:A:110:ASN:HD22	1:A:112:LEU:H	13	0.04
(1,274)	1:A:80:ASP:H	1:A:89:GLU:H	11	0.04
(1,270)	1:A:42:TYR:H	1:A:54:SER:H	7	0.04
(1,269)	1:A:22:ASN:HD22	1:A:24:GLY:H	3	0.04
(1,269)	1:A:22:ASN:HD22	1:A:24:GLY:H	5	0.04
(1,269)	1:A:22:ASN:HD22	1:A:24:GLY:H	15	0.04
(1,267)	1:A:21:GLN:H	1:A:24:GLY:H	5	0.04
(1,261)	1:A:99:LEU:HD21	1:A:116:ILE:HD11	3	0.04
(1,261)	1:A:99:LEU:HD21	1:A:116:ILE:HD12	3	0.04
(1,261)	1:A:99:LEU:HD21	1:A:116:ILE:HD13	3	0.04
(1,261)	1:A:99:LEU:HD22	1:A:116:ILE:HD11	3	0.04
(1,261)	1:A:99:LEU:HD22	1:A:116:ILE:HD12	3	0.04
(1,261)	1:A:99:LEU:HD22	1:A:116:ILE:HD13	3	0.04
(1,261)	1:A:99:LEU:HD23	1:A:116:ILE:HD11	3	0.04
(1,261)	1:A:99:LEU:HD23	1:A:116:ILE:HD12	3	0.04
(1,261)	1:A:99:LEU:HD23	1:A:116:ILE:HD13	3	0.04
(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD11	3	0.04
(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD12	3	0.04
(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD13	3	0.04
(1,259)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD11	2	0.04
(1,259)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD12	2	0.04
(1,259)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD13	2	0.04
(1,259)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD11	2	0.04
(1,259)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD12	2	0.04



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,259)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD13	2	0.04
(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD11	2	0.04
(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD12	2	0.04
(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD13	2	0.04
(1,259)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD11	15	0.04
(1,259)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD12	15	0.04
(1,259)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD13	15	0.04
(1,259)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD11	15	0.04
(1,259)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD12	15	0.04
(1,259)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD13	15	0.04
(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD11	15	0.04
(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD12	15	0.04
(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD13	15	0.04
(1,252)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:99:LEU:HD11	14	0.04
(1,252)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:99:LEU:HD12	14	0.04
(1,252)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:99:LEU:HD13	14	0.04
(1,252)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:99:LEU:HD11	14	0.04
(1,252)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:99:LEU:HD12	14	0.04
(1,252)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:99:LEU:HD13	14	0.04
(1,252)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:99:LEU:HD11	14	0.04
(1,252)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:99:LEU:HD12	14	0.04
(1,252)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:99:LEU:HD13	14	0.04
(1,250)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:25:THR:H	2	0.04
(1,250)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:25:THR:H	2	0.04
(1,250)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:25:THR:H	2	0.04
(1,25)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:123:PHE:H	2	0.04
(1,25)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:123:PHE:H	2	0.04
(1,25)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:123:PHE:H	2	0.04
(1,248)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD11	19	0.04
(1,248)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD12	19	0.04
(1,248)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD13	19	0.04
(1,24)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:134:TYR:H	16	0.04
(1,24)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:134:TYR:H	16	0.04
(1,24)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:134:TYR:H	16	0.04
(1,226)	1:A:92:SER:H	1:A:99:LEU:HD21	12	0.04
(1,226)	1:A:92:SER:H	1:A:99:LEU:HD22	12	0.04
(1,226)	1:A:92:SER:H	1:A:99:LEU:HD23	12	0.04
(1,221)	1:A:71:ILE:HD11	1:A:140:LEU:HD11	6	0.04
(1,221)	1:A:71:ILE:HD11	1:A:140:LEU:HD12	6	0.04
(1,221)	1:A:71:ILE:HD11	1:A:140:LEU:HD13	6	0.04
(1,221)	1:A:71:ILE:HD12	1:A:140:LEU:HD11	6	0.04
(1,221)	1:A:71:ILE:HD12	1:A:140:LEU:HD12	6	0.04



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,221)	1:A:71:ILE:HD12	1:A:140:LEU:HD13	6	0.04
(1,221)	1:A:71:ILE:HD13	1:A:140:LEU:HD11	6	0.04
(1,221)	1:A:71:ILE:HD13	1:A:140:LEU:HD12	6	0.04
(1,221)	1:A:71:ILE:HD13	1:A:140:LEU:HD13	6	0.04
(1,214)	1:A:16:GLN:HE22	1:A:45:ILE:HD11	6	0.04
(1,214)	1:A:16:GLN:HE22	1:A:45:ILE:HD12	6	0.04
(1,214)	1:A:16:GLN:HE22	1:A:45:ILE:HD13	6	0.04
(1,212)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:129:LEU:HD11	8	0.04
(1,212)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:129:LEU:HD12	8	0.04
(1,212)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:129:LEU:HD13	8	0.04
(1,212)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:129:LEU:HD11	8	0.04
(1,212)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:129:LEU:HD12	8	0.04
(1,212)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:129:LEU:HD13	8	0.04
(1,212)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:129:LEU:HD11	8	0.04
(1,212)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:129:LEU:HD12	8	0.04
(1,212)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:129:LEU:HD13	8	0.04
(1,211)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:138:LEU:HD11	10	0.04
(1,211)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:138:LEU:HD12	10	0.04
(1,211)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:138:LEU:HD13	10	0.04
(1,211)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:138:LEU:HD11	10	0.04
(1,211)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:138:LEU:HD12	10	0.04
(1,211)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:138:LEU:HD13	10	0.04
(1,211)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:138:LEU:HD11	10	0.04
(1,211)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:138:LEU:HD12	10	0.04
(1,211)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:138:LEU:HD13	10	0.04
(1,21)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD11	6	0.04
(1,21)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD12	6	0.04
(1,21)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD13	6	0.04
(1,21)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD11	18	0.04
(1,21)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD12	18	0.04
(1,21)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD13	18	0.04
(1,207)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:124:VAL:HG11	2	0.04
(1,207)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:124:VAL:HG12	2	0.04
(1,207)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:124:VAL:HG13	2	0.04
(1,207)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:124:VAL:HG11	2	0.04
(1,207)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:124:VAL:HG12	2	0.04
(1,207)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:124:VAL:HG13	2	0.04
(1,207)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:124:VAL:HG11	2	0.04
(1,207)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:124:VAL:HG12	2	0.04
(1,207)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:124:VAL:HG13	2	0.04
(1,206)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:124:VAL:HG11	11	0.04
(1,206)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:124:VAL:HG12	11	0.04



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,206)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:124:VAL:HG13	11	0.04
(1,206)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:HG11	11	0.04
(1,206)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:HG12	11	0.04
(1,206)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:HG13	11	0.04
(1,206)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:HG11	11	0.04
(1,206)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:HG12	11	0.04
(1,206)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:HG13	11	0.04
(1,201)	1:A:88:THR:H	1:A:102:VAL:HG11	4	0.04
(1,201)	1:A:88:THR:H	1:A:102:VAL:HG12	4	0.04
(1,201)	1:A:88:THR:H	1:A:102:VAL:HG13	4	0.04
(1,201)	1:A:88:THR:H	1:A:102:VAL:HG11	9	0.04
(1,201)	1:A:88:THR:H	1:A:102:VAL:HG12	9	0.04
(1,201)	1:A:88:THR:H	1:A:102:VAL:HG13	9	0.04
(1,195)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:124:VAL:HG21	5	0.04
(1,195)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:124:VAL:HG22	5	0.04
(1,195)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:124:VAL:HG23	5	0.04
(1,195)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:124:VAL:HG21	5	0.04
(1,195)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:124:VAL:HG22	5	0.04
(1,195)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:124:VAL:HG23	5	0.04
(1,195)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:124:VAL:HG21	5	0.04
(1,195)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:124:VAL:HG22	5	0.04
(1,195)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:124:VAL:HG23	5	0.04
(1,189)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:124:VAL:HG21	17	0.04
(1,189)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:124:VAL:HG22	17	0.04
(1,189)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:124:VAL:HG23	17	0.04
(1,189)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:HG21	17	0.04
(1,189)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:HG22	17	0.04
(1,189)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:HG23	17	0.04
(1,189)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:HG21	17	0.04
(1,189)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:HG22	17	0.04
(1,189)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:HG23	17	0.04
(1,187)	1:A:42:TYR:H	1:A:124:VAL:HG21	9	0.04
(1,187)	1:A:42:TYR:H	1:A:124:VAL:HG22	9	0.04
(1,187)	1:A:42:TYR:H	1:A:124:VAL:HG23	9	0.04
(1,186)	1:A:43:VAL:H	1:A:124:VAL:HG21	20	0.04
(1,186)	1:A:43:VAL:H	1:A:124:VAL:HG22	20	0.04
(1,186)	1:A:43:VAL:H	1:A:124:VAL:HG23	20	0.04
(1,184)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:112:LEU:HD11	10	0.04
(1,184)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:112:LEU:HD12	10	0.04
(1,184)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:112:LEU:HD13	10	0.04
(1,184)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:112:LEU:HD11	10	0.04
(1,184)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:112:LEU:HD12	10	0.04



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,184)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:112:LEU:HD13	10	0.04
(1,184)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:112:LEU:HD11	10	0.04
(1,184)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:112:LEU:HD12	10	0.04
(1,184)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:112:LEU:HD13	10	0.04
(1,184)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:112:LEU:HD11	13	0.04
(1,184)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:112:LEU:HD12	13	0.04
(1,184)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:112:LEU:HD13	13	0.04
(1,184)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:112:LEU:HD11	13	0.04
(1,184)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:112:LEU:HD12	13	0.04
(1,184)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:112:LEU:HD13	13	0.04
(1,184)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:112:LEU:HD11	13	0.04
(1,184)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:112:LEU:HD12	13	0.04
(1,184)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:112:LEU:HD13	13	0.04
(1,180)	1:A:90:VAL:HG21	1:A:91:ARG:H	6	0.04
(1,180)	1:A:90:VAL:HG22	1:A:91:ARG:H	6	0.04
(1,180)	1:A:90:VAL:HG23	1:A:91:ARG:H	6	0.04
(1,176)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:45:ILE:HD11	4	0.04
(1,176)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:45:ILE:HD12	4	0.04
(1,176)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:45:ILE:HD13	4	0.04
(1,176)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:45:ILE:HD11	4	0.04
(1,176)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:45:ILE:HD12	4	0.04
(1,176)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:45:ILE:HD13	4	0.04
(1,176)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:45:ILE:HD11	4	0.04
(1,176)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:45:ILE:HD12	4	0.04
(1,176)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:45:ILE:HD13	4	0.04
(1,172)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:20:THR:H	9	0.04
(1,172)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:20:THR:H	9	0.04
(1,172)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:20:THR:H	9	0.04
(1,171)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG11	4	0.04
(1,171)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG12	4	0.04
(1,171)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG13	4	0.04
(1,171)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG11	12	0.04
(1,171)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG12	12	0.04
(1,171)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG13	12	0.04
(1,163)	1:A:15:MET:H	1:A:17:TYR:H	20	0.04
(1,158)	1:A:77:GLU:H	1:A:78:LYS:H	13	0.04
(1,15)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG11	14	0.04
(1,15)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG12	14	0.04
(1,15)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG13	14	0.04
(1,148)	1:A:44:ASP:H	1:A:122:ARG:H	8	0.04
(1,148)	1:A:44:ASP:H	1:A:122:ARG:H	17	0.04
(1,146)	1:A:130:LYS:H	1:A:132:GLU:H	7	0.04



 $Continued\ from\ previous\ page...$

(1,146) (1,146) (1,145)	1:A:130:LYS:H	1:A:132:GLU:H	0	
(' /	1 A 100 TX/C TT	1.71.102.010.11	8	0.04
(1.145)	1:A:130:LYS:H	1:A:132:GLU:H	18	0.04
(+) + + > /	1:A:128:LYS:H	1:A:130:LYS:H	4	0.04
(1,131)	1:A:17:TYR:H	1:A:19:VAL:H	5	0.04
(1,131)	1:A:17:TYR:H	1:A:19:VAL:H	7	0.04
(1,131)	1:A:17:TYR:H	1:A:19:VAL:H	19	0.04
(1,110)	1:A:95:ALA:H	1:A:96:ASP:H	13	0.04
(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD21	4	0.04
(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD22	4	0.04
(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD23	4	0.04
(1,104)	1:A:73:GLU:H	1:A:75:VAL:H	12	0.04
(1,9)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:138:LEU:H	14	0.03
(1,9)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:138:LEU:H	14	0.03
(1,9)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:138:LEU:H	14	0.03
(1,87)	1:A:31:ASN:H	1:A:34:TRP:HE1	19	0.03
(1,83)	1:A:9:ILE:H	1:A:12:LEU:H	3	0.03
(1,81)	1:A:47:SER:H	1:A:48:GLY:H	19	0.03
(1,78)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:H	4	0.03
(1,7)	1:A:41:LEU:H	1:A:41:LEU:HD11	12	0.03
(1,7)	1:A:41:LEU:H	1:A:41:LEU:HD12	12	0.03
(1,7)	1:A:41:LEU:H	1:A:41:LEU:HD13	12	0.03
(1,67)	1:A:117:ASN:H	1:A:117:ASN:HD22	12	0.03
(1,65)	1:A:118:SER:HG	1:A:119:ALA:H	11	0.03
(1,65)	1:A:118:SER:HG	1:A:119:ALA:H	15	0.03
(1,64)	1:A:47:SER:HG	1:A:49:LYS:H	12	0.03
(1,63)	1:A:54:SER:HG	1:A:57:LYS:H	9	0.03
(1,623)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD11	17	0.03
(1,623)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD12	17	0.03
(1,623)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD13	17	0.03
(1,622)	1:A:13:ASN:HD22	1:A:12:LEU:HD11	9	0.03
(1,622)	1:A:13:ASN:HD22	1:A:12:LEU:HD12	9	0.03
(1,622)	1:A:13:ASN:HD22	1:A:12:LEU:HD13	9	0.03
(1,617)	1:A:116:ILE:HD11	1:A:99:LEU:HD11	3	0.03
(1,617)	1:A:116:ILE:HD11	1:A:99:LEU:HD12	3	0.03
(1,617)	1:A:116:ILE:HD11	1:A:99:LEU:HD13	3	0.03
(1,617)	1:A:116:ILE:HD12	1:A:99:LEU:HD11	3	0.03
(1,617)	1:A:116:ILE:HD12	1:A:99:LEU:HD12	3	0.03
(1,617)	1:A:116:ILE:HD12	1:A:99:LEU:HD13	3	0.03
(1,617)	1:A:116:ILE:HD13	1:A:99:LEU:HD11	3	0.03
(1,617)	1:A:116:ILE:HD13	1:A:99:LEU:HD12	3	0.03
(1,617)	1:A:116:ILE:HD13	1:A:99:LEU:HD13	3	0.03
(1,616)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD21	19	0.03



 $Continued\ from\ previous\ page...$

(1,616 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD22 19 0.03 (1,616 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD23 19 0.03 (1,616 1:A:90:VAL:HG12 1:A:99:LEU:HD22 19 0.03 (1,616 1:A:90:VAL:HG12 1:A:99:LEU:HD22 19 0.03 (1,616 1:A:90:VAL:HG12 1:A:99:LEU:HD23 19 0.03 (1,616 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD21 19 0.03 (1,616 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD22 19 0.03 (1,610 1:A:115:CYS:H 1:A:101:HIS:H 14 0.03 (1,610 1:A:115:CYS:H 1:A:101:HIS:H 18 0.03 (1,609 1:A:102:VAL:H 1:A:88:THR:H 11 0.03 (1,59) 1:A:132:GLU:H 1:A:138:LEU:HD11 4 0.03 (1,59) 1:A:132:GLU:H 1:A:138:LEU:HD12 4 0.03 (1,59) 1:A:132:GLU:H 1:A:138:LEU:HD13 4 0.03 (1,59) 1:A:132:GLU:H 1:A:138:LEU:HD11 9 0.03 (1,59) 1:A:132:GLU:H 1:A:138:LEU:HD13 4 0.03 (1,59) 1:A:132:GLU:H 1:A:138:LEU:HD13 9 0.03 (1,577) 1:A:140:LEU:HD14 1:A:148:LEU:HD15 9 0.03 (1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:112:LEU:HD22 10 0.03 (1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:112:LEU:HD22 10 0.03 (1,577) 1:A:140:LEU:HD11 1:A:141:PHE:H 14 0.03 (1,571) 1:A:140:LEU:HD12 1:A:141:PHE:H 14 0.03 (1,571) 1:A:140:LEU:HD13 1:A:141:PHE:H 14 0.03 (1,571) 1:A:140:LEU:HD13 1:A:141:PHE:H 14 0.03 (1,571) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:141:ARG:H 5 0.03 (1,571) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:141:ARG:H 5 0.03 (1,571) 1:A:112:LEU:HD12 1:A:113:ARG:H 5 0.03 (1,571) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:141:PHE:H 14 0.03 (1,571) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H 5 0.03 (1,564) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:137:TYR:H 5 0.03 (1,564) 1:A:129:LEU:HD	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,616) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:99:LEU:HD21 19 0.03 (1,616) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:99:LEU:HD22 19 0.03 (1,616) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD23 19 0.03 (1,616) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD22 19 0.03 (1,616) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD22 19 0.03 (1,616) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD23 19 0.03 (1,610) 1:A:115:CYS:H 1:A:101:HIS:H 14 0.03 (1,610) 1:A:115:CYS:H 1:A:101:HIS:H 18 0.03 (1,610) 1:A:102:VAL:H 1:A:88:THR:H 11 0.03 (1,59) 1:A:132:GLU:H 1:A:138:LEU:HD11 4 0.03 (1,59) 1:A:132:GLU:H 1:A:138:LEU:HD12 4 0.03 (1,59) 1:A:132:GLU:H 1:A:138:LEU:HD12 4 0.03 (1,59) 1:A:132:GLU:H 1:A:138:LEU:HD11 9 0.03 (1,59) 1:A:132:GLU:H 1:A:138:LEU:HD11 9 0.03 (1,59) 1:A:132:GLU:H 1:A:138:LEU:HD12 9 0.03 (1,59) 1:A:132:GLU:H 1:A:138:LEU:HD13 9 0.03 (1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:112:LEU:HD21 10 0.03 (1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:112:LEU:HD22 10 0.03 (1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:112:LEU:HD22 10 0.03 (1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:112:LEU:HD22 10 0.03 (1,571) 1:A:140:LEU:HD11 1:A:141:PHE:H 14 0.03 (1,571) 1:A:140:LEU:HD13 1:A:141:PHE:H 14 0.03 (1,571) 1:A:140:LEU:HD13 1:A:141:PHE:H 14 0.03 (1,571) 1:A:140:LEU:HD13 1:A:141:ARG:H 5 0.03 (1,571) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:143:ARG:H 5 0.03 (1,571) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H 5 0.03 (1,571) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H 5 0.03 (1,571) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H 10 0.03 (1,571) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H 10 0.03 (1,571) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H 10 0.03 (1,571) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H 5 0.03 (1,571) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H 5 0.03 (1,571) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H 10 0.03 (1,571) 1:A:11	(1,616)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD22	19	0.03
(1,616) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:99:LEU:HD22 19 0.03 (1,616) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD23 19 0.03 (1,616) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD22 19 0.03 (1,616) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD23 19 0.03 (1,610) 1:A:115:CYS:H 1:A:101:HIS:H 14 0.03 (1,610) 1:A:115:CYS:H 1:A:101:HIS:H 14 0.03 (1,600) 1:A:132:GLU:H 1:A:138:LEU:HD11 4 0.03 (1,59) 1:A:132:GLU:H 1:A:138:LEU:HD11 4 0.03 (1,59) 1:A:132:GLU:H 1:A:138:LEU:HD13 4 0.03 (1,59) 1:A:132:GLU:H 1:A:138:LEU:HD11 9 0.03 (1,59) 1:A:132:GLU:H 1:A:138:LEU:HD13 9 0.03 (1,59) 1:A:132:GLU:H 1:A:138:LEU:HD13 9 0.03 (1,59) 1:A:1412:GLY:H 1:A:13:142:LEU:HD13 9 0.03 (1,57) 1:A:111:GLY:H 1:A:112:LEU:HD12	(1,616)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD23	19	0.03
(1,616) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:99:LEU:HD23 19 0.03 (1,616) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD21 19 0.03 (1,616) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD22 19 0.03 (1,616) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD23 19 0.03 (1,610) 1:A:115:CYS:H 1:A:101:HIS:H 14 0.03 (1,610) 1:A:115:CYS:H 1:A:101:HIS:H 18 0.03 (1,609) 1:A:132:GLU:H 1:A:138:LEU:HD11 4 0.03 (1,59) 1:A:132:GLU:H 1:A:138:LEU:HD12 4 0.03 (1,59) 1:A:132:GLU:H 1:A:138:LEU:HD13 4 0.03 (1,59) 1:A:132:GLU:H 1:A:138:LEU:HD14 9 0.03 (1,59) 1:A:132:GLU:H 1:A:138:LEU:HD12 9 0.03 (1,59) 1:A:132:GLU:H 1:A:138:LEU:HD13 9 0.03 (1,57) 1:A:111:GLY:H 1:A:112:LEU:HD13 9 0.03 (1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:112:LEU:HD23 <td>(1,616)</td> <td>1:A:90:VAL:HG12</td> <td>1:A:99:LEU:HD21</td> <td>19</td> <td>0.03</td>	(1,616)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD21	19	0.03
(1,616) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD21 19 0.03 (1,616) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD22 19 0.03 (1,616) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD23 19 0.03 (1,610) 1:A:115:CYS:H 1:A:101:HIS:H 14 0.03 (1,600) 1:A:115:CYS:H 1:A:101:HIS:H 18 0.03 (1,609) 1:A:132:GLU:H 1:A:138:LEU:HD11 4 0.03 (1,59) 1:A:132:GLU:H 1:A:138:LEU:HD12 4 0.03 (1,59) 1:A:132:GLU:H 1:A:138:LEU:HD13 4 0.03 (1,59) 1:A:132:GLU:H 1:A:138:LEU:HD11 9 0.03 (1,59) 1:A:132:GLU:H 1:A:138:LEU:HD13 9 0.03 (1,59) 1:A:131:GLY:H 1:A:112:LEU:HD13 9 0.03 (1,57) 1:A:111:GLY:H 1:A:112:LEU:HD21 10 0.03 (1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:141:PHE:H 14 0.03 (1,571) 1:A:140:LEU:HD11 1:A:141:PHE:H	(1,616)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD22	19	0.03
(1,616) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD22 19 0.03 (1,616) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD23 19 0.03 (1,610) 1:A:115:CYS:H 1:A:101:HIS:H 14 0.03 (1,610) 1:A:115:CYS:H 1:A:101:HIS:H 18 0.03 (1,609) 1:A:102:VAL:H 1:A:88:THR:H 11 0.03 (1,59) 1:A:132:GLU:H 1:A:138:LEU:HD11 4 0.03 (1,59) 1:A:132:GLU:H 1:A:138:LEU:HD13 4 0.03 (1,59) 1:A:132:GLU:H 1:A:138:LEU:HD14 9 0.03 (1,59) 1:A:132:GLU:H 1:A:138:LEU:HD12 9 0.03 (1,59) 1:A:132:GLU:H 1:A:138:LEU:HD12 9 0.03 (1,59) 1:A:111:GLY:H 1:A:112:LEU:HD13 9 0.03 (1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:112:LEU:HD21 10 0.03 (1,577) 1:A:141:GLY:H 1:A:141:PHE:H 14 0.03 (1,571) 1:A:140:LEU:HD11 1:A:141:PHE:H	(1,616)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD23	19	0.03
(1,616) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:90:LEU:HD23 19 0.03 (1,610) 1:A:115:CYS:H 1:A:101:HIS:H 14 0.03 (1,600) 1:A:102:VAL:H 1:A:101:HIS:H 18 0.03 (1,609) 1:A:102:VAL:H 1:A:88:THR:H 11 0.03 (1,59) 1:A:132:GLU:H 1:A:138:LEU:HD11 4 0.03 (1,59) 1:A:132:GLU:H 1:A:138:LEU:HD12 4 0.03 (1,59) 1:A:132:GLU:H 1:A:138:LEU:HD13 4 0.03 (1,59) 1:A:132:GLU:H 1:A:138:LEU:HD11 9 0.03 (1,59) 1:A:132:GLU:H 1:A:138:LEU:HD12 9 0.03 (1,59) 1:A:111:GLY:H 1:A:112:LEU:HD12 9 0.03 (1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:112:LEU:HD21 10 0.03 (1,577) 1:A:140:LEU:HD11 1:A:141:PHE:H 14 0.03 (1,577) 1:A:140:LEU:HD11 1:A:141:PHE:H 14 0.03 (1,571) 1:A:140:LEU:HD13 1:A:141:PHE:H	(1,616)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD21	19	0.03
(1,610) 1:A:115:CYS:H 1:A:101:HIS:H 14 0.03 (1,610) 1:A:12:CYS:H 1:A:101:HIS:H 18 0.03 (1,609) 1:A:102:VAL:H 1:A:88:THR:H 11 0.03 (1,59) 1:A:132:GLU:H 1:A:138:LEU:HD11 4 0.03 (1,59) 1:A:132:GLU:H 1:A:138:LEU:HD12 4 0.03 (1,59) 1:A:132:GLU:H 1:A:138:LEU:HD11 9 0.03 (1,59) 1:A:132:GLU:H 1:A:138:LEU:HD11 9 0.03 (1,59) 1:A:132:GLU:H 1:A:138:LEU:HD12 9 0.03 (1,57) 1:A:111:GLY:H 1:A:138:LEU:HD13 9 0.03 (1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:112:LEU:HD22 10 0.03 (1,577) 1:A:1410:LEU:HD11 1:A:141:PHE:H 14 0.03 (1,577) 1:A:1410:LEU:HD11 1:A:141:PHE:H 14 0.03 (1,571) 1:A:140:LEU:HD11 1:A:141:PHE:H 14 0.03 (1,571) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:141:PHE:H	(1,616)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD22	19	0.03
(1,610) 1:A:115:CYS:H 1:A:101:HIS:H 18 0.03 (1,609) 1:A:102:VAL:H 1:A:88:THR:H 11 0.03 (1,59) 1:A:132:GLU:H 1:A:138:LEU:HD11 4 0.03 (1,59) 1:A:132:GLU:H 1:A:138:LEU:HD12 4 0.03 (1,59) 1:A:132:GLU:H 1:A:138:LEU:HD11 9 0.03 (1,59) 1:A:132:GLU:H 1:A:138:LEU:HD12 9 0.03 (1,59) 1:A:132:GLU:H 1:A:138:LEU:HD13 9 0.03 (1,57) 1:A:111:GLY:H 1:A:138:LEU:HD13 9 0.03 (1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:112:LEU:HD21 10 0.03 (1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:112:LEU:HD23 10 0.03 (1,577) 1:A:140:LEU:HD11 1:A:141:PHE:H 14 0.03 (1,571) 1:A:140:LEU:HD13 1:A:141:PHE:H 14 0.03 (1,571) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:1413:ARG:H 5 0.03 (1,571) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H	(1,616)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD23	19	0.03
(1,609) 1:A:102:VAL:H 1:A:88:THR:H 11 0.03 (1,59) 1:A:132:GLU:H 1:A:138:LEU:HD11 4 0.03 (1,59) 1:A:132:GLU:H 1:A:138:LEU:HD12 4 0.03 (1,59) 1:A:132:GLU:H 1:A:138:LEU:HD13 4 0.03 (1,59) 1:A:132:GLU:H 1:A:138:LEU:HD11 9 0.03 (1,59) 1:A:132:GLU:H 1:A:138:LEU:HD12 9 0.03 (1,579) 1:A:131:GLY:H 1:A:132:LEU:HD13 9 0.03 (1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:112:LEU:HD21 10 0.03 (1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:112:LEU:HD22 10 0.03 (1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:112:LEU:HD23 10 0.03 (1,577) 1:A:140:LEU:HD11 1:A:141:PHE:H 14 0.03 (1,571) 1:A:140:LEU:HD12 1:A:141:PHE:H 14 0.03 (1,571) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H 5 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H	(1,610)	1:A:115:CYS:H	1:A:101:HIS:H	14	0.03
(1,59) 1:A:132:GLU:H 1:A:138:LEU:HD11 4 0.03 (1,59) 1:A:132:GLU:H 1:A:138:LEU:HD12 4 0.03 (1,59) 1:A:132:GLU:H 1:A:138:LEU:HD13 4 0.03 (1,59) 1:A:132:GLU:H 1:A:138:LEU:HD11 9 0.03 (1,59) 1:A:132:GLU:H 1:A:138:LEU:HD12 9 0.03 (1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:138:LEU:HD13 9 0.03 (1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:112:LEU:HD22 10 0.03 (1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:112:LEU:HD23 10 0.03 (1,577) 1:A:140:LEU:HD11 1:A:141:PHE:H 14 0.03 (1,571) 1:A:140:LEU:HD12 1:A:141:PHE:H 14 0.03 (1,571) 1:A:140:LEU:HD13 1:A:141:PHE:H 14 0.03 (1,571) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:13:ARG:H 5 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD11 1:A:113:ARG:H 5 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H <td>(1,610)</td> <td>1:A:115:CYS:H</td> <td>1:A:101:HIS:H</td> <td>18</td> <td>0.03</td>	(1,610)	1:A:115:CYS:H	1:A:101:HIS:H	18	0.03
(1,59) 1:A:132:GLU:H 1:A:138:LEU:HD12 4 0.03 (1,59) 1:A:132:GLU:H 1:A:138:LEU:HD13 4 0.03 (1,59) 1:A:132:GLU:H 1:A:138:LEU:HD11 9 0.03 (1,59) 1:A:132:GLU:H 1:A:138:LEU:HD12 9 0.03 (1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:112:LEU:HD21 10 0.03 (1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:112:LEU:HD22 10 0.03 (1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:112:LEU:HD23 10 0.03 (1,577) 1:A:140:LEU:HD11 1:A:141:PHE:H 14 0.03 (1,571) 1:A:140:LEU:HD11 1:A:141:PHE:H 14 0.03 (1,571) 1:A:140:LEU:HD13 1:A:141:PHE:H 14 0.03 (1,571) 1:A:1410:LEU:HD13 1:A:1410:ARG:H 5 0.03 (1,571) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H 5 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD11 1:A:113:ARG:H 5 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:	(1,609)	1:A:102:VAL:H	1:A:88:THR:H	11	0.03
(1,59) 1:A:132:GLU:H 1:A:138:LEU:HD13 4 0.03 (1,59) 1:A:132:GLU:H 1:A:138:LEU:HD11 9 0.03 (1,59) 1:A:132:GLU:H 1:A:138:LEU:HD12 9 0.03 (1,59) 1:A:132:GLU:H 1:A:138:LEU:HD13 9 0.03 (1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:112:LEU:HD21 10 0.03 (1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:112:LEU:HD22 10 0.03 (1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:112:LEU:HD23 10 0.03 (1,577) 1:A:140:LEU:HD11 1:A:141:PHE:H 14 0.03 (1,571) 1:A:140:LEU:HD12 1:A:141:PHE:H 14 0.03 (1,571) 1:A:140:LEU:HD13 1:A:141:PHE:H 14 0.03 (1,571) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H 5 0.03 (1,572) 1:A:112:LEU:HD12 1:A:113:ARG:H 5 0.03 (1,572) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H 1 0.03 (1,573) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:	(1,59)	1:A:132:GLU:H	1:A:138:LEU:HD11	4	0.03
(1,59) 1:A:132:GLU:H 1:A:138:LEU:HD11 9 0.03 (1,59) 1:A:132:GLU:H 1:A:138:LEU:HD12 9 0.03 (1,59) 1:A:132:GLU:H 1:A:138:LEU:HD13 9 0.03 (1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:112:LEU:HD21 10 0.03 (1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:112:LEU:HD22 10 0.03 (1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:112:LEU:HD23 10 0.03 (1,577) 1:A:140:LEU:HD11 1:A:141:PHE:H 14 0.03 (1,571) 1:A:140:LEU:HD11 1:A:141:PHE:H 14 0.03 (1,571) 1:A:140:LEU:HD12 1:A:141:PHE:H 14 0.03 (1,571) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H 5 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD12 1:A:113:ARG:H 5 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H 5 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H 1 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H </td <td>(1,59)</td> <td>1:A:132:GLU:H</td> <td>1:A:138:LEU:HD12</td> <td>4</td> <td>0.03</td>	(1,59)	1:A:132:GLU:H	1:A:138:LEU:HD12	4	0.03
(1,59) 1:A:132:GLU:H 1:A:138:LEU:HD11 9 0.03 (1,59) 1:A:132:GLU:H 1:A:138:LEU:HD12 9 0.03 (1,59) 1:A:132:GLU:H 1:A:138:LEU:HD13 9 0.03 (1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:112:LEU:HD21 10 0.03 (1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:112:LEU:HD22 10 0.03 (1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:112:LEU:HD23 10 0.03 (1,577) 1:A:140:LEU:HD11 1:A:141:PHE:H 14 0.03 (1,571) 1:A:140:LEU:HD11 1:A:141:PHE:H 14 0.03 (1,571) 1:A:140:LEU:HD12 1:A:141:PHE:H 14 0.03 (1,571) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H 5 0.03 (1,572) 1:A:112:LEU:HD12 1:A:113:ARG:H 5 0.03 (1,573) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H 5 0.03 (1,574) 1:A:112:LEU:HD11 1:A:113:ARG:H 1 0.03 (1,574) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG	(1,59)	1:A:132:GLU:H	1:A:138:LEU:HD13	4	0.03
(1,59) 1:A:132:GLU:H 1:A:138:LEU:HD13 9 0.03 (1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:112:LEU:HD21 10 0.03 (1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:112:LEU:HD22 10 0.03 (1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:112:LEU:HD23 10 0.03 (1,571) 1:A:140:LEU:HD11 1:A:141:PHE:H 14 0.03 (1,571) 1:A:140:LEU:HD12 1:A:141:PHE:H 14 0.03 (1,571) 1:A:140:LEU:HD13 1:A:141:PHE:H 14 0.03 (1,571) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H 5 0.03 (1,571) 1:A:112:LEU:HD12 1:A:113:ARG:H 5 0.03 (1,571) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H 5 0.03 (1,572) 1:A:112:LEU:HD11 1:A:113:ARG:H 1 0.03 (1,573) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H 1 0.03 (1,573) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H 16 0.03 (1,574) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:	(1,59)	1:A:132:GLU:H	1:A:138:LEU:HD11	9	0.03
(1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:112:LEU:HD21 10 0.03 (1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:112:LEU:HD22 10 0.03 (1,577) 1:A:141:GLY:H 1:A:112:LEU:HD23 10 0.03 (1,571) 1:A:140:LEU:HD11 1:A:141:PHE:H 14 0.03 (1,571) 1:A:140:LEU:HD12 1:A:141:PHE:H 14 0.03 (1,571) 1:A:140:LEU:HD13 1:A:141:PHE:H 14 0.03 (1,571) 1:A:140:LEU:HD13 1:A:141:PHE:H 14 0.03 (1,571) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H 5 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD12 1:A:113:ARG:H 5 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H 1 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD12 1:A:113:ARG:H 11 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H 11 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H 16 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:AR	(1,59)	1:A:132:GLU:H	1:A:138:LEU:HD12	9	0.03
(1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:112:LEU:HD22 10 0.03 (1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:112:LEU:HD23 10 0.03 (1,571) 1:A:140:LEU:HD11 1:A:141:PHE:H 14 0.03 (1,571) 1:A:140:LEU:HD12 1:A:141:PHE:H 14 0.03 (1,571) 1:A:140:LEU:HD13 1:A:141:PHE:H 14 0.03 (1,571) 1:A:140:LEU:HD13 1:A:141:ARG:H 5 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD11 1:A:113:ARG:H 5 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H 5 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H 1 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD12 1:A:113:ARG:H 11 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H 11 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H 16 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H 16 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H	(1,59)	1:A:132:GLU:H	1:A:138:LEU:HD13	9	0.03
(1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:112:LEU:HD22 10 0.03 (1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:112:LEU:HD23 10 0.03 (1,571) 1:A:140:LEU:HD11 1:A:141:PHE:H 14 0.03 (1,571) 1:A:140:LEU:HD12 1:A:141:PHE:H 14 0.03 (1,571) 1:A:140:LEU:HD13 1:A:141:PHE:H 14 0.03 (1,571) 1:A:112:LEU:HD11 1:A:13:ARG:H 5 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD12 1:A:113:ARG:H 5 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H 5 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD11 1:A:113:ARG:H 1 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD12 1:A:113:ARG:H 11 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H 11 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H 16 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD12 1:A:113:ARG:H 16 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD12 1:A:113:ARG:H<	(1,577)	1:A:111:GLY:H	1:A:112:LEU:HD21	10	0.03
(1,577) 1:A:111:GLY:H 1:A:112:LEU:HD23 10 0.03 (1,571) 1:A:140:LEU:HD11 1:A:141:PHE:H 14 0.03 (1,571) 1:A:140:LEU:HD12 1:A:141:PHE:H 14 0.03 (1,571) 1:A:140:LEU:HD13 1:A:141:PHE:H 14 0.03 (1,571) 1:A:140:LEU:HD11 1:A:113:ARG:H 5 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD12 1:A:113:ARG:H 5 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H 5 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD11 1:A:113:ARG:H 11 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD12 1:A:113:ARG:H 11 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H 11 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD11 1:A:113:ARG:H 16 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD12 1:A:113:ARG:H 16 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD12 1:A:113:ARG:H 16 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD12 1:A:113:ARG:H	(1,577)	1:A:111:GLY:H	1:A:112:LEU:HD22	10	0.03
(1,571) 1:A:140:LEU:HD12 1:A:141:PHE:H 14 0.03 (1,571) 1:A:140:LEU:HD13 1:A:141:PHE:H 14 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD11 1:A:113:ARG:H 5 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD12 1:A:113:ARG:H 5 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H 11 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD11 1:A:113:ARG:H 11 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD12 1:A:113:ARG:H 11 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H 16 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD11 1:A:113:ARG:H 16 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD12 1:A:113:ARG:H 16 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H 16 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H 16 0.03 (1,564) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:137:TYR:H 2 0.03 (1,564) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:137:TYR:H<	(1,577)	1:A:111:GLY:H	1:A:112:LEU:HD23	10	0.03
(1,571) 1:A:140:LEU:HD13 1:A:141:PHE:H 14 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD11 1:A:113:ARG:H 5 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD12 1:A:113:ARG:H 5 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H 5 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD11 1:A:113:ARG:H 11 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD12 1:A:113:ARG:H 11 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H 16 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD12 1:A:113:ARG:H 16 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H 16 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H 16 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H 16 0.03 (1,564) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:137:TYR:H 2 0.03 (1,564) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:137:TYR:H 2 0.03 (1,564) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:137:TYR:H <td>(1,571)</td> <td>1:A:140:LEU:HD11</td> <td>1:A:141:PHE:H</td> <td>14</td> <td>0.03</td>	(1,571)	1:A:140:LEU:HD11	1:A:141:PHE:H	14	0.03
(1,57) 1:A:112:LEU:HD11 1:A:113:ARG:H 5 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD12 1:A:113:ARG:H 5 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H 5 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD11 1:A:113:ARG:H 11 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD12 1:A:113:ARG:H 11 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H 16 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD11 1:A:113:ARG:H 16 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD12 1:A:113:ARG:H 16 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H 16 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:137:TYR:H 2 0.03 (1,564) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:137:TYR:H 2 0.03 (1,564) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:137:TYR:H 5 0.03 (1,564) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:137:TYR:H 5 0.03 (1,564) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD21	(1,571)	1:A:140:LEU:HD12	1:A:141:PHE:H	14	0.03
(1,57) 1:A:112:LEU:HD12 1:A:113:ARG:H 5 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H 5 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD11 1:A:113:ARG:H 11 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD12 1:A:113:ARG:H 11 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H 16 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD12 1:A:113:ARG:H 16 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD12 1:A:113:ARG:H 16 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H 16 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H 16 0.03 (1,564) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:137:TYR:H 2 0.03 (1,564) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:137:TYR:H 2 0.03 (1,564) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:137:TYR:H 5 0.03 (1,564) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:137:TYR:H 5 0.03 (1,564) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD21 <td>(1,571)</td> <td>1:A:140:LEU:HD13</td> <td>1:A:141:PHE:H</td> <td>14</td> <td>0.03</td>	(1,571)	1:A:140:LEU:HD13	1:A:141:PHE:H	14	0.03
(1,57) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H 5 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD11 1:A:113:ARG:H 11 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD12 1:A:113:ARG:H 11 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H 16 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD12 1:A:113:ARG:H 16 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD12 1:A:113:ARG:H 16 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H 16 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:137:TYR:H 2 0.03 (1,564) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:137:TYR:H 2 0.03 (1,564) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:137:TYR:H 2 0.03 (1,564) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:137:TYR:H 5 0.03 (1,564) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:137:TYR:H 5 0.03 (1,564) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD21 11 0.03 (1,562) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD23 </td <td>(1,57)</td> <td>1:A:112:LEU:HD11</td> <td>1:A:113:ARG:H</td> <td>5</td> <td>0.03</td>	(1,57)	1:A:112:LEU:HD11	1:A:113:ARG:H	5	0.03
(1,57) 1:A:112:LEU:HD11 1:A:113:ARG:H 11 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD12 1:A:113:ARG:H 11 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H 11 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD11 1:A:113:ARG:H 16 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD12 1:A:113:ARG:H 16 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H 16 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:137:TYR:H 2 0.03 (1,564) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:137:TYR:H 2 0.03 (1,564) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:137:TYR:H 2 0.03 (1,564) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:137:TYR:H 5 0.03 (1,564) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:137:TYR:H 5 0.03 (1,564) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD21 11 0.03 (1,562) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD23 11 0.03 (1,562) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD23	(1,57)	1:A:112:LEU:HD12	1:A:113:ARG:H	5	0.03
(1,57) 1:A:112:LEU:HD12 1:A:113:ARG:H 11 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H 11 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD11 1:A:113:ARG:H 16 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD12 1:A:113:ARG:H 16 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H 16 0.03 (1,564) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:137:TYR:H 2 0.03 (1,564) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:137:TYR:H 2 0.03 (1,564) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:137:TYR:H 5 0.03 (1,564) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:137:TYR:H 5 0.03 (1,564) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:137:TYR:H 5 0.03 (1,564) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD21 11 0.03 (1,562) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD22 11 0.03 (1,562) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD23 11 0.03	(1,57)	1:A:112:LEU:HD13	1:A:113:ARG:H	5	0.03
(1,57) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H 11 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD11 1:A:113:ARG:H 16 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD12 1:A:113:ARG:H 16 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:13:ARG:H 16 0.03 (1,564) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:137:TYR:H 2 0.03 (1,564) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:137:TYR:H 2 0.03 (1,564) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:137:TYR:H 5 0.03 (1,564) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:137:TYR:H 5 0.03 (1,564) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:137:TYR:H 5 0.03 (1,564) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:137:TYR:H 5 0.03 (1,564) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD21 11 0.03 (1,562) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD22 11 0.03 (1,562) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD23 11 0.03	(1,57)	1:A:112:LEU:HD11	1:A:113:ARG:H	11	0.03
(1,57) 1:A:112:LEU:HD11 1:A:113:ARG:H 16 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD12 1:A:113:ARG:H 16 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H 16 0.03 (1,57) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:137:TYR:H 2 0.03 (1,564) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:137:TYR:H 2 0.03 (1,564) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:137:TYR:H 2 0.03 (1,564) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:137:TYR:H 5 0.03 (1,564) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:137:TYR:H 5 0.03 (1,564) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:137:TYR:H 5 0.03 (1,564) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD21 11 0.03 (1,562) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD22 11 0.03 (1,562) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD23 11 0.03	(1,57)	1:A:112:LEU:HD12	1:A:113:ARG:H	11	0.03
(1,57) 1:A:112:LEU:HD12 1:A:113:ARG:H 16 0.03 (1,57) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H 16 0.03 (1,564) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:137:TYR:H 2 0.03 (1,564) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:137:TYR:H 2 0.03 (1,564) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:137:TYR:H 2 0.03 (1,564) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:137:TYR:H 5 0.03 (1,564) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:137:TYR:H 5 0.03 (1,564) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:137:TYR:H 5 0.03 (1,564) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD21 11 0.03 (1,562) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD22 11 0.03 (1,562) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD23 11 0.03	(1,57)	1:A:112:LEU:HD13	1:A:113:ARG:H	11	0.03
(1,57) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H 16 0.03 (1,564) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:137:TYR:H 2 0.03 (1,564) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:137:TYR:H 2 0.03 (1,564) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:137:TYR:H 2 0.03 (1,564) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:137:TYR:H 5 0.03 (1,564) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:137:TYR:H 5 0.03 (1,564) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:137:TYR:H 5 0.03 (1,562) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD21 11 0.03 (1,562) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD22 11 0.03 (1,562) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD23 11 0.03	(1,57)	1:A:112:LEU:HD11	1:A:113:ARG:H	16	0.03
(1,564) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:137:TYR:H 2 0.03 (1,564) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:137:TYR:H 2 0.03 (1,564) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:137:TYR:H 2 0.03 (1,564) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:137:TYR:H 5 0.03 (1,564) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:137:TYR:H 5 0.03 (1,564) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:137:TYR:H 5 0.03 (1,564) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD21 11 0.03 (1,562) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD22 11 0.03 (1,562) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD23 11 0.03	(1,57)	1:A:112:LEU:HD12	1:A:113:ARG:H	16	0.03
(1,564) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:137:TYR:H 2 0.03 (1,564) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:137:TYR:H 2 0.03 (1,564) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:137:TYR:H 5 0.03 (1,564) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:137:TYR:H 5 0.03 (1,564) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:137:TYR:H 5 0.03 (1,562) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD21 11 0.03 (1,562) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD22 11 0.03 (1,562) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD23 11 0.03	(1,57)	1:A:112:LEU:HD13	1:A:113:ARG:H	16	0.03
(1,564) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:137:TYR:H 2 0.03 (1,564) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:137:TYR:H 2 0.03 (1,564) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:137:TYR:H 5 0.03 (1,564) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:137:TYR:H 5 0.03 (1,564) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:137:TYR:H 5 0.03 (1,562) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD21 11 0.03 (1,562) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD22 11 0.03 (1,562) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD23 11 0.03	· · /	1:A:129:LEU:HD21	1:A:137:TYR:H	2	0.03
(1,564) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:137:TYR:H 2 0.03 (1,564) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:137:TYR:H 5 0.03 (1,564) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:137:TYR:H 5 0.03 (1,564) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:137:TYR:H 5 0.03 (1,562) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD21 11 0.03 (1,562) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD22 11 0.03 (1,562) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD23 11 0.03		1:A:129:LEU:HD22	1:A:137:TYR:H	2	0.03
(1,564) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:137:TYR:H 5 0.03 (1,564) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:137:TYR:H 5 0.03 (1,564) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:137:TYR:H 5 0.03 (1,562) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD21 11 0.03 (1,562) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD22 11 0.03 (1,562) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD23 11 0.03		1:A:129:LEU:HD23	1:A:137:TYR:H	2	0.03
(1,564) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:137:TYR:H 5 0.03 (1,564) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:137:TYR:H 5 0.03 (1,562) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD21 11 0.03 (1,562) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD22 11 0.03 (1,562) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD23 11 0.03		1:A:129:LEU:HD21	1:A:137:TYR:H	5	0.03
(1,564) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:137:TYR:H 5 0.03 (1,562) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD21 11 0.03 (1,562) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD22 11 0.03 (1,562) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD23 11 0.03 (1,562) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD23 11 0.03	· · /	1:A:129:LEU:HD22	1:A:137:TYR:H	5	0.03
(1,562) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD21 11 0.03 (1,562) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD22 11 0.03 (1,562) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD23 11 0.03		1:A:129:LEU:HD23	1:A:137:TYR:H	5	0.03
(1,562) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD22 11 0.03 (1,562) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD23 11 0.03		1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD21		0.03
(1,562) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD23 11 0.03		1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD22	11	0.03
	· · /	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD23	11	0.03
(1,301) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:134:TYK:H $($ 0.03	(1,561)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:134:TYR:H	7	0.03



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,561)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:134:TYR:H	7	0.03
(1,561)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:134:TYR:H	7	0.03
(1,561)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:134:TYR:H	20	0.03
(1,561)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:134:TYR:H	20	0.03
(1,561)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:134:TYR:H	20	0.03
(1,56)	1:A:110:ASN:HD22	1:A:112:LEU:HD11	13	0.03
(1,56)	1:A:110:ASN:HD22	1:A:112:LEU:HD12	13	0.03
(1,56)	1:A:110:ASN:HD22	1:A:112:LEU:HD13	13	0.03
(1,557)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:131:GLU:H	15	0.03
(1,557)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:131:GLU:H	15	0.03
(1,557)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:131:GLU:H	15	0.03
(1,552)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD21	12	0.03
(1,552)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD22	12	0.03
(1,552)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD23	12	0.03
(1,548)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD11	11	0.03
(1,548)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD12	11	0.03
(1,548)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD13	11	0.03
(1,547)	1:A:45:ILE:HD11	1:A:121:LEU:H	2	0.03
(1,547)	1:A:45:ILE:HD12	1:A:121:LEU:H	2	0.03
(1,547)	1:A:45:ILE:HD13	1:A:121:LEU:H	2	0.03
(1,542)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD21	17	0.03
(1,542)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD22	17	0.03
(1,542)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD23	17	0.03
(1,536)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:102:VAL:H	6	0.03
(1,536)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:102:VAL:H	6	0.03
(1,536)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:102:VAL:H	6	0.03
(1,536)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:102:VAL:H	11	0.03
(1,536)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:102:VAL:H	11	0.03
(1,536)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:102:VAL:H	11	0.03
(1,526)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:98:HIS:H	12	0.03
(1,526)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:98:HIS:H	12	0.03
(1,526)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:98:HIS:H	12	0.03
(1,520)	1:A:90:VAL:H	1:A:90:VAL:HG11	2	0.03
(1,520)	1:A:90:VAL:H	1:A:90:VAL:HG12	2	0.03
(1,520)	1:A:90:VAL:H	1:A:90:VAL:HG13	2	0.03
(1,518)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD11	16	0.03
(1,518)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD12	16	0.03
(1,518)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD13	16	0.03
(1,517)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:HG21	16	0.03
(1,517)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:HG22	16	0.03
(1,517)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:HG23	16	0.03
(1,512)	1:A:79:LEU:HD21	1:A:87:ARG:H	20	0.03



 $Continued\ from\ previous\ page...$

(1,512) 1:A:79:LEU:HD22 1:A:87:ARG:H 20 0.03 (1,512) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:87:ARG:H 20 0.03 (1,511) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:122:ARG:H 13 0.03 (1,511) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:122:ARG:H 13 0.03 (1,511) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:122:ARG:H 13 0.03 (1,508) 1:A:78:IVS:H 1:A:102:VAL:HG21 6 0.03 (1,508) 1:A:78:IYS:H 1:A:102:VAL:HG22 6 0.03 (1,507) 1:A:75:VAL:HG11 1:A:77:GLU:H 5 0.03 (1,507) 1:A:75:VAL:HG12 1:A:77:GLU:H 5 0.03 (1,507) 1:A:75:VAL:HG13 1:A:77:GLU:H 5 0.03 (1,507) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 2 0.03 (1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 2 0.03 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 12 0.03 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,511) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:122:ARG:H 13 0.03 (1,511) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:122:ARG:H 13 0.03 (1,511) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:122:ARG:H 13 0.03 (1,508) 1:A:78:LYS:H 1:A:102:VAL:HG21 6 0.03 (1,508) 1:A:78:LYS:H 1:A:102:VAL:HG22 6 0.03 (1,507) 1:A:75:VAL:HG11 1:A:77:GLU:H 5 0.03 (1,507) 1:A:75:VAL:HG12 1:A:77:GLU:H 5 0.03 (1,507) 1:A:75:VAL:HG12 1:A:76:GLU:H 5 0.03 (1,507) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 5 0.03 (1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 2 0.03 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 12 0.03 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 12 0.03 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 12 0.03 (1,505) 1:A:73:GLU:H 12 0.03	(1,512)	1:A:79:LEU:HD22	1:A:87:ARG:H	20	0.03
(1,511) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:12:ARG:H 13 0.03 (1,511) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:12:ARG:H 13 0.03 (1,508) 1:A:78:LYS:H 1:A:102:VAL:HG21 6 0.03 (1,508) 1:A:78:LYS:H 1:A:102:VAL:HG22 6 0.03 (1,508) 1:A:78:LYS:H 1:A:102:VAL:HG23 6 0.03 (1,507) 1:A:75:VAL:HG11 1:A:77:GLU:H 5 0.03 (1,507) 1:A:75:VAL:HG12 1:A:77:GLU:H 5 0.03 (1,507) 1:A:75:VAL:HG13 1:A:77:GLU:H 5 0.03 (1,507) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 2 0.03 (1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 2 0.03 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 12 0.03 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 12 0.03 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 12 0.03 (1,505) 1:A:73:GLU:H 1:A:76:GLU:H 12 <td>(1,512)</td> <td>1:A:79:LEU:HD23</td> <td>1:A:87:ARG:H</td> <td>20</td> <td>0.03</td>	(1,512)	1:A:79:LEU:HD23	1:A:87:ARG:H	20	0.03
(1,511)	(1,511)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:122:ARG:H	13	0.03
(1,508) 1:A:78:LYS:H 1:A:102:VAL:HG21 6 0.03 (1,508) 1:A:78:LYS:H 1:A:102:VAL:HG22 6 0.03 (1,508) 1:A:78:LYS:H 1:A:102:VAL:HG23 6 0.03 (1,507) 1:A:75:VAL:HG11 1:A:77:GLU:H 5 0.03 (1,507) 1:A:75:VAL:HG12 1:A:77:GLU:H 5 0.03 (1,507) 1:A:75:VAL:HG12 1:A:76:GLU:H 5 0.03 (1,507) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 2 0.03 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 2 0.03 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 12 0.03 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 12 0.03 (1,505) 1:A:73:GLU:H 12 0.03 (1,505) 1:A:73:GLU:H 12 0.03 (1,500) 1:A:73:GLU:H 12 0.03 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG22 5 0.03 (1,500) 1:A:19:VAL:HG21 </td <td>(1,511)</td> <td>1:A:43:VAL:HG22</td> <td>1:A:122:ARG:H</td> <td>13</td> <td>0.03</td>	(1,511)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:122:ARG:H	13	0.03
(1,508) 1:A:78:LYS:H 1:A:102:VAL:HG22 6 0.03 (1,508) 1:A:78:LYS:H 1:A:102:VAL:HG23 6 0.03 (1,507) 1:A:75:VAL:HG11 1:A:77:GLU:H 5 0.03 (1,507) 1:A:75:VAL:HG12 1:A:77:GLU:H 5 0.03 (1,507) 1:A:75:VAL:HG13 1:A:77:GLU:H 5 0.03 (1,507) 1:A:75:VAL:HG13 1:A:76:GLU:H 5 0.03 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 2 0.03 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 2 0.03 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 2 0.03 (1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 12 0.03 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 12 0.03 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 12 0.03 (1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 12 0.03 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 12 0.03 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 12 0.03 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 12 0.03 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG21 5 0.03 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG22 5 0.03 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG22 5 0.03 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG23 5 0.03 (1,500) 1:A:79:VAL:HG21 1:A:64:TRP:HE1 5 0.03 (1,500) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:64:TRP:HE1 5 0.03 (1,500) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:64:TRP:HE1 5 0.03 (1,497) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:H 6 0.03 (1,497) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:H 6 0.03 (1,497) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:H 6 0.03 (1,497) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:H 12 0.03 (1,497) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:H 12 0.03 (1,497) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:H 12 0.03 (1,497) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:H 12 0.03 (1,497) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:H 12 0.03 (1,497) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:H 12 0.03 (1,497) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:H 12 0.03 (1,497) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:H 12 0.03 (1,498) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:52:PHE:H 19 0.03 (1,499) 1:A:51:LEU:H 12 1:A:51:L	(1,511)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:122:ARG:H	13	0.03
(1,508) 1:A:78:LYS:H 1:A:102:VAL:HG23 6 0.03 (1,507) 1:A:75:VAL:HG11 1:A:77:GLU:H 5 0.03 (1,507) 1:A:75:VAL:HG12 1:A:77:GLU:H 5 0.03 (1,507) 1:A:75:VAL:HG13 1:A:77:GLU:H 5 0.03 (1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 2 0.03 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 2 0.03 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 2 0.03 (1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 12 0.03 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 12 0.03 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 12 0.03 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG22 5 0.03 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG23 5 0.03 (1,500) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:64:TRP:HE1 5 0.03 (1,500) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:64:TRP:HE1 5 </td <td>(1,508)</td> <td>1:A:78:LYS:H</td> <td>1:A:102:VAL:HG21</td> <td>6</td> <td>0.03</td>	(1,508)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG21	6	0.03
(1,507) 1:A:75:VAL:HG11 1:A:77:GLU:H 5 0.03 (1,507) 1:A:75:VAL:HG12 1:A:77:GLU:H 5 0.03 (1,507) 1:A:75:VAL:HG13 1:A:77:GLU:H 5 0.03 (1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 2 0.03 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 2 0.03 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 2 0.03 (1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 12 0.03 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 12 0.03 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 12 0.03 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG21 5 0.03 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG22 5 0.03 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:64:TRP:HE1 5 0.03 (1,500) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:64:TRP:HE1 5 0.03 (1,500) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:64:TRP:HE1 5 <td>(1,508)</td> <td>1:A:78:LYS:H</td> <td>1:A:102:VAL:HG22</td> <td>6</td> <td>0.03</td>	(1,508)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG22	6	0.03
(1,507) 1:A:75:VAL:HG12 1:A:77:GLU:H 5 0.03 (1,507) 1:A:75:VAL:HG13 1:A:77:GLU:H 5 0.03 (1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 2 0.03 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 2 0.03 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 12 0.03 (1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 12 0.03 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 12 0.03 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 12 0.03 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG21 5 0.03 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG23 5 0.03 (1,500) 1:A:719:VAL:HG21 1:A:64:TRP:HE1 5 0.03 (1,500) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:64:TRP:HE1 5 0.03 (1,497) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:H 6 0.03 (1,497) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:H 6<	(1,508)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG23	6	0.03
(1,507) 1:A:75:VAL:HG13 1:A:77:GLU:H 5 0.03 (1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 2 0.03 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 2 0.03 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 12 0.03 (1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 12 0.03 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 12 0.03 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 12 0.03 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 12 0.03 (1,500) 1:A:73:GLU:H 12 0.03 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG22 5 0.03 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG23 5 0.03 (1,500) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:64:TRP:HE1 5 0.03 (1,500) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:64:TRP:HE1 5 0.03 (1,500) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:71:ILE:H 6 0.03 (1,497)	(1,507)	1:A:75:VAL:HG11	1:A:77:GLU:H	5	0.03
(1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 2 0.03 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 2 0.03 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 2 0.03 (1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 12 0.03 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 12 0.03 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 12 0.03 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG21 5 0.03 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG22 5 0.03 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG23 5 0.03 (1,500) 1:A:71:VAL:HG21 1:A:64:TRP:HE1 5 0.03 (1,500) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:64:TRP:HE1 5 0.03 (1,501) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:64:TRP:HE1 5 0.03 (1,497) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:H 6 0.03 (1,497) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:H 12	(1,507)	1:A:75:VAL:HG12	1:A:77:GLU:H	5	0.03
(1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 2 0.03 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 2 0.03 (1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 12 0.03 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 12 0.03 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 12 0.03 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG21 5 0.03 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG22 5 0.03 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG22 5 0.03 (1,500) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:64:TRP:HE1 5 0.03 (1,50) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:64:TRP:HE1 5 0.03 (1,50) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:64:TRP:HE1 5 0.03 (1,497) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:H 6 0.03 (1,497) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:H 6 0.03 (1,497) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:H 12 </td <td>(1,507)</td> <td>1:A:75:VAL:HG13</td> <td>1:A:77:GLU:H</td> <td>5</td> <td>0.03</td>	(1,507)	1:A:75:VAL:HG13	1:A:77:GLU:H	5	0.03
(1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 2 0.03 (1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 12 0.03 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 12 0.03 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 12 0.03 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG21 5 0.03 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG22 5 0.03 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:64:TRP:HE1 5 0.03 (1,500) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:64:TRP:HE1 5 0.03 (1,50) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:64:TRP:HE1 5 0.03 (1,50) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:64:TRP:HE1 5 0.03 (1,497) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:H 6 0.03 (1,497) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:H 6 0.03 (1,497) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:H 12 0.03 (1,497) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:H 12 </td <td>(1,505)</td> <td>1:A:75:VAL:HG21</td> <td>1:A:76:GLU:H</td> <td>2</td> <td>0.03</td>	(1,505)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:76:GLU:H	2	0.03
(1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 2 0.03 (1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 12 0.03 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 12 0.03 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 12 0.03 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG21 5 0.03 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG22 5 0.03 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG23 5 0.03 (1,500) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:64:TRP:HE1 5 0.03 (1,50) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:64:TRP:HE1 5 0.03 (1,50) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:64:TRP:HE1 5 0.03 (1,497) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:H 6 0.03 (1,497) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:H 6 0.03 (1,497) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:H 12 0.03 (1,497) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:H 12<	(1,505)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:76:GLU:H	2	0.03
(1,505) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:76:GLU:H 12 0.03 (1,505) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:76:GLU:H 12 0.03 (1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 12 0.03 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG21 5 0.03 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG22 5 0.03 (1,500) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:64:TRP:HE1 5 0.03 (1,50) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:64:TRP:HE1 5 0.03 (1,50) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:64:TRP:HE1 5 0.03 (1,50) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:64:TRP:HE1 5 0.03 (1,50) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:64:TRP:HE1 5 0.03 (1,497) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:H 6 0.03 (1,497) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:H 6 0.03 (1,497) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:H 12 0.03 (1,497) 1:A:43:1:LEU:HD23 1:A:71:ILE:H <td< td=""><td></td><td>1:A:75:VAL:HG23</td><td>1:A:76:GLU:H</td><td>2</td><td>0.03</td></td<>		1:A:75:VAL:HG23	1:A:76:GLU:H	2	0.03
(1,505) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 12 0.03 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG21 5 0.03 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG22 5 0.03 (1,500) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:64:TRP:HE1 5 0.03 (1,50) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:64:TRP:HE1 5 0.03 (1,50) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:64:TRP:HE1 5 0.03 (1,50) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:64:TRP:HE1 5 0.03 (1,50) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:64:TRP:HE1 5 0.03 (1,497) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:H 6 0.03 (1,497) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:H 6 0.03 (1,497) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:H 12 0.03 (1,497) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:H 12 0.03 (1,497) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:H 12 0.03 (1,493) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:52:PHE:H 1	(1,505)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:76:GLU:H	12	0.03
(1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG21 5 0.03 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG22 5 0.03 (1,500) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:64:TRP:HE1 5 0.03 (1,50) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:64:TRP:HE1 5 0.03 (1,50) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:64:TRP:HE1 5 0.03 (1,50) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:64:TRP:HE1 5 0.03 (1,497) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:H 6 0.03 (1,497) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:H 6 0.03 (1,497) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:H 12 0.03 (1,497) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:H 12 0.03 (1,497) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:H 12 0.03 (1,497) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:H 12 0.03 (1,497) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:52:PHE:H 19 0.03 (1,493) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:52:PHE:H 1	(1,505)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:76:GLU:H	12	0.03
(1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG22 5 0.03 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG23 5 0.03 (1,50) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:64:TRP:HE1 5 0.03 (1,50) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:64:TRP:HE1 5 0.03 (1,50) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:64:TRP:HE1 5 0.03 (1,497) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:H 6 0.03 (1,497) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:H 6 0.03 (1,497) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:H 6 0.03 (1,497) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:H 12 0.03 (1,497) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:H 12 0.03 (1,497) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:H 12 0.03 (1,497) 1:A:54:VAL:HG11 1:A:52:PHE:H 19 0.03 (1,493) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:52:PHE:H 19 0.03 (1,493) 1:A:44:LEU:HD21 1:A:55:PHE:H 7 </td <td>(1,505)</td> <td>1:A:75:VAL:HG23</td> <td>1:A:76:GLU:H</td> <td>12</td> <td>0.03</td>	(1,505)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:76:GLU:H	12	0.03
(1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG23 5 0.03 (1,50) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:64:TRP:HE1 5 0.03 (1,50) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:64:TRP:HE1 5 0.03 (1,50) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:64:TRP:HE1 5 0.03 (1,497) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:H 6 0.03 (1,497) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:H 6 0.03 (1,497) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:H 12 0.03 (1,497) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:H 12 0.03 (1,497) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:H 12 0.03 (1,497) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:52:PHE:H 19 0.03 (1,493) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:52:PHE:H 19 0.03 (1,493) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:52:PHE:H 19 0.03 (1,491) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:52:PHE:H 7 0.03 (1,489) 1:A:51:LEU:H 1:A:71:ILE:HD11 10	(1,500)	1:A:73:GLU:H	1:A:75:VAL:HG21	5	0.03
(1,50) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:64:TRP:HE1 5 0.03 (1,50) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:64:TRP:HE1 5 0.03 (1,50) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:64:TRP:HE1 5 0.03 (1,497) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:H 6 0.03 (1,497) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:H 6 0.03 (1,497) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:H 12 0.03 (1,497) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:H 12 0.03 (1,497) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:H 12 0.03 (1,497) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:H 12 0.03 (1,497) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:52:PHE:H 19 0.03 (1,493) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:52:PHE:H 19 0.03 (1,493) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:52:PHE:H 19 0.03 (1,491) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:52:PHE:H 7 0.03 (1,491) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:52:PHE:H 7	(1,500)	1:A:73:GLU:H	1:A:75:VAL:HG22	5	0.03
(1,50) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:64:TRP:HE1 5 0.03 (1,50) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:64:TRP:HE1 5 0.03 (1,497) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:H 6 0.03 (1,497) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:H 6 0.03 (1,497) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:H 12 0.03 (1,497) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:H 12 0.03 (1,497) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:H 12 0.03 (1,497) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:H 12 0.03 (1,497) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:H 12 0.03 (1,493) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:52:PHE:H 19 0.03 (1,493) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:52:PHE:H 19 0.03 (1,493) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:52:PHE:H 7 0.03 (1,491) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:52:PHE:H 7 0.03 (1,491) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:52:PHE:H 7<	(1,500)	1:A:73:GLU:H	1:A:75:VAL:HG23	5	0.03
(1,50) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:64:TRP:HE1 5 0.03 (1,497) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:H 6 0.03 (1,497) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:H 6 0.03 (1,497) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:H 6 0.03 (1,497) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:H 12 0.03 (1,497) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:H 12 0.03 (1,497) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:H 12 0.03 (1,497) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:H 19 0.03 (1,493) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:52:PHE:H 19 0.03 (1,493) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:52:PHE:H 19 0.03 (1,493) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:52:PHE:H 7 0.03 (1,491) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:52:PHE:H 7 0.03 (1,491) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:52:PHE:H 7 0.03 (1,489) 1:A:51:LEU:H 1:A:71:ILE:HD11 10 </td <td>(1,50)</td> <td>1:A:19:VAL:HG21</td> <td>1:A:64:TRP:HE1</td> <td>5</td> <td>0.03</td>	(1,50)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:64:TRP:HE1	5	0.03
(1,497) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:H 6 0.03 (1,497) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:H 6 0.03 (1,497) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:H 6 0.03 (1,497) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:H 12 0.03 (1,497) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:H 12 0.03 (1,497) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:H 12 0.03 (1,497) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:52:PHE:H 19 0.03 (1,493) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:52:PHE:H 19 0.03 (1,493) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:52:PHE:H 19 0.03 (1,491) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:52:PHE:H 7 0.03 (1,491) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:52:PHE:H 7 0.03 (1,489) 1:A:51:LEU:H 1:A:71:ILE:HD11 10 0.03 (1,489) 1:A:51:LEU:H 1:A:71:ILE:HD12 10 0.03 (1,488) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:51:LEU:H 5 </td <td>(1,50)</td> <td>1:A:19:VAL:HG22</td> <td>1:A:64:TRP:HE1</td> <td>5</td> <td>0.03</td>	(1,50)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:64:TRP:HE1	5	0.03
(1,497) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:H 6 0.03 (1,497) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:H 6 0.03 (1,497) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:H 12 0.03 (1,497) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:H 12 0.03 (1,497) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:H 12 0.03 (1,497) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:H 19 0.03 (1,493) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:52:PHE:H 19 0.03 (1,493) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:52:PHE:H 19 0.03 (1,493) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:52:PHE:H 7 0.03 (1,491) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:52:PHE:H 7 0.03 (1,491) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:52:PHE:H 7 0.03 (1,489) 1:A:51:LEU:H 1:A:71:ILE:HD11 10 0.03 (1,489) 1:A:51:LEU:H 1:A:71:ILE:HD12 10 0.03 (1,488) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:51:LEU:H 5 </td <td>(1,50)</td> <td>1:A:19:VAL:HG23</td> <td>1:A:64:TRP:HE1</td> <td>5</td> <td>0.03</td>	(1,50)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:64:TRP:HE1	5	0.03
(1,497) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:H 6 0.03 (1,497) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:H 12 0.03 (1,497) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:H 12 0.03 (1,497) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:H 12 0.03 (1,493) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:52:PHE:H 19 0.03 (1,493) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:52:PHE:H 19 0.03 (1,493) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:52:PHE:H 19 0.03 (1,491) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:52:PHE:H 7 0.03 (1,491) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:52:PHE:H 7 0.03 (1,491) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:52:PHE:H 7 0.03 (1,489) 1:A:51:LEU:H 1:A:71:ILE:HD11 10 0.03 (1,489) 1:A:51:LEU:H 1:A:71:ILE:HD12 10 0.03 (1,489) 1:A:51:LEU:H 1:A:51:LEU:H 5 0.03 (1,488) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:51:LEU:H 5	(1,497)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:H	6	0.03
(1,497) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:H 12 0.03 (1,497) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:H 12 0.03 (1,497) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:H 12 0.03 (1,493) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:52:PHE:H 19 0.03 (1,493) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:52:PHE:H 19 0.03 (1,493) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:52:PHE:H 19 0.03 (1,491) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:52:PHE:H 7 0.03 (1,491) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:52:PHE:H 7 0.03 (1,491) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:52:PHE:H 7 0.03 (1,491) 1:A:51:LEU:H 1:A:71:ILE:HD11 10 0.03 (1,489) 1:A:51:LEU:H 1:A:71:ILE:HD12 10 0.03 (1,489) 1:A:51:LEU:H 1:A:71:ILE:HD13 10 0.03 (1,488) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:51:LEU:H 5 0.03 (1,488) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:51:LEU:H 5<	(1,497)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:H	6	0.03
(1,497) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:H 12 0.03 (1,497) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:H 12 0.03 (1,493) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:52:PHE:H 19 0.03 (1,493) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:52:PHE:H 19 0.03 (1,493) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:52:PHE:H 19 0.03 (1,491) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:52:PHE:H 7 0.03 (1,491) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:52:PHE:H 7 0.03 (1,491) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:52:PHE:H 7 0.03 (1,491) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:52:PHE:H 7 0.03 (1,489) 1:A:51:LEU:H 1:A:71:ILE:HD11 10 0.03 (1,489) 1:A:51:LEU:H 1:A:71:ILE:HD12 10 0.03 (1,489) 1:A:51:LEU:H 1:A:51:LEU:H 5 0.03 (1,488) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:51:LEU:H 5 0.03 (1,488) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:51:LEU:H 5	(1,497)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:H	6	0.03
(1,497) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:H 12 0.03 (1,493) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:52:PHE:H 19 0.03 (1,493) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:52:PHE:H 19 0.03 (1,493) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:52:PHE:H 19 0.03 (1,491) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:52:PHE:H 7 0.03 (1,491) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:52:PHE:H 7 0.03 (1,491) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:52:PHE:H 7 0.03 (1,491) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:52:PHE:H 7 0.03 (1,489) 1:A:51:LEU:H 1:A:71:ILE:HD11 10 0.03 (1,489) 1:A:51:LEU:H 1:A:71:ILE:HD12 10 0.03 (1,488) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:51:LEU:H 5 0.03 (1,488) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:51:LEU:H 5 0.03 (1,488) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:51:LEU:H 5 0.03	(1,497)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:H	12	0.03
(1,493) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:52:PHE:H 19 0.03 (1,493) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:52:PHE:H 19 0.03 (1,493) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:52:PHE:H 19 0.03 (1,491) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:52:PHE:H 7 0.03 (1,491) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:52:PHE:H 7 0.03 (1,491) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:52:PHE:H 7 0.03 (1,489) 1:A:51:LEU:H 1:A:71:ILE:HD11 10 0.03 (1,489) 1:A:51:LEU:H 1:A:71:ILE:HD12 10 0.03 (1,489) 1:A:51:LEU:H 1:A:71:ILE:HD13 10 0.03 (1,488) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:51:LEU:H 5 0.03 (1,488) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:51:LEU:H 5 0.03 (1,488) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:51:LEU:H 5 0.03	(1,497)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:H	12	0.03
(1,493) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:52:PHE:H 19 0.03 (1,493) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:52:PHE:H 19 0.03 (1,493) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:52:PHE:H 19 0.03 (1,491) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:52:PHE:H 7 0.03 (1,491) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:52:PHE:H 7 0.03 (1,491) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:52:PHE:H 7 0.03 (1,489) 1:A:51:LEU:H 1:A:71:ILE:HD11 10 0.03 (1,489) 1:A:51:LEU:H 1:A:71:ILE:HD12 10 0.03 (1,489) 1:A:51:LEU:H 1:A:71:ILE:HD13 10 0.03 (1,488) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:51:LEU:H 5 0.03 (1,488) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:51:LEU:H 5 0.03 (1,488) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:51:LEU:H 5 0.03	(1,497)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:H	12	0.03
(1,493) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:52:PHE:H 19 0.03 (1,493) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:52:PHE:H 19 0.03 (1,491) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:52:PHE:H 7 0.03 (1,491) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:52:PHE:H 7 0.03 (1,491) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:52:PHE:H 7 0.03 (1,489) 1:A:51:LEU:H 1:A:71:ILE:HD11 10 0.03 (1,489) 1:A:51:LEU:H 1:A:71:ILE:HD12 10 0.03 (1,489) 1:A:51:LEU:H 1:A:71:ILE:HD13 10 0.03 (1,488) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:51:LEU:H 5 0.03 (1,488) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:51:LEU:H 5 0.03 (1,488) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:51:LEU:H 5 0.03	(1,493)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:52:PHE:H	19	0.03
(1,491) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:52:PHE:H 7 0.03 (1,491) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:52:PHE:H 7 0.03 (1,491) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:52:PHE:H 7 0.03 (1,489) 1:A:51:LEU:H 1:A:71:ILE:HD11 10 0.03 (1,489) 1:A:51:LEU:H 1:A:71:ILE:HD12 10 0.03 (1,489) 1:A:51:LEU:H 1:A:71:ILE:HD13 10 0.03 (1,488) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:51:LEU:H 5 0.03 (1,488) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:51:LEU:H 5 0.03 (1,488) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:51:LEU:H 5 0.03		1:A:43:VAL:HG12	1:A:52:PHE:H	19	0.03
(1,491) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:52:PHE:H 7 0.03 (1,491) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:52:PHE:H 7 0.03 (1,491) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:52:PHE:H 7 0.03 (1,489) 1:A:51:LEU:H 1:A:71:ILE:HD11 10 0.03 (1,489) 1:A:51:LEU:H 1:A:71:ILE:HD12 10 0.03 (1,489) 1:A:51:LEU:H 1:A:71:ILE:HD13 10 0.03 (1,488) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:51:LEU:H 5 0.03 (1,488) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:51:LEU:H 5 0.03 (1,488) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:51:LEU:H 5 0.03		1:A:43:VAL:HG13	1:A:52:PHE:H	19	0.03
(1,491) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:52:PHE:H 7 0.03 (1,491) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:52:PHE:H 7 0.03 (1,489) 1:A:51:LEU:H 1:A:71:ILE:HD11 10 0.03 (1,489) 1:A:51:LEU:H 1:A:71:ILE:HD12 10 0.03 (1,489) 1:A:51:LEU:H 1:A:71:ILE:HD13 10 0.03 (1,488) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:51:LEU:H 5 0.03 (1,488) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:51:LEU:H 5 0.03 (1,488) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:51:LEU:H 5 0.03		1:A:41:LEU:HD21	1:A:52:PHE:H	7	0.03
(1,491) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:52:PHE:H 7 0.03 (1,489) 1:A:51:LEU:H 1:A:71:ILE:HD11 10 0.03 (1,489) 1:A:51:LEU:H 1:A:71:ILE:HD12 10 0.03 (1,489) 1:A:51:LEU:H 1:A:71:ILE:HD13 10 0.03 (1,488) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:51:LEU:H 5 0.03 (1,488) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:51:LEU:H 5 0.03 (1,488) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:51:LEU:H 5 0.03		1:A:41:LEU:HD22	1:A:52:PHE:H	7	0.03
(1,489) 1:A:51:LEU:H 1:A:71:ILE:HD11 10 0.03 (1,489) 1:A:51:LEU:H 1:A:71:ILE:HD12 10 0.03 (1,489) 1:A:51:LEU:H 1:A:71:ILE:HD13 10 0.03 (1,488) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:51:LEU:H 5 0.03 (1,488) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:51:LEU:H 5 0.03 (1,488) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:51:LEU:H 5 0.03		1:A:41:LEU:HD23	1:A:52:PHE:H	7	0.03
(1,489) 1:A:51:LEU:H 1:A:71:ILE:HD12 10 0.03 (1,489) 1:A:51:LEU:H 1:A:71:ILE:HD13 10 0.03 (1,488) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:51:LEU:H 5 0.03 (1,488) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:51:LEU:H 5 0.03 (1,488) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:51:LEU:H 5 0.03 (1,488) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:51:LEU:H 5 0.03		1:A:51:LEU:H	1:A:71:ILE:HD11	10	0.03
(1,489) 1:A:51:LEU:H 1:A:71:ILE:HD13 10 0.03 (1,488) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:51:LEU:H 5 0.03 (1,488) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:51:LEU:H 5 0.03 (1,488) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:51:LEU:H 5 0.03	` ′	1:A:51:LEU:H	1:A:71:ILE:HD12	10	0.03
(1,488) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:51:LEU:H 5 0.03 (1,488) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:51:LEU:H 5 0.03 (1,488) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:51:LEU:H 5 0.03		1:A:51:LEU:H	1:A:71:ILE:HD13	10	0.03
(1,488) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:51:LEU:H 5 0.03 (1,488) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:51:LEU:H 5 0.03	· · /	1:A:43:VAL:HG21	1:A:51:LEU:H	5	0.03
(1,488) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:51:LEU:H 5 0.03	(1,488)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:51:LEU:H	5	0.03
	· · /	1:A:43:VAL:HG23	1:A:51:LEU:H	5	0.03
	· · /				



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,475)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:44:ASP:H	2	0.03
(1,475)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:44:ASP:H	2	0.03
(1,468)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:23:ASN:H	2	0.03
(1,468)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:23:ASN:H	2	0.03
(1,468)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:23:ASN:H	2	0.03
(1,465)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG11	9	0.03
(1,465)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG12	9	0.03
(1,465)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG13	9	0.03
(1,464)	1:A:16:GLN:H	1:A:46:VAL:HG11	11	0.03
(1,464)	1:A:16:GLN:H	1:A:46:VAL:HG12	11	0.03
(1,464)	1:A:16:GLN:H	1:A:46:VAL:HG13	11	0.03
(1,463)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:16:GLN:H	20	0.03
(1,463)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:16:GLN:H	20	0.03
(1,463)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:16:GLN:H	20	0.03
(1,462)	1:A:45:ILE:HD11	1:A:46:VAL:H	15	0.03
(1,462)	1:A:45:ILE:HD12	1:A:46:VAL:H	15	0.03
(1,462)	1:A:45:ILE:HD13	1:A:46:VAL:H	15	0.03
(1,462)	1:A:45:ILE:HD11	1:A:46:VAL:H	18	0.03
(1,462)	1:A:45:ILE:HD12	1:A:46:VAL:H	18	0.03
(1,462)	1:A:45:ILE:HD13	1:A:46:VAL:H	18	0.03
(1,458)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:10:LYS:H	8	0.03
(1,458)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:10:LYS:H	8	0.03
(1,458)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:10:LYS:H	8	0.03
(1,456)	1:A:9:ILE:H	1:A:12:LEU:HD21	2	0.03
(1,456)	1:A:9:ILE:H	1:A:12:LEU:HD22	2	0.03
(1,456)	1:A:9:ILE:H	1:A:12:LEU:HD23	2	0.03
(1,452)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG21	17	0.03
(1,452)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG22	17	0.03
(1,452)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG23	17	0.03
(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD11	15	0.03
(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD12	15	0.03
(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD13	15	0.03
(1,437)	1:A:46:VAL:HG11	1:A:48:GLY:H	14	0.03
(1,437)	1:A:46:VAL:HG12	1:A:48:GLY:H	14	0.03
(1,437)	1:A:46:VAL:HG13	1:A:48:GLY:H	14	0.03
(1,437)	1:A:46:VAL:HG11	1:A:48:GLY:H	15	0.03
(1,437)	1:A:46:VAL:HG12	1:A:48:GLY:H	15	0.03
(1,437)	1:A:46:VAL:HG13	1:A:48:GLY:H	15	0.03
(1,431)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:103:PHE:H	5	0.03
(1,431)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:103:PHE:H	5	0.03
(1,431)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:103:PHE:H	5	0.03
(1,430)	1:A:46:VAL:HG11	1:A:47:SER:H	4	0.03



 $Continued\ from\ previous\ page...$

(1,430) 1:A:46:VAL:HG12 1:A:47:SER:H 4 (1,430) 1:A:46:VAL:HG13 1:A:47:SER:H 4 (1,430) 1:A:46:VAL:HG11 1:A:47:SER:H 20 (1,430) 1:A:46:VAL:HG12 1:A:47:SER:H 20 (1,430) 1:A:46:VAL:HG13 1:A:47:SER:H 20 (1,428) 1:A:79:LEU:HD21 1:A:80:ASP:H 4 (1,428) 1:A:79:LEU:HD22 1:A:80:ASP:H 4	0.03 0.03 0.03 0.03 0.03 0.03 0.03
(1,430) 1:A:46:VAL:HG11 1:A:47:SER:H 20 (1,430) 1:A:46:VAL:HG12 1:A:47:SER:H 20 (1,430) 1:A:46:VAL:HG13 1:A:47:SER:H 20 (1,428) 1:A:79:LEU:HD21 1:A:80:ASP:H 4	0.03 0.03 0.03 0.03
(1,430) 1:A:46:VAL:HG12 1:A:47:SER:H 20 (1,430) 1:A:46:VAL:HG13 1:A:47:SER:H 20 (1,428) 1:A:79:LEU:HD21 1:A:80:ASP:H 4	0.03 0.03 0.03
(1,430) 1:A:46:VAL:HG13 1:A:47:SER:H 20 (1,428) 1:A:79:LEU:HD21 1:A:80:ASP:H 4	0.03 0.03
(1,428) 1:A:79:LEU:HD21 1:A:80:ASP:H 4	0.03
(1.499) 1.4.70.I EILIID99 1.4.90.ACD.II 4	0.03
(1,428) 1:A:79:LEU:HD22 1:A:80:ASP:H 4	0.00
(1,428) 1:A:79:LEU:HD23 1:A:80:ASP:H 4	0.03
(1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD21 14	0.03
(1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD22 14	0.03
(1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD23 14	0.03
(1,414) 1:A:12:LEU:H 1:A:12:LEU:HD21 9	0.03
(1,414) 1:A:12:LEU:H 1:A:12:LEU:HD22 9	0.03
(1,414) 1:A:12:LEU:H 1:A:12:LEU:HD23 9	0.03
(1,407) 1:A:12:LEU:HD11 1:A:46:VAL:HG21 15	0.03
(1,407) 1:A:12:LEU:HD11 1:A:46:VAL:HG22 15	0.03
(1,407) 1:A:12:LEU:HD11 1:A:46:VAL:HG23 15	0.03
(1,407) 1:A:12:LEU:HD12 1:A:46:VAL:HG21 15	0.03
(1,407) 1:A:12:LEU:HD12 1:A:46:VAL:HG22 15	0.03
(1,407) 1:A:12:LEU:HD12 1:A:46:VAL:HG23 15	0.03
(1,407) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:46:VAL:HG21 15	0.03
(1,407) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:46:VAL:HG22 15	0.03
(1,407) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:46:VAL:HG23 15	0.03
(1,4) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:124:VAL:H 2	0.03
(1,4) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:124:VAL:H 2	0.03
(1,4) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:H 2	0.03
(1,39) 1:A:140:LEU:H 1:A:140:LEU:HD11 3	0.03
(1,39) 1:A:140:LEU:H 1:A:140:LEU:HD12 3	0.03
(1,39) 1:A:140:LEU:H 1:A:140:LEU:HD13 3	0.03
(1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG21 3	0.03
(1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG22 3	0.03
(1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG23 3	0.03
(1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG21 3	0.03
(1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG22 3	0.03
(1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG23 3	0.03
(1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG21 3	0.03
(1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG22 3	0.03
(1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 3	0.03
(1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG21 20	0.03
(1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG22 20	0.03
(1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG23 20	0.03
(1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG21 20	0.03



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,387)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:90:VAL:HG22	20	0.03
(1,387)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:90:VAL:HG23	20	0.03
(1,387)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG21	20	0.03
(1,387)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG22	20	0.03
(1,387)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG23	20	0.03
(1,384)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:99:LEU:HD21	6	0.03
(1,384)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:99:LEU:HD22	6	0.03
(1,384)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:99:LEU:HD23	6	0.03
(1,384)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:99:LEU:HD21	6	0.03
(1,384)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:99:LEU:HD22	6	0.03
(1,384)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:99:LEU:HD23	6	0.03
(1,384)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:99:LEU:HD21	6	0.03
(1,384)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:99:LEU:HD22	6	0.03
(1,384)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:99:LEU:HD23	6	0.03
(1,384)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:99:LEU:HD21	9	0.03
(1,384)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:99:LEU:HD22	9	0.03
(1,384)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:99:LEU:HD23	9	0.03
(1,384)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:99:LEU:HD21	9	0.03
(1,384)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:99:LEU:HD22	9	0.03
(1,384)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:99:LEU:HD23	9	0.03
(1,384)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:99:LEU:HD21	9	0.03
(1,384)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:99:LEU:HD22	9	0.03
(1,384)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:99:LEU:HD23	9	0.03
(1,381)	1:A:140:LEU:H	1:A:142:ASN:H	11	0.03
(1,38)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:13:ASN:HD22	12	0.03
(1,38)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:13:ASN:HD22	12	0.03
(1,38)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:13:ASN:HD22	12	0.03
(1,38)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:13:ASN:HD22	17	0.03
(1,38)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:13:ASN:HD22	17	0.03
(1,38)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:13:ASN:HD22	17	0.03
(1,379)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:H	2	0.03
(1,379)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:H	5	0.03
(1,379)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:H	17	0.03
(1,375)	1:A:131:GLU:H	1:A:133:GLY:H	6	0.03
(1,370)	1:A:129:LEU:H	1:A:130:LYS:H	9	0.03
(1,368)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:H	6	0.03
(1,368)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:H	16	0.03
(1,366)	1:A:41:LEU:H	1:A:126:LYS:H	8	0.03
(1,361)	1:A:45:ILE:H	1:A:122:ARG:H	8	0.03
(1,357)	1:A:119:ALA:H	1:A:121:LEU:H	13	0.03
(1,357)	1:A:119:ALA:H	1:A:121:LEU:H	19	0.03
(1,331)	1:A:80:ASP:H	1:A:88:THR:H	1	0.03



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	ea from previous page Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,331)	1:A:80:ASP:H	1:A:88:THR:H	10	0.03
(1,330)	1:A:80:ASP:H	1:A:87:ARG:H	18	0.03
(1,318)	1:A:44:ASP:H	1:A:48:GLY:H	16	0.03
(1,312)	1:A:41:LEU:H	1:A:124:VAL:H	3	0.03
(1,308)	1:A:30:GLN:H	1:A:34:TRP:HE1	3	0.03
(1,307)	1:A:32:GLU:H	1:A:34:TRP:H	6	0.03
(1,30)	1:A:106:GLY:H	1:A:112:LEU:HD21	20	0.03
(1,30)	1:A:106:GLY:H	1:A:112:LEU:HD22	20	0.03
(1,30)	1:A:106:GLY:H	1:A:112:LEU:HD23	20	0.03
(1,29)	1:A:78:LYS:H	1:A:90:VAL:HG21	15	0.03
(1,29)	1:A:78:LYS:H	1:A:90:VAL:HG22	15	0.03
(1,29)	1:A:78:LYS:H	1:A:90:VAL:HG23	15	0.03
(1,29)	1:A:78:LYS:H	1:A:90:VAL:HG21	20	0.03
(1,29)	1:A:78:LYS:H	1:A:90:VAL:HG22	20	0.03
(1,29)	1:A:78:LYS:H	1:A:90:VAL:HG23	20	0.03
(1,285)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:H	2	0.03
(1,283)	1:A:131:GLU:H	1:A:134:TYR:H	10	0.03
(1,269)	1:A:22:ASN:HD22	1:A:24:GLY:H	4	0.03
(1,267)	1:A:21:GLN:H	1:A:24:GLY:H	6	0.03
(1,267)	1:A:21:GLN:H	1:A:24:GLY:H	20	0.03
(1,258)	1:A:51:LEU:HD11	1:A:116:ILE:HD11	3	0.03
(1,258)	1:A:51:LEU:HD11	1:A:116:ILE:HD12	3	0.03
(1,258)	1:A:51:LEU:HD11	1:A:116:ILE:HD13	3	0.03
(1,258)	1:A:51:LEU:HD12	1:A:116:ILE:HD11	3	0.03
(1,258)	1:A:51:LEU:HD12	1:A:116:ILE:HD12	3	0.03
(1,258)	1:A:51:LEU:HD12	1:A:116:ILE:HD13	3	0.03
(1,258)	1:A:51:LEU:HD13	1:A:116:ILE:HD11	3	0.03
(1,258)	1:A:51:LEU:HD13	1:A:116:ILE:HD12	3	0.03
(1,258)	1:A:51:LEU:HD13	1:A:116:ILE:HD13	3	0.03
(1,257)	1:A:51:LEU:HD11	1:A:75:VAL:HG21	9	0.03
(1,257)	1:A:51:LEU:HD11	1:A:75:VAL:HG22	9	0.03
(1,257)	1:A:51:LEU:HD11	1:A:75:VAL:HG23	9	0.03
(1,257)	1:A:51:LEU:HD12	1:A:75:VAL:HG21	9	0.03
(1,257)	1:A:51:LEU:HD12	1:A:75:VAL:HG22	9	0.03
(1,257)	1:A:51:LEU:HD12	1:A:75:VAL:HG23	9	0.03
(1,257)	1:A:51:LEU:HD13	1:A:75:VAL:HG21	9	0.03
(1,257)	1:A:51:LEU:HD13	1:A:75:VAL:HG22	9	0.03
(1,257)	1:A:51:LEU:HD13	1:A:75:VAL:HG23	9	0.03
(1,256)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD11	12	0.03
(1,256)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD12	12	0.03
(1,256)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD13	12	0.03
(1,256)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD11	12	0.03



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,256)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD12	12	0.03
(1,256)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD13	12	0.03
(1,256)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD11	12	0.03
(1,256)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD12	12	0.03
(1,256)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD13	12	0.03
(1,248)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD11	14	0.03
(1,248)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD12	14	0.03
(1,248)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD13	14	0.03
(1,244)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:130:LYS:H	14	0.03
(1,244)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:130:LYS:H	14	0.03
(1,244)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:130:LYS:H	14	0.03
(1,236)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:140:LEU:HD11	10	0.03
(1,236)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:140:LEU:HD12	10	0.03
(1,236)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:140:LEU:HD13	10	0.03
(1,236)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:140:LEU:HD11	10	0.03
(1,236)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:140:LEU:HD12	10	0.03
(1,236)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:140:LEU:HD13	10	0.03
(1,236)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:140:LEU:HD11	10	0.03
(1,236)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:140:LEU:HD12	10	0.03
(1,236)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:140:LEU:HD13	10	0.03
(1,236)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:140:LEU:HD11	15	0.03
(1,236)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:140:LEU:HD12	15	0.03
(1,236)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:140:LEU:HD13	15	0.03
(1,236)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:140:LEU:HD11	15	0.03
(1,236)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:140:LEU:HD12	15	0.03
(1,236)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:140:LEU:HD13	15	0.03
(1,236)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:140:LEU:HD11	15	0.03
(1,236)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:140:LEU:HD12	15	0.03
(1,236)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:140:LEU:HD13	15	0.03
(1,235)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:13:ASN:HD21	8	0.03
(1,235)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:13:ASN:HD21	8	0.03
(1,235)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:13:ASN:HD21	8	0.03
(1,235)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:13:ASN:HD21	14	0.03
(1,235)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:13:ASN:HD21	14	0.03
(1,235)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:13:ASN:HD21	14	0.03
(1,225)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:71:ILE:HD11	4	0.03
(1,225)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:71:ILE:HD12	4	0.03
(1,225)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:71:ILE:HD13	4	0.03
(1,225)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:71:ILE:HD11	4	0.03
(1,225)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:71:ILE:HD12	4	0.03
(1,225)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:71:ILE:HD13	4	0.03
(1,225)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:71:ILE:HD11	4	0.03



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	ea from previous page Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,225)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:71:ILE:HD12	4	0.03
(1,225)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:71:ILE:HD13	4	0.03
(1,221)	1:A:71:ILE:HD11	1:A:140:LEU:HD11	19	0.03
(1,221)	1:A:71:ILE:HD11	1:A:140:LEU:HD12	19	0.03
(1,221)	1:A:71:ILE:HD11	1:A:140:LEU:HD13	19	0.03
(1,221)	1:A:71:ILE:HD12	1:A:140:LEU:HD11	19	0.03
(1,221)	1:A:71:ILE:HD12	1:A:140:LEU:HD12	19	0.03
(1,221)	1:A:71:ILE:HD12	1:A:140:LEU:HD13	19	0.03
(1,221)	1:A:71:ILE:HD13	1:A:140:LEU:HD11	19	0.03
(1,221)	1:A:71:ILE:HD13	1:A:140:LEU:HD12	19	0.03
(1,221)	1:A:71:ILE:HD13	1:A:140:LEU:HD13	19	0.03
(1,220)	1:A:42:TYR:H	1:A:71:ILE:HD11	10	0.03
(1,220)	1:A:42:TYR:H	1:A:71:ILE:HD12	10	0.03
(1,220)	1:A:42:TYR:H	1:A:71:ILE:HD13	10	0.03
(1,219)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:74:GLU:H	2	0.03
(1,219)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:74:GLU:H	2	0.03
(1,219)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:74:GLU:H	2	0.03
(1,215)	1:A:16:GLN:HE21	1:A:45:ILE:HD11	1	0.03
(1,215)	1:A:16:GLN:HE21	1:A:45:ILE:HD12	1	0.03
(1,215)	1:A:16:GLN:HE21	1:A:45:ILE:HD13	1	0.03
(1,213)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:43:VAL:HG11	14	0.03
(1,213)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:43:VAL:HG12	14	0.03
(1,213)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:43:VAL:HG13	14	0.03
(1,213)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:43:VAL:HG11	14	0.03
(1,213)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:43:VAL:HG12	14	0.03
(1,213)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:43:VAL:HG13	14	0.03
(1,213)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:43:VAL:HG11	14	0.03
(1,213)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:43:VAL:HG12	14	0.03
(1,213)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:43:VAL:HG13	14	0.03
(1,212)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:129:LEU:HD11	4	0.03
(1,212)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:129:LEU:HD12	4	0.03
(1,212)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:129:LEU:HD13	4	0.03
(1,212)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:129:LEU:HD11	4	0.03
(1,212)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:129:LEU:HD12	4	0.03
(1,212)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:129:LEU:HD13	4	0.03
(1,212)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:129:LEU:HD11	4	0.03
(1,212)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:129:LEU:HD12	4	0.03
(1,212)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:129:LEU:HD13	4	0.03
(1,211)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:138:LEU:HD11	12	0.03
(1,211)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:138:LEU:HD12	12	0.03
(1,211)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:138:LEU:HD13	12	0.03
(1,211)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:138:LEU:HD11	12	0.03



 $Continued\ from\ previous\ page...$

(1,211) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD12 12 0.03 (1,211) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD13 12 0.03 (1,211) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD11 12 0.03 (1,211) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD12 12 0.03 (1,211) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD13 12 0.03 (1,211) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD13 12 0.03 (1,211) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD13 12 0.03 (1,21) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD11 4 0.03 (1,21) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD13 4 0.03 (1,21) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD11 10 0.03 (1,21) 1:A:43:VAL:HG11 <	
(1,211) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD11 12 0.03 (1,211) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD12 12 0.03 (1,211) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD13 12 0.03 (1,211) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD11 4 0.03 (1,21) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD12 4 0.03 (1,21) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD13 4 0.03 (1,21) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD11 10 0.03 (1,21) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD12 10 0.03 (1,21) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD13 10 0.03 (1,201) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:124:VAL:HG11 8 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:124:VAL:HG13 8 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:124:VAL:HG13 8 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:124:VAL:HG13 8 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG13	
(1,211) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD12 12 0.03 (1,211) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD13 12 0.03 (1,21) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD11 4 0.03 (1,21) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD12 4 0.03 (1,21) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD13 4 0.03 (1,21) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD11 10 0.03 (1,21) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD12 10 0.03 (1,21) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD13 10 0.03 (1,201) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:124:VAL:HG11 8 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:124:VAL:HG12 8 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:124:VAL:HG13 8 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:124:VAL:HG13 8 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:124:VAL:HG13 8 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG13 1:	
(1,211) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD13 12 0.03 (1,21) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD11 4 0.03 (1,21) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD12 4 0.03 (1,21) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD13 4 0.03 (1,21) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD11 10 0.03 (1,21) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD12 10 0.03 (1,21) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD13 10 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:124:VAL:HG11 8 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:124:VAL:HG13 8 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:124:VAL:HG12 8 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:124:VAL:HG13 8 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:124:VAL:HG11 8 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:124:VAL:HG11 8 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG13 1:A	
(1,21) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD11 4 0.03 (1,21) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD12 4 0.03 (1,21) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD13 4 0.03 (1,21) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD11 10 0.03 (1,21) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD12 10 0.03 (1,21) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD13 10 0.03 (1,21) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:124:VAL:HG11 8 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:124:VAL:HG12 8 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:124:VAL:HG11 8 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:124:VAL:HG13 8 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:124:VAL:HG11 8 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:124:VAL:HG11 8 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:124:VAL:HG12 8 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:1	
(1,21) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD12 4 0.03 (1,21) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD13 4 0.03 (1,21) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD11 10 0.03 (1,21) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD12 10 0.03 (1,21) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD13 10 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:124:VAL:HG11 8 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:124:VAL:HG12 8 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:124:VAL:HG12 8 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:124:VAL:HG13 8 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:124:VAL:HG13 8 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:124:VAL:HG11 8 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:124:VAL:HG12 8 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:124:VAL:HG12 8 0.03	
(1,21) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD13 4 0.03 (1,21) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD11 10 0.03 (1,21) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD12 10 0.03 (1,21) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD13 10 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:124:VAL:HG11 8 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:124:VAL:HG12 8 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:124:VAL:HG11 8 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:124:VAL:HG12 8 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:124:VAL:HG13 8 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:124:VAL:HG11 8 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:124:VAL:HG11 8 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:124:VAL:HG12 8 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:124:VAL:HG12 8 0.03	
(1,21) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD11 10 0.03 (1,21) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD12 10 0.03 (1,21) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD13 10 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:124:VAL:HG11 8 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:124:VAL:HG12 8 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:124:VAL:HG11 8 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:124:VAL:HG12 8 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:124:VAL:HG13 8 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:124:VAL:HG11 8 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:124:VAL:HG11 8 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:124:VAL:HG12 8 0.03	
(1,21) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD12 10 0.03 (1,21) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD13 10 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:124:VAL:HG11 8 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:124:VAL:HG12 8 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:124:VAL:HG13 8 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:124:VAL:HG12 8 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:124:VAL:HG13 8 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:124:VAL:HG11 8 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:124:VAL:HG11 8 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:124:VAL:HG11 8 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:124:VAL:HG12 8 0.03	
(1,21) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD13 10 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:124:VAL:HG11 8 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:124:VAL:HG12 8 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:124:VAL:HG13 8 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:124:VAL:HG11 8 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:124:VAL:HG12 8 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:124:VAL:HG11 8 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:124:VAL:HG11 8 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:124:VAL:HG11 8 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:124:VAL:HG12 8 0.03	
(1,207) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:124:VAL:HG11 8 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:124:VAL:HG12 8 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:124:VAL:HG13 8 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:124:VAL:HG11 8 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:124:VAL:HG12 8 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:124:VAL:HG13 8 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:124:VAL:HG11 8 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:124:VAL:HG12 8 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:124:VAL:HG12 8 0.03	
(1,207) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:124:VAL:HG12 8 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:124:VAL:HG13 8 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:124:VAL:HG11 8 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:124:VAL:HG12 8 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:124:VAL:HG13 8 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:124:VAL:HG11 8 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:124:VAL:HG12 8 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:124:VAL:HG12 8 0.03	
(1,207) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:124:VAL:HG13 8 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:124:VAL:HG11 8 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:124:VAL:HG12 8 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:124:VAL:HG13 8 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:124:VAL:HG11 8 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:124:VAL:HG12 8 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:124:VAL:HG12 8 0.03	
(1,207) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:124:VAL:HG11 8 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:124:VAL:HG12 8 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:124:VAL:HG13 8 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:124:VAL:HG11 8 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:124:VAL:HG12 8 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:124:VAL:HG12 8 0.03	
(1,207) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:124:VAL:HG11 8 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:124:VAL:HG12 8 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:124:VAL:HG13 8 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:124:VAL:HG11 8 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:124:VAL:HG12 8 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:124:VAL:HG12 8 0.03	
(1,207) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:124:VAL:HG13 8 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:124:VAL:HG11 8 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:124:VAL:HG12 8 0.03	
(1,207) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:124:VAL:HG11 8 0.03 (1,207) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:124:VAL:HG12 8 0.03	
(1,207) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:124:VAL:HG12 8 0.03	
(1,207) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:124:VAL:HG13 8 0.03	
1	
(1,207) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:124:VAL:HG11 20 0.03	
(1,207) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:124:VAL:HG12 20 0.03	
(1,207) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:124:VAL:HG13 20 0.03	
(1,207) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:124:VAL:HG11 20 0.03	
(1,207) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:124:VAL:HG12 20 0.03	
(1,207) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:124:VAL:HG13 20 0.03	
(1,207) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:124:VAL:HG11 20 0.03	
(1,207) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:124:VAL:HG12 20 0.03	
(1,207) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:124:VAL:HG13 20 0.03	
(1,201) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:HG11 7 0.03	
(1,201) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:HG12 7 0.03	
(1,201) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:HG13 7 0.03	
(1,194) 1:A:42:TYR:H 1:A:43:VAL:HG11 7 0.03	
(1,194) 1:A:42:TYR:H 1:A:43:VAL:HG12 7 0.03	
(1,194) 1:A:42:TYR:H 1:A:43:VAL:HG13 7 0.03	
(1,192) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 11 0.03	
(1,192) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:117:ASN:H 11 0.03	
(1,192) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:117:ASN:H 11 0.03	
(1,192) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 12 0.03	
(1,192) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:117:ASN:H 12 0.03	
(1,192) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:117:ASN:H 12 0.03	
(1,19) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:127:HIS:H 2 0.03	



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,19)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:127:HIS:H	2	0.03
(1,19)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:127:HIS:H	2	0.03
(1,184)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:112:LEU:HD11	3	0.03
(1,184)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:112:LEU:HD12	3	0.03
(1,184)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:112:LEU:HD13	3	0.03
(1,184)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:112:LEU:HD11	3	0.03
(1,184)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:112:LEU:HD12	3	0.03
(1,184)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:112:LEU:HD13	3	0.03
(1,184)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:112:LEU:HD11	3	0.03
(1,184)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:112:LEU:HD12	3	0.03
(1,184)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:112:LEU:HD13	3	0.03
(1,184)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:112:LEU:HD11	5	0.03
(1,184)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:112:LEU:HD12	5	0.03
(1,184)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:112:LEU:HD13	5	0.03
(1,184)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:112:LEU:HD11	5	0.03
(1,184)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:112:LEU:HD12	5	0.03
(1,184)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:112:LEU:HD13	5	0.03
(1,184)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:112:LEU:HD11	5	0.03
(1,184)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:112:LEU:HD12	5	0.03
(1,184)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:112:LEU:HD13	5	0.03
(1,180)	1:A:90:VAL:HG21	1:A:91:ARG:H	17	0.03
(1,180)	1:A:90:VAL:HG22	1:A:91:ARG:H	17	0.03
(1,180)	1:A:90:VAL:HG23	1:A:91:ARG:H	17	0.03
(1,18)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:128:LYS:H	2	0.03
(1,18)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:128:LYS:H	2	0.03
(1,18)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:128:LYS:H	2	0.03
(1,177)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:43:VAL:HG21	6	0.03
(1,177)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:43:VAL:HG22	6	0.03
(1,177)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:43:VAL:HG23	6	0.03
(1,177)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:43:VAL:HG21	6	0.03
(1,177)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:43:VAL:HG22	6	0.03
(1,177)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:43:VAL:HG23	6	0.03
(1,177)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:43:VAL:HG21	6	0.03
(1,177)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:43:VAL:HG22	6	0.03
(1,177)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:43:VAL:HG23	6	0.03
(1,172)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:20:THR:H	11	0.03
(1,172)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:20:THR:H	11	0.03
(1,172)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:20:THR:H	11	0.03
(1,172)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:20:THR:H	14	0.03
(1,172)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:20:THR:H	14	0.03
(1,172)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:20:THR:H	14	0.03
(1,171)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG11	13	0.03



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,171)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG12	13	0.03
(1,171)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG13	13	0.03
(1,17)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD21	11	0.03
(1,17)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD22	11	0.03
(1,17)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD23	11	0.03
(1,163)	1:A:15:MET:H	1:A:17:TYR:H	4	0.03
(1,161)	1:A:133:GLY:H	1:A:135:GLU:H	1	0.03
(1,161)	1:A:133:GLY:H	1:A:135:GLU:H	16	0.03
(1,160)	1:A:54:SER:H	1:A:56:ASP:H	14	0.03
(1,16)	1:A:102:VAL:H	1:A:102:VAL:HG11	12	0.03
(1,16)	1:A:102:VAL:H	1:A:102:VAL:HG12	12	0.03
(1,16)	1:A:102:VAL:H	1:A:102:VAL:HG13	12	0.03
(1,158)	1:A:77:GLU:H	1:A:78:LYS:H	15	0.03
(1,150)	1:A:81:THR:H	1:A:82:SER:H	4	0.03
(1,148)	1:A:44:ASP:H	1:A:122:ARG:H	7	0.03
(1,148)	1:A:44:ASP:H	1:A:122:ARG:H	14	0.03
(1,144)	1:A:130:LYS:H	1:A:133:GLY:H	15	0.03
(1,14)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD21	3	0.03
(1,14)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD22	3	0.03
(1,14)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD23	3	0.03
(1,139)	1:A:46:VAL:H	1:A:48:GLY:H	5	0.03
(1,139)	1:A:46:VAL:H	1:A:48:GLY:H	9	0.03
(1,133)	1:A:7:GLU:H	1:A:9:ILE:H	2	0.03
(1,132)	1:A:16:GLN:H	1:A:19:VAL:H	17	0.03
(1,124)	1:A:5:LYS:H	1:A:7:GLU:H	10	0.03
(1,119)	1:A:88:THR:H	1:A:102:VAL:H	17	0.03
(1,114)	1:A:29:PHE:H	1:A:31:ASN:H	8	0.03
(1,106)	1:A:105:ASP:H	1:A:113:ARG:H	12	0.03
(1,104)	1:A:73:GLU:H	1:A:75:VAL:H	7	0.03
(1,102)	1:A:52:PHE:H	1:A:71:ILE:H	12	0.03
(1,99)	1:A:20:THR:H	1:A:23:ASN:H	6	0.02
(1,99)	1:A:20:THR:H	1:A:23:ASN:H	7	0.02
(1,87)	1:A:31:ASN:H	1:A:34:TRP:HE1	4	0.02
(1,81)	1:A:47:SER:H	1:A:48:GLY:H	2	0.02
(1,81)	1:A:47:SER:H	1:A:48:GLY:H	3	0.02
(1,81)	1:A:47:SER:H	1:A:48:GLY:H	11	0.02
(1,8)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:42:TYR:H	1	0.02
(1,8)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:42:TYR:H	1	0.02
(1,8)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:42:TYR:H	1	0.02
(1,8)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:42:TYR:H	10	0.02
(1,8)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:42:TYR:H	10	0.02
(1,8)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:42:TYR:H	10	0.02



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,8)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:42:TYR:H	12	0.02
(1,8)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:42:TYR:H	12	0.02
(1,8)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:42:TYR:H	12	0.02
(1,79)	1:A:45:ILE:H	1:A:47:SER:H	13	0.02
(1,78)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:H	5	0.02
(1,70)	1:A:16:GLN:HE21	1:A:46:VAL:H	4	0.02
(1,7)	1:A:41:LEU:H	1:A:41:LEU:HD11	6	0.02
(1,7)	1:A:41:LEU:H	1:A:41:LEU:HD12	6	0.02
(1,7)	1:A:41:LEU:H	1:A:41:LEU:HD13	6	0.02
(1,65)	1:A:118:SER:HG	1:A:119:ALA:H	20	0.02
(1,64)	1:A:47:SER:HG	1:A:49:LYS:H	10	0.02
(1,64)	1:A:47:SER:HG	1:A:49:LYS:H	19	0.02
(1,63)	1:A:54:SER:HG	1:A:57:LYS:H	8	0.02
(1,62)	1:A:54:SER:HG	1:A:56:ASP:H	13	0.02
(1,614)	1:A:86:ILE:HD11	1:A:80:ASP:H	12	0.02
(1,614)	1:A:86:ILE:HD12	1:A:80:ASP:H	12	0.02
(1,614)	1:A:86:ILE:HD13	1:A:80:ASP:H	12	0.02
(1,610)	1:A:115:CYS:H	1:A:101:HIS:H	12	0.02
(1,608)	1:A:100:GLY:H	1:A:90:VAL:H	12	0.02
(1,595)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD11	15	0.02
(1,595)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD12	15	0.02
(1,595)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD13	15	0.02
(1,595)	1:A:104:ASN:HD22	1:A:112:LEU:HD11	15	0.02
(1,595)	1:A:104:ASN:HD22	1:A:112:LEU:HD12	15	0.02
(1,595)	1:A:104:ASN:HD22	1:A:112:LEU:HD13	15	0.02
(1,581)	1:A:102:VAL:HG11	1:A:113:ARG:H	15	0.02
(1,581)	1:A:102:VAL:HG12	1:A:113:ARG:H	15	0.02
(1,581)	1:A:102:VAL:HG13	1:A:113:ARG:H	15	0.02
(1,577)	1:A:111:GLY:H	1:A:112:LEU:HD21	19	0.02
(1,577)	1:A:111:GLY:H	1:A:112:LEU:HD22	19	0.02
(1,577)	1:A:111:GLY:H	1:A:112:LEU:HD23	19	0.02
(1,571)	1:A:140:LEU:HD11	1:A:141:PHE:H	5	0.02
(1,571)	1:A:140:LEU:HD12	1:A:141:PHE:H	5	0.02
(1,571)	1:A:140:LEU:HD13	1:A:141:PHE:H	5	0.02
(1,571)	1:A:140:LEU:HD11	1:A:141:PHE:H	8	0.02
(1,571)	1:A:140:LEU:HD12	1:A:141:PHE:H	8	0.02
(1,571)	1:A:140:LEU:HD13	1:A:141:PHE:H	8	0.02
(1,571)	1:A:140:LEU:HD11	1:A:141:PHE:H	19	0.02
(1,571)	1:A:140:LEU:HD12	1:A:141:PHE:H	19	0.02
(1,571)	1:A:140:LEU:HD13	1:A:141:PHE:H	19	0.02
(1,570)	1:A:140:LEU:H	1:A:140:LEU:HD21	19	0.02
(1,570)	1:A:140:LEU:H	1:A:140:LEU:HD22	19	0.02



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,570)	1:A:140:LEU:H	1:A:140:LEU:HD23	19	0.02
(1,567)	1:A:138:LEU:H	1:A:138:LEU:HD21	18	0.02
(1,567)	1:A:138:LEU:H	1:A:138:LEU:HD22	18	0.02
(1,567)	1:A:138:LEU:H	1:A:138:LEU:HD23	18	0.02
(1,565)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:H	3	0.02
(1,565)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:H	3	0.02
(1,565)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:H	3	0.02
(1,561)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:134:TYR:H	19	0.02
(1,561)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:134:TYR:H	19	0.02
(1,561)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:134:TYR:H	19	0.02
(1,559)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:132:GLU:H	1	0.02
(1,559)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:132:GLU:H	1	0.02
(1,559)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:132:GLU:H	1	0.02
(1,558)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:132:GLU:H	9	0.02
(1,558)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:132:GLU:H	9	0.02
(1,558)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:132:GLU:H	9	0.02
(1,556)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD11	12	0.02
(1,556)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD12	12	0.02
(1,556)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD13	12	0.02
(1,553)	1:A:124:VAL:H	1:A:124:VAL:HG11	2	0.02
(1,553)	1:A:124:VAL:H	1:A:124:VAL:HG12	2	0.02
(1,553)	1:A:124:VAL:H	1:A:124:VAL:HG13	2	0.02
(1,553)	1:A:124:VAL:H	1:A:124:VAL:HG11	13	0.02
(1,553)	1:A:124:VAL:H	1:A:124:VAL:HG12	13	0.02
(1,553)	1:A:124:VAL:H	1:A:124:VAL:HG13	13	0.02
(1,552)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD21	14	0.02
(1,552)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD22	14	0.02
(1,552)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD23	14	0.02
(1,551)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD11	5	0.02
(1,551)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD12	5	0.02
(1,551)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD13	5	0.02
(1,550)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG21	2	0.02
(1,550)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG22	2	0.02
(1,550)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG23	2	0.02
(1,55)	1:A:110:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD11	4	0.02
(1,55)	1:A:110:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD12	4	0.02
(1,55)	1:A:110:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD13	4	0.02
(1,545)	1:A:121:LEU:H	1:A:121:LEU:HD11	19	0.02
(1,545)	1:A:121:LEU:H	1:A:121:LEU:HD12	19	0.02
(1,545)	1:A:121:LEU:H	1:A:121:LEU:HD13	19	0.02
(1,542)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD21	11	0.02
(1,542)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD22	11	0.02



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,542)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD23	11	0.02
(1,534)	1:A:101:HIS:H	1:A:102:VAL:HG11	18	0.02
(1,534)	1:A:101:HIS:H	1:A:102:VAL:HG12	18	0.02
(1,534)	1:A:101:HIS:H	1:A:102:VAL:HG13	18	0.02
(1,531)	1:A:99:LEU:HD21	1:A:100:GLY:H	13	0.02
(1,531)	1:A:99:LEU:HD22	1:A:100:GLY:H	13	0.02
(1,531)	1:A:99:LEU:HD23	1:A:100:GLY:H	13	0.02
(1,53)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD21	12	0.02
(1,53)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD22	12	0.02
(1,53)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD23	12	0.02
(1,520)	1:A:90:VAL:H	1:A:90:VAL:HG11	17	0.02
(1,520)	1:A:90:VAL:H	1:A:90:VAL:HG12	17	0.02
(1,520)	1:A:90:VAL:H	1:A:90:VAL:HG13	17	0.02
(1,52)	1:A:16:GLN:HE21	1:A:46:VAL:HG11	15	0.02
(1,52)	1:A:16:GLN:HE21	1:A:46:VAL:HG12	15	0.02
(1,52)	1:A:16:GLN:HE21	1:A:46:VAL:HG13	15	0.02
(1,518)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD11	4	0.02
(1,518)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD12	4	0.02
(1,518)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD13	4	0.02
(1,518)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD11	10	0.02
(1,518)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD12	10	0.02
(1,518)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD13	10	0.02
(1,518)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD11	13	0.02
(1,518)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD12	13	0.02
(1,518)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD13	13	0.02
(1,517)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:HG21	6	0.02
(1,517)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:HG22	6	0.02
(1,517)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:HG23	6	0.02
(1,516)	1:A:89:GLU:H	1:A:90:VAL:HG11	14	0.02
(1,516)	1:A:89:GLU:H	1:A:90:VAL:HG12	14	0.02
(1,516)	1:A:89:GLU:H	1:A:90:VAL:HG13	14	0.02
(1,513)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:87:ARG:H	15	0.02
(1,513)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:87:ARG:H	15	0.02
(1,513)	1:A:79:LEU:HD13	1:A:87:ARG:H	15	0.02
(1,511)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:122:ARG:H	5	0.02
(1,511)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:122:ARG:H	5	0.02
(1,511)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:122:ARG:H	5	0.02
(1,505)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:76:GLU:H	9	0.02
(1,505)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:76:GLU:H	9	0.02
(1,505)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:76:GLU:H	9	0.02
(1,505)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:76:GLU:H	16	0.02
(1,505)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:76:GLU:H	16	0.02



 $Continued\ from\ previous\ page...$

(1,505) 1:A:76:VAL:HG23 1:A:76:GLU:H 1:A:99:LEU:HD21 2 0.02 (1,503) 1:A:76:GLU:H 1:A:99:LEU:HD22 2 0.02 (1,503) 1:A:76:GLU:H 1:A:99:LEU:HD23 2 0.02 (1,503) 1:A:76:GLU:H 1:A:99:LEU:HD22 17 0.02 (1,503) 1:A:76:GLU:H 1:A:99:LEU:HD22 17 0.02 (1,503) 1:A:76:GLU:H 1:A:99:LEU:HD23 17 0.02 (1,503) 1:A:76:GLU:H 1:A:99:LEU:HD23 17 0.02 (1,501) 1:A:76:GLU:H 1:A:75:VAL:HG21 8 0.02 (1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG22 8 0.02 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG21 4 0.02 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG22 4 0.02 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG22 6 0.02 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG22 6 0.02 (1,500) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,503) 1:A:76:GLU:H 1:A:99:LEU:HD22 2 0.02 (1,503) 1:A:76:GLU:H 1:A:99:LEU:HD23 2 0.02 (1,503) 1:A:76:GLU:H 1:A:99:LEU:HD22 17 0.02 (1,503) 1:A:76:GLU:H 1:A:99:LEU:HD23 17 0.02 (1,501) 1:A:76:GLU:H 1:A:75:VAL:HG21 8 0.02 (1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG22 8 0.02 (1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG23 8 0.02 (1,501) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG23 8 0.02 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG23 4 0.02 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG22 4 0.02 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG21 6 0.02 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG21 6 0.02 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG21 6 0.02 (1,500) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:64:TRP:HE1 10	(1,505)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:76:GLU:H	16	0.02
(1,503) 1:A:76:GLU:H 1:A:99:LEU:HD23 2 0.02 (1,503) 1:A:76:GLU:H 1:A:99:LEU:HD21 17 0.02 (1,503) 1:A:76:GLU:H 1:A:99:LEU:HD22 17 0.02 (1,503) 1:A:76:GLU:H 1:A:99:LEU:HD23 17 0.02 (1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG21 8 0.02 (1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG22 8 0.02 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG21 4 0.02 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG22 4 0.02 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG22 4 0.02 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG22 6 0.02 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG23 6 0.02 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG23 6 0.02 (1,500) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:64:TRP:HE1 10 0.02 (1,500) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:64:TRP:HE1 10<	(1,503)	1:A:76:GLU:H	1:A:99:LEU:HD21	2	0.02
(1,503) 1:A:76:GLU:H 1:A:99:LEU:HD21 17 0.02 (1,503) 1:A:76:GLU:H 1:A:99:LEU:HD22 17 0.02 (1,503) 1:A:76:GLU:H 1:A:99:LEU:HD23 17 0.02 (1,501) 1:A:76:GLU:H 1:A:99:LEU:HD23 17 0.02 (1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG21 8 0.02 (1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG22 8 0.02 (1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG23 8 0.02 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG23 8 0.02 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG21 4 0.02 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG21 4 0.02 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG23 4 0.02 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG23 4 0.02 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG23 6 0.02 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG23 6 0.02 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG21 6 0.02 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG22 6 0.02 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG22 6 0.02 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG23 6 0.02 (1,500) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:64:TRP:HE1 10 0.02 (1,50) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:64:TRP:HE1 10 0.02 (1,50) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:64:TRP:HE1 10 0.02 (1,50) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:64:TRP:HE1 13 0.02 (1,50) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:64:TRP:HE1 13 0.02 (1,50) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:64:TRP:HE1 13 0.02 (1,50) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:64:TRP:HE1 13 0.02 (1,499) 1:A:71:ILE:H 1:A:71:ILE:HD11 18 0.02 (1,499) 1:A:71:ILE:H 1:A:71:ILE:HD11 18 0.02 (1,499) 1:A:71:ILE:H 1:A:71:ILE:HD11 18 0.02 (1,499) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG23 11 0.02 (1,499) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG21 11 0.02 (1,499) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG21 11 0.02 (1,498) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG21 11 0.02 (1,498) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG21 11 0.02 (1,499) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG21 11 0.02 (1,499) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG21 11 0.02 (1,494) 1:A:52:PHE:H 1:A:75:VAL:HG23 11 0.02 (1,494) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:52:PHE:H 20 0.02 (1,494) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:52:PHE:H 20 0.02 (1,494) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:52:PHE:H 20 0.02 (1,494) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:52:PHE:H 20 0.02 (1,488) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:51:LEU:H 4 0.02 (1,488) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:51:LEU:H 11 0.02 (1,488) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:	(1,503)	1:A:76:GLU:H	1:A:99:LEU:HD22	2	0.02
(1,503) 1:A:76:GLU:H 1:A:99:LEU:HD22 17 0.02 (1,503) 1:A:76:GLU:H 1:A:99:LEU:HD23 17 0.02 (1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG21 8 0.02 (1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG21 8 0.02 (1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG23 8 0.02 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG21 4 0.02 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG21 4 0.02 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG22 4 0.02 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG22 4 0.02 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG21 6 0.02 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG23 6 0.02 (1,500) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:64:TRP:HE1 10 0.02 (1,50) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:64:TRP:HE1 10 0.02 (1,50) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:64:TRP:HE1 10 0.02 (1,50) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:64:TRP:HE1 13 0.02 (1,50) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:64:TRP:HE1 13 0.02 (1,50) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:64:TRP:HE1 13 0.02 (1,50) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:64:TRP:HE1 13 0.02 (1,50) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:64:TRP:HE1 13 0.02 (1,499) 1:A:71:ILE:H 1:A:71:ILE:HD11 18 0.02 (1,498) 1:A:71:ILE:H 1:A:71:ILE:HD11 18 0.02 (1,499) 1:A:71:ILE:H 1:A:71:ILE:HD11 18 0.02 (1,499) 1:A:71:ILE:H 1:A:71:ILE:HD11 18 0.02 (1,498) 1:A:71:ILE:H 1:A:71:ILE:HD11 18 0.02 (1,498) 1:A:71:ILE:H 1:A:71:ILE:HD11 18 0.02 (1,498) 1:A:71:ILE:H 1:A:71:ILE:HD11 11 0.02 (1,494) 1:A:42:PHE:H 1:A:71:ILE:HD11 11 0.02 (1,494) 1:A:42:PHE:H 1:A:71:ILE:HD11 11 0.02 (1,494) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:52:PHE:H 20 0.02 (1,498) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:51:ILEU:H 11 0.02 (1,488) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:51:ILEU:H 11 0.02 (1,488) 1:A:43:VAL:HG21	(1,503)	1:A:76:GLU:H	1:A:99:LEU:HD23	2	0.02
(1,503) 1:A:76:GLU:H 1:A:99:LEU:HD23 17 0.02 (1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG21 8 0.02 (1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG22 8 0.02 (1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG23 8 0.02 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG23 8 0.02 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG21 4 0.02 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG22 4 0.02 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG23 4 0.02 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG23 4 0.02 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG23 6 0.02 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG23 6 0.02 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG22 6 0.02 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG23 6 0.02 (1,500) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:64:TRP:HE1 10 0.02 (1,500) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:64:TRP:HE1 10 0.02 (1,500) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:64:TRP:HE1 10 0.02 (1,500) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:64:TRP:HE1 10 0.02 (1,500) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:64:TRP:HE1 13 0.02 (1,500) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:64:TRP:HE1 13 0.02 (1,500) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:64:TRP:HE1 13 0.02 (1,500) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:64:TRP:HE1 13 0.02 (1,500) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:64:TRP:HE1 13 0.02 (1,499) 1:A:71:ILE:H 1:A:71:ILE:HD11 18 0.02 (1,498) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG22 11 0.02 (1,494) 1:A:52:PHE:H 1:A:75:VAL:HG23 11 0.02 (1,494) 1:A:52:PHE:H 1:A:75:VAL:HG21 11 0.02 (1,494) 1:A:52:PHE:H 1:A:75:VAL:HG21 11 0.02 (1,494) 1:A:52:PHE:H 1:A:71:ILE:HD11 13 0.02 (1,498) 1:A:71:ILE:H 1:A:71:ILE:HD11 13 0.02 (1,498) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:51:ILEU:H 4 0.02 (1,498) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:51:LEU:H 4 0.02 (1,488) 1:A:43:V	(1,503)	1:A:76:GLU:H	1:A:99:LEU:HD21	17	0.02
(1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG21 8 0.02 (1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG22 8 0.02 (1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG23 8 0.02 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG21 4 0.02 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG23 4 0.02 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG23 4 0.02 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG21 6 0.02 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG23 6 0.02 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG23 6 0.02 (1,500) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:64:TRP:HE1 10 0.02 (1,50) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:64:TRP:HE1 10 0.02 (1,50) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:64:TRP:HE1 13 0.02 (1,50) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:64:TRP:HE1 13 0.02 (1,50) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:64:TRP:HE1 1	(1,503)	1:A:76:GLU:H	1:A:99:LEU:HD22	17	0.02
(1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG22 8 0.02 (1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG23 8 0.02 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG21 4 0.02 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG22 4 0.02 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG21 6 0.02 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG22 6 0.02 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG22 6 0.02 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG22 6 0.02 (1,500) 1:A:79:VAL:HG21 1:A:64:TRP:HE1 10 0.02 (1,50) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:64:TRP:HE1 10 0.02 (1,50) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:64:TRP:HE1 13 0.02 (1,50) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:64:TRP:HE1 13 0.02 (1,50) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:64:TRP:HE1 13 0.02 (1,499) 1:A:71:ILE:H 1:A:71:ILE:HD11	(1,503)	1:A:76:GLU:H	1:A:99:LEU:HD23	17	0.02
(1,501) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG23 8 0.02 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG21 4 0.02 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG22 4 0.02 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG23 4 0.02 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG21 6 0.02 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG22 6 0.02 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG23 6 0.02 (1,500) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:64:TRP:HE1 10 0.02 (1,50) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:64:TRP:HE1 10 0.02 (1,50) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:64:TRP:HE1 13 0.02 (1,50) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:64:TRP:HE1 13 0.02 (1,50) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:64:TRP:HE1 13 0.02 (1,50) 1:A:71:ILE:H 1:A:64:TRP:HE1 13 0.02 (1,50) 1:A:71:ILE:H 1:A:64:TRP:HE1 13<	(1,501)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG21	8	0.02
(1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG21 4 0.02 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG22 4 0.02 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG23 4 0.02 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG21 6 0.02 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG22 6 0.02 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG22 6 0.02 (1,500) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:64:TRP:HE1 10 0.02 (1,50) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:64:TRP:HE1 10 0.02 (1,50) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:64:TRP:HE1 13 0.02 (1,50) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:64:TRP:HE1 13 0.02 (1,50) 1:A:71:ILE:H 1:A:71:ILE:HD11 18 0.02 (1,499) 1:A:71:ILE:H 1:A:71:ILE:HD11 18 0.02 (1,499) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG21 11 0.02 (1,498) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG21	(1,501)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG22	8	0.02
(1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG22 4 0.02 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG23 4 0.02 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG21 6 0.02 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG22 6 0.02 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:64:TRP:HE1 10 0.02 (1,50) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:64:TRP:HE1 10 0.02 (1,50) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:64:TRP:HE1 10 0.02 (1,50) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:64:TRP:HE1 10 0.02 (1,50) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:64:TRP:HE1 13 0.02 (1,50) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:64:TRP:HE1 13 0.02 (1,50) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:64:TRP:HE1 13 0.02 (1,50) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:64:TRP:HE1 13 0.02 (1,499) 1:A:71:ILE:H 1:A:71:ILE:HD11 18 0.02 (1,499) 1:A:71:ILE:H 1:A:77:ILE:HD13	(1,501)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG23	8	0.02
(1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG23 4 0.02 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG21 6 0.02 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG22 6 0.02 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG23 6 0.02 (1,50) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:64:TRP:HE1 10 0.02 (1,50) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:64:TRP:HE1 10 0.02 (1,50) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:64:TRP:HE1 10 0.02 (1,50) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:64:TRP:HE1 13 0.02 (1,50) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:64:TRP:HE1 13 0.02 (1,50) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:64:TRP:HE1 13 0.02 (1,50) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:64:TRP:HE1 13 0.02 (1,499) 1:A:71:ILE:H 1:A:71:ILE:HD11 18 0.02 (1,499) 1:A:71:ILE:H 1:A:71:ILE:HD13 18 0.02 (1,498) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG21	(1,500)	1:A:73:GLU:H	1:A:75:VAL:HG21	4	0.02
(1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG21 6 0.02 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG22 6 0.02 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG23 6 0.02 (1,50) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:64:TRP:HE1 10 0.02 (1,50) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:64:TRP:HE1 10 0.02 (1,50) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:64:TRP:HE1 13 0.02 (1,50) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:64:TRP:HE1 13 0.02 (1,50) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:64:TRP:HE1 13 0.02 (1,50) 1:A:71:ILE:HG23 1:A:64:TRP:HE1 13 0.02 (1,50) 1:A:71:ILE:HG23 1:A:64:TRP:HE1 13 0.02 (1,499) 1:A:71:ILE:H 1:A:71:ILE:HD11 18 0.02 (1,499) 1:A:71:ILE:H 1:A:71:ILE:HD13 18 0.02 (1,498) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG21 11 0.02 (1,498) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG23	(1,500)	1:A:73:GLU:H	1:A:75:VAL:HG22	4	0.02
(1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG22 6 0.02 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG23 6 0.02 (1,50) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:64:TRP:HE1 10 0.02 (1,50) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:64:TRP:HE1 10 0.02 (1,50) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:64:TRP:HE1 13 0.02 (1,50) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:64:TRP:HE1 13 0.02 (1,50) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:64:TRP:HE1 13 0.02 (1,50) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:64:TRP:HE1 13 0.02 (1,50) 1:A:71:ILE:HG23 1:A:64:TRP:HE1 13 0.02 (1,499) 1:A:71:ILE:H 1:A:71:ILE:HD11 18 0.02 (1,499) 1:A:71:ILE:H 1:A:71:ILE:HD12 18 0.02 (1,498) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG21 11 0.02 (1,498) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG22 11 0.02 (1,494) 1:A:52:PHE:H 1:A:77:ILE:HD11	(1,500)	1:A:73:GLU:H	1:A:75:VAL:HG23	4	0.02
(1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG22 6 0.02 (1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG23 6 0.02 (1,50) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:64:TRP:HE1 10 0.02 (1,50) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:64:TRP:HE1 10 0.02 (1,50) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:64:TRP:HE1 13 0.02 (1,50) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:64:TRP:HE1 13 0.02 (1,50) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:64:TRP:HE1 13 0.02 (1,50) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:64:TRP:HE1 13 0.02 (1,50) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:64:TRP:HE1 13 0.02 (1,499) 1:A:71:ILE:H 1:A:71:ILE:HD11 18 0.02 (1,499) 1:A:71:ILE:H 1:A:71:ILE:HD12 18 0.02 (1,498) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG21 11 0.02 (1,498) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG22 11 0.02 (1,494) 1:A:52:PHE:H 1:A:77:ILE:HD13	. ,	1:A:73:GLU:H	1:A:75:VAL:HG21	6	0.02
(1,500) 1:A:73:GLU:H 1:A:75:VAL:HG23 6 0.02 (1,50) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:64:TRP:HE1 10 0.02 (1,50) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:64:TRP:HE1 10 0.02 (1,50) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:64:TRP:HE1 13 0.02 (1,50) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:64:TRP:HE1 13 0.02 (1,50) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:64:TRP:HE1 13 0.02 (1,50) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:64:TRP:HE1 13 0.02 (1,50) 1:A:71:ILE:H 1:A:71:ILE:HD11 18 0.02 (1,499) 1:A:71:ILE:H 1:A:71:ILE:HD12 18 0.02 (1,499) 1:A:71:ILE:H 1:A:71:ILE:HD13 18 0.02 (1,498) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG21 11 0.02 (1,498) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG22 11 0.02 (1,494) 1:A:52:PHE:H 1:A:71:ILE:HD11 13 0.02 (1,494) 1:A:52:PHE:H 1:A:71:ILE:HD13	(1,500)	1:A:73:GLU:H	1:A:75:VAL:HG22	6	0.02
(1,50) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:64:TRP:HE1 10 0.02 (1,50) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:64:TRP:HE1 10 0.02 (1,50) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:64:TRP:HE1 13 0.02 (1,50) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:64:TRP:HE1 13 0.02 (1,50) 1:A:71:ILE:H 1:A:64:TRP:HE1 13 0.02 (1,499) 1:A:71:ILE:H 1:A:71:ILE:HD11 18 0.02 (1,499) 1:A:71:ILE:H 1:A:71:ILE:HD12 18 0.02 (1,499) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:ILE:HD13 18 0.02 (1,498) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG21 11 0.02 (1,498) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG22 11 0.02 (1,494) 1:A:52:PHE:H 1:A:71:ILE:HD11 13 0.02 (1,494) 1:A:52:PHE:H 1:A:71:ILE:HD12 13 0.02 (1,494) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:52:PHE:H 20 0.02 (1,491) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:55:PHE:H		1:A:73:GLU:H	1:A:75:VAL:HG23	6	0.02
(1,50) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:64:TRP:HE1 10 0.02 (1,50) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:64:TRP:HE1 13 0.02 (1,50) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:64:TRP:HE1 13 0.02 (1,50) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:64:TRP:HE1 13 0.02 (1,499) 1:A:71:ILE:H 1:A:71:ILE:HD11 18 0.02 (1,499) 1:A:71:ILE:H 1:A:71:ILE:HD12 18 0.02 (1,499) 1:A:71:ILE:H 1:A:71:ILE:HD13 18 0.02 (1,499) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG21 11 0.02 (1,498) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG22 11 0.02 (1,498) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG23 11 0.02 (1,498) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG23 11 0.02 (1,494) 1:A:52:PHE:H 1:A:71:ILE:HD11 13 0.02 (1,494) 1:A:52:PHE:H 1:A:71:ILE:HD13 3 0.02 (1,491) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:52:PHE:H	(1,50)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:64:TRP:HE1	10	0.02
(1,50) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:64:TRP:HE1 13 0.02 (1,50) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:64:TRP:HE1 13 0.02 (1,50) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:64:TRP:HE1 13 0.02 (1,499) 1:A:71:ILE:H 1:A:71:ILE:HD11 18 0.02 (1,499) 1:A:71:ILE:H 1:A:71:ILE:HD12 18 0.02 (1,499) 1:A:71:ILE:H 1:A:71:ILE:HD13 18 0.02 (1,498) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG21 11 0.02 (1,498) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG22 11 0.02 (1,498) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG23 11 0.02 (1,494) 1:A:52:PHE:H 1:A:71:ILE:HD11 13 0.02 (1,494) 1:A:52:PHE:H 1:A:71:ILE:HD12 13 0.02 (1,494) 1:A:52:PHE:H 1:A:52:PHE:H 20 0.02 (1,491) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:52:PHE:H 20 0.02 (1,491) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:51:LEU:H <t< td=""><td>(1,50)</td><td>1:A:19:VAL:HG22</td><td>1:A:64:TRP:HE1</td><td>10</td><td>0.02</td></t<>	(1,50)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:64:TRP:HE1	10	0.02
(1,50) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:64:TRP:HE1 13 0.02 (1,50) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:64:TRP:HE1 13 0.02 (1,499) 1:A:71:ILE:H 1:A:71:ILE:HD11 18 0.02 (1,499) 1:A:71:ILE:H 1:A:71:ILE:HD12 18 0.02 (1,499) 1:A:71:ILE:H 1:A:71:ILE:HD13 18 0.02 (1,498) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG21 11 0.02 (1,498) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG22 11 0.02 (1,498) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG23 11 0.02 (1,494) 1:A:52:PHE:H 1:A:71:ILE:HD11 13 0.02 (1,494) 1:A:52:PHE:H 1:A:71:ILE:HD12 13 0.02 (1,494) 1:A:52:PHE:H 1:A:71:ILE:HD13 13 0.02 (1,494) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:52:PHE:H 20 0.02 (1,491) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:52:PHE:H 20 0.02 (1,498) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:51:LEU:H	(1,50)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:64:TRP:HE1	10	0.02
(1,50) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:64:TRP:HE1 13 0.02 (1,499) 1:A:71:ILE:H 1:A:71:ILE:HD11 18 0.02 (1,499) 1:A:71:ILE:H 1:A:71:ILE:HD12 18 0.02 (1,499) 1:A:71:ILE:H 1:A:71:ILE:HD13 18 0.02 (1,498) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG21 11 0.02 (1,498) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG22 11 0.02 (1,498) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG23 11 0.02 (1,494) 1:A:52:PHE:H 1:A:71:ILE:HD11 13 0.02 (1,494) 1:A:52:PHE:H 1:A:71:ILE:HD12 13 0.02 (1,494) 1:A:52:PHE:H 1:A:71:ILE:HD13 13 0.02 (1,494) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:52:PHE:H 20 0.02 (1,491) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:52:PHE:H 20 0.02 (1,491) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:51:LEU:H 4 0.02 (1,488) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:51:LEU:H <t< td=""><td>(1,50)</td><td>1:A:19:VAL:HG21</td><td>1:A:64:TRP:HE1</td><td>13</td><td>0.02</td></t<>	(1,50)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:64:TRP:HE1	13	0.02
(1,499) 1:A:71:ILE:H 1:A:71:ILE:HD11 18 0.02 (1,499) 1:A:71:ILE:H 1:A:71:ILE:HD12 18 0.02 (1,499) 1:A:71:ILE:H 1:A:71:ILE:HD13 18 0.02 (1,498) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG21 11 0.02 (1,498) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG22 11 0.02 (1,498) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG23 11 0.02 (1,494) 1:A:52:PHE:H 1:A:71:ILE:HD11 13 0.02 (1,494) 1:A:52:PHE:H 1:A:71:ILE:HD12 13 0.02 (1,494) 1:A:52:PHE:H 1:A:71:ILE:HD13 13 0.02 (1,494) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:52:PHE:H 20 0.02 (1,491) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:52:PHE:H 20 0.02 (1,491) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:51:LEU:H 4 0.02 (1,488) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:51:LEU:H 4 0.02 (1,488) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:51:LEU:H	(1,50)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:64:TRP:HE1	13	0.02
(1,499) 1:A:71:ILE:H 1:A:71:ILE:HD12 18 0.02 (1,499) 1:A:71:ILE:H 1:A:71:ILE:HD13 18 0.02 (1,498) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG21 11 0.02 (1,498) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG22 11 0.02 (1,498) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG23 11 0.02 (1,494) 1:A:52:PHE:H 1:A:71:ILE:HD11 13 0.02 (1,494) 1:A:52:PHE:H 1:A:71:ILE:HD12 13 0.02 (1,494) 1:A:52:PHE:H 1:A:71:ILE:HD13 13 0.02 (1,494) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:52:PHE:H 20 0.02 (1,491) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:52:PHE:H 20 0.02 (1,491) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:51:LEU:H 4 0.02 (1,488) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:51:LEU:H 4 0.02 (1,488) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:51:LEU:H 4 0.02 (1,488) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:51:LEU:H 1	(1,50)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:64:TRP:HE1	13	0.02
(1,499) 1:A:71:ILE:H 1:A:71:ILE:HD13 18 0.02 (1,498) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG21 11 0.02 (1,498) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG22 11 0.02 (1,498) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG23 11 0.02 (1,494) 1:A:52:PHE:H 1:A:71:ILE:HD11 13 0.02 (1,494) 1:A:52:PHE:H 1:A:71:ILE:HD12 13 0.02 (1,494) 1:A:52:PHE:H 1:A:71:ILE:HD13 13 0.02 (1,494) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:52:PHE:H 20 0.02 (1,491) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:52:PHE:H 20 0.02 (1,491) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:52:PHE:H 20 0.02 (1,488) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:51:LEU:H 4 0.02 (1,488) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:51:LEU:H 4 0.02 (1,488) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:51:LEU:H 11 0.02 (1,488) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:51:LEU:H	(1,499)	1:A:71:ILE:H	1:A:71:ILE:HD11	18	0.02
(1,498) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG21 11 0.02 (1,498) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG22 11 0.02 (1,498) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG23 11 0.02 (1,494) 1:A:52:PHE:H 1:A:71:ILE:HD11 13 0.02 (1,494) 1:A:52:PHE:H 1:A:71:ILE:HD12 13 0.02 (1,494) 1:A:52:PHE:H 1:A:71:ILE:HD13 13 0.02 (1,491) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:52:PHE:H 20 0.02 (1,491) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:52:PHE:H 20 0.02 (1,491) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:52:PHE:H 20 0.02 (1,488) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:51:LEU:H 4 0.02 (1,488) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:51:LEU:H 4 0.02 (1,488) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:51:LEU:H 11 0.02 (1,488) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:51:LEU:H 11 0.02 (1,488) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:51:LEU:H	(1,499)	1:A:71:ILE:H	1:A:71:ILE:HD12	18	0.02
(1,498) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG22 11 0.02 (1,498) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG23 11 0.02 (1,494) 1:A:52:PHE:H 1:A:71:ILE:HD11 13 0.02 (1,494) 1:A:52:PHE:H 1:A:71:ILE:HD12 13 0.02 (1,494) 1:A:52:PHE:H 1:A:71:ILE:HD13 13 0.02 (1,494) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:52:PHE:H 20 0.02 (1,491) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:52:PHE:H 20 0.02 (1,491) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:52:PHE:H 20 0.02 (1,491) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:52:PHE:H 20 0.02 (1,488) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:51:LEU:H 4 0.02 (1,488) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:51:LEU:H 4 0.02 (1,488) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:51:LEU:H 11 0.02 (1,488) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:51:LEU:H 11 0.02 (1,488) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:51:LEU:H 11 0.02 (1,488) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:49:LYS:H	(1,499)	1:A:71:ILE:H	1:A:71:ILE:HD13	18	0.02
(1,498) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG23 11 0.02 (1,494) 1:A:52:PHE:H 1:A:71:ILE:HD11 13 0.02 (1,494) 1:A:52:PHE:H 1:A:71:ILE:HD12 13 0.02 (1,494) 1:A:52:PHE:H 1:A:71:ILE:HD13 13 0.02 (1,491) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:52:PHE:H 20 0.02 (1,491) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:52:PHE:H 20 0.02 (1,491) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:52:PHE:H 20 0.02 (1,488) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:51:LEU:H 4 0.02 (1,488) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:51:LEU:H 4 0.02 (1,488) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:51:LEU:H 11 0.02 (1,488) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:51:LEU:H 11 0.02 (1,488) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:51:LEU:H 11 0.02 (1,488) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:51:LEU:H 11 0.02 (1,488) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:49:LYS:H	(1,498)	1:A:71:ILE:H	1:A:75:VAL:HG21	11	0.02
(1,494) 1:A:52:PHE:H 1:A:71:ILE:HD11 13 0.02 (1,494) 1:A:52:PHE:H 1:A:71:ILE:HD12 13 0.02 (1,494) 1:A:52:PHE:H 1:A:71:ILE:HD13 13 0.02 (1,491) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:52:PHE:H 20 0.02 (1,491) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:52:PHE:H 20 0.02 (1,491) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:52:PHE:H 20 0.02 (1,488) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:51:LEU:H 4 0.02 (1,488) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:51:LEU:H 4 0.02 (1,488) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:51:LEU:H 11 0.02 (1,488) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:51:LEU:H 11 0.02 (1,488) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:51:LEU:H 11 0.02 (1,488) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:51:LEU:H 11 0.02 (1,488) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:49:LYS:H 17 0.02	(1,498)	1:A:71:ILE:H	1:A:75:VAL:HG22	11	0.02
(1,494) 1:A:52:PHE:H 1:A:71:ILE:HD12 13 0.02 (1,494) 1:A:52:PHE:H 1:A:71:ILE:HD13 13 0.02 (1,491) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:52:PHE:H 20 0.02 (1,491) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:52:PHE:H 20 0.02 (1,491) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:52:PHE:H 20 0.02 (1,488) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:51:LEU:H 4 0.02 (1,488) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:51:LEU:H 4 0.02 (1,488) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:51:LEU:H 1 0.02 (1,488) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:51:LEU:H 11 0.02 (1,488) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:51:LEU:H 11 0.02 (1,488) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:51:LEU:H 11 0.02 (1,488) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:51:LEU:H 11 0.02 (1,488) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:49:LYS:H 17 0.02	(1,498)	1:A:71:ILE:H	1:A:75:VAL:HG23	11	0.02
(1,494) 1:A:52:PHE:H 1:A:71:ILE:HD13 13 0.02 (1,491) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:52:PHE:H 20 0.02 (1,491) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:52:PHE:H 20 0.02 (1,491) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:52:PHE:H 20 0.02 (1,488) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:51:LEU:H 4 0.02 (1,488) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:51:LEU:H 4 0.02 (1,488) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:51:LEU:H 4 0.02 (1,488) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:51:LEU:H 11 0.02 (1,488) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:51:LEU:H 11 0.02 (1,488) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:51:LEU:H 11 0.02 (1,488) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:51:LEU:H 11 0.02 (1,483) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:49:LYS:H 17 0.02	(1,494)	1:A:52:PHE:H	1:A:71:ILE:HD11	13	0.02
(1,491) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:52:PHE:H 20 0.02 (1,491) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:52:PHE:H 20 0.02 (1,491) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:52:PHE:H 20 0.02 (1,488) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:51:LEU:H 4 0.02 (1,488) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:51:LEU:H 4 0.02 (1,488) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:51:LEU:H 4 0.02 (1,488) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:51:LEU:H 11 0.02 (1,488) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:51:LEU:H 11 0.02 (1,488) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:51:LEU:H 11 0.02 (1,488) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:51:LEU:H 11 0.02 (1,483) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:49:LYS:H 17 0.02	(1,494)	1:A:52:PHE:H	1:A:71:ILE:HD12	13	0.02
(1,491) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:52:PHE:H 20 0.02 (1,491) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:52:PHE:H 20 0.02 (1,488) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:51:LEU:H 4 0.02 (1,488) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:51:LEU:H 4 0.02 (1,488) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:51:LEU:H 4 0.02 (1,488) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:51:LEU:H 11 0.02 (1,488) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:51:LEU:H 11 0.02 (1,488) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:51:LEU:H 11 0.02 (1,488) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:51:LEU:H 11 0.02 (1,483) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:49:LYS:H 17 0.02	(1,494)	1:A:52:PHE:H	1:A:71:ILE:HD13	13	0.02
(1,491) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:52:PHE:H 20 0.02 (1,488) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:51:LEU:H 4 0.02 (1,488) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:51:LEU:H 4 0.02 (1,488) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:51:LEU:H 4 0.02 (1,488) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:51:LEU:H 11 0.02 (1,488) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:51:LEU:H 11 0.02 (1,488) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:51:LEU:H 11 0.02 (1,483) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:49:LYS:H 17 0.02	(1,491)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:52:PHE:H	20	0.02
(1,488) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:51:LEU:H 4 0.02 (1,488) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:51:LEU:H 4 0.02 (1,488) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:51:LEU:H 4 0.02 (1,488) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:51:LEU:H 11 0.02 (1,488) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:51:LEU:H 11 0.02 (1,488) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:51:LEU:H 11 0.02 (1,483) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:49:LYS:H 17 0.02	(1,491)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:52:PHE:H	20	0.02
(1,488) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:51:LEU:H 4 0.02 (1,488) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:51:LEU:H 4 0.02 (1,488) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:51:LEU:H 4 0.02 (1,488) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:51:LEU:H 11 0.02 (1,488) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:51:LEU:H 11 0.02 (1,488) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:51:LEU:H 11 0.02 (1,483) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:49:LYS:H 17 0.02		1:A:41:LEU:HD23	1:A:52:PHE:H	20	0.02
(1,488) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:51:LEU:H 4 0.02 (1,488) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:51:LEU:H 4 0.02 (1,488) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:51:LEU:H 11 0.02 (1,488) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:51:LEU:H 11 0.02 (1,488) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:51:LEU:H 11 0.02 (1,483) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:49:LYS:H 17 0.02		1:A:43:VAL:HG21	1:A:51:LEU:H	4	0.02
(1,488) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:51:LEU:H 4 0.02 (1,488) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:51:LEU:H 11 0.02 (1,488) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:51:LEU:H 11 0.02 (1,488) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:51:LEU:H 11 0.02 (1,483) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:49:LYS:H 17 0.02		1:A:43:VAL:HG22	1:A:51:LEU:H	4	0.02
(1,488) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:51:LEU:H 11 0.02 (1,488) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:51:LEU:H 11 0.02 (1,488) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:51:LEU:H 11 0.02 (1,483) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:49:LYS:H 17 0.02		1:A:43:VAL:HG23	1:A:51:LEU:H	4	0.02
(1,488) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:51:LEU:H 11 0.02 (1,488) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:51:LEU:H 11 0.02 (1,483) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:49:LYS:H 17 0.02		1:A:43:VAL:HG21	1:A:51:LEU:H	11	0.02
(1,483) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:49:LYS:H 17 0.02		1:A:43:VAL:HG22	1:A:51:LEU:H	11	0.02
	(1,488)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:51:LEU:H	11	0.02
(4.400) 4.4.40 1141 11600	(1,483)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:49:LYS:H	17	0.02
(1,483) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:49:LYS:H 17 0.02	(1,483)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:49:LYS:H	17	0.02



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,483)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:49:LYS:H	17	0.02
(1,480)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:48:GLY:H	19	0.02
(1,480)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:48:GLY:H	19	0.02
(1,480)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:48:GLY:H	19	0.02
(1,473)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD11	10	0.02
(1,473)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD12	10	0.02
(1,473)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD13	10	0.02
(1,473)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD11	17	0.02
(1,473)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD12	17	0.02
(1,473)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD13	17	0.02
(1,472)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:42:TYR:H	3	0.02
(1,472)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:42:TYR:H	3	0.02
(1,472)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:42:TYR:H	3	0.02
(1,472)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:42:TYR:H	18	0.02
(1,472)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:42:TYR:H	18	0.02
(1,472)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:42:TYR:H	18	0.02
(1,468)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:23:ASN:H	9	0.02
(1,468)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:23:ASN:H	9	0.02
(1,468)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:23:ASN:H	9	0.02
(1,465)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG11	11	0.02
(1,465)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG12	11	0.02
(1,465)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG13	11	0.02
(1,456)	1:A:9:ILE:H	1:A:12:LEU:HD21	10	0.02
(1,456)	1:A:9:ILE:H	1:A:12:LEU:HD22	10	0.02
(1,456)	1:A:9:ILE:H	1:A:12:LEU:HD23	10	0.02
(1,453)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG21	18	0.02
(1,453)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG22	18	0.02
(1,453)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG23	18	0.02
(1,452)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG21	9	0.02
(1,452)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG22	9	0.02
(1,452)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG23	9	0.02
(1,452)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG21	14	0.02
(1,452)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG22	14	0.02
(1,452)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG23	14	0.02
(1,451)	1:A:75:VAL:HG11	1:A:91:ARG:H	8	0.02
(1,451)	1:A:75:VAL:HG12	1:A:91:ARG:H	8	0.02
(1,451)	1:A:75:VAL:HG13	1:A:91:ARG:H	8	0.02
(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD11	19	0.02
(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD12	19	0.02
(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD13	19	0.02
(1,443)	1:A:90:VAL:HG21	1:A:101:HIS:H	12	0.02
(1,443)	1:A:90:VAL:HG22	1:A:101:HIS:H	12	0.02



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,443)	1:A:90:VAL:HG23	1:A:101:HIS:H	12	0.02
(1,443)	1:A:90:VAL:HG21	1:A:101:HIS:H	14	0.02
(1,443)	1:A:90:VAL:HG22	1:A:101:HIS:H	14	0.02
(1,443)	1:A:90:VAL:HG23	1:A:101:HIS:H	14	0.02
(1,442)	1:A:71:ILE:H	1:A:75:VAL:HG11	3	0.02
(1,442)	1:A:71:ILE:H	1:A:75:VAL:HG12	3	0.02
(1,442)	1:A:71:ILE:H	1:A:75:VAL:HG13	3	0.02
(1,441)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:124:VAL:H	8	0.02
(1,441)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:124:VAL:H	8	0.02
(1,441)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:124:VAL:H	8	0.02
(1,438)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:120:ALA:H	19	0.02
(1,438)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:120:ALA:H	19	0.02
(1,438)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:120:ALA:H	19	0.02
(1,438)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:120:ALA:H	20	0.02
(1,438)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:120:ALA:H	20	0.02
(1,438)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:120:ALA:H	20	0.02
(1,437)	1:A:46:VAL:HG11	1:A:48:GLY:H	3	0.02
(1,437)	1:A:46:VAL:HG12	1:A:48:GLY:H	3	0.02
(1,437)	1:A:46:VAL:HG13	1:A:48:GLY:H	3	0.02
(1,437)	1:A:46:VAL:HG11	1:A:48:GLY:H	8	0.02
(1,437)	1:A:46:VAL:HG12	1:A:48:GLY:H	8	0.02
(1,437)	1:A:46:VAL:HG13	1:A:48:GLY:H	8	0.02
(1,431)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:103:PHE:H	3	0.02
(1,431)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:103:PHE:H	3	0.02
(1,431)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:103:PHE:H	3	0.02
(1,428)	1:A:79:LEU:HD21	1:A:80:ASP:H	16	0.02
(1,428)	1:A:79:LEU:HD22	1:A:80:ASP:H	16	0.02
(1,428)	1:A:79:LEU:HD23	1:A:80:ASP:H	16	0.02
(1,424)	1:A:90:VAL:HG21	1:A:115:CYS:H	5	0.02
(1,424)	1:A:90:VAL:HG22	1:A:115:CYS:H	5	0.02
(1,424)	1:A:90:VAL:HG23	1:A:115:CYS:H	5	0.02
(1,421)	1:A:43:VAL:H	1:A:43:VAL:HG11	14	0.02
(1,421)	1:A:43:VAL:H	1:A:43:VAL:HG12	14	0.02
(1,421)	1:A:43:VAL:H	1:A:43:VAL:HG13	14	0.02
(1,420)	1:A:19:VAL:H	1:A:19:VAL:HG11	15	0.02
(1,420)	1:A:19:VAL:H	1:A:19:VAL:HG12	15	0.02
(1,420)	1:A:19:VAL:H	1:A:19:VAL:HG13	15	0.02
(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD21	12	0.02
(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD22	12	0.02
(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD23	12	0.02
(1,414)	1:A:12:LEU:H	1:A:12:LEU:HD21	13	0.02
(1,414)	1:A:12:LEU:H	1:A:12:LEU:HD22	13	0.02



 $Continued\ from\ previous\ page...$

(1,414) 1:A:12:LEU:H 1:A:12:LEU:HD21 17 (1,414) 1:A:12:LEU:H 1:A:12:LEU:HD22 17 (1,414) 1:A:12:LEU:H 1:A:12:LEU:HD23 17 (1,414) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:138:LEU:HD23 17 (1,412) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:138:LEU:HD21 6 (1,412) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:138:LEU:HD23 6 (1,412) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD21 6 (1,412) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD23 6 (1,412) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD21 6 (1,412) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD21 6 (1,412) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD21 6	0.02 0.02 0.02 0.02 0.02 0.02 0.02 0.02 0.02 0.02 0.02 0.02
(1,414) 1:A:12:LEU:H 1:A:12:LEU:HD22 17 (1,414) 1:A:12:LEU:H 1:A:12:LEU:HD23 17 (1,412) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:138:LEU:HD21 6 (1,412) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:138:LEU:HD22 6 (1,412) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:138:LEU:HD23 6 (1,412) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD21 6 (1,412) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD22 6 (1,412) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD23 6 (1,412) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD21 6 (1,412) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD21 6 (1,412) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD22 6	0.02 0.02 0.02 0.02 0.02 0.02 0.02 0.02 0.02
(1,414) 1:A:12:LEU:H 1:A:12:LEU:HD23 17 (1,412) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:138:LEU:HD21 6 (1,412) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:138:LEU:HD22 6 (1,412) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:138:LEU:HD23 6 (1,412) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD21 6 (1,412) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD22 6 (1,412) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD23 6 (1,412) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD21 6 (1,412) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD21 6 (1,412) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD22 6	0.02 0.02 0.02 0.02 0.02 0.02 0.02 0.02
(1,412) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:138:LEU:HD21 6 (1,412) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:138:LEU:HD22 6 (1,412) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:138:LEU:HD23 6 (1,412) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD21 6 (1,412) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD22 6 (1,412) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD23 6 (1,412) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD21 6 (1,412) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD22 6	0.02 0.02 0.02 0.02 0.02 0.02
(1,412) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:138:LEU:HD22 6 (1,412) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:138:LEU:HD23 6 (1,412) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD21 6 (1,412) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD22 6 (1,412) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD23 6 (1,412) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD21 6 (1,412) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD22 6	0.02 0.02 0.02 0.02 0.02
(1,412) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:138:LEU:HD23 6 (1,412) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD21 6 (1,412) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD22 6 (1,412) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD23 6 (1,412) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD21 6 (1,412) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD22 6	0.02 0.02 0.02 0.02
(1,412) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD21 6 (1,412) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD22 6 (1,412) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD23 6 (1,412) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD21 6 (1,412) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD22 6	0.02 0.02 0.02
(1,412) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD22 6 (1,412) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD23 6 (1,412) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD21 6 (1,412) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD22 6	0.02 0.02
(1,412) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD23 6 (1,412) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD21 6 (1,412) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD22 6	0.02
(1,412) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD21 6 (1,412) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD22 6	
(1,412) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD22 6	0.02
	0.04
	0.02
(1,412) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD23 6	0.02
(1,412) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:138:LEU:HD21 20	0.02
(1,412) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:138:LEU:HD22 20	0.02
	0.02
(1,412) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD21 20	0.02
(1,412) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD22 20	0.02
(1,412) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD23 20	0.02
	0.02
(1,412) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD22 20	0.02
(1,412) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD23 20	0.02
(1,41) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG21 4	0.02
(1,41) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG22 4	0.02
(1,41) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG23 4	0.02
(1,41) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG21 13	0.02
(1,41) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG22 13	0.02
(1,41) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG23 13	0.02
(1,4) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:124:VAL:H 12	0.02
(1,4) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:124:VAL:H 12	0.02
(1,4) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:H 12	0.02
(1,39) 1:A:140:LEU:H 1:A:140:LEU:HD11 4	0.02
(1,39) 1:A:140:LEU:H 1:A:140:LEU:HD12 4	0.02
(1,39) 1:A:140:LEU:H 1:A:140:LEU:HD13 4	0.02
	0.02
	0.02
(1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG23 1	0.02
	0.02
	0.02
	0.02
	0.02
(1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG22 1	0.02



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,387)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG23	1	0.02
(1,387)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:90:VAL:HG21	15	0.02
(1,387)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:90:VAL:HG22	15	0.02
(1,387)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:90:VAL:HG23	15	0.02
(1,387)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:90:VAL:HG21	15	0.02
(1,387)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:90:VAL:HG22	15	0.02
(1,387)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:90:VAL:HG23	15	0.02
(1,387)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG21	15	0.02
(1,387)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG22	15	0.02
(1,387)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG23	15	0.02
(1,381)	1:A:140:LEU:H	1:A:142:ASN:H	5	0.02
(1,375)	1:A:131:GLU:H	1:A:133:GLY:H	14	0.02
(1,368)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:H	10	0.02
(1,365)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:H	2	0.02
(1,352)	1:A:104:ASN:H	1:A:113:ARG:H	7	0.02
(1,341)	1:A:99:LEU:H	1:A:100:GLY:H	4	0.02
(1,337)	1:A:76:GLU:H	1:A:91:ARG:H	11	0.02
(1,334)	1:A:89:GLU:H	1:A:90:VAL:H	2	0.02
(1,334)	1:A:89:GLU:H	1:A:90:VAL:H	20	0.02
(1,332)	1:A:85:MET:H	1:A:86:ILE:H	15	0.02
(1,328)	1:A:78:LYS:H	1:A:79:LEU:H	10	0.02
(1,32)	1:A:103:PHE:H	1:A:112:LEU:HD21	2	0.02
(1,32)	1:A:103:PHE:H	1:A:112:LEU:HD22	2	0.02
(1,32)	1:A:103:PHE:H	1:A:112:LEU:HD23	2	0.02
(1,32)	1:A:103:PHE:H	1:A:112:LEU:HD21	3	0.02
(1,32)	1:A:103:PHE:H	1:A:112:LEU:HD22	3	0.02
(1,32)	1:A:103:PHE:H	1:A:112:LEU:HD23	3	0.02
(1,32)	1:A:103:PHE:H	1:A:112:LEU:HD21	16	0.02
(1,32)	1:A:103:PHE:H	1:A:112:LEU:HD22	16	0.02
(1,32)	1:A:103:PHE:H	1:A:112:LEU:HD23	16	0.02
(1,319)	1:A:45:ILE:H	1:A:48:GLY:H	5	0.02
(1,31)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:49:LYS:H	9	0.02
(1,31)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:49:LYS:H	9	0.02
(1,31)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:49:LYS:H	9	0.02
(1,308)	1:A:30:GLN:H	1:A:34:TRP:HE1	9	0.02
(1,305)	1:A:25:THR:H	1:A:26:GLU:H	8	0.02
(1,303)	1:A:18:GLU:H	1:A:20:THR:H	8	0.02
(1,303)	1:A:18:GLU:H	1:A:20:THR:H	11	0.02
(1,302)	1:A:17:TYR:H	1:A:20:THR:H	18	0.02
(1,299)	1:A:15:MET:H	1:A:18:GLU:H	7	0.02
(1,285)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:H	12	0.02
(1,284)	1:A:6:GLU:H	1:A:8:LYS:H	2	0.02



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,279)	1:A:26:GLU:H	1:A:64:TRP:HE1	11	0.02
(1,273)	1:A:78:LYS:H	1:A:91:ARG:H	17	0.02
(1,259)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD11	17	0.02
(1,259)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD12	17	0.02
(1,259)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD13	17	0.02
(1,259)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD11	17	0.02
(1,259)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD12	17	0.02
(1,259)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD13	17	0.02
(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD11	17	0.02
(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD12	17	0.02
(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD13	17	0.02
(1,258)	1:A:51:LEU:HD11	1:A:116:ILE:HD11	7	0.02
(1,258)	1:A:51:LEU:HD11	1:A:116:ILE:HD12	7	0.02
(1,258)	1:A:51:LEU:HD11	1:A:116:ILE:HD13	7	0.02
(1,258)	1:A:51:LEU:HD12	1:A:116:ILE:HD11	7	0.02
(1,258)	1:A:51:LEU:HD12	1:A:116:ILE:HD12	7	0.02
(1,258)	1:A:51:LEU:HD12	1:A:116:ILE:HD13	7	0.02
(1,258)	1:A:51:LEU:HD13	1:A:116:ILE:HD11	7	0.02
(1,258)	1:A:51:LEU:HD13	1:A:116:ILE:HD12	7	0.02
(1,258)	1:A:51:LEU:HD13	1:A:116:ILE:HD13	7	0.02
(1,25)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:123:PHE:H	11	0.02
(1,25)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:123:PHE:H	11	0.02
(1,25)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:123:PHE:H	11	0.02
(1,247)	1:A:121:LEU:HD11	1:A:122:ARG:H	2	0.02
(1,247)	1:A:121:LEU:HD12	1:A:122:ARG:H	2	0.02
(1,247)	1:A:121:LEU:HD13	1:A:122:ARG:H	2	0.02
(1,247)	1:A:121:LEU:HD11	1:A:122:ARG:H	14	0.02
(1,247)	1:A:121:LEU:HD12	1:A:122:ARG:H	14	0.02
(1,247)	1:A:121:LEU:HD13	1:A:122:ARG:H	14	0.02
(1,245)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:129:LEU:HD11	6	0.02
(1,245)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:129:LEU:HD12	6	0.02
(1,245)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:129:LEU:HD13	6	0.02
(1,245)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:129:LEU:HD11	6	0.02
(1,245)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:129:LEU:HD12	6	0.02
(1,245)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:129:LEU:HD13	6	0.02
(1,245)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:129:LEU:HD11	6	0.02
(1,245)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:129:LEU:HD12	6	0.02
(1,245)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:129:LEU:HD13	6	0.02
(1,244)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:130:LYS:H	15	0.02
(1,244)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:130:LYS:H	15	0.02
(1,244)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:130:LYS:H	15	0.02
(1,244)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:130:LYS:H	18	0.02



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,244)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:130:LYS:H	18	0.02
(1,244)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:130:LYS:H	18	0.02
(1,230)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:129:LEU:HD21	9	0.02
(1,230)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:129:LEU:HD22	9	0.02
(1,230)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:129:LEU:HD23	9	0.02
(1,230)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:129:LEU:HD21	9	0.02
(1,230)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:129:LEU:HD22	9	0.02
(1,230)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:129:LEU:HD23	9	0.02
(1,230)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:129:LEU:HD21	9	0.02
(1,230)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:129:LEU:HD22	9	0.02
(1,230)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:129:LEU:HD23	9	0.02
(1,225)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:71:ILE:HD11	11	0.02
(1,225)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:71:ILE:HD12	11	0.02
(1,225)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:71:ILE:HD13	11	0.02
(1,225)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:71:ILE:HD11	11	0.02
(1,225)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:71:ILE:HD12	11	0.02
(1,225)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:71:ILE:HD13	11	0.02
(1,225)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:71:ILE:HD11	11	0.02
(1,225)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:71:ILE:HD12	11	0.02
(1,225)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:71:ILE:HD13	11	0.02
(1,220)	1:A:42:TYR:H	1:A:71:ILE:HD11	13	0.02
(1,220)	1:A:42:TYR:H	1:A:71:ILE:HD12	13	0.02
(1,220)	1:A:42:TYR:H	1:A:71:ILE:HD13	13	0.02
(1,22)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:137:TYR:H	6	0.02
(1,22)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:137:TYR:H	6	0.02
(1,22)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:137:TYR:H	6	0.02
(1,22)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:137:TYR:H	20	0.02
(1,22)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:137:TYR:H	20	0.02
(1,22)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:137:TYR:H	20	0.02
(1,219)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:74:GLU:H	9	0.02
(1,219)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:74:GLU:H	9	0.02
(1,219)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:74:GLU:H	9	0.02
(1,21)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD11	16	0.02
(1,21)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD12	16	0.02
(1,21)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD13	16	0.02
(1,21)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD11	19	0.02
(1,21)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD12	19	0.02
(1,21)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD13	19	0.02
(1,206)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:124:VAL:HG11	2	0.02
(1,206)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:124:VAL:HG12	2	0.02
(1,206)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:124:VAL:HG13	2	0.02
(1,206)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:HG11	2	0.02



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,206)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:HG12	2	0.02
(1,206)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:HG13	2	0.02
(1,206)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:HG11	2	0.02
(1,206)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:HG12	2	0.02
(1,206)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:HG13	2	0.02
(1,194)	1:A:42:TYR:H	1:A:43:VAL:HG11	5	0.02
(1,194)	1:A:42:TYR:H	1:A:43:VAL:HG12	5	0.02
(1,194)	1:A:42:TYR:H	1:A:43:VAL:HG13	5	0.02
(1,19)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:127:HIS:H	13	0.02
(1,19)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:127:HIS:H	13	0.02
(1,19)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:127:HIS:H	13	0.02
(1,19)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:127:HIS:H	15	0.02
(1,19)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:127:HIS:H	15	0.02
(1,19)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:127:HIS:H	15	0.02
(1,19)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:127:HIS:H	18	0.02
(1,19)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:127:HIS:H	18	0.02
(1,19)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:127:HIS:H	18	0.02
(1,184)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:112:LEU:HD11	19	0.02
(1,184)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:112:LEU:HD12	19	0.02
(1,184)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:112:LEU:HD13	19	0.02
(1,184)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:112:LEU:HD11	19	0.02
(1,184)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:112:LEU:HD12	19	0.02
(1,184)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:112:LEU:HD13	19	0.02
(1,184)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:112:LEU:HD11	19	0.02
(1,184)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:112:LEU:HD12	19	0.02
(1,184)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:112:LEU:HD13	19	0.02
(1,18)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:128:LYS:H	11	0.02
(1,18)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:128:LYS:H	11	0.02
(1,18)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:128:LYS:H	11	0.02
(1,18)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:128:LYS:H	15	0.02
(1,18)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:128:LYS:H	15	0.02
(1,18)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:128:LYS:H	15	0.02
(1,172)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:20:THR:H	7	0.02
(1,172)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:20:THR:H	7	0.02
(1,172)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:20:THR:H	7	0.02
(1,172)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:20:THR:H	15	0.02
(1,172)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:20:THR:H	15	0.02
(1,172)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:20:THR:H	15	0.02
(1,172)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:20:THR:H	18	0.02
(1,172)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:20:THR:H	18	0.02
(1,172)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:20:THR:H	18	0.02
(1,172)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:20:THR:H	20	0.02



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,172)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:20:THR:H	20	0.02
(1,172)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:20:THR:H	20	0.02
(1,171)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG11	9	0.02
(1,171)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG12	9	0.02
(1,171)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG13	9	0.02
(1,17)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD21	5	0.02
(1,17)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD22	5	0.02
(1,17)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD23	5	0.02
(1,17)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD21	12	0.02
(1,17)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD22	12	0.02
(1,17)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD23	12	0.02
(1,17)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD21	18	0.02
(1,17)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD22	18	0.02
(1,17)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD23	18	0.02
(1,167)	1:A:101:HIS:H	1:A:115:CYS:H	20	0.02
(1,166)	1:A:40:GLY:H	1:A:54:SER:H	3	0.02
(1,164)	1:A:76:GLU:H	1:A:77:GLU:H	8	0.02
(1,163)	1:A:15:MET:H	1:A:17:TYR:H	12	0.02
(1,160)	1:A:54:SER:H	1:A:56:ASP:H	8	0.02
(1,16)	1:A:102:VAL:H	1:A:102:VAL:HG11	16	0.02
(1,16)	1:A:102:VAL:H	1:A:102:VAL:HG12	16	0.02
(1,16)	1:A:102:VAL:H	1:A:102:VAL:HG13	16	0.02
(1,16)	1:A:102:VAL:H	1:A:102:VAL:HG11	18	0.02
(1,16)	1:A:102:VAL:H	1:A:102:VAL:HG12	18	0.02
(1,16)	1:A:102:VAL:H	1:A:102:VAL:HG13	18	0.02
(1,150)	1:A:81:THR:H	1:A:82:SER:H	16	0.02
(1,15)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG11	15	0.02
(1,15)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG12	15	0.02
(1,15)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG13	15	0.02
(1,148)	1:A:44:ASP:H	1:A:122:ARG:H	9	0.02
(1,145)	1:A:128:LYS:H	1:A:130:LYS:H	9	0.02
(1,145)	1:A:128:LYS:H	1:A:130:LYS:H	17	0.02
(1,14)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD21	15	0.02
(1,14)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD22	15	0.02
(1,14)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD23	15	0.02
(1,139)	1:A:46:VAL:H	1:A:48:GLY:H	4	0.02
(1,139)	1:A:46:VAL:H	1:A:48:GLY:H	19	0.02
(1,132)	1:A:16:GLN:H	1:A:19:VAL:H	6	0.02
(1,127)	1:A:21:GLN:H	1:A:23:ASN:H	1	0.02
(1,127)	1:A:21:GLN:H	1:A:23:ASN:H	14	0.02
(1,119)	1:A:88:THR:H	1:A:102:VAL:H	5	0.02
(1,104)	1:A:73:GLU:H	1:A:75:VAL:H	19	0.02



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,98)	1:A:31:ASN:H	1:A:34:TRP:H	10	0.01
(1,89)	1:A:55:LYS:H	1:A:57:LYS:H	15	0.01
(1,83)	1:A:9:ILE:H	1:A:12:LEU:H	11	0.01
(1,82)	1:A:13:ASN:H	1:A:13:ASN:HD21	12	0.01
(1,81)	1:A:47:SER:H	1:A:48:GLY:H	8	0.01
(1,81)	1:A:47:SER:H	1:A:48:GLY:H	18	0.01
(1,7)	1:A:41:LEU:H	1:A:41:LEU:HD11	20	0.01
(1,7)	1:A:41:LEU:H	1:A:41:LEU:HD12	20	0.01
(1,7)	1:A:41:LEU:H	1:A:41:LEU:HD13	20	0.01
(1,619)	1:A:34:TRP:HE1	1:A:31:ASN:H	7	0.01
(1,614)	1:A:86:ILE:HD11	1:A:80:ASP:H	3	0.01
(1,614)	1:A:86:ILE:HD12	1:A:80:ASP:H	3	0.01
(1,614)	1:A:86:ILE:HD13	1:A:80:ASP:H	3	0.01
(1,609)	1:A:102:VAL:H	1:A:88:THR:H	8	0.01
(1,609)	1:A:102:VAL:H	1:A:88:THR:H	20	0.01
(1,601)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD11	13	0.01
(1,601)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD12	13	0.01
(1,601)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD13	13	0.01
(1,601)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD21	13	0.01
(1,601)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD22	13	0.01
(1,601)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD23	13	0.01
(1,601)	1:A:142:ASN:HD22	1:A:144:LEU:HD11	13	0.01
(1,601)	1:A:142:ASN:HD22	1:A:144:LEU:HD12	13	0.01
(1,601)	1:A:142:ASN:HD22	1:A:144:LEU:HD13	13	0.01
(1,601)	1:A:142:ASN:HD22	1:A:144:LEU:HD21	13	0.01
(1,601)	1:A:142:ASN:HD22	1:A:144:LEU:HD22	13	0.01
(1,601)	1:A:142:ASN:HD22	1:A:144:LEU:HD23	13	0.01
(1,60)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD11	3	0.01
(1,60)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD12	3	0.01
(1,60)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD13	3	0.01
(1,60)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD11	15	0.01
(1,60)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD12	15	0.01
(1,60)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD13	15	0.01
(1,60)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD11	19	0.01
(1,60)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD12	19	0.01
(1,60)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD13	19	0.01
(1,593)	1:A:22:ASN:HD21	1:A:23:ASN:H	1	0.01
(1,593)	1:A:22:ASN:HD22	1:A:23:ASN:H	1	0.01
(1,588)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:22:ASN:H	15	0.01
(1,588)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:22:ASN:H	15	0.01
(1,588)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:22:ASN:H	15	0.01
(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG11	14	0.01
()/	1			d on next mage



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG12	14	0.01
(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG13	14	0.01
(1,583)	1:A:90:VAL:H	1:A:102:VAL:HG21	11	0.01
(1,583)	1:A:90:VAL:H	1:A:102:VAL:HG22	11	0.01
(1,583)	1:A:90:VAL:H	1:A:102:VAL:HG23	11	0.01
(1,581)	1:A:102:VAL:HG11	1:A:113:ARG:H	14	0.01
(1,581)	1:A:102:VAL:HG12	1:A:113:ARG:H	14	0.01
(1,581)	1:A:102:VAL:HG13	1:A:113:ARG:H	14	0.01
(1,578)	1:A:112:LEU:H	1:A:112:LEU:HD11	8	0.01
(1,578)	1:A:112:LEU:H	1:A:112:LEU:HD12	8	0.01
(1,578)	1:A:112:LEU:H	1:A:112:LEU:HD13	8	0.01
(1,572)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:141:PHE:H	15	0.01
(1,572)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:141:PHE:H	15	0.01
(1,572)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:141:PHE:H	15	0.01
(1,571)	1:A:140:LEU:HD11	1:A:141:PHE:H	2	0.01
(1,571)	1:A:140:LEU:HD12	1:A:141:PHE:H	2	0.01
(1,571)	1:A:140:LEU:HD13	1:A:141:PHE:H	2	0.01
(1,57)	1:A:112:LEU:HD11	1:A:113:ARG:H	9	0.01
(1,57)	1:A:112:LEU:HD12	1:A:113:ARG:H	9	0.01
(1,57)	1:A:112:LEU:HD13	1:A:113:ARG:H	9	0.01
(1,565)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:H	5	0.01
(1,565)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:H	5	0.01
(1,565)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:H	5	0.01
(1,562)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD21	1	0.01
(1,562)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD22	1	0.01
(1,562)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD23	1	0.01
(1,56)	1:A:110:ASN:HD22	1:A:112:LEU:HD11	11	0.01
(1,56)	1:A:110:ASN:HD22	1:A:112:LEU:HD12	11	0.01
(1,56)	1:A:110:ASN:HD22	1:A:112:LEU:HD13	11	0.01
(1,556)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD11	2	0.01
(1,556)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD12	2	0.01
(1,556)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD13	2	0.01
(1,552)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD21	17	0.01
(1,552)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD22	17	0.01
(1,552)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD23	17	0.01
(1,550)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG21	12	0.01
(1,550)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG22	12	0.01
(1,550)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG23	12	0.01
(1,544)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:120:ALA:H	5	0.01
(1,544)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:120:ALA:H	5	0.01
(1,544)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:120:ALA:H	5	0.01
(1,536)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:102:VAL:H	4	0.01



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,536)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:102:VAL:H	4	0.01
(1,536)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:102:VAL:H	4	0.01
(1,528)	1:A:105:ASP:H	1:A:112:LEU:HD21	6	0.01
(1,528)	1:A:105:ASP:H	1:A:112:LEU:HD22	6	0.01
(1,528)	1:A:105:ASP:H	1:A:112:LEU:HD23	6	0.01
(1,518)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD11	8	0.01
(1,518)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD12	8	0.01
(1,518)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD13	8	0.01
(1,505)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:76:GLU:H	20	0.01
(1,505)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:76:GLU:H	20	0.01
(1,505)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:76:GLU:H	20	0.01
(1,503)	1:A:76:GLU:H	1:A:99:LEU:HD21	1	0.01
(1,503)	1:A:76:GLU:H	1:A:99:LEU:HD22	1	0.01
(1,503)	1:A:76:GLU:H	1:A:99:LEU:HD23	1	0.01
(1,501)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG21	5	0.01
(1,501)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG22	5	0.01
(1,501)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG23	5	0.01
(1,500)	1:A:73:GLU:H	1:A:75:VAL:HG21	7	0.01
(1,500)	1:A:73:GLU:H	1:A:75:VAL:HG22	7	0.01
(1,500)	1:A:73:GLU:H	1:A:75:VAL:HG23	7	0.01
(1,49)	1:A:78:LYS:H	1:A:90:VAL:HG11	11	0.01
(1,49)	1:A:78:LYS:H	1:A:90:VAL:HG12	11	0.01
(1,49)	1:A:78:LYS:H	1:A:90:VAL:HG13	11	0.01
(1,488)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:51:LEU:H	7	0.01
(1,488)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:51:LEU:H	7	0.01
(1,488)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:51:LEU:H	7	0.01
(1,488)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:51:LEU:H	8	0.01
(1,488)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:51:LEU:H	8	0.01
(1,488)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:51:LEU:H	8	0.01
(1,48)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:88:THR:H	9	0.01
(1,48)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:88:THR:H	9	0.01
(1,48)	1:A:79:LEU:HD13	1:A:88:THR:H	9	0.01
(1,472)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:42:TYR:H	15	0.01
(1,472)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:42:TYR:H	15	0.01
(1,472)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:42:TYR:H	15	0.01
(1,47)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:115:CYS:H	18	0.01
(1,47)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:115:CYS:H	18	0.01
(1,47)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:115:CYS:H	18	0.01
(1,469)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:24:GLY:H	10	0.01
(1,469)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:24:GLY:H	10	0.01
(1,469)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:24:GLY:H	10	0.01
(1,463)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:16:GLN:H	3	0.01



 $Continued\ from\ previous\ page...$

(1,463) 1:A:12:LEU:HD12 1:A:16:GLN:H 3 0.01 (1,463) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:16:GLN:H 3 0.01 (1,462) 1:A:45:ILE:HD11 1:A:46:VAL:H 7 0.01 (1,462) 1:A:45:ILE:HD12 1:A:46:VAL:H 7 0.01 (1,462) 1:A:45:ILE:HD13 1:A:46:VAL:H 7 0.01 (1,459) 1:A:12:LEU:H 1:A:12:LEU:HD11 9 0.01 (1,459) 1:A:12:LEU:H 1:A:12:LEU:HD12 9 0.01 (1,459) 1:A:12:LEU:H 1:A:12:LEU:HD13 9 0.01 (1,459) 1:A:12:LEU:H 1:A:10:LYS:H 13 0.01 (1,458) 1:A:9:ILE:HD12 1:A:10:LYS:H 13 0.01 (1,458) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:10:LYS:H 13 0.01 (1,458) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:10:LYS:H 13 0.01 (1,456) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:10:LYS:H 13 0.01 (1,456) 1:A:9:ILE:H 1:A:10:LYS:H 13 <	
(1,462) 1:A:45:ILE:HD11 1:A:46:VAL:H 7 0.01 (1,462) 1:A:45:ILE:HD12 1:A:46:VAL:H 7 0.01 (1,462) 1:A:45:ILE:HD13 1:A:46:VAL:H 7 0.01 (1,459) 1:A:45:ILE:HU13 1:A:12:LEU:HD11 9 0.01 (1,459) 1:A:12:LEU:H 1:A:12:LEU:HD12 9 0.01 (1,459) 1:A:12:LEU:H 1:A:12:LEU:HD13 9 0.01 (1,458) 1:A:9:ILE:HD11 1:A:10:LYS:H 13 0.01 (1,458) 1:A:9:ILE:HD12 1:A:10:LYS:H 13 0.01 (1,458) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:10:LYS:H 13 0.01 (1,458) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:10:LYS:H 13 0.01 (1,456) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:10:LYS:H 13 0.01 (1,456) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:10:LYS:H 13 0.01 (1,456) 1:A:9:ILE:H 1:A:12:LEU:HD21 18 0.01 (1,455) 1:A:8:LYS:H 1:A:9:ILE:HD11 15	
(1,462) 1:A:45:ILE:HD12 1:A:46:VAL:H 7 0.01 (1,462) 1:A:45:ILE:HD13 1:A:46:VAL:H 7 0.01 (1,459) 1:A:45:ILE:HD13 1:A:46:VAL:H 7 0.01 (1,459) 1:A:12:LEU:H 1:A:12:LEU:HD11 9 0.01 (1,459) 1:A:12:LEU:H 1:A:12:LEU:HD13 9 0.01 (1,458) 1:A:9:ILE:HD11 1:A:10:LYS:H 13 0.01 (1,458) 1:A:9:ILE:HD12 1:A:10:LYS:H 13 0.01 (1,458) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:10:LYS:H 13 0.01 (1,458) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:10:LYS:H 13 0.01 (1,456) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:12:LEU:HD21 18 0.01 (1,456) 1:A:9:ILE:H 1:A:12:LEU:HD22 18 0.01 (1,456) 1:A:9:ILE:H 1:A:9:ILE:HD11 15 0.01 (1,455) 1:A:8:LYS:H 1:A:9:ILE:HD11 15 0.01 (1,455) 1:A:8:LYS:H 1:A:9:ILE:HD13 17	
(1,462) 1:A:45:ILE:HD13 1:A:46:VAL:H 7 0.01 (1,459) 1:A:12:LEU:H 1:A:12:LEU:HD11 9 0.01 (1,459) 1:A:12:LEU:H 1:A:12:LEU:HD12 9 0.01 (1,459) 1:A:12:LEU:H 1:A:12:LEU:HD13 9 0.01 (1,458) 1:A:9:ILE:HD11 1:A:10:LYS:H 13 0.01 (1,458) 1:A:9:ILE:HD12 1:A:10:LYS:H 13 0.01 (1,458) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:10:LYS:H 13 0.01 (1,458) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:10:LYS:H 13 0.01 (1,456) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:10:LYS:H 13 0.01 (1,456) 1:A:9:ILE:H 1:A:12:LEU:HD21 18 0.01 (1,456) 1:A:9:ILE:H 1:A:12:LEU:HD23 18 0.01 (1,455) 1:A:8:LYS:H 1:A:9:ILE:HD11 15 0.01 (1,455) 1:A:8:LYS:H 1:A:9:ILE:HD12 15 0.01 (1,455) 1:A:8:LYS:H 1:A:9:ILE:HD13 17	
(1,459) 1:A:12:LEU:H 1:A:12:LEU:HD11 9 0.01 (1,459) 1:A:12:LEU:H 1:A:12:LEU:HD12 9 0.01 (1,459) 1:A:12:LEU:H 1:A:12:LEU:HD13 9 0.01 (1,459) 1:A:12:LEU:H 1:A:10:LYS:H 13 0.01 (1,458) 1:A:9:ILE:HD12 1:A:10:LYS:H 13 0.01 (1,458) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:10:LYS:H 13 0.01 (1,458) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:10:LYS:H 13 0.01 (1,458) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:10:LYS:H 13 0.01 (1,456) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:0:1 0.01	
(1,459) 1:A:12:LEU:H 1:A:12:LEU:HD12 9 0.01 (1,459) 1:A:12:LEU:H 1:A:12:LEU:HD13 9 0.01 (1,458) 1:A:9:ILE:HD11 1:A:10:LYS:H 13 0.01 (1,458) 1:A:9:ILE:HD12 1:A:10:LYS:H 13 0.01 (1,458) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:10:LYS:H 13 0.01 (1,458) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:10:LYS:H 13 0.01 (1,456) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:12:LEU:HD21 18 0.01 (1,456) 1:A:9:ILE:H 1:A:12:LEU:HD22 18 0.01 (1,456) 1:A:9:ILE:H 1:A:9:ILE:HD13 18 0.01 (1,456) 1:A:8:LYS:H 1:A:9:ILE:HD11 15 0.01 (1,455) 1:A:8:LYS:H 1:A:9:ILE:HD13 15 0.01 (1,455) 1:A:8:LYS:H 1:A:9:ILE:HD13 17 0.01 (1,455) 1:A:8:LYS:H 1:A:9:ILE:HD13 17 0.01 (1,455) 1:A:8:LYS:H 1:A:9:ILE:HD13 17	
(1,459) 1:A:12:LEU:H 1:A:12:LEU:HD13 9 0.01 (1,458) 1:A:9:ILE:HD11 1:A:10:LYS:H 13 0.01 (1,458) 1:A:9:ILE:HD12 1:A:10:LYS:H 13 0.01 (1,458) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:10:LYS:H 13 0.01 (1,458) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:10:LYS:H 13 0.01 (1,456) 1:A:9:ILE:H 1:A:12:LEU:HD21 18 0.01 (1,456) 1:A:9:ILE:H 1:A:12:LEU:HD22 18 0.01 (1,456) 1:A:9:ILE:H 1:A:12:LEU:HD23 18 0.01 (1,456) 1:A:9:ILE:H 1:A:9:ILE:HD11 15 0.01 (1,455) 1:A:8:LYS:H 1:A:9:ILE:HD12 15 0.01 (1,455) 1:A:8:LYS:H 1:A:9:ILE:HD13 15 0.01 (1,455) 1:A:8:LYS:H 1:A:9:ILE:HD12 17 0.01 (1,455) 1:A:8:LYS:H 1:A:9:ILE:HD13 17 0.01 (1,455) 1:A:8:LYS:H 1:A:9:ILE:HD13 17 <t< td=""><td></td></t<>	
(1,458) 1:A:9:ILE:HD11 1:A:10:LYS:H 13 0.01 (1,458) 1:A:9:ILE:HD12 1:A:10:LYS:H 13 0.01 (1,458) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:10:LYS:H 13 0.01 (1,458) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:10:LYS:H 13 0.01 (1,456) 1:A:9:ILE:H 1:A:12:LEU:HD21 18 0.01 (1,456) 1:A:9:ILE:H 1:A:12:LEU:HD22 18 0.01 (1,456) 1:A:9:ILE:H 1:A:12:LEU:HD23 18 0.01 (1,456) 1:A:9:ILE:H 1:A:9:ILE:HD11 15 0.01 (1,455) 1:A:8:LYS:H 1:A:9:ILE:HD12 15 0.01 (1,455) 1:A:8:LYS:H 1:A:9:ILE:HD13 15 0.01 (1,455) 1:A:8:LYS:H 1:A:9:ILE:HD13 17 0.01 (1,455) 1:A:8:LYS:H 1:A:9:ILE:HD13 17 0.01 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG21 13 0.01 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG23 13	
(1,458) 1:A:9:ILE:HD12 1:A:10:LYS:H 13 0.01 (1,458) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:10:LYS:H 13 0.01 (1,456) 1:A:9:ILE:H 1:A:12:LEU:HD21 18 0.01 (1,456) 1:A:9:ILE:H 1:A:12:LEU:HD22 18 0.01 (1,456) 1:A:9:ILE:H 1:A:12:LEU:HD23 18 0.01 (1,456) 1:A:9:ILE:H 1:A:9:ILE:HD13 15 0.01 (1,455) 1:A:8:LYS:H 1:A:9:ILE:HD12 15 0.01 (1,455) 1:A:8:LYS:H 1:A:9:ILE:HD13 15 0.01 (1,455) 1:A:8:LYS:H 1:A:9:ILE:HD11 17 0.01 (1,455) 1:A:8:LYS:H 1:A:9:ILE:HD12 17 0.01 (1,455) 1:A:8:LYS:H 1:A:9:ILE:HD13 17 0.01 (1,455) 1:A:8:LYS:H 1:A:9:ILE:HD12 17 0.01 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG21 13 0.01 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG23 13 <	
(1,458) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:10:LYS:H 13 0.01 (1,456) 1:A:9:ILE:H 1:A:12:LEU:HD21 18 0.01 (1,456) 1:A:9:ILE:H 1:A:12:LEU:HD22 18 0.01 (1,456) 1:A:9:ILE:H 1:A:12:LEU:HD23 18 0.01 (1,456) 1:A:9:ILE:H 1:A:9:ILE:HD13 15 0.01 (1,455) 1:A:8:LYS:H 1:A:9:ILE:HD12 15 0.01 (1,455) 1:A:8:LYS:H 1:A:9:ILE:HD13 15 0.01 (1,455) 1:A:8:LYS:H 1:A:9:ILE:HD11 17 0.01 (1,455) 1:A:8:LYS:H 1:A:9:ILE:HD12 17 0.01 (1,455) 1:A:8:LYS:H 1:A:9:ILE:HD13 17 0.01 (1,455) 1:A:8:LYS:H 1:A:9:ILE:HD13 17 0.01 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG21 13 0.01 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG23 13 0.01 (1,452) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG22 19	
(1,456) 1:A:9:ILE:H 1:A:12:LEU:HD21 18 0.01 (1,456) 1:A:9:ILE:H 1:A:12:LEU:HD22 18 0.01 (1,456) 1:A:9:ILE:H 1:A:12:LEU:HD23 18 0.01 (1,456) 1:A:9:ILE:H 1:A:9:ILE:HD11 15 0.01 (1,455) 1:A:8:LYS:H 1:A:9:ILE:HD12 15 0.01 (1,455) 1:A:8:LYS:H 1:A:9:ILE:HD13 15 0.01 (1,455) 1:A:8:LYS:H 1:A:9:ILE:HD11 17 0.01 (1,455) 1:A:8:LYS:H 1:A:9:ILE:HD12 17 0.01 (1,455) 1:A:8:LYS:H 1:A:9:ILE:HD13 17 0.01 (1,455) 1:A:8:LYS:H 1:A:9:ILE:HD13 17 0.01 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG21 13 0.01 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG23 13 0.01 (1,452) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG21 19 0.01 (1,452) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG22 19	
(1,456) 1:A:9:ILE:H 1:A:12:LEU:HD22 18 0.01 (1,456) 1:A:9:ILE:H 1:A:12:LEU:HD23 18 0.01 (1,455) 1:A:8:LYS:H 1:A:9:ILE:HD11 15 0.01 (1,455) 1:A:8:LYS:H 1:A:9:ILE:HD12 15 0.01 (1,455) 1:A:8:LYS:H 1:A:9:ILE:HD13 15 0.01 (1,455) 1:A:8:LYS:H 1:A:9:ILE:HD11 17 0.01 (1,455) 1:A:8:LYS:H 1:A:9:ILE:HD12 17 0.01 (1,455) 1:A:8:LYS:H 1:A:9:ILE:HD13 17 0.01 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG21 13 0.01 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG23 13 0.01 (1,452) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG21 19 0.01 (1,452) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG22 19 0.01	
(1,456) 1:A:9:ILE:H 1:A:12:LEU:HD23 18 0.01 (1,455) 1:A:8:LYS:H 1:A:9:ILE:HD11 15 0.01 (1,455) 1:A:8:LYS:H 1:A:9:ILE:HD12 15 0.01 (1,455) 1:A:8:LYS:H 1:A:9:ILE:HD13 15 0.01 (1,455) 1:A:8:LYS:H 1:A:9:ILE:HD11 17 0.01 (1,455) 1:A:8:LYS:H 1:A:9:ILE:HD12 17 0.01 (1,455) 1:A:8:LYS:H 1:A:9:ILE:HD13 17 0.01 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG21 13 0.01 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG22 13 0.01 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG23 13 0.01 (1,452) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG21 19 0.01 (1,452) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG22 19 0.01	
(1,455) 1:A:8:LYS:H 1:A:9:ILE:HD11 15 0.01 (1,455) 1:A:8:LYS:H 1:A:9:ILE:HD12 15 0.01 (1,455) 1:A:8:LYS:H 1:A:9:ILE:HD13 15 0.01 (1,455) 1:A:8:LYS:H 1:A:9:ILE:HD11 17 0.01 (1,455) 1:A:8:LYS:H 1:A:9:ILE:HD12 17 0.01 (1,455) 1:A:8:LYS:H 1:A:9:ILE:HD13 17 0.01 (1,455) 1:A:8:LYS:H 1:A:9:ILE:HD13 17 0.01 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG21 13 0.01 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG22 13 0.01 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG23 13 0.01 (1,452) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG21 19 0.01 (1,452) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG22 19 0.01	
(1,455) 1:A:8:LYS:H 1:A:9:ILE:HD11 15 0.01 (1,455) 1:A:8:LYS:H 1:A:9:ILE:HD12 15 0.01 (1,455) 1:A:8:LYS:H 1:A:9:ILE:HD13 15 0.01 (1,455) 1:A:8:LYS:H 1:A:9:ILE:HD11 17 0.01 (1,455) 1:A:8:LYS:H 1:A:9:ILE:HD12 17 0.01 (1,455) 1:A:8:LYS:H 1:A:9:ILE:HD13 17 0.01 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG21 13 0.01 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG22 13 0.01 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG23 13 0.01 (1,452) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG21 19 0.01 (1,452) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG22 19 0.01	
(1,455) 1:A:8:LYS:H 1:A:9:ILE:HD13 15 0.01 (1,455) 1:A:8:LYS:H 1:A:9:ILE:HD11 17 0.01 (1,455) 1:A:8:LYS:H 1:A:9:ILE:HD12 17 0.01 (1,455) 1:A:8:LYS:H 1:A:9:ILE:HD13 17 0.01 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG21 13 0.01 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG22 13 0.01 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG23 13 0.01 (1,452) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG21 19 0.01 (1,452) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG22 19 0.01	
(1,455) 1:A:8:LYS:H 1:A:9:ILE:HD11 17 0.01 (1,455) 1:A:8:LYS:H 1:A:9:ILE:HD12 17 0.01 (1,455) 1:A:8:LYS:H 1:A:9:ILE:HD13 17 0.01 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG21 13 0.01 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG22 13 0.01 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG23 13 0.01 (1,452) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG21 19 0.01 (1,452) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG22 19 0.01	
(1,455) 1:A:8:LYS:H 1:A:9:ILE:HD12 17 0.01 (1,455) 1:A:8:LYS:H 1:A:9:ILE:HD13 17 0.01 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG21 13 0.01 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG22 13 0.01 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG23 13 0.01 (1,453) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG21 19 0.01 (1,452) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG22 19 0.01 (1,452) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG22 19 0.01	
(1,455) 1:A:8:LYS:H 1:A:9:ILE:HD13 17 0.01 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG21 13 0.01 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG22 13 0.01 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG23 13 0.01 (1,452) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG21 19 0.01 (1,452) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG22 19 0.01	
(1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG21 13 0.01 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG22 13 0.01 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG23 13 0.01 (1,452) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG21 19 0.01 (1,452) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG22 19 0.01	
(1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG22 13 0.01 (1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG23 13 0.01 (1,452) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG21 19 0.01 (1,452) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG22 19 0.01	
(1,453) 1:A:44:ASP:H 1:A:46:VAL:HG23 13 0.01 (1,452) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG21 19 0.01 (1,452) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG22 19 0.01	
(1,452) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG21 19 0.01 (1,452) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG22 19 0.01	
(1,452) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG22 19 0.01	
(1.452) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG23 19 0.01	
(=,===, 1.11.,0.5.2.5.11 1.11.00.,1112.11.02.5 10 0.01	
(1,45) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD11 17 0.01	
(1,45) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD12 17 0.01	-
(1,45) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD13 17 0.01	
(1,448) 1:A:79:LEU:HD11 1:A:89:GLU:H 1 0.01	
(1,448) 1:A:79:LEU:HD12 1:A:89:GLU:H 1 0.01	
(1,448) 1:A:79:LEU:HD13 1:A:89:GLU:H 1 0.01	
(1,447) 1:A:41:LEU:H 1:A:124:VAL:HG21 18 0.01	
(1,447) 1:A:41:LEU:H 1:A:124:VAL:HG22 18 0.01	
(1,447) 1:A:41:LEU:H 1:A:124:VAL:HG23 18 0.01	
(1,442) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG11 11 0.01	
(1,442) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG12 11 0.01	
(1,442) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG13 11 0.01	
(1,440) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:100:GLY:H 8 0.01	
(1,440) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:100:GLY:H 8 0.01	
(1,440) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:100:GLY:H 8 0.01	
(1,440) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:100:GLY:H 12 0.01	



Continued from previous page...

(1,440) 1:A:9 (1,44) 1:A:4	0:VAL:HG12	1:A:100:GLY:H	12	
(1,44) 1:A:4	O TALL TICAL	1.11.100.011.11	12	0.01
(/ /	0:VAL:HG13	1:A:100:GLY:H	12	0.01
	6:VAL:HG21	1:A:48:GLY:H	2	0.01
(1,44) 1:A:4	6:VAL:HG22	1:A:48:GLY:H	2	0.01
(1,44) 1:A:4	6:VAL:HG23	1:A:48:GLY:H	2	0.01
(1,430) 1:A:4	6:VAL:HG11	1:A:47:SER:H	10	0.01
(1,430) 1:A:4	6:VAL:HG12	1:A:47:SER:H	10	0.01
(1,430) 1:A:4	6:VAL:HG13	1:A:47:SER:H	10	0.01
(1,421) 1:A	:43:VAL:H	1:A:43:VAL:HG11	13	0.01
(1,421) 1:A	:43:VAL:H	1:A:43:VAL:HG12	13	0.01
(1,421) 1:A	:43:VAL:H	1:A:43:VAL:HG13	13	0.01
(1,420) 1:A	:19:VAL:H	1:A:19:VAL:HG11	3	0.01
(1,420) 1:A	:19:VAL:H	1:A:19:VAL:HG12	3	0.01
(1,420) 1:A	:19:VAL:H	1:A:19:VAL:HG13	3	0.01
(1,420) 1:A	:19:VAL:H	1:A:19:VAL:HG11	5	0.01
(1,420) 1:A	:19:VAL:H	1:A:19:VAL:HG12	5	0.01
	:19:VAL:H	1:A:19:VAL:HG13	5	0.01
(1,420) 1:A	:19:VAL:H	1:A:19:VAL:HG11	18	0.01
(1,420) 1:A	:19:VAL:H	1:A:19:VAL:HG12	18	0.01
(1,420) 1:A	:19:VAL:H	1:A:19:VAL:HG13	18	0.01
(1,415) 1:A	:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD21	17	0.01
(1,415) 1:A	:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD22	17	0.01
(1,415) 1:A	:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD23	17	0.01
(1,413) 1:A:5	1:LEU:HD11	1:A:121:LEU:HD11	20	0.01
(1,413) 1:A:5	1:LEU:HD11	1:A:121:LEU:HD12	20	0.01
(1,413) 1:A:5	1:LEU:HD11	1:A:121:LEU:HD13	20	0.01
(1,413) 1:A:5	1:LEU:HD12	1:A:121:LEU:HD11	20	0.01
(1,413) 1:A:5	1:LEU:HD12	1:A:121:LEU:HD12	20	0.01
(1,413) 1:A:5	1:LEU:HD12	1:A:121:LEU:HD13	20	0.01
(1,413) 1:A:5	1:LEU:HD13	1:A:121:LEU:HD11	20	0.01
	1:LEU:HD13	1:A:121:LEU:HD12	20	0.01
(1,413) 1:A:5	1:LEU:HD13	1:A:121:LEU:HD13	20	0.01
(1,412) 1:A:12	29:LEU:HD21	1:A:138:LEU:HD21	5	0.01
(1,412) 1:A:12	29:LEU:HD21	1:A:138:LEU:HD22	5	0.01
	29:LEU:HD21	1:A:138:LEU:HD23	5	0.01
	29:LEU:HD22	1:A:138:LEU:HD21	5	0.01
	29:LEU:HD22	1:A:138:LEU:HD22	5	0.01
	29:LEU:HD22	1:A:138:LEU:HD23	5	0.01
(1,412) 1:A:12	29:LEU:HD23	1:A:138:LEU:HD21	5	0.01
	29:LEU:HD23	1:A:138:LEU:HD22	5	0.01
(1,412) 1:A:12	29:LEU:HD23	1:A:138:LEU:HD23	5	0.01
	29:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD21	4	0.01



 $Continued\ from\ previous\ page...$

(1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD22 4 0.01 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD23 4 0.01 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD21 4 0.01 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD22 4 0.01 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD23 4 0.01 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD21 4 0.01 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD22 4 0.01 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD23 4 0.01 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD23 4 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD12 10 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD13 10 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD11 10 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD13 10 0.01 (1,408) 1:A:41:LE	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD21 4 0.01 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD22 4 0.01 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD23 4 0.01 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD21 4 0.01 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD22 4 0.01 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD23 4 0.01 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD23 4 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD13 1 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD13 10 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD13 10 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD13 10 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD13 10 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD13 10 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU	(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD22	4	0.01
(1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD22 4 0.01 (1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD23 4 0.01 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD21 4 0.01 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD22 4 0.01 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD23 4 0.01 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD12 4 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD12 10 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD12 10 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD11 10 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD12 10 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD13 10 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD11 10 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD13 10 0.01 (1,408) 1:A:41:LE	(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD23	4	0.01
(1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD23 4 0.01 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD21 4 0.01 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD22 4 0.01 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD23 4 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD11 10 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD12 10 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD13 10 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD13 10 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD12 10 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD13 10 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD13 10 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD11 10 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD13 10 0.01 (1,407) 1:A:12:LE	(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD21	4	0.01
(1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD21 4 0.01 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD22 4 0.01 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD23 4 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD11 10 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD12 10 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD13 10 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD11 10 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD12 10 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD13 10 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD11 10 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD12 10 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD12 10 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:46:VAL:HG21 20 0.01 (1,407) 1:A:12:LEU	(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD22	4	0.01
(1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD22 4 0.01 (1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD23 4 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD11 10 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD12 10 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD13 10 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD11 10 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD12 10 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD13 10 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD11 10 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD12 10 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD12 10 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD13 10 0.01 (1,407) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:46:VAL:HG21 20 0.01 (1,407) 1:A:12:LEU	(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD23	4	0.01
(1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD23 4 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD11 10 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD12 10 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD13 10 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD11 10 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD12 10 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD13 10 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD11 10 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD12 10 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD13 10 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:46:VAL:HG21 20 0.01 (1,407) 1:A:12:LEU:HD11 1:A:46:VAL:HG22 20 0.01 (1,407) 1:A:12:LEU:HD12 1:A:46:VAL:HG23 20 0.01 (1,407) 1:A:12:LEU:H	(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD21	4	0.01
(1,408) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD11 10 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD12 10 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD13 10 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD11 10 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD13 10 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD13 10 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD11 10 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD12 10 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD12 10 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD12 10 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:46:VAL:HG21 20 0.01 (1,407) 1:A:12:LEU:HD11 1:A:46:VAL:HG22 20 0.01 (1,407) 1:A:12:LEU:HD12 1:A:46:VAL:HG21 20 0.01 (1,407) 1:A:12:LEU:H	(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD22	4	0.01
(1,408) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD12 10 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD13 10 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD11 10 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD12 10 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD13 10 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD11 10 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD12 10 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD12 10 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD12 10 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD13 10 0.01 (1,409) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:46:VAL:HG21 20 0.01 (1,407) 1:A:12:LEU:HD11 1:A:46:VAL:HG23 20 0.01 (1,407) 1:A:12:LEU:HD12 1:A:46:VAL:HG21 20 0.01 (1,407) 1:A:12:LEU:H	(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD23	4	0.01
(1,408) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD13 10 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD11 10 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD12 10 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD13 10 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD11 10 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD12 10 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD13 10 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD13 10 0.01 (1,407) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:46:VAL:HG21 20 0.01 (1,407) 1:A:12:LEU:HD11 1:A:46:VAL:HG23 20 0.01 (1,407) 1:A:12:LEU:HD12 1:A:46:VAL:HG21 20 0.01 (1,407) 1:A:12:LEU:HD12 1:A:46:VAL:HG22 20 0.01 (1,407) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:46:VAL:HG23 20 0.01 (1,407) 1:A:12:LEU:HD1	(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD11	10	0.01
(1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD11 10 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD12 10 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD13 10 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD11 10 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD12 10 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD13 10 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD13 10 0.01 (1,407) 1:A:12:LEU:HD11 1:A:46:VAL:HG21 20 0.01 (1,407) 1:A:12:LEU:HD11 1:A:46:VAL:HG23 20 0.01 (1,407) 1:A:12:LEU:HD12 1:A:46:VAL:HG21 20 0.01 (1,407) 1:A:12:LEU:HD12 1:A:46:VAL:HG23 20 0.01 (1,407) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:46:VAL:HG21 20 0.01 (1,407) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:46:VAL:HG21 20 0.01 (1,407) 1:A:12:LEU:HD13	(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD12	10	0.01
(1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD12 10 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD13 10 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD11 10 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD12 10 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD13 10 0.01 (1,407) 1:A:12:LEU:HD11 1:A:46:VAL:HG21 20 0.01 (1,407) 1:A:12:LEU:HD11 1:A:46:VAL:HG22 20 0.01 (1,407) 1:A:12:LEU:HD12 1:A:46:VAL:HG21 20 0.01 (1,407) 1:A:12:LEU:HD12 1:A:46:VAL:HG21 20 0.01 (1,407) 1:A:12:LEU:HD12 1:A:46:VAL:HG22 20 0.01 (1,407) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:46:VAL:HG23 20 0.01 (1,407) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:46:VAL:HG21 20 0.01 (1,407) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:46:VAL:HG23 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD21 </td <td>(1,408)</td> <td>1:A:41:LEU:HD11</td> <td>1:A:138:LEU:HD13</td> <td>10</td> <td>0.01</td>	(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD13	10	0.01
(1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD13 10 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD11 10 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD12 10 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD13 10 0.01 (1,407) 1:A:12:LEU:HD11 1:A:46:VAL:HG21 20 0.01 (1,407) 1:A:12:LEU:HD11 1:A:46:VAL:HG22 20 0.01 (1,407) 1:A:12:LEU:HD11 1:A:46:VAL:HG23 20 0.01 (1,407) 1:A:12:LEU:HD12 1:A:46:VAL:HG21 20 0.01 (1,407) 1:A:12:LEU:HD12 1:A:46:VAL:HG23 20 0.01 (1,407) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:46:VAL:HG21 20 0.01 (1,407) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:46:VAL:HG22 20 0.01 (1,307) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:46:VAL:HG23 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:46:VAL:HG23 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD22 <td>(1,408)</td> <td>1:A:41:LEU:HD12</td> <td>1:A:138:LEU:HD11</td> <td>10</td> <td>0.01</td>	(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD11	10	0.01
(1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD11 10 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD12 10 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD13 10 0.01 (1,407) 1:A:12:LEU:HD11 1:A:46:VAL:HG21 20 0.01 (1,407) 1:A:12:LEU:HD11 1:A:46:VAL:HG22 20 0.01 (1,407) 1:A:12:LEU:HD11 1:A:46:VAL:HG23 20 0.01 (1,407) 1:A:12:LEU:HD12 1:A:46:VAL:HG21 20 0.01 (1,407) 1:A:12:LEU:HD12 1:A:46:VAL:HG23 20 0.01 (1,407) 1:A:12:LEU:HD12 1:A:46:VAL:HG23 20 0.01 (1,407) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:46:VAL:HG21 20 0.01 (1,407) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:46:VAL:HG22 20 0.01 (1,308) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:46:VAL:HG23 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:46:VAL:HG21 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD22 <td>(1,408)</td> <td>1:A:41:LEU:HD12</td> <td>1:A:138:LEU:HD12</td> <td>10</td> <td>0.01</td>	(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD12	10	0.01
(1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD11 10 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD12 10 0.01 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD13 10 0.01 (1,407) 1:A:12:LEU:HD11 1:A:46:VAL:HG21 20 0.01 (1,407) 1:A:12:LEU:HD11 1:A:46:VAL:HG22 20 0.01 (1,407) 1:A:12:LEU:HD11 1:A:46:VAL:HG23 20 0.01 (1,407) 1:A:12:LEU:HD12 1:A:46:VAL:HG21 20 0.01 (1,407) 1:A:12:LEU:HD12 1:A:46:VAL:HG23 20 0.01 (1,407) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:46:VAL:HG21 20 0.01 (1,407) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:46:VAL:HG22 20 0.01 (1,407) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:46:VAL:HG22 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:46:VAL:HG23 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:46:VAL:HG21 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD22 <td></td> <td>1:A:41:LEU:HD12</td> <td>1:A:138:LEU:HD13</td> <td>10</td> <td>0.01</td>		1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD13	10	0.01
(1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD13 10 0.01 (1,407) 1:A:12:LEU:HD11 1:A:46:VAL:HG21 20 0.01 (1,407) 1:A:12:LEU:HD11 1:A:46:VAL:HG22 20 0.01 (1,407) 1:A:12:LEU:HD11 1:A:46:VAL:HG23 20 0.01 (1,407) 1:A:12:LEU:HD12 1:A:46:VAL:HG21 20 0.01 (1,407) 1:A:12:LEU:HD12 1:A:46:VAL:HG23 20 0.01 (1,407) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:46:VAL:HG21 20 0.01 (1,407) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:46:VAL:HG22 20 0.01 (1,407) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:46:VAL:HG23 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:46:VAL:HG23 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:46:VAL:HG23 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG21 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG22 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD22	(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD11	10	0.01
(1,407) 1:A:12:LEU:HD11 1:A:46:VAL:HG21 20 0.01 (1,407) 1:A:12:LEU:HD11 1:A:46:VAL:HG22 20 0.01 (1,407) 1:A:12:LEU:HD11 1:A:46:VAL:HG23 20 0.01 (1,407) 1:A:12:LEU:HD12 1:A:46:VAL:HG21 20 0.01 (1,407) 1:A:12:LEU:HD12 1:A:46:VAL:HG22 20 0.01 (1,407) 1:A:12:LEU:HD12 1:A:46:VAL:HG23 20 0.01 (1,407) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:46:VAL:HG21 20 0.01 (1,407) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:46:VAL:HG22 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:46:VAL:HG23 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:46:VAL:HG22 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG21 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG22 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG23 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD23	(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD12	10	0.01
(1,407) 1:A:12:LEU:HD11 1:A:46:VAL:HG22 20 0.01 (1,407) 1:A:12:LEU:HD11 1:A:46:VAL:HG23 20 0.01 (1,407) 1:A:12:LEU:HD12 1:A:46:VAL:HG21 20 0.01 (1,407) 1:A:12:LEU:HD12 1:A:46:VAL:HG22 20 0.01 (1,407) 1:A:12:LEU:HD12 1:A:46:VAL:HG23 20 0.01 (1,407) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:46:VAL:HG21 20 0.01 (1,407) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:46:VAL:HG23 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:46:VAL:HG21 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:46:VAL:HG22 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG21 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG22 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG23 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD23 1:A:46:VAL:HG21 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD23	(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD13	10	0.01
(1,407) 1:A:12:LEU:HD11 1:A:46:VAL:HG23 20 0.01 (1,407) 1:A:12:LEU:HD12 1:A:46:VAL:HG21 20 0.01 (1,407) 1:A:12:LEU:HD12 1:A:46:VAL:HG22 20 0.01 (1,407) 1:A:12:LEU:HD12 1:A:46:VAL:HG23 20 0.01 (1,407) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:46:VAL:HG21 20 0.01 (1,407) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:46:VAL:HG22 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:46:VAL:HG23 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:46:VAL:HG22 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG23 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG21 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG23 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG23 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD23 1:A:46:VAL:HG23 20 0.01	(1,407)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:46:VAL:HG21	20	0.01
(1,407) 1:A:12:LEU:HD12 1:A:46:VAL:HG21 20 0.01 (1,407) 1:A:12:LEU:HD12 1:A:46:VAL:HG22 20 0.01 (1,407) 1:A:12:LEU:HD12 1:A:46:VAL:HG23 20 0.01 (1,407) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:46:VAL:HG21 20 0.01 (1,407) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:46:VAL:HG22 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:46:VAL:HG23 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:46:VAL:HG22 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG23 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG21 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG22 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG23 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD23 1:A:46:VAL:HG21 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD23 1:A:46:VAL:HG21 20 0.01	(1,407)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:46:VAL:HG22	20	0.01
(1,407) 1:A:12:LEU:HD12 1:A:46:VAL:HG22 20 0.01 (1,407) 1:A:12:LEU:HD12 1:A:46:VAL:HG23 20 0.01 (1,407) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:46:VAL:HG21 20 0.01 (1,407) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:46:VAL:HG22 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:46:VAL:HG23 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:46:VAL:HG22 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:46:VAL:HG23 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG21 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG22 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG23 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG23 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG23 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD23 1:A:46:VAL:HG21 20 0.01	(1,407)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:46:VAL:HG23	20	0.01
(1,407) 1:A:12:LEU:HD12 1:A:46:VAL:HG23 20 0.01 (1,407) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:46:VAL:HG21 20 0.01 (1,407) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:46:VAL:HG22 20 0.01 (1,407) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:46:VAL:HG23 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:46:VAL:HG21 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:46:VAL:HG22 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG21 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG22 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG23 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG23 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG23 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD23 1:A:46:VAL:HG21 20 0.01	(1,407)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:46:VAL:HG21	20	0.01
(1,407) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:46:VAL:HG21 20 0.01 (1,407) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:46:VAL:HG22 20 0.01 (1,407) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:46:VAL:HG23 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:46:VAL:HG21 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:46:VAL:HG22 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG21 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG22 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG23 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG23 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD23 1:A:46:VAL:HG21 20 0.01	(1,407)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:46:VAL:HG22	20	0.01
(1,407) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:46:VAL:HG22 20 0.01 (1,407) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:46:VAL:HG23 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:46:VAL:HG21 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:46:VAL:HG22 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:46:VAL:HG23 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG21 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG23 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG23 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD23 1:A:46:VAL:HG21 20 0.01	(1,407)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:46:VAL:HG23	20	0.01
(1,407) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:46:VAL:HG23 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:46:VAL:HG21 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:46:VAL:HG22 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:46:VAL:HG23 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG21 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG22 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG23 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD23 1:A:46:VAL:HG21 20 0.01	(1,407)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:46:VAL:HG21	20	0.01
(1,398) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:46:VAL:HG21 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:46:VAL:HG22 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:46:VAL:HG23 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG21 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG22 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG23 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD23 1:A:46:VAL:HG21 20 0.01	(1,407)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:46:VAL:HG22	20	0.01
(1,398) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:46:VAL:HG22 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:46:VAL:HG23 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG21 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG22 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG23 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD23 1:A:46:VAL:HG21 20 0.01	(1,407)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:46:VAL:HG23	20	0.01
(1,398) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:46:VAL:HG23 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG21 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG22 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG23 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD23 1:A:46:VAL:HG21 20 0.01	(1,398)	1:A:12:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HG21	20	0.01
(1,398) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG21 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG22 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG23 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD23 1:A:46:VAL:HG21 20 0.01	(1,398)	1:A:12:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HG22	20	0.01
(1,398) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG22 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG23 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD23 1:A:46:VAL:HG21 20 0.01	(1,398)	1:A:12:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HG23	20	0.01
(1,398) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG23 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD23 1:A:46:VAL:HG21 20 0.01	(1,398)	1:A:12:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HG21	20	0.01
(1,398) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:46:VAL:HG23 20 0.01 (1,398) 1:A:12:LEU:HD23 1:A:46:VAL:HG21 20 0.01		1:A:12:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HG22	20	0.01
(1,398) 1:A:12:LEU:HD23 1:A:46:VAL:HG21 20 0.01		1:A:12:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HG23	20	0.01
(1 200) 1 A 10 I DIJ IID00 1 A 46 J/AT JICCO 20 20 20 20 20 20 20 20 20 20 20 20 20		1:A:12:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HG21	20	0.01
(1,398)	(1,398)	1:A:12:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HG22	20	0.01
(1,398) 1:A:12:LEU:HD23 1:A:46:VAL:HG23 20 0.01	(1,398)	1:A:12:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HG23	20	0.01
(1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG21 7 0.01	(1,387)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:90:VAL:HG21	7	0.01
(1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG22 7 0.01	(1,387)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:90:VAL:HG22	7	0.01
(1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG23 7 0.01		1:A:75:VAL:HG21	1:A:90:VAL:HG23	7	0.01
(1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG21 7 0.01		1:A:75:VAL:HG22	1:A:90:VAL:HG21	7	0.01
(1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG22 7 0.01	(1,387)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:90:VAL:HG22	7	0.01
(1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG23 7 0.01	(1,387)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:90:VAL:HG23	7	0.01
(1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG21 7 0.01	(1,387)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG21	7	0.01



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,387)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG22	7	0.01
(1,387)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG23	7	0.01
(1,377)	1:A:134:TYR:H	1:A:135:GLU:H	19	0.01
(1,374)	1:A:132:GLU:H	1:A:134:TYR:H	5	0.01
(1,365)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:H	1	0.01
(1,365)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:H	10	0.01
(1,357)	1:A:119:ALA:H	1:A:121:LEU:H	2	0.01
(1,357)	1:A:119:ALA:H	1:A:121:LEU:H	16	0.01
(1,355)	1:A:67:PHE:H	1:A:114:TYR:H	5	0.01
(1,353)	1:A:104:ASN:H	1:A:106:GLY:H	7	0.01
(1,341)	1:A:99:LEU:H	1:A:100:GLY:H	1	0.01
(1,341)	1:A:99:LEU:H	1:A:100:GLY:H	9	0.01
(1,339)	1:A:92:SER:H	1:A:98:HIS:H	12	0.01
(1,337)	1:A:76:GLU:H	1:A:91:ARG:H	14	0.01
(1,335)	1:A:90:VAL:H	1:A:100:GLY:H	19	0.01
(1,334)	1:A:89:GLU:H	1:A:90:VAL:H	10	0.01
(1,331)	1:A:80:ASP:H	1:A:88:THR:H	12	0.01
(1,331)	1:A:80:ASP:H	1:A:88:THR:H	20	0.01
(1,327)	1:A:78:LYS:H	1:A:89:GLU:H	6	0.01
(1,327)	1:A:78:LYS:H	1:A:89:GLU:H	10	0.01
(1,31)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:49:LYS:H	5	0.01
(1,31)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:49:LYS:H	5	0.01
(1,31)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:49:LYS:H	5	0.01
(1,308)	1:A:30:GLN:H	1:A:34:TRP:HE1	16	0.01
(1,305)	1:A:25:THR:H	1:A:26:GLU:H	19	0.01
(1,303)	1:A:18:GLU:H	1:A:20:THR:H	4	0.01
(1,30)	1:A:106:GLY:H	1:A:112:LEU:HD21	16	0.01
(1,30)	1:A:106:GLY:H	1:A:112:LEU:HD22	16	0.01
(1,30)	1:A:106:GLY:H	1:A:112:LEU:HD23	16	0.01
(1,299)	1:A:15:MET:H	1:A:18:GLU:H	4	0.01
(1,299)	1:A:15:MET:H	1:A:18:GLU:H	9	0.01
(1,298)	1:A:14:ARG:H	1:A:17:TYR:H	17	0.01
(1,285)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:H	3	0.01
(1,267)	1:A:21:GLN:H	1:A:24:GLY:H	4	0.01
(1,256)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD11	7	0.01
(1,256)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD12	7	0.01
(1,256)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD13	7	0.01
(1,256)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD11	7	0.01
(1,256)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD12	7	0.01
(1,256)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD13	7	0.01
(1,256)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD11	7	0.01
(1,256)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD12	7	0.01



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,256)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD13	7	0.01
(1,250)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:25:THR:H	1	0.01
(1,250)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:25:THR:H	1	0.01
(1,250)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:25:THR:H	1	0.01
(1,248)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD11	13	0.01
(1,248)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD12	13	0.01
(1,248)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD13	13	0.01
(1,240)	1:A:75:VAL:H	1:A:99:LEU:HD11	16	0.01
(1,240)	1:A:75:VAL:H	1:A:99:LEU:HD12	16	0.01
(1,240)	1:A:75:VAL:H	1:A:99:LEU:HD13	16	0.01
(1,239)	1:A:51:LEU:HD11	1:A:99:LEU:HD21	9	0.01
(1,239)	1:A:51:LEU:HD11	1:A:99:LEU:HD22	9	0.01
(1,239)	1:A:51:LEU:HD11	1:A:99:LEU:HD23	9	0.01
(1,239)	1:A:51:LEU:HD12	1:A:99:LEU:HD21	9	0.01
(1,239)	1:A:51:LEU:HD12	1:A:99:LEU:HD22	9	0.01
(1,239)	1:A:51:LEU:HD12	1:A:99:LEU:HD23	9	0.01
(1,239)	1:A:51:LEU:HD13	1:A:99:LEU:HD21	9	0.01
(1,239)	1:A:51:LEU:HD13	1:A:99:LEU:HD22	9	0.01
(1,239)	1:A:51:LEU:HD13	1:A:99:LEU:HD23	9	0.01
(1,236)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:140:LEU:HD11	4	0.01
(1,236)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:140:LEU:HD12	4	0.01
(1,236)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:140:LEU:HD13	4	0.01
(1,236)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:140:LEU:HD11	4	0.01
(1,236)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:140:LEU:HD12	4	0.01
(1,236)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:140:LEU:HD13	4	0.01
(1,236)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:140:LEU:HD11	4	0.01
(1,236)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:140:LEU:HD12	4	0.01
(1,236)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:140:LEU:HD13	4	0.01
(1,235)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:13:ASN:HD21	2	0.01
(1,235)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:13:ASN:HD21	2	0.01
(1,235)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:13:ASN:HD21	2	0.01
(1,230)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:129:LEU:HD21	10	0.01
(1,230)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:129:LEU:HD22	10	0.01
(1,230)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:129:LEU:HD23	10	0.01
(1,230)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:129:LEU:HD21	10	0.01
(1,230)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:129:LEU:HD22	10	0.01
(1,230)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:129:LEU:HD23	10	0.01
(1,230)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:129:LEU:HD21	10	0.01
(1,230)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:129:LEU:HD22	10	0.01
(1,230)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:129:LEU:HD23	10	0.01
(1,221)	1:A:71:ILE:HD11	1:A:140:LEU:HD11	5	0.01
(1,221)	1:A:71:ILE:HD11	1:A:140:LEU:HD12	5	0.01
/	1	1	<i>A</i> 1:	d on nort nago



 $Continued\ from\ previous\ page...$

(1,221) 1:A:71:ILE:HD11 1:A:140:LEU:HD13 5 0.01 (1,221) 1:A:71:ILE:HD12 1:A:140:LEU:HD11 5 0.01 (1,221) 1:A:71:ILE:HD12 1:A:140:LEU:HD13 5 0.01 (1,221) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD11 5 0.01 (1,221) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD12 5 0.01 (1,221) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD12 5 0.01 (1,221) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD13 5 0.01 (1,221) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD13 5 0.01 (1,221) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:137:TYR:H 19 0.01 (1,222) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:137:TYR:H 19 0.01 (1,221) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:43:VAL:HG11 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:43:VAL:HG12 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:43:VAL:HG13 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,221) 1:A:71:ILE:HD12 1:A:140:LEU:HD12 5 0.01 (1,221) 1:A:71:ILE:HD12 1:A:140:LEU:HD13 5 0.01 (1,221) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD11 5 0.01 (1,221) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD13 5 0.01 (1,221) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD13 5 0.01 (1,222) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:137:TYR:H 19 0.01 (1,222) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:137:TYR:H 19 0.01 (1,222) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:137:TYR:H 19 0.01 (1,222) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:137:TYR:H 19 0.01 (1,223) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:43:VAL:HG11 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:43:VAL:HG13 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:43:VAL:HG11 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:43:VAL:HG11 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23 <	(1,221)	1:A:71:ILE:HD11	1:A:140:LEU:HD13	5	0.01
(1,221) 1:A:71:ILE:HD12 1:A:140:LEU:HD13 5 0.01 (1,221) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD11 5 0.01 (1,221) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD12 5 0.01 (1,221) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD13 5 0.01 (1,221) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:137:TYR:H 19 0.01 (1,222) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:137:TYR:H 19 0.01 (1,222) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:137:TYR:H 19 0.01 (1,223) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:43:VAL:HG11 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:43:VAL:HG12 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:43:VAL:HG11 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:43:VAL:HG13 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG11 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG11 7 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23 <t< td=""><td>(1,221)</td><td>1:A:71:ILE:HD12</td><td>1:A:140:LEU:HD11</td><td>5</td><td>0.01</td></t<>	(1,221)	1:A:71:ILE:HD12	1:A:140:LEU:HD11	5	0.01
(1,221) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD11 5 0.01 (1,221) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD12 5 0.01 (1,221) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD13 5 0.01 (1,221) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD13 5 0.01 (1,222) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:137:TYR:H 19 0.01 (1,222) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:137:TYR:H 19 0.01 (1,223) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:43:VAL:HG11 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:43:VAL:HG13 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:43:VAL:HG13 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:43:VAL:HG13 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG13 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG11 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG11 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD21 <	(1,221)	1:A:71:ILE:HD12	1:A:140:LEU:HD12	5	0.01
(1,221) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD12 5 0.01 (1,221) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD13 5 0.01 (1,22) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:137:TYR:H 19 0.01 (1,22) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:137:TYR:H 19 0.01 (1,22) 1:A:412:LEU:HD21 1:A:43:VAL:HG11 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:43:VAL:HG12 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:43:VAL:HG13 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:43:VAL:HG12 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:43:VAL:HG13 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG13 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG11 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG11 7 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG11 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD21 1	(1,221)	1:A:71:ILE:HD12	1:A:140:LEU:HD13	5	0.01
(1,221) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD13 5 0.01 (1,22) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:137:TYR:H 19 0.01 (1,22) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:137:TYR:H 19 0.01 (1,22) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:137:TYR:H 19 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:43:VAL:HG11 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:43:VAL:HG13 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:43:VAL:HG13 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:43:VAL:HG12 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG13 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG11 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG11 7 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG11 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:43:VAL:HG11 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD22 1:	(1,221)	1:A:71:ILE:HD13	1:A:140:LEU:HD11	5	0.01
(1,22) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:137:TYR:H 19 0.01 (1,22) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:137:TYR:H 19 0.01 (1,22) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:137:TYR:H 19 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:43:VAL:HG11 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:43:VAL:HG13 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:43:VAL:HG11 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:43:VAL:HG12 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:43:VAL:HG13 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:43:VAL:HG13 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG11 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG13 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG13 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG13 7 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:4	(1,221)	1:A:71:ILE:HD13	1:A:140:LEU:HD12	5	0.01
(1,22) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:137:TYR:H 19 0.01 (1,22) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:137:TYR:H 19 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:43:VAL:HG11 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:43:VAL:HG12 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:43:VAL:HG13 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:43:VAL:HG12 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:43:VAL:HG13 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:43:VAL:HG13 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG11 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG12 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG13 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:43:VAL:HG11 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:43:VAL:HG12 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD22 1:	(1,221)	1:A:71:ILE:HD13	1:A:140:LEU:HD13	5	0.01
(1,22) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:137:TYR:H 19 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:43:VAL:HG11 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:43:VAL:HG12 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:43:VAL:HG13 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:43:VAL:HG12 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:43:VAL:HG13 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG11 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG12 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG13 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG11 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:43:VAL:HG11 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:43:VAL:HG13 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:43:VAL:HG11 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD22 <td< td=""><td>(1,22)</td><td>1:A:129:LEU:HD11</td><td>1:A:137:TYR:H</td><td>19</td><td>0.01</td></td<>	(1,22)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:137:TYR:H	19	0.01
(1,213) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:43:VAL:HG11 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:43:VAL:HG12 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:43:VAL:HG13 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:43:VAL:HG11 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:43:VAL:HG13 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG11 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG11 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG13 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG13 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:43:VAL:HG11 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:43:VAL:HG13 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:43:VAL:HG11 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:43:VAL:HG13 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD22 <t< td=""><td>(1,22)</td><td>1:A:129:LEU:HD12</td><td>1:A:137:TYR:H</td><td>19</td><td>0.01</td></t<>	(1,22)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:137:TYR:H	19	0.01
(1,213) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:43:VAL:HG12 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:43:VAL:HG13 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:43:VAL:HG11 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:43:VAL:HG12 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG13 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG12 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG12 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG13 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG13 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:43:VAL:HG12 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:43:VAL:HG13 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:43:VAL:HG11 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:43:VAL:HG13 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23 <	(1,22)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:137:TYR:H	19	0.01
(1,213) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:43:VAL:HG13 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:43:VAL:HG11 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:43:VAL:HG12 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG13 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG11 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG12 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG13 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG13 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:43:VAL:HG12 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:43:VAL:HG13 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:43:VAL:HG11 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:43:VAL:HG12 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG13 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23 <	(1,213)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:43:VAL:HG11	6	0.01
(1,213) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:43:VAL:HG11 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:43:VAL:HG12 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:43:VAL:HG13 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG11 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG12 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG13 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:43:VAL:HG11 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:43:VAL:HG13 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:43:VAL:HG11 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:43:VAL:HG11 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:43:VAL:HG13 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG13 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG11 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23	(1,213)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:43:VAL:HG12	6	0.01
(1,213) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:43:VAL:HG12 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:43:VAL:HG13 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG11 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG12 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG13 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:43:VAL:HG11 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:43:VAL:HG13 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:43:VAL:HG11 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:43:VAL:HG11 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:43:VAL:HG11 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:43:VAL:HG13 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG11 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG11 17 0.01 (1,211) 1:A:41:LEU:HD23	(1,213)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:43:VAL:HG13	6	0.01
(1,213) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:43:VAL:HG13 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG11 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG12 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG13 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:43:VAL:HG11 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:43:VAL:HG12 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:43:VAL:HG13 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:43:VAL:HG11 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:43:VAL:HG13 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:43:VAL:HG13 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG11 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG11 17 0.01 (1,211) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG13 17 0.01 (1,211) 1:A:41:LEU:HD23	(1,213)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:43:VAL:HG11	6	0.01
(1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG11 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG12 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG13 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:43:VAL:HG11 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:43:VAL:HG12 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:43:VAL:HG13 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:43:VAL:HG11 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:43:VAL:HG13 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:43:VAL:HG13 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG13 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG12 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG12 17 0.01 (1,211) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG13 17 0.01 (1,211) 1:A:41:LEU:HD21	(1,213)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:43:VAL:HG12	6	0.01
(1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG12 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG13 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:43:VAL:HG11 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:43:VAL:HG12 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:43:VAL:HG13 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:43:VAL:HG11 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:43:VAL:HG13 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:43:VAL:HG13 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG11 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG11 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG11 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG12 17 0.01 (1,211) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG12 17 0.01 (1,211) 1:A:41:LEU:HD21	(1,213)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:43:VAL:HG13	6	0.01
(1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG13 6 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:43:VAL:HG11 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:43:VAL:HG12 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:43:VAL:HG13 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:43:VAL:HG11 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:43:VAL:HG12 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:43:VAL:HG13 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG11 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG12 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG13 17 0.01 (1,211) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG13 17 0.01 (1,211) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:138:LEU:HD11 7 0.01 (1,211) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:138:LEU:HD13 7 0.01 (1,211) 1:A:41:LEU:HD22	(1,213)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:43:VAL:HG11	6	0.01
(1,213) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:43:VAL:HG11 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:43:VAL:HG12 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:43:VAL:HG13 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:43:VAL:HG11 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:43:VAL:HG12 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:43:VAL:HG13 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG11 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG12 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG13 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG13 17 0.01 (1,211) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:138:LEU:HD11 7 0.01 (1,211) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:138:LEU:HD13 7 0.01 (1,211) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD11 7 0.01 (1,211) 1:A:41:LEU:HD22	(1,213)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:43:VAL:HG12	6	0.01
(1,213) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:43:VAL:HG12 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:43:VAL:HG13 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:43:VAL:HG11 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:43:VAL:HG12 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:43:VAL:HG13 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG11 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG12 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG13 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG13 17 0.01 (1,211) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD11 7 0.01 (1,211) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:138:LEU:HD13 7 0.01 (1,211) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD11 7 0.01 (1,211) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD13 7 0.01 (1,211) 1:A:41:LEU:HD23	(1,213)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:43:VAL:HG13	6	0.01
(1,213) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:43:VAL:HG13 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:43:VAL:HG11 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:43:VAL:HG12 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:43:VAL:HG13 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG11 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG12 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG13 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG13 17 0.01 (1,211) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:138:LEU:HD11 7 0.01 (1,211) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:138:LEU:HD13 7 0.01 (1,211) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD12 7 0.01 (1,211) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD13 7 0.01 (1,211) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD13 7 0.01 (1,211) 1:A:41:LEU:HD23	(1,213)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:43:VAL:HG11	17	0.01
(1,213) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:43:VAL:HG11 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:43:VAL:HG12 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:43:VAL:HG13 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG11 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG12 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG13 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG13 17 0.01 (1,211) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:138:LEU:HD11 7 0.01 (1,211) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:138:LEU:HD13 7 0.01 (1,211) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD12 7 0.01 (1,211) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD13 7 0.01 (1,211) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD13 7 0.01 (1,211) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD11 7 0.01	(1,213)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:43:VAL:HG12	17	0.01
(1,213) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:43:VAL:HG12 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:43:VAL:HG13 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG11 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG12 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG13 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD11 7 0.01 (1,211) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:138:LEU:HD12 7 0.01 (1,211) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD11 7 0.01 (1,211) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD12 7 0.01 (1,211) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD13 7 0.01 (1,211) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD13 7 0.01 (1,211) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD13 7 0.01	(1,213)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:43:VAL:HG13	17	0.01
(1,213) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:43:VAL:HG13 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG11 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG12 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG13 17 0.01 (1,211) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:138:LEU:HD11 7 0.01 (1,211) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:138:LEU:HD12 7 0.01 (1,211) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD11 7 0.01 (1,211) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD12 7 0.01 (1,211) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD13 7 0.01 (1,211) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD13 7 0.01 (1,211) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD11 7 0.01	(1,213)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:43:VAL:HG11	17	0.01
(1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG11 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG12 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG13 17 0.01 (1,211) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:138:LEU:HD11 7 0.01 (1,211) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:138:LEU:HD12 7 0.01 (1,211) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD11 7 0.01 (1,211) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD12 7 0.01 (1,211) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD13 7 0.01 (1,211) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD13 7 0.01 (1,211) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD11 7 0.01	(1,213)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:43:VAL:HG12	17	0.01
(1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG12 17 0.01 (1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG13 17 0.01 (1,211) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:138:LEU:HD11 7 0.01 (1,211) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:138:LEU:HD12 7 0.01 (1,211) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:138:LEU:HD13 7 0.01 (1,211) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD11 7 0.01 (1,211) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD13 7 0.01 (1,211) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD13 7 0.01 (1,211) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD11 7 0.01	(1,213)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:43:VAL:HG13	17	0.01
(1,213) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG13 17 0.01 (1,211) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:138:LEU:HD11 7 0.01 (1,211) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:138:LEU:HD12 7 0.01 (1,211) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:138:LEU:HD13 7 0.01 (1,211) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD11 7 0.01 (1,211) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD12 7 0.01 (1,211) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD13 7 0.01 (1,211) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD11 7 0.01 (1,211) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD11 7 0.01	(1,213)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:43:VAL:HG11	17	0.01
(1,211) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:138:LEU:HD11 7 0.01 (1,211) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:138:LEU:HD12 7 0.01 (1,211) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:138:LEU:HD13 7 0.01 (1,211) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD11 7 0.01 (1,211) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD12 7 0.01 (1,211) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD13 7 0.01 (1,211) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD11 7 0.01	(1,213)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:43:VAL:HG12	17	0.01
(1,211) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:138:LEU:HD12 7 0.01 (1,211) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:138:LEU:HD13 7 0.01 (1,211) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD11 7 0.01 (1,211) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD12 7 0.01 (1,211) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD13 7 0.01 (1,211) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD11 7 0.01	(1,213)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:43:VAL:HG13	17	0.01
(1,211) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:138:LEU:HD13 7 0.01 (1,211) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD11 7 0.01 (1,211) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD12 7 0.01 (1,211) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD13 7 0.01 (1,211) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD11 7 0.01	(1,211)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:138:LEU:HD11	7	0.01
(1,211) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD11 7 0.01 (1,211) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD12 7 0.01 (1,211) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD13 7 0.01 (1,211) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD11 7 0.01 (1,211) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD11 7 0.01	(1,211)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:138:LEU:HD12	7	0.01
(1,211) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD12 7 0.01 (1,211) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD13 7 0.01 (1,211) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD11 7 0.01	(1,211)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:138:LEU:HD13	7	0.01
(1,211) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD13 7 0.01 (1,211) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD11 7 0.01	(1,211)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:138:LEU:HD11	7	0.01
(1,211) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD11 7 0.01	(1,211)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:138:LEU:HD12	7	0.01
(1,211) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD11 7 0.01	(1,211)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:138:LEU:HD13	7	0.01
		1:A:41:LEU:HD23	1:A:138:LEU:HD11	7	0.01
(1,211) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD12 7 0.01	(1,211)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:138:LEU:HD12	7	0.01
(1,211) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD13 7 0.01		1:A:41:LEU:HD23	1:A:138:LEU:HD13	7	0.01
(1,210) 1:A:41:LEU:H 1:A:41:LEU:HD21 18 0.01		1:A:41:LEU:H	1:A:41:LEU:HD21	18	0.01
(1,210) 1:A:41:LEU:H 1:A:41:LEU:HD22 18 0.01	(1,210)	1:A:41:LEU:H	1:A:41:LEU:HD22	18	0.01
(1,210) 1:A:41:LEU:H 1:A:41:LEU:HD23 18 0.01	(1,210)	1:A:41:LEU:H	1:A:41:LEU:HD23	18	0.01
(1,207) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:124:VAL:HG11 15 0.01	(1,207)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:124:VAL:HG11	15	0.01
(1,207) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:124:VAL:HG12 15 0.01	(1,207)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:124:VAL:HG12	15	0.01



 $Continued\ from\ previous\ page...$

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,207)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:124:VAL:HG13	15	0.01
(1,207)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:124:VAL:HG11	15	0.01
(1,207)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:124:VAL:HG12	15	0.01
(1,207)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:124:VAL:HG13	15	0.01
(1,207)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:124:VAL:HG11	15	0.01
(1,207)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:124:VAL:HG12	15	0.01
(1,207)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:124:VAL:HG13	15	0.01
(1,201)	1:A:88:THR:H	1:A:102:VAL:HG11	16	0.01
(1,201)	1:A:88:THR:H	1:A:102:VAL:HG12	16	0.01
(1,201)	1:A:88:THR:H	1:A:102:VAL:HG13	16	0.01
(1,194)	1:A:42:TYR:H	1:A:43:VAL:HG11	15	0.01
(1,194)	1:A:42:TYR:H	1:A:43:VAL:HG12	15	0.01
(1,194)	1:A:42:TYR:H	1:A:43:VAL:HG13	15	0.01
(1,190)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:26:GLU:H	6	0.01
(1,190)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:26:GLU:H	6	0.01
(1,190)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:26:GLU:H	6	0.01
(1,180)	1:A:90:VAL:HG21	1:A:91:ARG:H	19	0.01
(1,180)	1:A:90:VAL:HG22	1:A:91:ARG:H	19	0.01
(1,180)	1:A:90:VAL:HG23	1:A:91:ARG:H	19	0.01
(1,177)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:43:VAL:HG21	11	0.01
(1,177)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:43:VAL:HG22	11	0.01
(1,177)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:43:VAL:HG23	11	0.01
(1,177)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:43:VAL:HG21	11	0.01
(1,177)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:43:VAL:HG22	11	0.01
(1,177)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:43:VAL:HG23	11	0.01
(1,177)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:43:VAL:HG21	11	0.01
(1,177)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:43:VAL:HG22	11	0.01
(1,177)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:43:VAL:HG23	11	0.01
(1,172)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:20:THR:H	4	0.01
(1,172)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:20:THR:H	4	0.01
(1,172)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:20:THR:H	4	0.01
(1,171)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG11	8	0.01
(1,171)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG12	8	0.01
(1,171)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG13	8	0.01
(1,17)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD21	19	0.01
(1,17)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD22	19	0.01
(1,17)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD23	19	0.01
(1,164)	1:A:76:GLU:H	1:A:77:GLU:H	6	0.01
(1,160)	1:A:54:SER:H	1:A:56:ASP:H	6	0.01
(1,16)	1:A:102:VAL:H	1:A:102:VAL:HG11	20	0.01
(1,16)	1:A:102:VAL:H	1:A:102:VAL:HG12	20	0.01
(1,16)	1:A:102:VAL:H	1:A:102:VAL:HG13	20	0.01



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,158)	1:A:77:GLU:H	1:A:78:LYS:H	7	0.01
(1,158)	1:A:77:GLU:H	1:A:78:LYS:H	8	0.01
(1,150)	1:A:81:THR:H	1:A:82:SER:H	15	0.01
(1,15)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG11	12	0.01
(1,15)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG12	12	0.01
(1,15)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG13	12	0.01
(1,15)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG11	19	0.01
(1,15)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG12	19	0.01
(1,15)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG13	19	0.01
(1,14)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD21	7	0.01
(1,14)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD22	7	0.01
(1,14)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD23	7	0.01
(1,14)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD21	19	0.01
(1,14)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD22	19	0.01
(1,14)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD23	19	0.01
(1,139)	1:A:46:VAL:H	1:A:48:GLY:H	8	0.01
(1,139)	1:A:46:VAL:H	1:A:48:GLY:H	12	0.01
(1,13)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:131:GLU:H	1	0.01
(1,13)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:131:GLU:H	1	0.01
(1,13)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:131:GLU:H	1	0.01
(1,127)	1:A:21:GLN:H	1:A:23:ASN:H	18	0.01
(1,119)	1:A:88:THR:H	1:A:102:VAL:H	13	0.01
(1,115)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:H	19	0.01
(1,106)	1:A:105:ASP:H	1:A:113:ARG:H	11	0.01
(1,104)	1:A:73:GLU:H	1:A:75:VAL:H	3	0.01
(1,104)	1:A:73:GLU:H	1:A:75:VAL:H	14	0.01
(1,102)	1:A:52:PHE:H	1:A:71:ILE:H	20	0.01



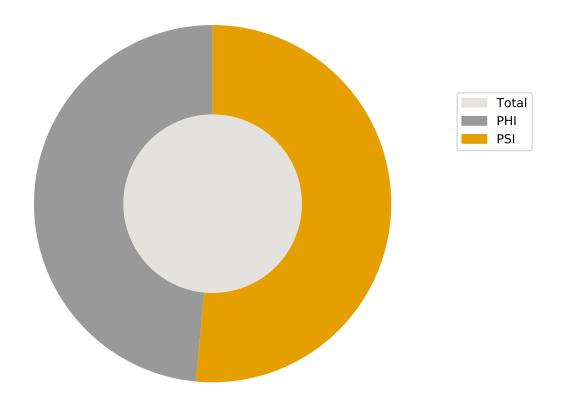
9 Dihedral angle restraints analysis

9.1 Dihedral angle restraints summary

Angle name	Count	%
PHI	228	48.5
PSI	242	51.5
Total	470	100.0

9.1.1 Pie chart : Dihedral angle restraints

There are 0 unmapped restraints



9.2 Dihedral angle violations

The following table provides the summary of violated restraints. Restraints that are violated at least in one model are counted as violated.

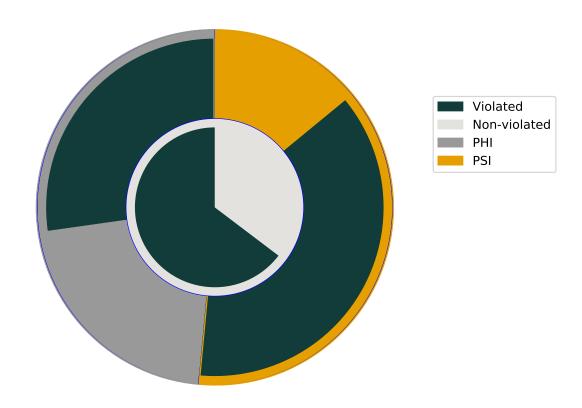
Angle name	Count	$\%^1$	$\%^2$
PHI	128	56.1	42.1
PSI	176	72.7	57.9



Angle name	Count	$\%^1$	$\%^2$
Total	304	64.7	100.0

¹percentage of violated restraints in that particular angle type, ²percentage of violation in total violations.

9.2.1 Pie chart: Dihedral angle violations



9.3 Consistent dihedral angle violations

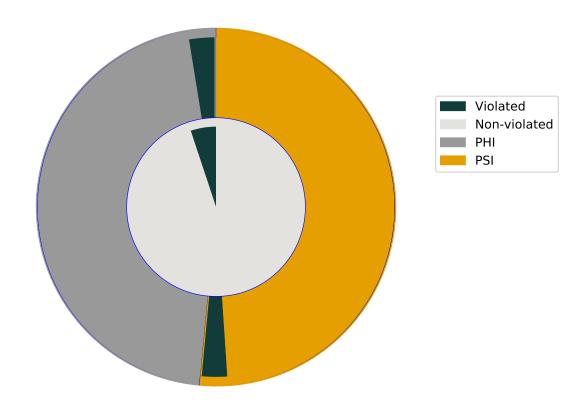
The following table provides the summary of consistently violated restraints. Restraints that are violated in all models are counted as consistently violated.

Angle name	Count	$\%^1$	$\%^2$
PHI	12	5.3	50.0
PSI	12	5.0	50.0
Total	24	5.1	100.0

 1 percentage of violated restraints in that particular angle type, 2 percentage of violation in total violations.



9.3.1 Pie chart: Consistent dihedral angle violations



9.4 Residual dihedral angle violations

Violation are counted in different bin sizes and listed below

Range (\circ)	Avg. No. of violated restraints per model	$ \text{Max violation } (\circ) $
0.0-5.0	64.3	4.99
5.0-10.0	10.5	9.79
10.0-20.0	8.6	19.75
20.0-40.0	15.1	39.98
40.0-80.0	13.6	69.9
80.0<	None	None

9.5 Dihedral angle violations in the ensemble

The restraints are grouped based on the number of violated models and listed here.

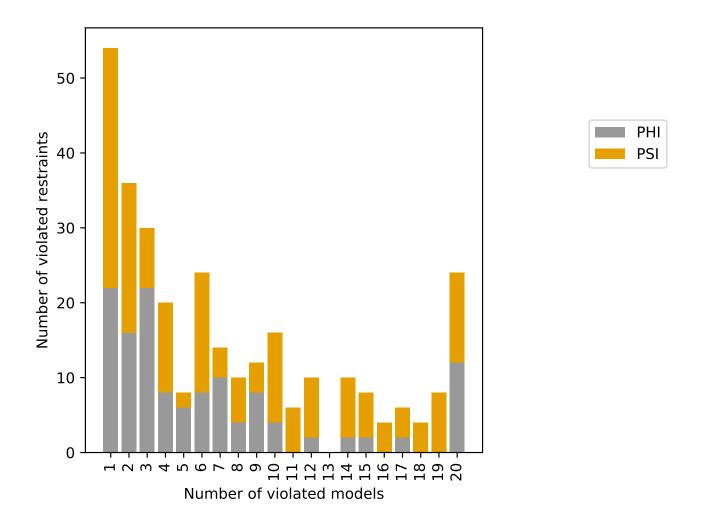
No.	of vic	olated restraints	No. of violated models
PHI	PSI	Total	No. of violated models
22	32	54	1



		$\overline{ m precedent page}.$	
PHI	PSI	Total	No. of violated models
16	20	36	2
22	8	30	3
8	12	20	4
6	2	8	5
8	16	24	6
10	4	14	7
4	6	10	8
8	4	12	9
4	12	16	10
0	6	6	11
2	8	10	12
0	0	0	13
2	8	10	14
2	6	8	15
0	4	4	16
2	4	6	17
0	4	4	18
0	8	8	19
12	12	24	20



9.5.1 Bar graph: No. of models vs No. of violations



9.6 Violations in each model

The following table lists the violation count in each model in the ensemble

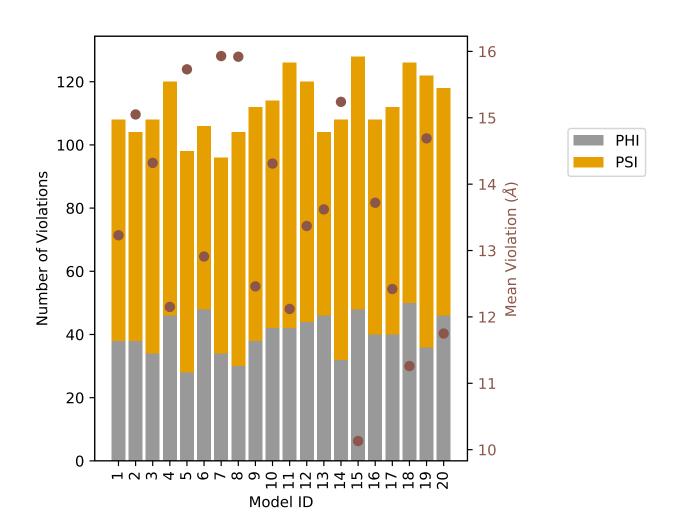
Model ID	No.	of vic	lations	Maga (a)	Mov (a)	
Model 1D	PHI	PSI	Total	$\mathbf{Mean} \; (\; \circ \;)$	$\mathbf{Max} (\circ)$	
1	38	70	108	13.23	66.84	
2	38	66	104	15.05	64.25	
3	34	74	108	14.32	65.72	
4	46	74	120	12.15	58.78	
5	28	70	98	15.73	65.67	
6	48	58	106	12.91	69.9	
7	34	62	96	15.93	62.88	
8	30	74	104	15.92	68.01	
9	38	74	112	12.46	69.47	



Continued from previous page...

Model ID	No.	of vic	lations	Maga (a)	Mary (a)
Model 1D	PHI	PSI	Total	$\mathbf{Mean} \; (\; \circ \;)$	$\operatorname{Max}(\circ)$
10	42	72	114	14.31	62.84
11	42	84	126	12.12	57.53
12	44	76	120	13.37	66.14
13	46	58	104	13.62	68.39
14	32	76	108	15.24	62.75
15	48	80	128	10.13	50.19
16	40	68	108	13.72	68.6
17	40	72	112	12.42	64.33
18	50	76	126	11.26	61.22
19	36	86	122	14.69	65.55
20	46	72	118	11.75	68.26

9.6.1 Bar graph: Violations in each model

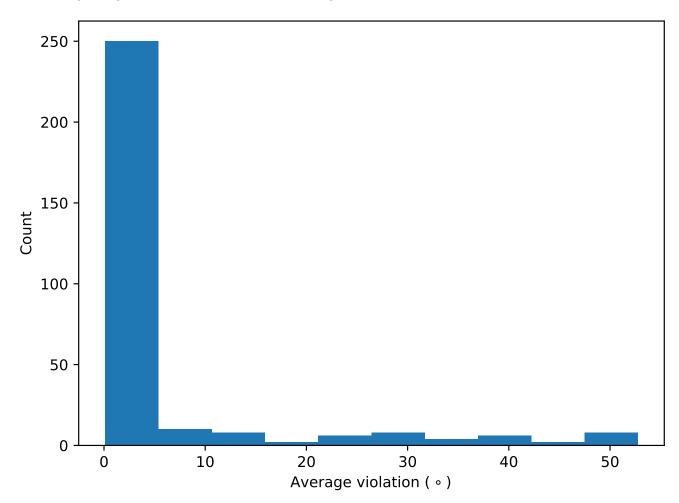




9.7 Most violated dihedral angle restraints

9.7.1 Histogram: Distribution of mean dihedral angle violations

The following histogram shows the distribution of average violation of each restraint



9.7.2 Table: Most violated dihedral angle restraints

The following tale lists the average violation of each restraint sorted by number of violated models

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models	$\mathbf{Mean}\;(\;\circ\;)$	Max (°)
(1,409)	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	1:A:107:PRO:N	20	52.73	69.9
(1,174)	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	1:A:107:PRO:N	20	52.73	69.9
(1,94)	1:A:60:SER:N	1:A:60:SER:CA	1:A:60:SER:C	1:A:61:GLN:N	18	36.42	66.14
(1,329)	1:A:60:SER:N	1:A:60:SER:CA	1:A:60:SER:C	1:A:61:GLN:N	18	36.42	66.14
(1,304)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	20	44.05	63.31
(1,69)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	20	44.05	63.31
(1,344)	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	1:A:70:PRO:N	20	41.59	60.79
(1,109)	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	1:A:70:PRO:N	20	41.59	60.79
(1,412)	1:A:108:GLY:N	1:A:108:GLY:CA	1:A:108:GLY:C	1:A:109:PRO:N	20	29.23	51.98
(1,177)	1:A:108:GLY:N	1:A:108:GLY:CA	1:A:108:GLY:C	1:A:109:PRO:N	20	29.23	51.98



Key	$\frac{ed\ from\ previous\ po}{\mathbf{Atom-1}}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models	Mean (o)	Mov (a)
-						\ /	Max (o)
(1,417)	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	1:A:113:ARG:N	20	39.99	51.12
(1,182)	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA 1:A:66:SER:CA	1:A:112:LEU:C 1:A:66:SER:C	1:A:113:ARG:N	20 19	39.99	51.12
(1,338)	1:A:66:SER:N			1:A:67:PHE:N		31.19	45.31
(1,103)	1:A:66:SER:N	1:A:66:SER:CA	1:A:66:SER:C	1:A:67:PHE:N	19	31.19	45.31
(1,59)	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	1:A:39:GLU:N	17	28.55	45.11
(1,294)	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	1:A:39:GLU:N	17	28.55 33.32	45.11
(1,281)	1:A:26:GLU:N 1:A:26:GLU:N	1:A:26:GLU:CA	1:A:26:GLU:C 1:A:26:GLU:C	1:A:27:PRO:N 1:A:27:PRO:N	19 19		43.84
(1,46)		1:A:26:GLU:CA 1:A:90:VAL:CA				33.32	43.84
(1,144)	1:A:90:VAL:N		1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	20	23.55	35.88
(1,379)	1:A:90:VAL:N	1:A:90:VAL:CA	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	20	23.55	35.88
(1,373)	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	1:A:88:THR:N	19	21.93	34.58
(1,138)	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	1:A:88:THR:N	19	21.93	34.58
(1,105)	1:A:67:PHE:N	1:A:67:PHE:CA	1:A:67:PHE:C	1:A:68:THR:N	16	18.18	30.49
(1,340)	1:A:67:PHE:N	1:A:67:PHE:CA	1:A:67:PHE:C	1:A:68:THR:N	16	18.18	30.49
(1,389)	1:A:95:ALA:N	1:A:95:ALA:CA	1:A:95:ALA:C	1:A:96:ASP:N	9	11.86	20.75
(1,154)	1:A:95:ALA:N	1:A:95:ALA:CA	1:A:95:ALA:C	1:A:96:ASP:N	9	11.86	20.75
(1,148)	1:A:92:SER:N	1:A:92:SER:CA	1:A:92:SER:C	1:A:93:ARG:N	15	11.36	19.35
(1,383)	1:A:92:SER:N	1:A:92:SER:CA	1:A:92:SER:C	1:A:93:ARG:N	15	11.36	19.35
(1,134)	1:A:85:MET:N	1:A:85:MET:CA	1:A:85:MET:C	1:A:86:ILE:N	8	11.37	17.21
(1,369)	1:A:85:MET:N	1:A:85:MET:CA	1:A:85:MET:C	1:A:86:ILE:N	8	11.37	17.21
(1,387)	1:A:94:THR:N	1:A:94:THR:CA	1:A:94:THR:C	1:A:95:ALA:N	14	6.42	16.19
(1,152)	1:A:94:THR:N	1:A:94:THR:CA	1:A:94:THR:C	1:A:95:ALA:N	14	6.42	16.19
(1,284)	1:A:31:ASN:N	1:A:31:ASN:CA	1:A:31:ASN:C	1:A:32:GLU:N	11	9.25	15.65
(1,49)	1:A:31:ASN:N	1:A:31:ASN:CA	1:A:31:ASN:C	1:A:32:GLU:N	11	9.25	15.65
(1,156)	1:A:96:ASP:N	1:A:96:ASP:CA	1:A:96:ASP:C	1:A:97:SER:N	17	7.85	14.49
(1,391)	1:A:96:ASP:N	1:A:96:ASP:CA	1:A:96:ASP:C	1:A:97:SER:N	17	7.85	14.49
(1,110)	1:A:70:PRO:N	1:A:70:PRO:CA	1:A:70:PRO:C	1:A:71:ILE:N	14	4.03	11.32
(1,345)	1:A:70:PRO:N	1:A:70:PRO:CA	1:A:70:PRO:C	1:A:71:ILE:N	14	4.03	11.32
(1,393)	1:A:97:SER:N	1:A:97:SER:CA	1:A:97:SER:C	1:A:98:HIS:N	1	11.09	11.09
(1,158)	1:A:97:SER:N	1:A:97:SER:CA	1:A:97:SER:C	1:A:98:HIS:N	1	11.09	11.09
(1,423)	1:A:115:CYS:N	1:A:115:CYS:CA	1:A:115:CYS:C	1:A:116:ILE:N	14	4.85	9.58
(1,188)	1:A:115:CYS:N	1:A:115:CYS:CA	1:A:115:CYS:C	1:A:116:ILE:N	14	4.85	9.58
(1,61)	1:A:39:GLU:N	1:A:39:GLU:CA	1:A:39:GLU:C	1:A:40:GLY:N	5	2.78	8.67
(1,296)	1:A:39:GLU:N	1:A:39:GLU:CA	1:A:39:GLU:C	1:A:40:GLY:N	5	2.78	8.67
(1,397)	1:A:99:LEU:N	1:A:99:LEU:CA	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	16	3.44	8.66
(1,162)	1:A:99:LEU:N	1:A:99:LEU:CA	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	16	3.44	8.66
(1,456)	1:A:133:GLY:N	1:A:133:GLY:CA	1:A:133:GLY:C	1:A:134:TYR:N	12	4.49	7.85
(1,221)	1:A:133:GLY:N	1:A:133:GLY:CA	1:A:133:GLY:C	1:A:134:TYR:N	12	4.49	7.85
(1,186)	1:A:114:TYR:N	1:A:114:TYR:CA	1:A:114:TYR:C	1:A:115:CYS:N	12	3.46	7.67
(1,421)	1:A:114:TYR:N	1:A:114:TYR:CA	1:A:114:TYR:C	1:A:115:CYS:N	12	3.46	7.67
(1,419)	1:A:113:ARG:N	1:A:113:ARG:CA	1:A:113:ARG:C	1:A:114:TYR:N	18	2.8	7.11
(1,184)	1:A:113:ARG:N	1:A:113:ARG:CA	1:A:113:ARG:C	1:A:114:TYR:N	18	2.8	7.11
(1,42)	1:A:24:GLY:N	1:A:24:GLY:CA	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	15	3.31	6.97
(1,277)	1:A:24:GLY:N	1:A:24:GLY:CA	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	15	3.31	6.97
(1,261)	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	1:A:16:GLN:N	4	3.02	6.75
(1,26)	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	1:A:16:GLN:N	4	3.02	6.75
(1,315)	1:A:52:PHE:N	1:A:52:PHE:CA	1:A:52:PHE:C	1:A:53:THR:N	4	3.58	6.6
(1,80)	1:A:52:PHE:N	1:A:52:PHE:CA	1:A:52:PHE:C	1:A:53:THR:N	4	3.58	6.6
(1,395)	1:A:98:HIS:N	1:A:98:HIS:CA	1:A:98:HIS:C	1:A:99:LEU:N	10	3.25	6.55
(1,160)	1:A:98:HIS:N	1:A:98:HIS:CA	1:A:98:HIS:C	1:A:99:LEU:N	10	3.25	6.55
(1,336)	1:A:65:PRO:N	1:A:65:PRO:CA	1:A:65:PRO:C	1:A:66:SER:N	14	2.44	6.27



	ed from previous po						
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models	$\mathbf{Mean} \; (\; \circ \;)$	Max (∘)
(1,101)	1:A:65:PRO:N	1:A:65:PRO:CA	1:A:65:PRO:C	1:A:66:SER:N	14	2.44	6.27
(1,116)	1:A:74:GLU:N	1:A:74:GLU:CA	1:A:74:GLU:C	1:A:75:VAL:N	3	3.39	6.02
(1,351)	1:A:74:GLU:N	1:A:74:GLU:CA	1:A:74:GLU:C	1:A:75:VAL:N	3	3.39	6.02
(1,349)	1:A:73:GLU:N	1:A:73:GLU:CA	1:A:73:GLU:C	1:A:74:GLU:N	10	2.19	5.83
(1,114)	1:A:73:GLU:N	1:A:73:GLU:CA	1:A:73:GLU:C	1:A:74:GLU:N	10	2.19	5.83
(1,292)	1:A:37:LYS:N	1:A:37:LYS:CA	1:A:37:LYS:C	1:A:38:GLU:N	6	2.5	5.76
(1,57)	1:A:37:LYS:N	1:A:37:LYS:CA	1:A:37:LYS:C	1:A:38:GLU:N	6	2.5	5.76
(1,365)	1:A:82:SER:N	1:A:82:SER:CA	1:A:82:SER:C	1:A:83:HIS:N	7	2.63	5.63
(1,130)	1:A:82:SER:N	1:A:82:SER:CA	1:A:82:SER:C	1:A:83:HIS:N	7	2.63	5.63
(1,229)	1:A:138:LEU:N	1:A:138:LEU:CA	1:A:138:LEU:C	1:A:139:HIS:N	12	1.98	5.61
(1,464)	1:A:138:LEU:N	1:A:138:LEU:CA	1:A:138:LEU:C	1:A:139:HIS:N	12	1.98	5.61
(1,112)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:GLU:N	15	1.69	5.48
(1,347)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:GLU:N	15	1.69	5.48
(1,458)	1:A:135:GLU:N	1:A:135:GLU:CA	1:A:135:GLU:C	1:A:136:SER:N	6	3.36	5.41
(1,223)	1:A:135:GLU:N	1:A:135:GLU:CA	1:A:135:GLU:C	1:A:136:SER:N	6	3.36	5.41
(1,470)	1:A:141:PHE:N	1:A:141:PHE:CA	1:A:141:PHE:C	1:A:142:ASN:N	10	2.7	5.12
(1,235)	1:A:141:PHE:N	1:A:141:PHE:CA	1:A:141:PHE:C	1:A:142:ASN:N	10	2.7	5.12
(1,342)	1:A:68:THR:N	1:A:68:THR:CA	1:A:68:THR:C	1:A:69:LYS:N	4	2.17	4.9
(1,107)	1:A:68:THR:N	1:A:68:THR:CA	1:A:68:THR:C	1:A:69:LYS:N	4	2.17	4.9
(1,136)	1:A:86:ILE:N	1:A:86:ILE:CA	1:A:86:ILE:C	1:A:87:ARG:N	6	2.21	4.76
(1,371)	1:A:86:ILE:N	1:A:86:ILE:CA	1:A:86:ILE:C	1:A:87:ARG:N	6	2.21	4.76
(1,313)	1:A:50:PRO:N	1:A:50:PRO:CA	1:A:50:PRO:C	1:A:51:LEU:N	19	2.05	4.67
(1,78)	1:A:50:PRO:N	1:A:50:PRO:CA	1:A:50:PRO:C	1:A:51:LEU:N	19	2.05	4.67
(1,90)	1:A:58:PHE:N	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:C	1:A:59:ASP:N	8	2.66	4.64
(1,325)	1:A:58:PHE:N	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:C	1:A:59:ASP:N	8	2.66	4.64
(1,385)	1:A:93:ARG:N	1:A:93:ARG:CA	1:A:93:ARG:C	1:A:94:THR:N	10	2.17	4.54
(1,150)	1:A:93:ARG:N	1:A:93:ARG:CA	1:A:93:ARG:C	1:A:94:THR:N	10	2.17	4.54
(1,319)	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	1:A:55:LYS:N	10	2.07	4.37
(1,84)	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	1:A:55:LYS:N	10	2.07	4.37
(1,237)	1:A:3:TYR:N	1:A:3:TYR:CA	1:A:3:TYR:C	1:A:4:ASN:N	8	2.27	4.34
(1,2)	1:A:3:TYR:N	1:A:3:TYR:CA	1:A:3:TYR:C	1:A:4:ASN:N	8	2.27	4.34
(1,331)	1:A:61:GLN:N	1:A:61:GLN:CA	1:A:61:GLN:C	1:A:62:CYS:N	2	2.86	4.31
(1,96)	1:A:61:GLN:N	1:A:61:GLN:CA	1:A:61:GLN:C	1:A:62:CYS:N	2	2.86	4.31
(1,282)	1:A:27:PRO:N	1:A:27:PRO:CA	1:A:27:PRO:C	1:A:28:PRO:N	7	2.67	4.03
(1,47)	1:A:27:PRO:N	1:A:27:PRO:CA	1:A:27:PRO:C	1:A:28:PRO:N	7	2.67	4.03
(1,233)	1:A:140:LEU:N	1:A:140:LEU:CA	1:A:140:LEU:C	1:A:141:PHE:N	11	2.51	3.87
(1,468)	1:A:140:LEU:N	1:A:140:LEU:CA	1:A:140:LEU:C	1:A:141:PHE:N	11	2.51	3.87
(1,227)	1:A:137:TYR:N	1:A:137:TYR:CA	1:A:137:TYR:C	1:A:138:LEU:N	2	1.98	3.8
(1,462)	1:A:137:TYR:N	1:A:137:TYR:CA	1:A:137:TYR:C	1:A:138:LEU:N	2	1.98	3.8
(1,375)	1:A:88:THR:N	1:A:88:THR:CA	1:A:88:THR:C	1:A:89:GLU:N	10	2.08	3.54
(1,140)	1:A:88:THR:N	1:A:88:THR:CA	1:A:88:THR:C	1:A:89:GLU:N	10	2.08	3.54
(1,82)	1:A:53:THR:N	1:A:53:THR:CA	1:A:53:THR:C	1:A:54:SER:N	4	1.91	3.5
(1,317)	1:A:53:THR:N	1:A:53:THR:CA	1:A:53:THR:C	1:A:54:SER:N	4	1.91	3.5
(1,410)	1:A:107:PRO:N	1:A:107:PRO:CA	1:A:107:PRO:C	1:A:108:GLY:N	11	1.61	3.41
(1,175)	1:A:107:PRO:N	1:A:107:PRO:CA	1:A:107:PRO:C	1:A:108:GLY:N	11	1.61	3.41
(1,300)	1:A:42:TYR:N	1:A:42:TYR:CA	1:A:42:TYR:C	1:A:43:VAL:N	9	1.21	3.22
(1,65)	1:A:42:TYR:N	1:A:42:TYR:CA	1:A:42:TYR:C	1:A:43:VAL:N	9	1.21	3.22
(1,312)	1:A:49:LYS:N	1:A:49:LYS:CA	1:A:49:LYS:C	1:A:50:PRO:N	2	1.94	3.21
(1,77)	1:A:49:LYS:N	1:A:49:LYS:CA	1:A:49:LYS:C	1:A:50:PRO:N	2	1.94	3.21
(1,92)	1:A:59:ASP:N	1:A:59:ASP:CA	1:A:59:ASP:C	1:A:60:SER:N	6	2.13	3.16
(1,327)	1:A:59:ASP:N	1:A:59:ASP:CA	1:A:59:ASP:C	1:A:60:SER:N	6	2.13	3.16
	•			•		Continued on	nort nago



	ed from previous po						
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models	$\mathbf{Mean} \; (\; \circ \;)$	$\mathbf{Max} (\circ)$
(1,367)	1:A:84:GLY:N	1:A:84:GLY:CA	1:A:84:GLY:C	1:A:85:MET:N	6	2.45	3.15
(1,132)	1:A:84:GLY:N	1:A:84:GLY:CA	1:A:84:GLY:C	1:A:85:MET:N	6	2.45	3.15
(1,323)	1:A:57:LYS:N	1:A:57:LYS:CA	1:A:57:LYS:C	1:A:58:PHE:N	3	1.89	3.11
(1,88)	1:A:57:LYS:N	1:A:57:LYS:CA	1:A:57:LYS:C	1:A:58:PHE:N	3	1.89	3.11
(1,290)	1:A:35:ASP:N	1:A:35:ASP:CA	1:A:35:ASP:C	1:A:36:HIS:N	1	3.05	3.05
(1,55)	1:A:35:ASP:N	1:A:35:ASP:CA	1:A:35:ASP:C	1:A:36:HIS:N	1	3.05	3.05
(1,357)	1:A:77:GLU:N	1:A:77:GLU:CA	1:A:77:GLU:C	1:A:78:LYS:N	2	2.13	3.03
(1,122)	1:A:77:GLU:N	1:A:77:GLU:CA	1:A:77:GLU:C	1:A:78:LYS:N	2	2.13	3.03
(1,355)	1:A:76:GLU:N	1:A:76:GLU:CA	1:A:76:GLU:C	1:A:77:GLU:N	12	1.46	3.01
(1,120)	1:A:76:GLU:N	1:A:76:GLU:CA	1:A:76:GLU:C	1:A:77:GLU:N	12	1.46	3.01
(1,128)	1:A:80:ASP:N	1:A:80:ASP:CA	1:A:80:ASP:C	1:A:81:THR:N	4	2.03	2.89
(1,363)	1:A:80:ASP:N	1:A:80:ASP:CA	1:A:80:ASP:C	1:A:81:THR:N	4	2.03	2.89
(1,166)	1:A:101:HIS:N	1:A:101:HIS:CA	1:A:101:HIS:C	1:A:102:VAL:N	6	1.36	2.71
(1,401)	1:A:101:HIS:N	1:A:101:HIS:CA	1:A:101:HIS:C	1:A:102:VAL:N	6	1.36	2.71
(1,200)	1:A:122:ARG:N	1:A:122:ARG:CA	1:A:122:ARG:C	1:A:123:PHE:N	6	1.29	2.62
(1,435)	1:A:122:ARG:N	1:A:122:ARG:CA	1:A:122:ARG:C	1:A:123:PHE:N	6	1.29	2.62
(1,269)	1:A:19:VAL:N	1:A:19:VAL:CA	1:A:19:VAL:C	1:A:20:THR:N	2	1.52	2.58
(1,34)	1:A:19:VAL:N	1:A:19:VAL:CA	1:A:19:VAL:C	1:A:20:THR:N	2	1.52	2.58
(1,194)	1:A:118:SER:N	1:A:118:SER:CA	1:A:118:SER:C	1:A:119:ALA:N	1	2.53	2.53
(1,429)	1:A:118:SER:N	1:A:118:SER:CA	1:A:118:SER:C	1:A:119:ALA:N	1	2.53	2.53
(1,178)	1:A:109:PRO:N	1:A:109:PRO:CA	1:A:109:PRO:C	1:A:110:ASN:N	2	1.33	2.51
(1,413)	1:A:109:PRO:N	1:A:109:PRO:CA	1:A:109:PRO:C	1:A:110:ASN:N	2	1.33	2.51
(1,310)	1:A:47:SER:N	1:A:47:SER:CA	1:A:47:SER:C	1:A:48:GLY:N	2	2.09	2.49
(1,75)	1:A:47:SER:N	1:A:47:SER:CA	1:A:47:SER:C	1:A:48:GLY:N	2	2.09	2.49
(1,460)	1:A:136:SER:N	1:A:136:SER:CA	1:A:136:SER:C	1:A:137:TYR:N	6	1.64	2.46
(1,225)	1:A:136:SER:N	1:A:136:SER:CA	1:A:136:SER:C	1:A:137:TYR:N	6	1.64	2.46
(1,28)	1:A:16:GLN:N	1:A:16:GLN:CA	1:A:16:GLN:C	1:A:17:TYR:N	1	2.16	2.16
(1,263)	1:A:16:GLN:N	1:A:16:GLN:CA	1:A:16:GLN:C	1:A:17:TYR:N	1	2.16	2.16
(1,168)	1:A:102:VAL:N	1:A:102:VAL:CA	1:A:102:VAL:C	1:A:103:PHE:N	2	1.7	2.04
(1,403)	1:A:102:VAL:N	1:A:102:VAL:CA	1:A:102:VAL:C	1:A:103:PHE:N	2	1.7	2.04
(1,333)	1:A:62:CYS:N	1:A:62:CYS:CA	1:A:62:CYS:C	1:A:63:GLY:N	2	0.91	1.78
(1,98)	1:A:62:CYS:N	1:A:62:CYS:CA	1:A:62:CYS:C	1:A:63:GLY:N	2	0.91	1.78
(1,239)	1:A:4:ASN:N	1:A:4:ASN:CA	1:A:4:ASN:C	1:A:5:LYS:N	4	1.05	1.78
(1,4)	1:A:4:ASN:N	1:A:4:ASN:CA	1:A:4:ASN:C	1:A:5:LYS:N	4	1.05	1.78
(1,415)	1:A:110:ASN:N	1:A:110:ASN:CA	1:A:110:ASN:C	1:A:111:GLY:N	1	1.56	1.56
(1,180)	1:A:110:ASN:N	1:A:110:ASN:CA	1:A:110:ASN:C	1:A:111:GLY:N	1	1.56	1.56
(1,243)	1:A:6:GLU:N	1:A:6:GLU:CA	1:A:6:GLU:C	1:A:7:GLU:N	1	1.46	1.46
(1,8)	1:A:6:GLU:N	1:A:6:GLU:CA	1:A:6:GLU:C	1:A:7:GLU:N	1	1.46	1.46
(1,286)	1:A:32:GLU:N	1:A:32:GLU:CA	1:A:32:GLU:C	1:A:33:TYR:N	3	0.82	1.25
(1,51)	1:A:32:GLU:N	1:A:32:GLU:CA	1:A:32:GLU:C	1:A:33:TYR:N	3	0.82	1.25
(1,407)	1:A:105:ASP:N	1:A:105:ASP:CA	1:A:105:ASP:C	1:A:106:GLY:N	1	1.21	1.21
(1,172)	1:A:105:ASP:N	1:A:105:ASP:CA	1:A:105:ASP:C	1:A:106:GLY:N	1	1.21	1.21
(1,431)	1:A:119:ALA:N	1:A:119:ALA:CA	1:A:119:ALA:C	1:A:120:ALA:N	2	0.61	1.18
(1,196)	1:A:119:ALA:N	1:A:119:ALA:CA	1:A:119:ALA:C	1:A:120:ALA:N	2	0.61	1.18
(1,241)	1:A:5:LYS:N	1:A:5:LYS:CA	1:A:5:LYS:C	1:A:6:GLU:N	1	1.12	1.12
(1,6)	1:A:5:LYS:N	1:A:5:LYS:CA	1:A:5:LYS:C	1:A:6:GLU:N	1	1.12	1.12
(1,437)	1:A:123:PHE:N	1:A:123:PHE:CA	1:A:123:PHE:C	1:A:124:VAL:N	1	1.09	1.09
(1,202)	1:A:123:PHE:N	1:A:123:PHE:CA	1:A:123:PHE:C	1:A:124:VAL:N	1	1.09	1.09
(1,192)	1:A:117:ASN:N	1:A:117:ASN:CA	1:A:117:ASN:C	1:A:118:SER:N	1	0.92	0.92
(1,427)	1:A:117:ASN:N	1:A:117:ASN:CA	1:A:117:ASN:C	1:A:118:SER:N	1	0.92	0.92
(1,63)	1:A:41:LEU:N	1:A:41:LEU:CA	1:A:41:LEU:C	1:A:42:TYR:N	1	Continued on	0.91



	ed from previous po						
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models	$\mathbf{Mean} \; (\; \circ \;)$	$\mathbf{Max} (\circ)$
(1,298)	1:A:41:LEU:N	1:A:41:LEU:CA	1:A:41:LEU:C	1:A:42:TYR:N	1	0.91	0.91
(1,100)	1:A:64:TRP:N	1:A:64:TRP:CA	1:A:64:TRP:C	1:A:65:PRO:N	3	0.45	0.88
(1,335)	1:A:64:TRP:N	1:A:64:TRP:CA	1:A:64:TRP:C	1:A:65:PRO:N	3	0.45	0.88
(1,466)	1:A:139:HIS:N	1:A:139:HIS:CA	1:A:139:HIS:C	1:A:140:LEU:N	1	0.85	0.85
(1,231)	1:A:139:HIS:N	1:A:139:HIS:CA	1:A:139:HIS:C	1:A:140:LEU:N	1	0.85	0.85
(1,321)	1:A:55:LYS:N	1:A:55:LYS:CA	1:A:55:LYS:C	1:A:56:ASP:N	1	0.82	0.82
(1,86)	1:A:55:LYS:N	1:A:55:LYS:CA	1:A:55:LYS:C	1:A:56:ASP:N	1	0.82	0.82
(1,146)	1:A:91:ARG:N	1:A:91:ARG:CA	1:A:91:ARG:C	1:A:92:SER:N	1	0.48	0.48
(1,381)	1:A:91:ARG:N	1:A:91:ARG:CA	1:A:91:ARG:C	1:A:92:SER:N	1	0.48	0.48
(1,439)	1:A:124:VAL:N	1:A:124:VAL:CA	1:A:124:VAL:C	1:A:125:PRO:N	1	0.29	0.29
(1,204)	1:A:124:VAL:N	1:A:124:VAL:CA	1:A:124:VAL:C	1:A:125:PRO:N	1	0.29	0.29
(1,10)	1:A:7:GLU:N	1:A:7:GLU:CA	1:A:7:GLU:C	1:A:8:LYS:N	1	0.13	0.13
(1,245)	1:A:7:GLU:N	1:A:7:GLU:CA	1:A:7:GLU:C	1:A:8:LYS:N	1	0.13	0.13
(1,43)	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	1:A:25:THR:CA	1:A:25:THR:C	20	50.29	69.47
(1,278)	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	1:A:25:THR:CA	1:A:25:THR:C	20	50.29	69.47
(1,173)	1:A:105:ASP:C	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	20	52.06	68.6
(1,408)	1:A:105:ASP:C	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	20	52.06	68.6
(1,343)	1:A:68:THR:C	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	20	40.4	66.84
(1,108)	1:A:68:THR:C	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	20	40.4	66.84
(1,163)	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	1:A:100:GLY:CA	1:A:100:GLY:C	20	28.71	65.33
(1,398)	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	1:A:100:GLY:CA	1:A:100:GLY:C	20	28.71	65.33
(1,137)	1:A:86:ILE:C	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	20	49.01	63.56
(1,372)	1:A:86:ILE:C	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	20	49.01	63.56
(1,58)	1:A:37:LYS:C	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	20	22.23	52.32
(1,293)	1:A:37:LYS:C	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	20	22.23	52.32
(1,153)	1:A:94:THR:C	1:A:95:ALA:N	1:A:95:ALA:CA	1:A:95:ALA:C	14	6.79	19.74
(1,388)	1:A:94:THR:C	1:A:95:ALA:N	1:A:95:ALA:CA	1:A:95:ALA:C	14	6.79	19.74
(1,155)	1:A:95:ALA:C	1:A:96:ASP:N	1:A:96:ASP:CA	1:A:96:ASP:C	9	7.43	16.13
(1,390)	1:A:95:ALA:C	1:A:96:ASP:N	1:A:96:ASP:CA	1:A:96:ASP:C	9	7.43	16.13
(1,145)	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	1:A:91:ARG:CA	1:A:91:ARG:C	15	4.26	13.11
(1,380)	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	1:A:91:ARG:CA	1:A:91:ARG:C	15	4.26	13.11
(1,157)	1:A:96:ASP:C	1:A:97:SER:N	1:A:97:SER:CA	1:A:97:SER:C	10	5.08	12.44
(1,392)	1:A:96:ASP:C	1:A:97:SER:N	1:A:97:SER:CA	1:A:97:SER:C	10	5.08	12.44
(1,386)	1:A:93:ARG:C	1:A:94:THR:N	1:A:94:THR:CA	1:A:94:THR:C	9	2.7	9.26
(1,151)	1:A:93:ARG:C	1:A:94:THR:N	1:A:94:THR:CA	1:A:94:THR:C	9	2.7	9.26
(1,465)	1:A:138:LEU:C	1:A:139:HIS:N	1:A:139:HIS:CA	1:A:139:HIS:C	8	4.39	8.83
(1,230)	1:A:138:LEU:C	1:A:139:HIS:N	1:A:139:HIS:CA	1:A:139:HIS:C	8	4.39	8.83
(1,79)	1:A:51:LEU:C	1:A:52:PHE:N	1:A:52:PHE:CA	1:A:52:PHE:C	9	2.15	7.56
(1,314)	1:A:51:LEU:C	1:A:52:PHE:N	1:A:52:PHE:CA	1:A:52:PHE:C	9	2.15	7.56
(1,324)	1:A:57:LYS:C	1:A:58:PHE:N	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:C	7	2.83	7.27
(1,89)	1:A:57:LYS:C	1:A:58:PHE:N	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:C	7	2.83	7.27
(1,220)	1:A:132:GLU:C	1:A:133:GLY:N	1:A:133:GLY:CA	1:A:133:GLY:C	12	2.32	7.21
(1,455)	1:A:132:GLU:C	1:A:133:GLY:N	1:A:133:GLY:CA	1:A:133:GLY:C	12	2.32	7.21
(1,87)	1:A:56:ASP:C	1:A:57:LYS:N	1:A:57:LYS:CA	1:A:57:LYS:C	10	2.45	6.9
(1,322)	1:A:56:ASP:C	1:A:57:LYS:N	1:A:57:LYS:CA	1:A:57:LYS:C	10	2.45	6.9
(1,11)	1:A:7:GLU:C	1:A:8:LYS:N	1:A:8:LYS:CA	1:A:8:LYS:C	2	3.52	6.8
(1,246)	1:A:7:GLU:C	1:A:8:LYS:N	1:A:8:LYS:CA	1:A:8:LYS:C	2	3.52	6.8
(1,139)	1:A:87:ARG:C	1:A:88:THR:N	1:A:88:THR:CA	1:A:88:THR:C	7	2.6	6.6
(1,374)	1:A:87:ARG:C	1:A:88:THR:N	1:A:88:THR:CA	1:A:88:THR:C	7	2.6	6.6
(1,25)	1:A:14:ARG:C	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	4	2.54	5.84
(1,260)	1:A:14:ARG:C	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	4	2.54	5.84
(1,200)	1.11.11.11.11.01.0	1.11.10.11111111	1.11.10.171111.011	1.11.10.11.11	1	Continued on	



	ed from previous pe						
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models	$\mathbf{Mean} \; (\; \circ \;)$	$\mathbf{Max} (\circ)$
(1,451)	1:A:130:LYS:C	1:A:131:GLU:N	1:A:131:GLU:CA	1:A:131:GLU:C	7	2.37	5.49
(1,216)	1:A:130:LYS:C	1:A:131:GLU:N	1:A:131:GLU:CA	1:A:131:GLU:C	7	2.37	5.49
(1,224)	1:A:135:GLU:C	1:A:136:SER:N	1:A:136:SER:CA	1:A:136:SER:C	9	2.73	5.48
(1,459)	1:A:135:GLU:C	1:A:136:SER:N	1:A:136:SER:CA	1:A:136:SER:C	9	2.73	5.48
(1,159)	1:A:97:SER:C	1:A:98:HIS:N	1:A:98:HIS:CA	1:A:98:HIS:C	6	2.71	5.35
(1,394)	1:A:97:SER:C	1:A:98:HIS:N	1:A:98:HIS:CA	1:A:98:HIS:C	6	2.71	5.35
(1,181)	1:A:111:GLY:C	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	17	3.36	5.34
(1,416)	1:A:111:GLY:C	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	17	3.36	5.34
(1,378)	1:A:89:GLU:C	1:A:90:VAL:N	1:A:90:VAL:CA	1:A:90:VAL:C	8	1.48	4.91
(1,143)	1:A:89:GLU:C	1:A:90:VAL:N	1:A:90:VAL:CA	1:A:90:VAL:C	8	1.48	4.91
(1,176)	1:A:107:PRO:C	1:A:108:GLY:N	1:A:108:GLY:CA	1:A:108:GLY:C	6	2.52	4.69
(1,411)	1:A:107:PRO:C	1:A:108:GLY:N	1:A:108:GLY:CA	1:A:108:GLY:C	6	2.52	4.69
(1,74)	1:A:46:VAL:C	1:A:47:SER:N	1:A:47:SER:CA	1:A:47:SER:C	4	1.84	4.34
(1,309)	1:A:46:VAL:C	1:A:47:SER:N	1:A:47:SER:CA	1:A:47:SER:C	4	1.84	4.34
(1,382)	1:A:91:ARG:C	1:A:92:SER:N	1:A:92:SER:CA	1:A:92:SER:C	3	2.65	4.27
(1,147)	1:A:91:ARG:C	1:A:92:SER:N	1:A:92:SER:CA	1:A:92:SER:C	3	2.65	4.27
(1,50)	1:A:31:ASN:C	1:A:32:GLU:N	1:A:32:GLU:CA	1:A:32:GLU:C	5	2.71	4.12
(1,285)	1:A:31:ASN:C	1:A:32:GLU:N	1:A:32:GLU:CA	1:A:32:GLU:C	5	2.71	4.12
(1,133)	1:A:84:GLY:C	1:A:85:MET:N	1:A:85:MET:CA	1:A:85:MET:C	2	2.92	3.55
(1,368)	1:A:84:GLY:C	1:A:85:MET:N	1:A:85:MET:CA	1:A:85:MET:C	2	2.92	3.55
(1,414)	1:A:109:PRO:C	1:A:110:ASN:N	1:A:110:ASN:CA	1:A:110:ASN:C	7	1.27	3.39
(1,179)	1:A:109:PRO:C	1:A:110:ASN:N	1:A:110:ASN:CA	1:A:110:ASN:C	7	1.27	3.39
(1,362)	1:A:79:LEU:C	1:A:80:ASP:N	1:A:80:ASP:CA	1:A:80:ASP:C	4	2.23	3.35
(1,127)	1:A:79:LEU:C	1:A:80:ASP:N	1:A:80:ASP:CA	1:A:80:ASP:C	4	2.23	3.35
(1,364)	1:A:81:THR:C	1:A:82:SER:N	1:A:82:SER:CA	1:A:82:SER:C	3	1.73	3.31
(1,129)	1:A:81:THR:C	1:A:82:SER:N	1:A:82:SER:CA	1:A:82:SER:C	3	1.73	3.31
(1,52)	1:A:32:GLU:C	1:A:33:TYR:N	1:A:33:TYR:CA	1:A:33:TYR:C	3	1.36	3.23
(1,287)	1:A:32:GLU:C	1:A:33:TYR:N	1:A:33:TYR:CA	1:A:33:TYR:C	3	1.36	3.23
(1,467)	1:A:139:HIS:C	1:A:140:LEU:N	1:A:140:LEU:CA	1:A:140:LEU:C	3	1.1	3.22
(1,232)	1:A:139:HIS:C	1:A:140:LEU:N	1:A:140:LEU:CA	1:A:140:LEU:C	3	1.1	3.22
(1,254)	1:A:11:SER:C	1:A:12:LEU:N	1:A:12:LEU:CA	1:A:12:LEU:C	6	1.51	3.17
(1,19)	1:A:11:SER:C	1:A:12:LEU:N	1:A:12:LEU:CA	1:A:12:LEU:C	6	1.51	3.17
(1,238)	1:A:3:TYR:C	1:A:4:ASN:N	1:A:4:ASN:CA	1:A:4:ASN:C	3	1.25	3.14
(1,3)	1:A:3:TYR:C	1:A:4:ASN:N	1:A:4:ASN:CA	1:A:4:ASN:C	3	1.25	3.14
(1,56)	1:A:36:HIS:C	1:A:37:LYS:N	1:A:37:LYS:CA	1:A:37:LYS:C	5	0.9	2.91
(1,291)	1:A:36:HIS:C	1:A:37:LYS:N	1:A:37:LYS:CA	1:A:37:LYS:C	5	0.9	2.91
(1,318)	1:A:53:THR:C	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	7	1.59	2.73
(1,83)	1:A:53:THR:C	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	7	1.59	2.73
(1,9)	1:A:6:GLU:C	1:A:7:GLU:N	1:A:7:GLU:CA	1:A:7:GLU:C	1	2.53	2.53
(1,244)	1:A:6:GLU:C	1:A:7:GLU:N	1:A:7:GLU:CA	1:A:7:GLU:C	1	2.53	2.53
(1,330)	1:A:60:SER:C	1:A:61:GLN:N	1:A:61:GLN:CA	1:A:61:GLN:C	2	2.05	2.51
(1,95)	1:A:60:SER:C	1:A:61:GLN:N	1:A:61:GLN:CA	1:A:61:GLN:C	2	2.05	2.51
(1,102)	1:A:65:PRO:C	1:A:66:SER:N	1:A:66:SER:CA	1:A:66:SER:C	2	1.99	2.34
(1,337)	1:A:65:PRO:C	1:A:66:SER:N	1:A:66:SER:CA	1:A:66:SER:C	2	1.99	2.34
(1,461)	1:A:136:SER:C	1:A:137:TYR:N	1:A:137:TYR:CA	1:A:137:TYR:C	3	1.78	2.25
(1,226)	1:A:136:SER:C	1:A:137:TYR:N	1:A:137:TYR:CA	1:A:137:TYR:C	3	1.78	2.25
(1,99)	1:A:63:GLY:C	1:A:64:TRP:N	1:A:64:TRP:CA	1:A:64:TRP:C	2	1.57	2.17
(1,334)	1:A:63:GLY:C	1:A:64:TRP:N	1:A:64:TRP:CA	1:A:64:TRP:C	2	1.57	2.17
(1,218)	1:A:131:GLU:C	1:A:132:GLU:N	1:A:132:GLU:CA	1:A:132:GLU:C	3	1.27	2.06
(1,453)	1:A:131:GLU:C	1:A:132:GLU:N	1:A:132:GLU:CA	1:A:132:GLU:C	3	1.27	2.06
(1,91)	1:A:58:PHE:C	1:A:59:ASP:N	1:A:59:ASP:CA	1:A:59:ASP:C	3	0.76	1.67
· · · /		1	1	L	1	Continued on	mort mage



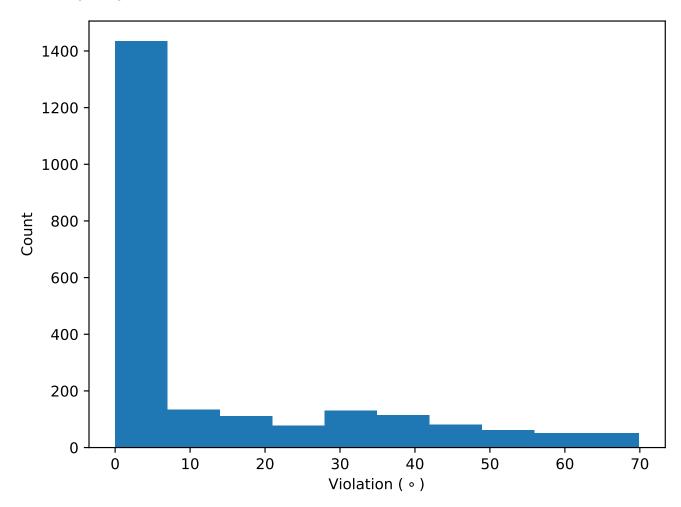
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models	Mean (o)	Max (°)
(1,326)	1:A:58:PHE:C	1:A:59:ASP:N	1:A:59:ASP:CA	1:A:59:ASP:C	3	0.76	1.67
(1,341)	1:A:67:PHE:C	1:A:68:THR:N	1:A:68:THR:CA	1:A:68:THR:C	2	1.03	1.59
(1,106)	1:A:67:PHE:C	1:A:68:THR:N	1:A:68:THR:CA	1:A:68:THR:C	2	1.03	1.59
(1,45)	1:A:25:THR:C	1:A:26:GLU:N	1:A:26:GLU:CA	1:A:26:GLU:C	1	1.42	1.42
(1,280)	1:A:25:THR:C	1:A:26:GLU:N	1:A:26:GLU:CA	1:A:26:GLU:C	1	1.42	1.42
(1,117)	1:A:74:GLU:C	1:A:75:VAL:N	1:A:75:VAL:CA	1:A:75:VAL:C	1	1.23	1.23
(1,104)	1:A:66:SER:C	1:A:67:PHE:N	1:A:67:PHE:CA	1:A:67:PHE:C	3	0.96	1.23
(1,339)	1:A:66:SER:C	1:A:67:PHE:N	1:A:67:PHE:CA	1:A:67:PHE:C	3	0.96	1.23
(1,352)	1:A:74:GLU:C	1:A:75:VAL:N	1:A:75:VAL:CA	1:A:75:VAL:C	1	1.23	1.23
(1,119)	1:A:75:VAL:C	1:A:76:GLU:N	1:A:76:GLU:CA	1:A:76:GLU:C	1	1.22	1.22
(1,354)	1:A:75:VAL:C	1:A:76:GLU:N	1:A:76:GLU:CA	1:A:76:GLU:C	1	1.22	1.22
(1,350)	1:A:73:GLU:C	1:A:74:GLU:N	1:A:74:GLU:CA	1:A:74:GLU:C	3	0.91	1.21
(1,115)	1:A:73:GLU:C	1:A:74:GLU:N	1:A:74:GLU:CA	1:A:74:GLU:C	3	0.91	1.21
(1,311)	1:A:48:GLY:C	1:A:49:LYS:N	1:A:49:LYS:CA	1:A:49:LYS:C	1	1.21	1.21
(1,76)	1:A:48:GLY:C	1:A:49:LYS:N	1:A:49:LYS:CA	1:A:49:LYS:C	1	1.21	1.21
(1,406)	1:A:104:ASN:C	1:A:105:ASP:N	1:A:105:ASP:CA	1:A:105:ASP:C	6	0.72	1.08
(1,171)	1:A:104:ASN:C	1:A:105:ASP:N	1:A:105:ASP:CA	1:A:105:ASP:C	6	0.72	1.08
(1,97)	1:A:61:GLN:C	1:A:62:CYS:N	1:A:62:CYS:CA	1:A:62:CYS:C	5	0.38	0.89
(1,332)	1:A:61:GLN:C	1:A:62:CYS:N	1:A:62:CYS:CA	1:A:62:CYS:C	5	0.38	0.89
(1,161)	1:A:98:HIS:C	1:A:99:LEU:N	1:A:99:LEU:CA	1:A:99:LEU:C	4	0.56	0.85
(1,396)	1:A:98:HIS:C	1:A:99:LEU:N	1:A:99:LEU:CA	1:A:99:LEU:C	4	0.56	0.85
(1,384)	1:A:92:SER:C	1:A:93:ARG:N	1:A:93:ARG:CA	1:A:93:ARG:C	3	0.67	0.81
(1,149)	1:A:92:SER:C	1:A:93:ARG:N	1:A:93:ARG:CA	1:A:93:ARG:C	3	0.67	0.81
(1,262)	1:A:15:MET:C	1:A:16:GLN:N	1:A:16:GLN:CA	1:A:16:GLN:C	1	0.77	0.77
(1,27)	1:A:15:MET:C	1:A:16:GLN:N	1:A:16:GLN:CA	1:A:16:GLN:C	1	0.77	0.77
(1,404)	1:A:102:VAL:C	1:A:103:PHE:N	1:A:103:PHE:CA	1:A:103:PHE:C	2	0.37	0.73
(1,169)	1:A:102:VAL:C	1:A:103:PHE:N	1:A:103:PHE:CA	1:A:103:PHE:C	2	0.37	0.73
(1,123)	1:A:77:GLU:C	1:A:78:LYS:N	1:A:78:LYS:CA	1:A:78:LYS:C	1	0.6	0.6
(1,358)	1:A:77:GLU:C	1:A:78:LYS:N	1:A:78:LYS:CA	1:A:78:LYS:C	1	0.6	0.6
(1,328)	1:A:59:ASP:C	1:A:60:SER:N	1:A:60:SER:CA	1:A:60:SER:C	1	0.48	0.48
(1,93)	1:A:59:ASP:C	1:A:60:SER:N	1:A:60:SER:CA	1:A:60:SER:C	1	0.48	0.48
(1,469)	1:A:140:LEU:C	1:A:141:PHE:N	1:A:141:PHE:CA	1:A:141:PHE:C	2	0.36	0.39
(1,234)	1:A:140:LEU:C	1:A:141:PHE:N	1:A:141:PHE:CA	1:A:141:PHE:C	2	0.36	0.39
(1,457)	1:A:134:TYR:C	1:A:135:GLU:N	1:A:135:GLU:CA	1:A:135:GLU:C	1	0.36	0.36
(1,222)	1:A:134:TYR:C	1:A:135:GLU:N	1:A:135:GLU:CA	1:A:135:GLU:C	1	0.36	0.36
(1,135)	1:A:85:MET:C	1:A:86:ILE:N	1:A:86:ILE:CA	1:A:86:ILE:C	1	0.25	0.25
(1,370)	1:A:85:MET:C	1:A:86:ILE:N	1:A:86:ILE:CA	1:A:86:ILE:C	1	0.25	0.25
(1,85)	1:A:54:SER:C	1:A:55:LYS:N	1:A:55:LYS:CA	1:A:55:LYS:C	1	0.14	0.14
(1,320)	1:A:54:SER:C	1:A:55:LYS:N	1:A:55:LYS:CA	1:A:55:LYS:C	1	0.14	0.14



9.8 All violated dihedral angleeee restraints

9.8.1 Histogram: Distribution of violations

The following histogram shows the distribution of violations in the ensemble.



9.8.2 Table: All violated dihedral angle restraints

The following table lists the violations in the ensemble sorted by violation value

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	$\textbf{Violation} \ (\ \circ\)$
(1,409)	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	1:A:107:PRO:N	6	69.9
(1,174)	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	1:A:107:PRO:N	6	69.9
(1,43)	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	1:A:25:THR:CA	1:A:25:THR:C	9	69.47
(1,278)	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	1:A:25:THR:CA	1:A:25:THR:C	9	69.47
(1,408)	1:A:105:ASP:C	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	16	68.6
(1,173)	1:A:105:ASP:C	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	16	68.6
(1,408)	1:A:105:ASP:C	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	13	68.39
(1,173)	1:A:105:ASP:C	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	13	68.39
(1,43)	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	1:A:25:THR:CA	1:A:25:THR:C	20	68.26
(1,278)	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	1:A:25:THR:CA	1:A:25:THR:C	20	68.26



Key	$\frac{d\ from\ previous\ po}{\mathbf{Atom-1}}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	1:A:107:PRO:N	8	68.01
(/ /	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	1:A:107:PRO:N	8	68.01
(1,343)	1:A:68:THR:C	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	1	66.84
(1,108)	1:A:68:THR:C	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	1	66.84
(1,343)	1:A:68:THR:C	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	8	66.32
(1,108)	1:A:68:THR:C	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	8	66.32
(1,94)	1:A:60:SER:N	1:A:60:SER:CA	1:A:60:SER:C	1:A:61:GLN:N	12	66.14
(1,329)	1:A:60:SER:N	1:A:60:SER:CA	1:A:60:SER:C	1:A:61:GLN:N	12	66.14
(1,408)	1:A:105:ASP:C	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	3	65.72
(1,173)	1:A:105:ASP:C	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	3	65.72
(1,94)	1:A:60:SER:N	1:A:60:SER:CA	1:A:60:SER:C	1:A:61:GLN:N	5	65.67
(1,329)	1:A:60:SER:N	1:A:60:SER:CA	1:A:60:SER:C	1:A:61:GLN:N	5	65.67
(1,408)	1:A:105:ASP:C	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	19	65.55
(1,173)	1:A:105:ASP:C	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	19	65.55
(1,408)	1:A:105:ASP:C	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	6	65.44
(1,173)	1:A:105:ASP:C	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	6	65.44
(1,343)	1:A:68:THR:C	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	19	65.36
(1,108)	1:A:68:THR:C	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	19	65.36
(1,398)	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	1:A:100:GLY:CA	1:A:100:GLY:C	19	65.33
(1,163)	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	1:A:100:GLY:CA	1:A:100:GLY:C	19	65.33
(1,43)	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	1:A:25:THR:CA	1:A:25:THR:C	13	64.85
(1,278)	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	1:A:25:THR:CA	1:A:25:THR:C	13	64.85
(1,94)	1:A:60:SER:N	1:A:60:SER:CA	1:A:60:SER:C	1:A:61:GLN:N	19	64.62
(1,329)	1:A:60:SER:N	1:A:60:SER:CA	1:A:60:SER:C	1:A:61:GLN:N	19	64.62
· · /	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	1:A:107:PRO:N	5	64.58
· /	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	1:A:107:PRO:N	5	64.58
(1,408)	1:A:105:ASP:C	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	17	64.33
(1,173)	1:A:105:ASP:C	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	17	64.33
(, ,	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	1:A:107:PRO:N	2	64.25
(1,174)	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	1:A:107:PRO:N	2	64.25
(1,372)	1:A:86:ILE:C	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	3	63.56
(1,137)	1:A:86:ILE:C	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	3	63.56
· · /	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	1:A:107:PRO:N	19	63.45
· · /	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	1:A:107:PRO:N	19	63.45
	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	13	63.31
(1,304)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	13	63.31
(1,343)	1:A:68:THR:C	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	6	63.16
(1,108)	1:A:68:THR:C	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	6	63.16
(1,69)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	19	63.07
(1,304)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	19	63.07
(1,408)	1:A:105:ASP:C	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	7	62.88
(1,173)	1:A:105:ASP:C	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	7	62.88
(1,408)	1:A:105:ASP:C	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	10	62.84
(1,173)	1:A:105:ASP:C	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	10	62.84
(1,408)	1:A:105:ASP:C	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	14	62.75
(1,173)	1:A:105:ASP:C	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	14	62.75
(1,409)	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	1:A:107:PRO:N	17	62.64
· · /	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	1:A:107:PRO:N	17	62.64
	1 A 100 OTT N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	1:A:107:PRO:N	9	62.54
(' /	1:A:106:GLY:N	1.A.100.GL1.CA	1.71.100.GL1.C	1.11.101.11.100.11	0	02.01
(1,409)	1:A:106:GLY:N 1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA 1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	1:A:107:PRO:N	9	62.54



(1,304) (1,372) (1,137)	Atom-1 1:A:44:ASP:N	Atom-2	$\mathbf{Atom} ext{-}3$	$\mathbf{Atom}\text{-}4$	Model	Violation (^)
(1,372)	1:A:44:ASP:N					$\textbf{Violation} \ (\ \circ \)$
· · /		1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	5	61.81
(1 127)	1:A:86:ILE:C	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	1	61.48
· · /	1:A:86:ILE:C	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	1	61.48
	1:A:105:ASP:C	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	18	61.22
(/ /	1:A:105:ASP:C	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	18	61.22
(1,344)	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	1:A:70:PRO:N	5	60.79
(1,109)	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	1:A:70:PRO:N	5	60.79
(1,43)	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	1:A:25:THR:CA	1:A:25:THR:C	2	60.78
(1,278)	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	1:A:25:THR:CA	1:A:25:THR:C	2	60.78
(1,372)	1:A:86:ILE:C	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	9	60.25
(1,137)	1:A:86:ILE:C	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	9	60.25
(' /	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	1:A:107:PRO:N	12	60.05
(' /	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	1:A:107:PRO:N	12	60.05
(1,69)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	20	59.89
(1,304)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	20	59.89
(1,372)	1:A:86:ILE:C	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	7	59.6
(1,137)	1:A:86:ILE:C	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	7	59.6
(1,409)	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	1:A:107:PRO:N	10	59.44
(1,174)	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	1:A:107:PRO:N	10	59.44
(1,43)	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	1:A:25:THR:CA	1:A:25:THR:C	18	59.09
(1,278)	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	1:A:25:THR:CA	1:A:25:THR:C	18	59.09
(1,43)	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	1:A:25:THR:CA	1:A:25:THR:C	3	59.01
(1,278)	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	1:A:25:THR:CA	1:A:25:THR:C	3	59.01
(1,409)	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	1:A:107:PRO:N	4	58.78
(1,174)	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	1:A:107:PRO:N	4	58.78
(1,343)	1:A:68:THR:C	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	12	58.24
(1,108)	1:A:68:THR:C	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	12	58.24
(1,94)	1:A:60:SER:N	1:A:60:SER:CA	1:A:60:SER:C	1:A:61:GLN:N	2	58.22
(1,329)	1:A:60:SER:N	1:A:60:SER:CA	1:A:60:SER:C	1:A:61:GLN:N	2	58.22
(1,344)	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	1:A:70:PRO:N	7	58.04
(1,109)	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	1:A:70:PRO:N	7	58.04
(1,408)	1:A:105:ASP:C	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	11	57.53
(1,173)	1:A:105:ASP:C	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	11	57.53
(1,344)	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	1:A:70:PRO:N	18	57.16
(1,109)	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	1:A:70:PRO:N	18	57.16
(1,409)	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	1:A:107:PRO:N	7	56.6
(1,174)	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	1:A:107:PRO:N	7	56.6
(1,69)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	2	55.96
(1,304)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	2	55.96
(1,372)	1:A:86:ILE:C	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	8	55.76
(1,137)	1:A:86:ILE:C	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	8	55.76
(1,43)	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	1:A:25:THR:CA	1:A:25:THR:C	10	55.75
(1,278)	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	1:A:25:THR:CA	1:A:25:THR:C	10	55.75
	1:A:68:THR:C	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	16	55.09
· /	1:A:68:THR:C	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	16	55.09
(' /	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	1:A:107:PRO:N	1	55.06
(/ /	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	1:A:107:PRO:N	1	55.06
(1,372)	1:A:86:ILE:C	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	13	54.68
(1,137)	1:A:86:ILE:C	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	13	54.68
· · /	1:A:105:ASP:C	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	8	54.5
(/ /	1:A:105:ASP:C	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	8	54.5



Key	$rac{d\ from\ previous\ po}{\mathbf{Atom-1}}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,409)	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	1:A:107:PRO:N	11	54.41
(1,174)	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	1:A:107:PRO:N	11	54.41
(1,43)	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	1:A:25:THR:CA	1:A:25:THR:C	5	54.27
(1,278)	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	1:A:25:THR:CA	1:A:25:THR:C	5	54.27
(1,43)	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	1:A:25:THR:CA	1:A:25:THR:C	17	53.9
(1,278)	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	1:A:25:THR:CA	1:A:25:THR:C	17	53.9
(1,43)	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	1:A:25:THR:CA	1:A:25:THR:C	8	53.63
(1,278)	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	1:A:25:THR:CA	1:A:25:THR:C	8	53.63
(1,94)	1:A:60:SER:N	1:A:60:SER:CA	1:A:60:SER:C	1:A:61:GLN:N	3	53.48
(1,329)	1:A:60:SER:N	1:A:60:SER:CA	1:A:60:SER:C	1:A:61:GLN:N	3	53.48
(1,409)	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	1:A:107:PRO:N	14	53.37
(1,174)	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	1:A:107:PRO:N	14	53.37
(1,94)	1:A:60:SER:N	1:A:60:SER:CA	1:A:60:SER:C	1:A:61:GLN:N	10	53.06
(1,329)	1:A:60:SER:N	1:A:60:SER:CA	1:A:60:SER:C	1:A:61:GLN:N	10	53.06
(1,344)	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	1:A:70:PRO:N	20	52.43
(1,109)	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	1:A:70:PRO:N	20	52.43
(1,58)	1:A:37:LYS:C	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	7	52.32
(1,293)	1:A:37:LYS:C	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	7	52.32
(1,412)	1:A:108:GLY:N	1:A:108:GLY:CA	1:A:108:GLY:C	1:A:109:PRO:N	14	51.98
(1,177)	1:A:108:GLY:N	1:A:108:GLY:CA	1:A:108:GLY:C	1:A:109:PRO:N	14	51.98
(1,344)	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	1:A:70:PRO:N	2	51.25
(1,109)	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	1:A:70:PRO:N	2	51.25
(1,372)	1:A:86:ILE:C	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	10	51.14
(1,137)	1:A:86:ILE:C	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	10	51.14
(1,417)	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	1:A:113:ARG:N	1	51.12
(1,182)	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	1:A:113:ARG:N	1	51.12
(1,409)	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	1:A:107:PRO:N	3	51.01
(1,174)	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	1:A:107:PRO:N	3	51.01
(1,43)	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	1:A:25:THR:CA	1:A:25:THR:C	12	50.94
(1,278)	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	1:A:25:THR:CA	1:A:25:THR:C	12	50.94
(1,372)	1:A:86:ILE:C	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	5	50.81
(1,137)	1:A:86:ILE:C	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	5	50.81
(1,372)	1:A:86:ILE:C	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	15	50.19
(1,137)	1:A:86:ILE:C	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	15	50.19
(1,344)	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	1:A:70:PRO:N	4	50.18
(1,109)	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	1:A:70:PRO:N	4	50.18
(1,343)	1:A:68:THR:C	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	17	50.11
(1,108)	1:A:68:THR:C	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	17	50.11
(1,412)	1:A:108:GLY:N	1:A:108:GLY:CA	1:A:108:GLY:C	1:A:109:PRO:N	19	49.99
(1,177)	1:A:108:GLY:N	1:A:108:GLY:CA	1:A:108:GLY:C	1:A:109:PRO:N	19	49.99
(1,412)	1:A:108:GLY:N	1:A:108:GLY:CA	1:A:108:GLY:C	1:A:109:PRO:N	11	49.94
(1,177)	1:A:108:GLY:N	1:A:108:GLY:CA	1:A:108:GLY:C	1:A:109:PRO:N	11	49.94
(1,343)	1:A:68:THR:C	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	2	49.83
(1,108)	1:A:68:THR:C	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	2	49.83
(1,417)	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	1:A:113:ARG:N	11	49.39
(1,182)	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	1:A:113:ARG:N	11	49.39
(1,344)	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	1:A:70:PRO:N	12	49.13
` '		1 1 00 7770 01	1. A. CO. I V.C. C	1:A:70:PRO:N	12	49.13
(1,109)	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	1.A.70.1 1tO.N	14	40.10
(1,109) $(1,417)$	1:A:69:LYS:N 1:A:112:LEU:N	1:A:69:LYS:CA 1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	1:A:113:ARG:N	8	49.12
· · /						



	ed from previous pe		A	A	3 f 1 1	T 7° 1 4° ()
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (°)
(1,137)	1:A:86:ILE:C	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	6	48.35
(1,43)	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	1:A:25:THR:CA	1:A:25:THR:C	15	48.09
(1,278)	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	1:A:25:THR:CA	1:A:25:THR:C	15	48.09
(1,412)	1:A:108:GLY:N	1:A:108:GLY:CA	1:A:108:GLY:C	1:A:109:PRO:N	20	47.89
(1,177)	1:A:108:GLY:N	1:A:108:GLY:CA	1:A:108:GLY:C	1:A:109:PRO:N	20	47.89
(1,408)	1:A:105:ASP:C	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	5	47.32
(1,173)	1:A:105:ASP:C	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	5	47.32
(1,372)	1:A:86:ILE:C	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	14	47.07
(1,137)	1:A:86:ILE:C	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	14	47.07
(1,417)	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	1:A:113:ARG:N	13	46.95
(1,182)	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	1:A:113:ARG:N	13	46.95
(1,372)	1:A:86:ILE:C	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	2	46.92
(1,137)	1:A:86:ILE:C	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	2	46.92
(1,344)	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	1:A:70:PRO:N	8	46.39
(1,109)	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	1:A:70:PRO:N	8	46.39
(1,43)	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	1:A:25:THR:CA	1:A:25:THR:C	11	46.23
(1,278)	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	1:A:25:THR:CA	1:A:25:THR:C	11	46.23
(1,372)	1:A:86:ILE:C	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	4	46.17
(1,137)	1:A:86:ILE:C	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	4	46.17
(1,417)	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	1:A:113:ARG:N	12	46.09
(1,182)	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	1:A:113:ARG:N	12	46.09
(1,408)	1:A:105:ASP:C	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	15	45.32
(1,173)	1:A:105:ASP:C	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	15	45.32
(1,338)	1:A:66:SER:N	1:A:66:SER:CA	1:A:66:SER:C	1:A:67:PHE:N	7	45.31
(1,103)	1:A:66:SER:N	1:A:66:SER:CA	1:A:66:SER:C	1:A:67:PHE:N	7	45.31
(1,69)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	12	45.12
(1,304)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	12	45.12
(1,59)	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	1:A:39:GLU:N	8	45.11
(1,294)	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	1:A:39:GLU:N	8	45.11
(1,43)	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	1:A:25:THR:CA	1:A:25:THR:C	19	45.06
(1,278)	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	1:A:25:THR:CA	1:A:25:THR:C	19	45.06
(1,372)	1:A:86:ILE:C	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	12	45.04
(1,137)	1:A:86:ILE:C	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	12	45.04
(1,94)	1:A:60:SER:N	1:A:60:SER:CA	1:A:60:SER:C	1:A:61:GLN:N	11	44.86
(1,69)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	15	44.86
(1,329)	1:A:60:SER:N	1:A:60:SER:CA	1:A:60:SER:C	1:A:61:GLN:N	11	44.86
(1,304)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	15	44.86
(1,94)	1:A:60:SER:N	1:A:60:SER:CA	1:A:60:SER:C	1:A:61:GLN:N	14	44.6
(1,329)	1:A:60:SER:N	1:A:60:SER:CA	1:A:60:SER:C	1:A:61:GLN:N	14	44.6
(1,94)	1:A:60:SER:N	1:A:60:SER:CA	1:A:60:SER:C	1:A:61:GLN:N	16	44.51
(1,329)	1:A:60:SER:N	1:A:60:SER:CA	1:A:60:SER:C	1:A:61:GLN:N	16	44.51
(1,372)	1:A:86:ILE:C	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	11	44.49
(1,372) $(1,137)$	1:A:86:ILE:C	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	11	44.49
(1,344)	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	1:A:70:PRO:N	9	44.37
(1,109)	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	1:A:70:PRO:N	9	44.37
(1,103) $(1,417)$	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	1:A:113:ARG:N	18	44.26
(1,417) $(1,182)$	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	1:A:113:ARG:N	18	44.26
(1,132) $(1,417)$	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	1:A:113:ARG:N	2	43.85
(1,417) $(1,182)$	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	1:A:113:ARG:N	2	43.85
(1,162) $(1,46)$	1:A:26:GLU:N	1:A:112.LEU.CA 1:A:26:GLU:CA	1:A:26:GLU:C	1:A:173.ARG.N 1:A:27:PRO:N	2	43.84
(1,40) $(1,281)$	1:A:26:GLU:N	1:A:26:GLU:CA 1:A:26:GLU:CA	1:A:26:GLU:C	1:A:27:PRO:N 1:A:27:PRO:N	2	43.84
(1,201)	1.A.20.GLU:N	1.A.20.GLU.UA	1.A.20.GLU.U	1.A.21.F NO:N		43.04



	ed from previous po					
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	$\textbf{Violation} \ (\ \circ \)$
(1,408)	1:A:105:ASP:C	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	1	43.7
(1,173)	1:A:105:ASP:C	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	1	43.7
(1,43)	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	1:A:25:THR:CA	1:A:25:THR:C	14	43.67
(1,43)	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	1:A:25:THR:CA	1:A:25:THR:C	16	43.67
(1,278)	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	1:A:25:THR:CA	1:A:25:THR:C	14	43.67
(1,278)	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	1:A:25:THR:CA	1:A:25:THR:C	16	43.67
(1,46)	1:A:26:GLU:N	1:A:26:GLU:CA	1:A:26:GLU:C	1:A:27:PRO:N	17	43.63
(1,281)	1:A:26:GLU:N	1:A:26:GLU:CA	1:A:26:GLU:C	1:A:27:PRO:N	17	43.63
(1,417)	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	1:A:113:ARG:N	10	43.56
(1,182)	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	1:A:113:ARG:N	10	43.56
(1,59)	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	1:A:39:GLU:N	3	43.45
(1,294)	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	1:A:39:GLU:N	3	43.45
(1,69)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	4	43.25
(1,304)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	4	43.25
(1,372)	1:A:86:ILE:C	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	18	43.23
(1,137)	1:A:86:ILE:C	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	18	43.23
(1,344)	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	1:A:70:PRO:N	1	43.22
(1,109)	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	1:A:70:PRO:N	1	43.22
(1,43)	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	1:A:25:THR:CA	1:A:25:THR:C	4	43.14
(1,278)	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	1:A:25:THR:CA	1:A:25:THR:C	4	43.14
(1,408)	1:A:105:ASP:C	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	12	43.12
(1,173)	1:A:105:ASP:C	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	12	43.12
(1,372)	1:A:86:ILE:C	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	16	42.88
(1,137)	1:A:86:ILE:C	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	16	42.88
(1,94)	1:A:60:SER:N	1:A:60:SER:CA	1:A:60:SER:C	1:A:61:GLN:N	6	42.07
(1,329)	1:A:60:SER:N	1:A:60:SER:CA	1:A:60:SER:C	1:A:61:GLN:N	6	42.07
(1,338)	1:A:66:SER:N	1:A:66:SER:CA	1:A:66:SER:C	1:A:67:PHE:N	18	41.95
(1,103)	1:A:66:SER:N	1:A:66:SER:CA	1:A:66:SER:C	1:A:67:PHE:N	18	41.95
(1,417)	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	1:A:113:ARG:N	7	41.84
(1,182)	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	1:A:113:ARG:N	7	41.84
(1,69)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	10	41.46
(1,304)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	10	41.46
(1,417)	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	1:A:113:ARG:N	14	41.35
(1,338)	1:A:66:SER:N	1:A:66:SER:CA	1:A:66:SER:C	1:A:67:PHE:N	3	41.35
(1,182)		1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	1:A:113:ARG:N	I .	41.35
(1,103)	1:A:66:SER:N	1:A:66:SER:CA	1:A:66:SER:C	1:A:67:PHE:N	3	41.35
(1,338)	1:A:66:SER:N	1:A:66:SER:CA	1:A:66:SER:C	1:A:67:PHE:N	2	40.93
(1,103)	1:A:66:SER:N	1:A:66:SER:CA	1:A:66:SER:C	1:A:67:PHE:N	2	40.93
(1,343)	1:A:68:THR:C	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	7	40.84
(1,108)	1:A:68:THR:C	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	7	40.84
(1,338)	1:A:66:SER:N	1:A:66:SER:CA	1:A:66:SER:C	1:A:67:PHE:N	11	40.64
(1,300) $(1,103)$	1:A:66:SER:N	1:A:66:SER:CA	1:A:66:SER:C	1:A:67:PHE:N	11	40.64
(1,338)	1:A:66:SER:N	1:A:66:SER:CA	1:A:66:SER:C	1:A:67:PHE:N	4	40.63
(1,300) $(1,103)$	1:A:66:SER:N	1:A:66:SER:CA	1:A:66:SER:C	1:A:67:PHE:N	4	40.63
(1,69)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	8	40.61
(1,304)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	8	40.61
(1,304) $(1,412)$	1:A:108:GLY:N	1:A:108:GLY:CA	1:A:108:GLY:C	1:A:109:PRO:N	8	40.49
(1,338)	1:A:66:SER:N	1:A:66:SER:CA	1:A:66:SER:C	1:A:67:PHE:N	8	40.49
(1,333) $(1,177)$	1:A:108:GLY:N	1:A:108:GLY:CA	1:A:108:GLY:C	1:A:109:PRO:N	8	40.49
(1,103)	1:A:66:SER:N	1:A:66:SER:CA	1:A:66:SER:C	1:A:67:PHE:N	8	40.49
(1,69)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	14	40.24
(1,00)	1.11.11.11.11.11.11	1	1	1.11.10.1111.11		ed on nert nage



	ed from previous po					
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (\circ)
(1,412)	1:A:108:GLY:N	1:A:108:GLY:CA	1:A:108:GLY:C	1:A:109:PRO:N	13	40.24
(1,304)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	14	40.24
(1,177)	1:A:108:GLY:N	1:A:108:GLY:CA	1:A:108:GLY:C	1:A:109:PRO:N	13	40.24
(1,417)	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	1:A:113:ARG:N	5	40.1
(1,182)	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	1:A:113:ARG:N	5	40.1
(1,338)	1:A:66:SER:N	1:A:66:SER:CA	1:A:66:SER:C	1:A:67:PHE:N	19	40.05
(1,103)	1:A:66:SER:N	1:A:66:SER:CA	1:A:66:SER:C	1:A:67:PHE:N	19	40.05
(1,59)	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	1:A:39:GLU:N	18	39.98
(1,294)	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	1:A:39:GLU:N	18	39.98
(1,58)	1:A:37:LYS:C	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	2	39.94
(1,293)	1:A:37:LYS:C	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	2	39.94
(1,338)	1:A:66:SER:N	1:A:66:SER:CA	1:A:66:SER:C	1:A:67:PHE:N	9	39.92
(1,103)	1:A:66:SER:N	1:A:66:SER:CA	1:A:66:SER:C	1:A:67:PHE:N	9	39.92
(1,46)	1:A:26:GLU:N	1:A:26:GLU:CA	1:A:26:GLU:C	1:A:27:PRO:N	4	39.81
(1,281)	1:A:26:GLU:N	1:A:26:GLU:CA	1:A:26:GLU:C	1:A:27:PRO:N	4	39.81
(1,417)	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	1:A:113:ARG:N	17	39.61
(1,182)	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	1:A:113:ARG:N	17	39.61
(1,338)	1:A:66:SER:N	1:A:66:SER:CA	1:A:66:SER:C	1:A:67:PHE:N	6	39.24
(1,103)	1:A:66:SER:N	1:A:66:SER:CA	1:A:66:SER:C	1:A:67:PHE:N	6	39.24
(1,69)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	9	39.05
(1,304)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	9	39.05
(1,69)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	1	38.91
(1,338)	1:A:66:SER:N	1:A:66:SER:CA	1:A:66:SER:C	1:A:67:PHE:N	10	38.91
(1,304)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	1	38.91
(1,103)	1:A:66:SER:N	1:A:66:SER:CA	1:A:66:SER:C	1:A:67:PHE:N	10	38.91
(1,417)	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	1:A:113:ARG:N	6	38.85
(1,182)	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	1:A:113:ARG:N	6	38.85
(1,69)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	11	38.8
(1,304)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	11	38.8
(1,59)	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	1:A:39:GLU:N	1	38.54
(1,294)	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	1:A:39:GLU:N	1	38.54
(1,344)	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	1:A:70:PRO:N	19	38.37
(1,109)	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	1:A:70:PRO:N	19	38.37
(1,46)	1:A:26:GLU:N	1:A:26:GLU:CA	1:A:26:GLU:C	1:A:27:PRO:N	3	38.32
(1,281)	1:A:26:GLU:N	1:A:26:GLU:CA	1:A:26:GLU:C	1:A:27:PRO:N	3	38.32
(1,343)	1:A:68:THR:C	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	4	38.21
(1,108)	1:A:68:THR:C	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	4	38.21
(1,46)	1:A:26:GLU:N	1:A:26:GLU:CA	1:A:26:GLU:C	1:A:27:PRO:N	14	38.13
(1,281)	1:A:26:GLU:N	1:A:26:GLU:CA	1:A:26:GLU:C	1:A:27:PRO:N	14	38.13
(1,94)	1:A:60:SER:N	1:A:60:SER:CA	1:A:60:SER:C	1:A:61:GLN:N	9	38.11
(1,329)	1:A:60:SER:N	1:A:60:SER:CA	1:A:60:SER:C	1:A:61:GLN:N	9	38.11
(1,344)	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	1:A:70:PRO:N	14	38.02
(1,109)	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	1:A:70:PRO:N	14	38.02
(1,372)	1:A:86:ILE:C	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	17	37.8
(1,137)	1:A:86:ILE:C	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	17	37.8
(1,46)	1:A:26:GLU:N	1:A:26:GLU:CA	1:A:26:GLU:C	1:A:27:PRO:N	1	37.71
(1,281)	1:A:26:GLU:N	1:A:26:GLU:CA	1:A:26:GLU:C	1:A:27:PRO:N	1	37.71
(1,344)	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	1:A:70:PRO:N	3	37.5
(1,109)	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	1:A:70:PRO:N	3	37.5
(1,59)	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	1:A:39:GLU:N	10	37.33
(1,294)	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	1:A:39:GLU:N	10	37.33



Key	$rac{ed\ from\ previous\ po}{\mathbf{Atom-1}}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,58)	1:A:37:LYS:C	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	16	37.3
(1,293)	1:A:37:LYS:C	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	16	37.3
(1,372)	1:A:86:ILE:C	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	19	37.12
(1,137)	1:A:86:ILE:C	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	19	37.12
(1,46)	1:A:26:GLU:N	1:A:26:GLU:CA	1:A:26:GLU:C	1:A:27:PRO:N	18	37.06
(1,281)	1:A:26:GLU:N	1:A:26:GLU:CA	1:A:26:GLU:C	1:A:27:PRO:N	18	37.06
(1,69)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	16	37.0
(1,304)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	16	37.0
(1,46)	1:A:26:GLU:N	1:A:26:GLU:CA	1:A:26:GLU:C	1:A:27:PRO:N	6	36.87
(1,281)	1:A:26:GLU:N	1:A:26:GLU:CA	1:A:26:GLU:C	1:A:27:PRO:N	6	36.87
(1,46)	1:A:26:GLU:N	1:A:26:GLU:CA	1:A:26:GLU:C	1:A:27:PRO:N	8	36.64
(1,281)	1:A:26:GLU:N	1:A:26:GLU:CA	1:A:26:GLU:C	1:A:27:PRO:N	8	36.64
(1,417)	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	1:A:113:ARG:N	3	36.58
(1,182)	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	1:A:113:ARG:N	3	36.58
(1,43)	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	1:A:25:THR:CA	1:A:25:THR:C	1	36.5
(1,278)	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	1:A:25:THR:CA	1:A:25:THR:C	1	36.5
(1,46)	1:A:26:GLU:N	1:A:26:GLU:CA	1:A:26:GLU:C	1:A:27:PRO:N	10	36.42
(1,281)	1:A:26:GLU:N	1:A:26:GLU:CA	1:A:26:GLU:C	1:A:27:PRO:N	10	36.42
(1,398)	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	1:A:100:GLY:CA	1:A:100:GLY:C	11	35.91
(1,163)	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	1:A:100:GLY:CA	1:A:100:GLY:C	11	35.91
(1,379)	1:A:90:VAL:N	1:A:90:VAL:CA	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	10	35.88
(1,144)	1:A:90:VAL:N	1:A:90:VAL:CA	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	10	35.88
(1,408)	1:A:105:ASP:C	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	20	35.81
(1,173)	1:A:105:ASP:C	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	20	35.81
(1,398)	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	1:A:100:GLY:CA	1:A:100:GLY:C	14	35.79
(1,163)	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	1:A:100:GLY:CA	1:A:100:GLY:C	14	35.79
(1,379)	1:A:90:VAL:N	1:A:90:VAL:CA	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	5	35.74
(1,144)	1:A:90:VAL:N	1:A:90:VAL:CA	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	5	35.74
(1,409)	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	1:A:107:PRO:N	16	35.71
(1,174)	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	1:A:107:PRO:N	16	35.71
(1,69)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	6	35.64
(1,304)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	6	35.64
(1,412)	1:A:108:GLY:N	1:A:108:GLY:CA	1:A:108:GLY:C	1:A:109:PRO:N	12	35.58
(1,177)	1:A:108:GLY:N	1:A:108:GLY:CA	1:A:108:GLY:C	1:A:109:PRO:N	12	35.58
(1,69)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	3	35.42
(1,304)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	3	35.42
(1,338)	1:A:66:SER:N	1:A:66:SER:CA	1:A:66:SER:C	1:A:67:PHE:N	14	35.28
(1,103)	1:A:66:SER:N	1:A:66:SER:CA	1:A:66:SER:C	1:A:67:PHE:N	14	35.28
(1,59)	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	1:A:39:GLU:N	7	35.2
(1,294)	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	1:A:39:GLU:N	7	35.2
(1,343)	1:A:68:THR:C	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	5	34.78
(1,108)	1:A:68:THR:C	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	5	34.78
(1,58)	1:A:37:LYS:C	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	19	34.73
(1,293)	1:A:37:LYS:C	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	19	34.73
(1,398)	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	1:A:100:GLY:CA	1:A:100:GLY:C	17	34.71
(1,163)	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	1:A:100:GLY:CA	1:A:100:GLY:C	17	34.71
(1,373)	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	1:A:88:THR:N	14	34.58
(1,138)	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	1:A:88:THR:N	14	34.58
(1,343)	1:A:68:THR:C	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	9	34.56
(1,108)	1:A:68:THR:C	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	9	34.56
(1,373)	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	1:A:88:THR:N	10	34.52
` ' /		l .	I .	l .		ed on nert nage



	ed from previous po		A		36 11	T 71 1 + 1 ()
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (°)
(1,138)	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	1:A:88:THR:N	10	34.52
(1,409)	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	1:A:107:PRO:N	13	34.41
(1,174)	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	1:A:107:PRO:N	13	34.41
(1,69)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	18	34.25
(1,304)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	18	34.25
(1,417)	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	1:A:113:ARG:N	16	34.12
(1,182)	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	1:A:113:ARG:N	16	34.12
(1,58)	1:A:37:LYS:C	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	4	33.89
(1,293)	1:A:37:LYS:C	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	4	33.89
(1,417)	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	1:A:113:ARG:N	20	33.87
(1,182)	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	1:A:113:ARG:N	20	33.87
(1,46)	1:A:26:GLU:N	1:A:26:GLU:CA	1:A:26:GLU:C	1:A:27:PRO:N	13	33.69
(1,372)	1:A:86:ILE:C	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	20	33.69
(1,281)	1:A:26:GLU:N	1:A:26:GLU:CA	1:A:26:GLU:C	1:A:27:PRO:N	13	33.69
(1,137)	1:A:86:ILE:C	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	20	33.69
(1,344)	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	1:A:70:PRO:N	17	33.47
(1,109)	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	1:A:70:PRO:N	17	33.47
(1,398)	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	1:A:100:GLY:CA	1:A:100:GLY:C	20	33.28
(1,163)	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	1:A:100:GLY:CA	1:A:100:GLY:C	20	33.28
(1,46)	1:A:26:GLU:N	1:A:26:GLU:CA	1:A:26:GLU:C	1:A:27:PRO:N	16	33.09
(1,281)	1:A:26:GLU:N	1:A:26:GLU:CA	1:A:26:GLU:C	1:A:27:PRO:N	16	33.09
(1,417)	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	1:A:113:ARG:N	4	33.02
(1,182)	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	1:A:113:ARG:N	4	33.02
(1,409)	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	1:A:107:PRO:N	15	32.73
(1,174)	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	1:A:107:PRO:N	15	32.73
(1,338)	1:A:66:SER:N	1:A:66:SER:CA	1:A:66:SER:C	1:A:67:PHE:N	13	32.57
(1,103)	1:A:66:SER:N	1:A:66:SER:CA	1:A:66:SER:C	1:A:67:PHE:N	13	32.57
(1,408)	1:A:105:ASP:C	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	4	32.42
(1,173)	1:A:105:ASP:C	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	4	32.42
(1,379)	1:A:90:VAL:N	1:A:90:VAL:CA	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	7	32.35
(1,344)	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	1:A:70:PRO:N	10	32.35
(1,144)	1:A:90:VAL:N	1:A:90:VAL:CA	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	7	32.35
(1,109)	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	1:A:70:PRO:N	10	32.35
(1,59)	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	1:A:39:GLU:N	9	32.29
(1,294)	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	1:A:39:GLU:N	9	32.29
(1,344)	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	1:A:70:PRO:N	15	32.2
(1,109)	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	1:A:70:PRO:N	15	32.2
(1,398)	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	1:A:100:GLY:CA	1:A:100:GLY:C	1	31.94
(1,163)	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	1:A:100:GLY:CA	1:A:100:GLY:C	1	31.94
(1,59)	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	1:A:39:GLU:N	4	31.78
(1,294)	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	1:A:39:GLU:N	4	31.78
(1,398)	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	1:A:100:GLY:CA	1:A:100:GLY:C	12	31.3
(1,163)	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	1:A:100:GLY:CA	1:A:100:GLY:C	12	31.3
(1,46)	1:A:26:GLU:N	1:A:26:GLU:CA	1:A:26:GLU:C	1:A:27:PRO:N	11	31.29
(1,281)	1:A:26:GLU:N	1:A:26:GLU:CA	1:A:26:GLU:C	1:A:27:PRO:N	11	31.29
(1,69)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	7	31.24
(1,304)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	7	31.24
(1,59)	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	1:A:39:GLU:N	19	31.16
(1,417)	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	1:A:113:ARG:N	19	31.16
(1,294)	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	1:A:39:GLU:N	19	31.16
(1,182)	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	1:A:113:ARG:N	19	31.16
(1,182)	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	1:A:113:ARG:N		31.16



Key	$egin{array}{c} ed \ from \ previous \ poly \ egin{array}{c} \mathbf{Atom-1} \end{array}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,398)	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	1:A:100:GLY:CA	1:A:100:GLY:C	9	31.12
(1,163)	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	1:A:100:GLY:CA	1:A:100:GLY:C	9	31.12
(1,344)	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	1:A:70:PRO:N	6	31.11
(1,109)	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	1:A:70:PRO:N	6	31.11
(1,69)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	17	31.08
(1,304)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	17	31.08
(1,398)	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	1:A:100:GLY:CA	1:A:100:GLY:C	6	30.9
(1,163)	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	1:A:100:GLY:CA	1:A:100:GLY:C	6	30.9
(1,417)	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	1:A:113:ARG:N	15	30.76
(1,379)	1:A:90:VAL:N	1:A:90:VAL:CA	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	4	30.76
(1,182)	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	1:A:113:ARG:N	15	30.76
(1,144)	1:A:90:VAL:N	1:A:90:VAL:CA	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	4	30.76
(1,373)	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	1:A:88:THR:N	17	30.72
(1,138)	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	1:A:88:THR:N	17	30.72
(1,59)	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	1:A:39:GLU:N	13	30.61
(1,294)	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	1:A:39:GLU:N	13	30.61
(1,340)	1:A:67:PHE:N	1:A:67:PHE:CA	1:A:67:PHE:C	1:A:68:THR:N	7	30.49
(1,105)	1:A:67:PHE:N	1:A:67:PHE:CA	1:A:67:PHE:C	1:A:68:THR:N	7	30.49
(1,373)	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	1:A:88:THR:N	7	30.45
(1,138)	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	1:A:88:THR:N	7	30.45
(1,46)	1:A:26:GLU:N	1:A:26:GLU:CA	1:A:26:GLU:C	1:A:27:PRO:N	7	30.41
(1,281)	1:A:26:GLU:N	1:A:26:GLU:CA	1:A:26:GLU:C	1:A:27:PRO:N	7	30.41
(1,46)	1:A:26:GLU:N	1:A:26:GLU:CA	1:A:26:GLU:C	1:A:27:PRO:N	12	30.33
(1,281)	1:A:26:GLU:N	1:A:26:GLU:CA	1:A:26:GLU:C	1:A:27:PRO:N	12	30.33
(1,412)	1:A:108:GLY:N	1:A:108:GLY:CA	1:A:108:GLY:C	1:A:109:PRO:N	17	30.31
(1,177)	1:A:108:GLY:N	1:A:108:GLY:CA	1:A:108:GLY:C	1:A:109:PRO:N	17	30.31
(1,379)	1:A:90:VAL:N	1:A:90:VAL:CA	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	3	30.21
(1,144)	1:A:90:VAL:N	1:A:90:VAL:CA	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	3	30.21
(1,343)	1:A:68:THR:C	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	20	30.14
(1,108)	1:A:68:THR:C	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	20	30.14
(1,340)	1:A:67:PHE:N	1:A:67:PHE:CA	1:A:67:PHE:C	1:A:68:THR:N	13	30.09
(1,105)	1:A:67:PHE:N	1:A:67:PHE:CA	1:A:67:PHE:C	1:A:68:THR:N	13	30.09
(1,58)	1:A:37:LYS:C	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	10	30.01
(1,293)	1:A:37:LYS:C	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	10	30.01
(1,58)	1:A:37:LYS:C	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	17	29.96
(1,293)	1:A:37:LYS:C	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	17	29.96
(1,59)	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	1:A:39:GLU:N	5	29.69
(1,294)	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	1:A:39:GLU:N	5	29.69
(1,412)	1:A:108:GLY:N	1:A:108:GLY:CA	1:A:108:GLY:C	1:A:109:PRO:N	9	29.54
(1,177)	1:A:108:GLY:N	1:A:108:GLY:CA	1:A:108:GLY:C	1:A:109:PRO:N	9	29.54
(1,343)	1:A:68:THR:C	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	15	29.51
(1,108)	1:A:68:THR:C	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	15	29.51
(1,412)	1:A:108:GLY:N	1:A:108:GLY:CA	1:A:108:GLY:C	1:A:109:PRO:N	15	29.5
(1,177)	1:A:108:GLY:N	1:A:108:GLY:CA	1:A:108:GLY:C	1:A:109:PRO:N	15	29.5
(1,379)	1:A:90:VAL:N	1:A:90:VAL:CA	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	8	29.47
(1,144)	1:A:90:VAL:N	1:A:90:VAL:CA	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	8	29.47
(1,340)	1:A:67:PHE:N	1:A:67:PHE:CA	1:A:67:PHE:C	1:A:68:THR:N	3	29.19
(1,105)	1:A:67:PHE:N	1:A:67:PHE:CA	1:A:67:PHE:C	1:A:68:THR:N	3	29.19
(1,373)	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	1:A:88:THR:N	3	29.14
(1,138)	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	1:A:88:THR:N	3	29.14
(1,343)	1:A:68:THR:C	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	10	29.12
` ' '		i	1	1		ed on nert nage



	d from previous pe		A	A	3.6.1.1	T 70 1 10 ()
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (°)
(1,108)	1:A:68:THR:C	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	10	29.12
(1,58)	1:A:37:LYS:C	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	11	28.96
(1,293)	1:A:37:LYS:C	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	11	28.96
(1,373)	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	1:A:88:THR:N	6	28.72
(1,138)	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	1:A:88:THR:N	6	28.72
(1,373)	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	1:A:88:THR:N	8	28.71
(1,138)	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	1:A:88:THR:N	8	28.71
(1,379)	1:A:90:VAL:N	1:A:90:VAL:CA	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	9	28.64
(1,144)	1:A:90:VAL:N	1:A:90:VAL:CA	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	9	28.64
(1,343)	1:A:68:THR:C	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	3	28.56
(1,108)	1:A:68:THR:C	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	3	28.56
(1,409)	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	1:A:107:PRO:N	20	28.45
(1,174)	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	1:A:107:PRO:N	20	28.45
(1,398)	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	1:A:100:GLY:CA	1:A:100:GLY:C	16	28.39
(1,163)	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	1:A:100:GLY:CA	1:A:100:GLY:C	16	28.39
(1,46)	1:A:26:GLU:N	1:A:26:GLU:CA	1:A:26:GLU:C	1:A:27:PRO:N	19	28.38
(1,281)	1:A:26:GLU:N	1:A:26:GLU:CA	1:A:26:GLU:C	1:A:27:PRO:N	19	28.38
(1,344)	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	1:A:70:PRO:N	16	27.94
(1,109)	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	1:A:70:PRO:N	16	27.94
(1,412)	1:A:108:GLY:N	1:A:108:GLY:CA	1:A:108:GLY:C	1:A:109:PRO:N	10	27.69
(1,177)	1:A:108:GLY:N	1:A:108:GLY:CA	1:A:108:GLY:C	1:A:109:PRO:N	10	27.69
(1,338)	1:A:66:SER:N	1:A:66:SER:CA	1:A:66:SER:C	1:A:67:PHE:N	15	27.39
(1,103)	1:A:66:SER:N	1:A:66:SER:CA	1:A:66:SER:C	1:A:67:PHE:N	15	27.39
(1,343)	1:A:68:THR:C	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	18	27.01
(1,108)	1:A:68:THR:C	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	18	27.01
(1,398)	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	1:A:100:GLY:CA	1:A:100:GLY:C	18	26.58
(1,163)	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	1:A:100:GLY:CA	1:A:100:GLY:C	18	26.58
(1,46)	1:A:26:GLU:N	1:A:26:GLU:CA	1:A:26:GLU:C	1:A:27:PRO:N	5	26.44
(1,281)	1:A:26:GLU:N	1:A:26:GLU:CA	1:A:26:GLU:C	1:A:27:PRO:N	5	26.44
(1,373)	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	1:A:88:THR:N	11	26.4
(1,138)	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	1:A:88:THR:N	11	26.4
(1,340)	1:A:67:PHE:N	1:A:67:PHE:CA	1:A:67:PHE:C	1:A:68:THR:N	11	26.27
(1,105)	1:A:67:PHE:N	1:A:67:PHE:CA	1:A:67:PHE:C	1:A:68:THR:N	11	26.27
(1,398)	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	1:A:100:GLY:CA	1:A:100:GLY:C	4	26.19
(1,163)	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	1:A:100:GLY:CA	1:A:100:GLY:C	4	26.19
(1,344)	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	1:A:70:PRO:N	13	26.13
(1,109)	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	1:A:70:PRO:N	13	26.13
(1,340)	1:A:67:PHE:N	1:A:67:PHE:CA	1:A:67:PHE:C	1:A:68:THR:N	4	26.1
(1,105)	1:A:67:PHE:N	1:A:67:PHE:CA	1:A:67:PHE:C	1:A:68:THR:N	4	26.1
(1,340)	1:A:67:PHE:N	1:A:67:PHE:CA	1:A:67:PHE:C	1:A:68:THR:N	14	26.05
(1,105)	1:A:67:PHE:N	1:A:67:PHE:CA	1:A:67:PHE:C	1:A:68:THR:N	14	26.05
(1,412)	1:A:108:GLY:N	1:A:108:GLY:CA	1:A:108:GLY:C	1:A:109:PRO:N	5	25.6
(1,177)	1:A:108:GLY:N	1:A:108:GLY:CA	1:A:108:GLY:C	1:A:109:PRO:N	5	25.6
(1,398)	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	1:A:100:GLY:CA	1:A:100:GLY:C	13	25.4
(1,163)	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	1:A:100:GLY:CA	1:A:100:GLY:C	13	25.4
(1,43)	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	1:A:25:THR:CA	1:A:25:THR:C	7	25.21
(1,278)	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	1:A:25:THR:CA	1:A:25:THR:C	7	25.21
(1,398)	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	1:A:100:GLY:CA	1:A:100:GLY:C	10	24.99
(1,163)	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	1:A:100:GLY:CA	1:A:100:GLY:C	10	24.99
(1,379)	1:A:90:VAL:N	1:A:90:VAL:CA	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	16	24.57
(1,0101 l						



Key	$rac{ed\ from\ previous\ po}{\mathbf{Atom-1}}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,417)	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	1:A:113:ARG:N	9	24.22
(1,182)	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	1:A:113:ARG:N	9	24.22
(1,43)	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	1:A:25:THR:CA	1:A:25:THR:C	6	24.21
(1,278)	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	1:A:25:THR:CA	1:A:25:THR:C	6	24.21
(1,373)	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	1:A:88:THR:N	16	23.98
(1,138)	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	1:A:88:THR:N	16	23.98
(1,58)	1:A:37:LYS:C	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	15	23.95
(1,293)	1:A:37:LYS:C	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	15	23.95
(1,379)	1:A:90:VAL:N	1:A:90:VAL:CA	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	15	23.92
(1,144)	1:A:90:VAL:N	1:A:90:VAL:CA	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	15	23.92
(1,379)	1:A:90:VAL:N	1:A:90:VAL:CA	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	18	23.3
(1,144)	1:A:90:VAL:N	1:A:90:VAL:CA	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	18	23.3
(1,379)	1:A:90:VAL:N	1:A:90:VAL:CA	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	1	23.26
(1,144)	1:A:90:VAL:N	1:A:90:VAL:CA	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	1	23.26
(1,94)	1:A:60:SER:N	1:A:60:SER:CA	1:A:60:SER:C	1:A:61:GLN:N	15	23.23
(1,329)	1:A:60:SER:N	1:A:60:SER:CA	1:A:60:SER:C	1:A:61:GLN:N	15	23.23
(1,525) $(1,59)$	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	1:A:39:GLU:N	12	22.72
(1,294)	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	1:A:39:GLU:N	12	22.72
(1,234) $(1,379)$	1:A:90:VAL:N	1:A:90:VAL:CA	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	13	22.54
(1,344)	1:A:90:VAL:N	1:A:90:VAL:CA	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	13	22.54
(1,412)	1:A:108:GLY:N	1:A:108:GLY:CA	1:A:108:GLY:C	1:A:109:PRO:N	1	22.48
(1,172) $(1,177)$	1:A:108:GLY:N	1:A:108:GLY:CA	1:A:108:GLY:C	1:A:109:PRO:N	1	22.48
(1,343)	1:A:68:THR:C	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	14	22.29
(1,108)	1:A:68:THR:C	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	14	22.29
(1,398)	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	1:A:100:GLY:CA	1:A:100:GLY:C	8	22.22
(1,163)	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	1:A:100:GLY:CA	1:A:100:GLY:C	8	22.22
(1,412)	1:A:108:GLY:N	1:A:108:GLY:CA	1:A:108:GLY:C	1:A:109:PRO:N	16	22.16
(1,177)	1:A:108:GLY:N	1:A:108:GLY:CA	1:A:108:GLY:C	1:A:109:PRO:N	16	22.16
(1,398)	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	1:A:100:GLY:CA	1:A:100:GLY:C	7	21.76
(1,340)	1:A:67:PHE:N	1:A:67:PHE:CA	1:A:67:PHE:C	1:A:68:THR:N	9	21.76
(1,163)	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	1:A:100:GLY:CA	1:A:100:GLY:C	7	21.76
(1,105)	1:A:67:PHE:N	1:A:67:PHE:CA	1:A:67:PHE:C	1:A:68:THR:N	9	21.76
(1,344)	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	1:A:70:PRO:N	11	21.73
(1,109)	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	1:A:70:PRO:N	11	21.73
(1,59)	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	1:A:39:GLU:N	20	21.71
(1,294)	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	1:A:39:GLU:N	20	21.71
(1,412)	1:A:108:GLY:N	1:A:108:GLY:CA	1:A:108:GLY:C	1:A:109:PRO:N	2	21.48
(1,177)	1:A:108:GLY:N	1:A:108:GLY:CA	1:A:108:GLY:C	1:A:109:PRO:N	2	21.48
(1,379)	1:A:90:VAL:N	1:A:90:VAL:CA	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	11	21.28
(1,144)	1:A:90:VAL:N	1:A:90:VAL:CA	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	11	21.28
(1,58)	1:A:37:LYS:C	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	20	21.25
(1,293)	1:A:37:LYS:C	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	20	21.25
(1,398)	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	1:A:100:GLY:CA	1:A:100:GLY:C	2	21.15
(1,163)	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	1:A:100:GLY:CA	1:A:100:GLY:C	2	21.15
(1,373)	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	1:A:88:THR:N	15	20.96
(1,138)	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	1:A:88:THR:N	15	20.96
(1,389)	1:A:95:ALA:N	1:A:95:ALA:CA	1:A:95:ALA:C	1:A:96:ASP:N	16	20.75
(1,154)	1:A:95:ALA:N	1:A:95:ALA:CA	1:A:95:ALA:C	1:A:96:ASP:N	16	20.75
(1,373)	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	1:A:88:THR:N	12	20.49
(1,138)	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	1:A:88:THR:N	12	20.49
(1,58)	1:A:37:LYS:C	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	1	20.4
\ //					- C .:	ed on nert nage



	ed from previous po	*				
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (\circ)
(1,293)	1:A:37:LYS:C	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	1	20.4
(1,338)	1:A:66:SER:N	1:A:66:SER:CA	1:A:66:SER:C	1:A:67:PHE:N	16	20.28
(1,103)	1:A:66:SER:N	1:A:66:SER:CA	1:A:66:SER:C	1:A:67:PHE:N	16	20.28
(1,379)	1:A:90:VAL:N	1:A:90:VAL:CA	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	17	19.75
(1,144)	1:A:90:VAL:N	1:A:90:VAL:CA	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	17	19.75
(1,388)	1:A:94:THR:C	1:A:95:ALA:N	1:A:95:ALA:CA	1:A:95:ALA:C	20	19.74
(1,153)	1:A:94:THR:C	1:A:95:ALA:N	1:A:95:ALA:CA	1:A:95:ALA:C	20	19.74
(1,398)	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	1:A:100:GLY:CA	1:A:100:GLY:C	15	19.73
(1,163)	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	1:A:100:GLY:CA	1:A:100:GLY:C	15	19.73
(1,373)	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	1:A:88:THR:N	9	19.69
(1,138)	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	1:A:88:THR:N	9	19.69
(1,46)	1:A:26:GLU:N	1:A:26:GLU:CA	1:A:26:GLU:C	1:A:27:PRO:N	15	19.68
(1,281)	1:A:26:GLU:N	1:A:26:GLU:CA	1:A:26:GLU:C	1:A:27:PRO:N	15	19.68
(1,340)	1:A:67:PHE:N	1:A:67:PHE:CA	1:A:67:PHE:C	1:A:68:THR:N	17	19.64
(1,105)	1:A:67:PHE:N	1:A:67:PHE:CA	1:A:67:PHE:C	1:A:68:THR:N	17	19.64
(1,383)	1:A:92:SER:N	1:A:92:SER:CA	1:A:92:SER:C	1:A:93:ARG:N	14	19.35
(1,148)	1:A:92:SER:N	1:A:92:SER:CA	1:A:92:SER:C	1:A:93:ARG:N	14	19.35
(1,340)	1:A:67:PHE:N	1:A:67:PHE:CA	1:A:67:PHE:C	1:A:68:THR:N	5	19.23
(1,105)	1:A:67:PHE:N	1:A:67:PHE:CA	1:A:67:PHE:C	1:A:68:THR:N	5	19.23
(1,409)	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	1:A:107:PRO:N	18	19.14
(1,174)	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	1:A:107:PRO:N	18	19.14
(1,379)	1:A:90:VAL:N	1:A:90:VAL:CA	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	12	19.07
(1,144)	1:A:90:VAL:N	1:A:90:VAL:CA	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	12	19.07
(1,383)	1:A:92:SER:N	1:A:92:SER:CA	1:A:92:SER:C	1:A:93:ARG:N	2	19.05
(1,148)	1:A:92:SER:N	1:A:92:SER:CA	1:A:92:SER:C	1:A:93:ARG:N	2	19.05
(1,408)	1:A:105:ASP:C	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	2	18.93
(1,173)	1:A:105:ASP:C	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	2	18.93
(1,389)	1:A:95:ALA:N	1:A:95:ALA:CA	1:A:95:ALA:C	1:A:96:ASP:N	20	18.87
(1,154)	1:A:95:ALA:N	1:A:95:ALA:CA	1:A:95:ALA:C	1:A:96:ASP:N	20	18.87
(1,379)	1:A:90:VAL:N	1:A:90:VAL:CA	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	2	18.76
(1,144)	1:A:90:VAL:N	1:A:90:VAL:CA	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	2	18.76
(1,340)	1:A:67:PHE:N	1:A:67:PHE:CA	1:A:67:PHE:C	1:A:68:THR:N	12	18.33
(1,105)	1:A:67:PHE:N	1:A:67:PHE:CA	1:A:67:PHE:C	1:A:68:THR:N	12	18.33
(1,373)	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	1:A:88:THR:N	1	18.01
(1,138)	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	1:A:88:THR:N	1	18.01
(1,373)	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	1:A:88:THR:N	2	17.82
(1,138)	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	1:A:88:THR:N	2	17.82
(1,379)	1:A:90:VAL:N	1:A:90:VAL:CA	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	20	17.66
(1,144)	1:A:90:VAL:N	1:A:90:VAL:CA	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	20	17.66
(1,412)	1:A:108:GLY:N	1:A:108:GLY:CA	1:A:108:GLY:C	1:A:109:PRO:N	18	17.61
(1,177)	1:A:108:GLY:N	1:A:108:GLY:CA	1:A:108:GLY:C	1:A:109:PRO:N	18	17.61
(1,369)	1:A:85:MET:N	1:A:85:MET:CA	1:A:85:MET:C	1:A:86:ILE:N	15	17.21
(1,134)	1:A:85:MET:N	1:A:85:MET:CA	1:A:85:MET:C	1:A:86:ILE:N	15	17.21
(1,369)	1:A:85:MET:N	1:A:85:MET:CA	1:A:85:MET:C	1:A:86:ILE:N	18	17.02
(1,134)	1:A:85:MET:N	1:A:85:MET:CA	1:A:85:MET:C	1:A:86:ILE:N	18	17.02
(1,59)	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	1:A:39:GLU:N	2	17.0
(1,294)	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	1:A:39:GLU:N	2	17.0
(1,412)	1:A:108:GLY:N	1:A:108:GLY:CA	1:A:108:GLY:C	1:A:109:PRO:N	6	16.91
(1,177)	1:A:108:GLY:N	1:A:108:GLY:CA	1:A:108:GLY:C	1:A:109:PRO:N	6	16.91
(1,94)	1:A:60:SER:N	1:A:60:SER:CA	1:A:60:SER:C	1:A:61:GLN:N	8	16.85
(1,329)	1:A:60:SER:N	1:A:60:SER:CA	1:A:60:SER:C	1:A:61:GLN:N	8	16.85
/		1	1	1	Continu	ed on next page



Key	$rac{ed\ from\ previous\ po}{\mathbf{Atom-1}}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,369)	1:A:85:MET:N	1:A:85:MET:CA	1:A:85:MET:C	1:A:86:ILE:N	12	16.8
(1,134)	1:A:85:MET:N	1:A:85:MET:CA	1:A:85:MET:C	1:A:86:ILE:N	12	16.8
(1,398)	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	1:A:100:GLY:CA	1:A:100:GLY:C	3	16.65
(1,379)	1:A:90:VAL:N	1:A:90:VAL:CA	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	19	16.65
(1,163)	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	1:A:100:GLY:CA	1:A:100:GLY:C	3	16.65
(1,144)	1:A:90:VAL:N	1:A:90:VAL:CA	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	19	16.65
(1,383)	1:A:92:SER:N	1:A:92:SER:CA	1:A:92:SER:C	1:A:93:ARG:N	20	16.6
(1,148)	1:A:92:SER:N	1:A:92:SER:CA	1:A:92:SER:C	1:A:93:ARG:N	20	16.6
(1,388)	1:A:94:THR:C	1:A:95:ALA:N	1:A:95:ALA:CA	1:A:95:ALA:C	19	16.56
(1,153)	1:A:94:THR:C	1:A:95:ALA:N	1:A:95:ALA:CA	1:A:95:ALA:C	19	16.56
(1,58)	1:A:37:LYS:C	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	14	16.55
(1,293)	1:A:37:LYS:C	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	14	16.55
(1,383)	1:A:92:SER:N	1:A:92:SER:CA	1:A:92:SER:C	1:A:93:ARG:N	11	16.53
(1,148)	1:A:92:SER:N	1:A:92:SER:CA	1:A:92:SER:C	1:A:93:ARG:N	11	16.53
(1,387)	1:A:94:THR:N	1:A:94:THR:CA	1:A:94:THR:C	1:A:95:ALA:N	19	16.19
(1,152)	1:A:94:THR:N	1:A:94:THR:CA	1:A:94:THR:C	1:A:95:ALA:N	19	16.19
(1,379)	1:A:90:VAL:N	1:A:90:VAL:CA	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	6	16.16
(1,144)	1:A:90:VAL:N	1:A:90:VAL:CA	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	6	16.16
(1,390)	1:A:95:ALA:C	1:A:96:ASP:N	1:A:96:ASP:CA	1:A:96:ASP:C	16	16.13
(1,155)	1:A:95:ALA:C	1:A:96:ASP:N	1:A:96:ASP:CA	1:A:96:ASP:C	16	16.13
(1,383)	1:A:92:SER:N	1:A:92:SER:CA	1:A:92:SER:C	1:A:93:ARG:N	1	16.06
(1,148)	1:A:92:SER:N	1:A:92:SER:CA	1:A:92:SER:C	1:A:93:ARG:N	1	16.06
(1,389)	1:A:95:ALA:N	1:A:95:ALA:CA	1:A:95:ALA:C	1:A:96:ASP:N	14	15.99
(1,154)	1:A:95:ALA:N	1:A:95:ALA:CA	1:A:95:ALA:C	1:A:96:ASP:N	14	15.99
(1,58)	1:A:37:LYS:C	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	6	15.9
(1,293)	1:A:37:LYS:C	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	6	15.9
(1,383)	1:A:92:SER:N	1:A:92:SER:CA	1:A:92:SER:C	1:A:93:ARG:N	4	15.78
(1,148)	1:A:92:SER:N	1:A:92:SER:CA	1:A:92:SER:C	1:A:93:ARG:N	4	15.78
(1,49)	1:A:31:ASN:N	1:A:31:ASN:CA	1:A:31:ASN:C	1:A:32:GLU:N	2	15.65
(1,284)	1:A:31:ASN:N	1:A:31:ASN:CA	1:A:31:ASN:C	1:A:32:GLU:N	2	15.65
(1,390)	1:A:95:ALA:C	1:A:96:ASP:N	1:A:96:ASP:CA	1:A:96:ASP:C	20	15.29
(1,155)	1:A:95:ALA:C	1:A:96:ASP:N	1:A:96:ASP:CA	1:A:96:ASP:C	20	15.29
(1,408)	1:A:105:ASP:C	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	9	14.88
(1,173)	1:A:105:ASP:C	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	9	14.88
(1,59)	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	1:A:39:GLU:N	14	14.79
(1,294)	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	1:A:39:GLU:N	14	14.79
(1,373)	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	1:A:88:THR:N	4	14.74
(1,138)	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	1:A:88:THR:N	4	14.74
(1,412)	1:A:108:GLY:N	1:A:108:GLY:CA	1:A:108:GLY:C	1:A:109:PRO:N	7	14.73
(1,177)	1:A:108:GLY:N	1:A:108:GLY:CA	1:A:108:GLY:C	1:A:109:PRO:N	7	14.73
(1,390)	1:A:95:ALA:C	1:A:96:ASP:N	1:A:96:ASP:CA	1:A:96:ASP:C	14	14.62
(1,155)	1:A:95:ALA:C	1:A:96:ASP:N	1:A:96:ASP:CA	1:A:96:ASP:C 1:A:32:GLU:N	14	14.62
(1,49)	1:A:31:ASN:N	1:A:31:ASN:CA 1:A:31:ASN:CA	1:A:31:ASN:C		18	14.58
(1,284)	1:A:31:ASN:N		1:A:31:ASN:C	1:A:32:GLU:N	18	14.58
(1,391)	1:A:96:ASP:N	1:A:96:ASP:CA	1:A:96:ASP:C	1:A:97:SER:N	16 16	14.49
(1,156)	1:A:96:ASP:N 1:A:85:MET:N	1:A:96:ASP:CA 1:A:85:MET:CA	1:A:96:ASP:C	1:A:97:SER:N	10	14.49
(1,369)	1:A:85:MET:N 1:A:85:MET:N	1:A:85:MET:CA 1:A:85:MET:CA	1:A:85:MET:C 1:A:85:MET:C	1:A:86:ILE:N 1:A:86:ILE:N	10	14.4 14.4
(1,134)	1:A:85:ME1:N 1:A:68:THR:C	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	13	14.4
(1,343) $(1,108)$	1:A:68:THR:C 1:A:68:THR:C	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA 1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	13	14.32
` ' /	1:A:08:1HR:C 1:A:37:LYS:C	1:A:38:GLU:N	1:A:09:LYS:CA 1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	13	14.32
(1,58)	1:A:37:L13:U	1:A:30:GLU:IN	1:A:30:GLU:UA	1:A:30:GLU:U		ed on nert nage



	ed from previous po	*				
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (\circ)
(1,293)	1:A:37:LYS:C	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	12	14.04
(1,391)	1:A:96:ASP:N	1:A:96:ASP:CA	1:A:96:ASP:C	1:A:97:SER:N	14	13.78
(1,156)	1:A:96:ASP:N	1:A:96:ASP:CA	1:A:96:ASP:C	1:A:97:SER:N	14	13.78
(1,49)	1:A:31:ASN:N	1:A:31:ASN:CA	1:A:31:ASN:C	1:A:32:GLU:N	10	13.72
(1,284)	1:A:31:ASN:N	1:A:31:ASN:CA	1:A:31:ASN:C	1:A:32:GLU:N	10	13.72
(1,373)	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	1:A:88:THR:N	5	13.7
(1,138)	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	1:A:88:THR:N	5	13.7
(1,49)	1:A:31:ASN:N	1:A:31:ASN:CA	1:A:31:ASN:C	1:A:32:GLU:N	14	13.63
(1,284)	1:A:31:ASN:N	1:A:31:ASN:CA	1:A:31:ASN:C	1:A:32:GLU:N	14	13.63
(1,380)	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	1:A:91:ARG:CA	1:A:91:ARG:C	17	13.11
(1,145)	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	1:A:91:ARG:CA	1:A:91:ARG:C	17	13.11
(1,383)	1:A:92:SER:N	1:A:92:SER:CA	1:A:92:SER:C	1:A:93:ARG:N	12	13.09
(1,148)	1:A:92:SER:N	1:A:92:SER:CA	1:A:92:SER:C	1:A:93:ARG:N	12	13.09
(1,340)	1:A:67:PHE:N	1:A:67:PHE:CA	1:A:67:PHE:C	1:A:68:THR:N	16	12.77
(1,105)	1:A:67:PHE:N	1:A:67:PHE:CA	1:A:67:PHE:C	1:A:68:THR:N	16	12.77
(1,383)	1:A:92:SER:N	1:A:92:SER:CA	1:A:92:SER:C	1:A:93:ARG:N	9	12.46
(1,148)	1:A:92:SER:N	1:A:92:SER:CA	1:A:92:SER:C	1:A:93:ARG:N	9	12.46
(1,388)	1:A:94:THR:C	1:A:95:ALA:N	1:A:95:ALA:CA	1:A:95:ALA:C	14	12.45
(1,153)	1:A:94:THR:C	1:A:95:ALA:N	1:A:95:ALA:CA	1:A:95:ALA:C	14	12.45
(1,392)	1:A:96:ASP:C	1:A:97:SER:N	1:A:97:SER:CA	1:A:97:SER:C	14	12.44
(1,157)	1:A:96:ASP:C	1:A:97:SER:N	1:A:97:SER:CA	1:A:97:SER:C	14	12.44
(1,340)	1:A:67:PHE:N	1:A:67:PHE:CA	1:A:67:PHE:C	1:A:68:THR:N	10	12.43
(1,105)	1:A:67:PHE:N	1:A:67:PHE:CA	1:A:67:PHE:C	1:A:68:THR:N	10	12.43
(1,380)	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	1:A:91:ARG:CA	1:A:91:ARG:C	10	12.4
(1,145)	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	1:A:91:ARG:CA	1:A:91:ARG:C	10	12.4
(1,391)	1:A:96:ASP:N	1:A:96:ASP:CA	1:A:96:ASP:C	1:A:97:SER:N	2	12.3
(1,156)	1:A:96:ASP:N	1:A:96:ASP:CA	1:A:96:ASP:C	1:A:97:SER:N	2	12.3
(1,388)	1:A:94:THR:C	1:A:95:ALA:N	1:A:95:ALA:CA	1:A:95:ALA:C	16	12.21
(1,153)	1:A:94:THR:C	1:A:95:ALA:N	1:A:95:ALA:CA	1:A:95:ALA:C	16	12.21
(1,392)	1:A:96:ASP:C	1:A:97:SER:N	1:A:97:SER:CA	1:A:97:SER:C	16	12.12
(1,157)	1:A:96:ASP:C	1:A:97:SER:N	1:A:97:SER:CA	1:A:97:SER:C	16	12.12
(1,49)	1:A:31:ASN:N	1:A:31:ASN:CA	1:A:31:ASN:C	1:A:32:GLU:N	3	12.09
(1,284)	1:A:31:ASN:N	1:A:31:ASN:CA	1:A:31:ASN:C	1:A:32:GLU:N	3	12.09
(1,369)	1:A:85:MET:N	1:A:85:MET:CA	1:A:85:MET:C	1:A:86:ILE:N	8	11.94
(1,134)	1:A:85:MET:N	1:A:85:MET:CA	1:A:85:MET:C	1:A:86:ILE:N	8	11.94
(1,387)	1:A:94:THR:N	1:A:94:THR:CA	1:A:94:THR:C	1:A:95:ALA:N	16	11.79
(1,152)	1:A:94:THR:N	1:A:94:THR:CA	1:A:94:THR:C	1:A:95:ALA:N	16	11.79
(1,387)	1:A:94:THR:N	1:A:94:THR:CA	1:A:94:THR:C	1:A:95:ALA:N	20	11.74
(1,152)	1:A:94:THR:N	1:A:94:THR:CA	1:A:94:THR:C	1:A:95:ALA:N	20	11.74
(1,383)	1:A:92:SER:N	1:A:92:SER:CA	1:A:92:SER:C	1:A:93:ARG:N	8	11.42
(1,148)	1:A:92:SER:N	1:A:92:SER:CA	1:A:92:SER:C	1:A:93:ARG:N	8	11.42
(1,58)	1:A:37:LYS:C	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	5	11.39
(1,293)	1:A:37:LYS:C	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	5	11.39
(1,230) $(1,46)$	1:A:26:GLU:N	1:A:26:GLU:CA	1:A:26:GLU:C	1:A:27:PRO:N	20	11.37
(1,10) $(1,281)$	1:A:26:GLU:N	1:A:26:GLU:CA	1:A:26:GLU:C	1:A:27:PRO:N	20	11.37
(1,345)	1:A:70:PRO:N	1:A:70:PRO:CA	1:A:70:PRO:C	1:A:71:ILE:N	5	11.32
(1,340) $(1,110)$	1:A:70:PRO:N	1:A:70:PRO:CA	1:A:70:PRO:C	1:A:71:ILE:N	5	11.32
(1,393)	1:A:97:SER:N	1:A:97:SER:CA	1:A:97:SER:C	1:A:98:HIS:N	19	11.09
(1,358) $(1,158)$	1:A:97:SER:N	1:A:97:SER:CA	1:A:97:SER:C	1:A:98:HIS:N	19	11.09
(1,338)	1:A:66:SER:N	1:A:66:SER:CA	1:A:66:SER:C	1:A:67:PHE:N	5	11.03
(1,300) $(1,103)$	1:A:66:SER:N	1:A:66:SER:CA	1:A:66:SER:C	1:A:67:PHE:N	5	11.03
(1,100)	1.71.00.0110.11	1.71.00.5116.071	1.71.00.DL16.0	1.71.01.11111.11		ad an next mass



1.390	Key	$rac{ed\ from\ previous\ po}{\mathbf{Atom-1}}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
1,156							` '
1,399 1-A-99-LEUC	· · /						
(1.163	_ ` ' /				1:A:100:GLY:C		
(1.39)	· · /						
(1,156) 1:A:96:ASP:N	· · /	1:A:96:ASP:N	1:A:96:ASP:CA		1:A:97:SER:N	12	
(1,389)	· · /						
(1,154) 1:A-95:ALA:N 1:A-95:ALA:CA 1:A-95:ALA:CA 1:A-96:ASP:N 4 10.72 (1,392) 1:A-96:ASP:C 1:A-97:SER:N 1:A-97:SER:CA 1:A-96:ASP:CA	· · /					4	
(1,392) 1.A.96.ASP.C	· · /	1:A:95:ALA:N	1:A:95:ALA:CA	1:A:95:ALA:C	1:A:96:ASP:N	4	
	· · /					20	
(1,391) 1:A:96:ASP:N 1:A:96:ASP:CA 1:A:96:ASP:C 1:A:97:SER:N 9 10.7 (1,156) 1:A:96:ASP:N 1:A:96:ASP:CA 1:A:96:ASP:C 1:A:97:SER:N 9 10.7 (1,154) 1:A:95:ALA:N 1:A:96:ALA:CA 1:A:96:ALA:C 1:A:96:ASP:N 7 10.55 (1,154) 1:A:95:ALA:N 1:A:95:ALA:CA 1:A:96:ALA:C 1:A:96:ASP:N 7 10.55 (1,154) 1:A:96:AER:N 1:A:96:SER:CA 1:A:96:ALA:C 1:A:96:ASP:N 7 10.55 (1,94) 1:A:60.SER:N 1:A:60.SER:CA 1:A:60.SER:C 1:A:61:GLN:N 4 10.53 (1,383) 1:A:92:SER:N 1:A:92:SER:CA 1:A:92:SER:C 1:A:93:ARG:N 18 10.5 (1,389) 1:A:92:SER:N 1:A:92:SER:CA 1:A:92:SER:C 1:A:93:ARG:N 18 10.5 (1,391) 1:A:96:ASP:N 1:A:92:SER:CA 1:A:92:SER:C 1:A:93:ARG:N 18 10.5 (1,391) 1:A:96:ASP:N 1:A:96:ASP:CA 1:A:96:ASP:C 1:A:93:ARG:N 18 10.5 (1,391) 1:A:96:ASP:N 1:A:96:ASP:CA 1:A:96:ASP:C 1:A:93:ARG:N 18 10.5 (1,491) 1:A:31:ASN:N 1:A:31:ASN:CA 1:A:31:ASN:C 1:A:93:ASP:CN 4 10.23 (1,494) 1:A:31:ASN:N 1:A:31:ASN:CA 1:A:31:ASN:C 1:A:32:GLU:N 4 10.23 (1,284) 1:A:31:ASN:N 1:A:31:ASN:CA 1:A:31:ASN:C 1:A:32:GLU:N 4 10.23 (1,284) 1:A:31:ASN:N 1:A:31:ASN:CA 1:A:31:ASN:C 1:A:32:GLU:N 8 9.79 (1,58) 1:A:37:LYS:C 1:A:38:GLU:N 1:A:38:GLU:CA 1:A:38:GLU:C 3 9.69 (1,293) 1:A:37:LYS:C 1:A:38:GLU:N 1:A:38:GLU:CA 1:A:38:GLU:C 3 9.69 (1,293) 1:A:37:LYS:C 1:A:38:GLU:N 1:A:38:GLU:CA 1:A:38:GLU:C 3 9.69 (1,293) 1:A:94:THR:N 1:A:94:THR:CA 1:A:94:THR:C 1:A:95:ALA:N 14 9.49 (1,43) 1:A:95:ALA:N 1:A:95:ALA:CA 1:A:96:ASR:C 1:A:61:GLN:N 7 9.45 (1,339) 1:A:95:ALA:N 1:A:95:ALA:CA 1:A:95:ALA:C 1:A:95:ALA:N 14 9.49 (1,43) 1:A:95:ALA:N 1:A:95:ALA:CA 1:A:95:ALA:C 1:A:95:AL	/	1:A:96:ASP:C	1:A:97:SER:N	1:A:97:SER:CA		20	
	/						
(1,389) 1:A:95:ALA:N 1:A:95:ALA:CA 1:A:95:ALA:C 1:A:96:ASP:N 7 10.55 (1,154) 1:A:95:ALA:N 1:A:95:ALA:CA 1:A:95:ALA:C 1:A:96:ASP:N 7 10.55 (1,154) 1:A:96:SER:N 1:A:96:SER:CA 1:A:96:SER:C 1:A:61:GLN:N 4 10.53 (1,329) 1:A:60:SER:N 1:A:60:SER:CA 1:A:60:SER:C 1:A:61:GLN:N 4 10.53 (1,333) 1:A:92:SER:N 1:A:92:SER:CA 1:A:92:SER:C 1:A:93:ARG:N 18 10.5 (1,391) 1:A:96:ASP:N 1:A:92:SER:CA 1:A:92:SER:C 1:A:93:ARG:N 18 10.5 (1,391) 1:A:96:ASP:N 1:A:92:SER:CA 1:A:92:SER:C 1:A:93:ARG:N 18 10.5 (1,391) 1:A:96:ASP:N 1:A:96:ASP:CA 1:A:96:ASP:C 1:A:97:SER:N 8 10.24 (1,156) 1:A:96:ASP:N 1:A:96:ASP:CA 1:A:96:ASP:C 1:A:97:SER:N 8 10.24 (1,156) 1:A:96:ASP:N 1:A:31:ASN:CA 1:A:31:ASN:C 1:A:32:GLU:N 4 10.23 (1,284) 1:A:31:ASN:N 1:A:31:ASN:CA 1:A:31:ASN:C 1:A:32:GLU:N 4 10.23 (1,284) 1:A:31:ASN:N 1:A:31:ASN:CA 1:A:31:ASN:C 1:A:32:GLU:N 8 9.79 (1,284) 1:A:31:ASN:N 1:A:31:ASN:CA 1:A:31:ASN:C 1:A:32:GLU:N 8 9.79 (1,284) 1:A:31:ASN:N 1:A:31:ASN:CA 1:A:31:ASN:C 1:A:33:GLU:N 8 9.79 (1,284) 1:A:37:LYS:C 1:A:38:GLU:N 1:A:38:GLU:CA 1:A:38:GLU:C 3 9.69 (1,293) 1:A:37:LYS:C 1:A:38:GLU:N 1:A:38:GLU:CA 1:A:38:GLU:C 3 9.69 (1,293) 1:A:37:LYS:C 1:A:38:GLU:N 1:A:38:GLU:CA 1:A:38:GLU:C 3 9.69 (1,423) 1:A:115:CYS:N 1:A:115:CYS:CA 1:A:115:CYS:C 1:A:116:LLE:N 13 9.58 (1,387) 1:A:94:THR:N 1:A:94:THR:CA 1:A:94:THR:C 1:A:95:ALA:N 14 9.49 (1,152) 1:A:94:THR:N 1:A:94:THR:CA 1:A:94:THR:C 1:A:95:ALA:N 14 9.49 (1,152) 1:A:99:SER:N 1:A:60:SER:CA 1:A:60:SER:C 1:A:60:SER:N 1:A:99:SER:N 1:A:99:SER:C 1:A:99:ARC:N 19 9.26 (1,38) 1:A:87:ARG:N 1:A:87:ARG:C 1:A:88:THR:N 20 9.29	(' /						
(1,154) 1:A:95:ALA:N 1:A:95:ALA:CA 1:A:95:ALA:C 1:A:96:ASP:N 7 10.55 (1,94) 1:A:60:SER:N 1:A:60:SER:CA 1:A:60:SER:C 1:A:61:GIN:N 4 10.53 (1,329) 1:A:60:SER:N 1:A:60:SER:CA 1:A:60:SER:C 1:A:61:GIN:N 4 10.53 (1,383) 1:A:92:SER:N 1:A:92:SER:CA 1:A:92:SER:C 1:A:93:ARG:N 18 10.5 (1,484) 1:A:96:ASP:N 1:A:92:SER:CA 1:A:92:SER:C 1:A:93:ARG:N 18 10.5 (1,491) 1:A:96:ASP:N 1:A:96:ASP:CA 1:A:96:ASP:C 1:A:97:SER:N 8 10.24 (1,490) 1:A:31:ASN:N 1:A:31:ASN:CA 1:A:31:ASN:C 1:A:32:GLU:N 4 10.23 (1,284) 1:A:31:ASN:N 1:A:31:ASN:CA 1:A:31:ASN:C 1:A:32:GLU:N 8 9.79 (1,284) 1:A:31:ASN:C 1:A:31:ASN:C 1:A:33:ASN:C 1:A:33:GLU:N 8 9.79 (1,284) 1:A:33:ASN:C 1:A:33:ASN:C 1:A:33:GLU:N 8 9.79	\ ' /						
(1,94) 1:A:60:SER:N 1:A:60:SER:CA 1:A:60:SER:C 1:A:61:GLN:N 4 10.53 (1,329) 1:A:60:SER:N 1:A:60:SER:CA 1:A:60:SER:C 1:A:61:GLN:N 4 10.53 (1,332) 1:A:92:SER:N 1:A:92:SER:CA 1:A:92:SER:C 1:A:93:ARG:N 18 10.5 (1,148) 1:A:92:SER:N 1:A:96:ASP:CA 1:A:96:ASP:C 1:A:93:ARG:N 18 10.5 (1,331) 1:A:96:ASP:N 1:A:96:ASP:CA 1:A:96:ASP:C 1:A:97:SER:N 8 10.24 (1,456) 1:A:96:ASP:N 1:A:96:ASP:CA 1:A:96:ASP:C 1:A:97:SER:N 8 10.24 (1,450) 1:A:31:ASN:N 1:A:31:ASN:CA 1:A:31:ASN:C 1:A:32:GLU:N 4 10.23 (1,244) 1:A:31:ASN:N 1:A:31:ASN:CA 1:A:31:ASN:C 1:A:32:GLU:N 8 9.79 (1,58) 1:A:37:LYS:C 1:A:38:GLU:N 1:A:38:GLU:CA 1:A:38:GLU:C 3 9.69 (1,231) 1:A:115:CYS:C 1:A:38:GLU:C 1:A:38:GLU:C 3 9.69	· · /						
(1,329) 1:A:60:SER:N 1:A:60:SER:CA 1:A:60:SER:C 1:A:61:GLN:N 4 10.53 (1,333) 1:A:92:SER:N 1:A:92:SER:CA 1:A:92:SER:C 1:A:92:SER:C 1:A:93:ARG:N 18 10.5 (1,148) 1:A:92:SER:N 1:A:92:SER:CA 1:A:92:SER:C 1:A:93:ARG:N 18 10.5 (1,148) 1:A:96:ASP:N 1:A:96:ASP:CA 1:A:96:ASP:C 1:A:97:SER:N 8 10.24 (1,156) 1:A:96:ASP:N 1:A:36:ASP:CA 1:A:36:ASP:C 1:A:37:SER:N 8 10.24 (1,49) 1:A:31:ASN:N 1:A:31:ASN:CA 1:A:31:ASN:C 1:A:32:GU:N 4 10.23 (1,284) 1:A:31:ASN:N 1:A:31:ASN:CA 1:A:31:ASN:C 1:A:32:GU:N 4 10.23 (1,284) 1:A:31:ASN:C 1:A:38:GU:N 1:A:38:GU:N 1:A:38:GU:N 8 9.79 (1,284) 1:A:37:LYS:C 1:A:38:GU:N 1:A:38:GU:CA 1:A:38:GU:CA 1:A:38:GU:CA 3:A:38:GU:C 3 9.69 (1,293) 1:A:31:ECYS:C 1:A:31:ECYS:CA	\ ' /						
(1,383) 1:A:92:SER:N 1:A:92:SER:CA 1:A:92:SER:C 1:A:93:ARG:N 18 10.5 (1,148) 1:A:92:SER:N 1:A:92:SER:CA 1:A:92:SER:C 1:A:93:ARG:N 18 10.5 (1,391) 1:A:96:ASP:N 1:A:96:ASP:CA 1:A:96:ASP:C 1:A:97:SER:N 8 10.24 (1,156) 1:A:36:ASP:N 1:A:36:ASP:CA 1:A:36:ASP:C 1:A:37:SER:N 8 10.24 (1,49) 1:A:31:ASN:N 1:A:31:ASN:CA 1:A:31:ASN:C 1:A:32:GU:N 4 10.23 (1,49) 1:A:31:ASN:N 1:A:31:ASN:CA 1:A:31:ASN:C 1:A:32:GU:N 8 9.79 (1,284) 1:A:31:ASN:N 1:A:31:ASN:CA 1:A:31:ASN:C 1:A:32:GU:N 8 9.79 (1,284) 1:A:37:LYS:C 1:A:38:GU:N 1:A:38:GU:CA 1:A:38:GU:CA 3 9.69 (1,293) 1:A:115:CYS:C 1:A:38:GU:CA 1:A:38:GU:CA 3 9.69 (1,423) 1:A:115:CYS:C 1:A:115:CYS:C 1:A:116:ILE:N 13 9.58 (1,188) <	(' /						
(1,148) 1:A:92:SER:N 1:A:92:SER:CA 1:A:92:SER:C 1:A:93:ARG:N 18 10.5	· · /						
(1,391) 1:A:96:ASP:N 1:A:96:ASP:CA 1:A:96:ASP:C 1:A:97:SER:N 8 10.24 (1,156) 1:A:96:ASP:N 1:A:96:ASP:CA 1:A:96:ASP:C 1:A:97:SER:N 8 10.24 (1,49) 1:A:31:ASN:N 1:A:31:ASN:CA 1:A:31:ASN:C 1:A:32:GLU:N 4 10.23 (1,284) 1:A:31:ASN:N 1:A:31:ASN:CA 1:A:31:ASN:C 1:A:32:GLU:N 8 9.79 (1,284) 1:A:31:ASN:N 1:A:31:ASN:CA 1:A:31:ASN:C 1:A:32:GLU:N 8 9.79 (1,58) 1:A:37:LYS:C 1:A:38:GLU:N 1:A:38:GLU:CA 1:A:38:GLU:C 3 9.69 (1,233) 1:A:37:LYS:C 1:A:38:GLU:N 1:A:38:GLU:CA 1:A:38:GLU:C 3 9.69 (1,423) 1:A:115:CYS:N 1:A:115:CYS:CA 1:A:115:CYS:C 1:A:116:ILE:N 13 9.58 (1,188) 1:A:115:CYS:N 1:A:115:CYS:CA 1:A:115:CYS:C 1:A:116:ILE:N 13 9.58 (1,387) 1:A:49:THR:N 1:A:49:THR:CA 1:A:49:THR:C 1:A:49:5ALA:N 14							
(1,156) 1:A:96:ASP:N 1:A:96:ASP:CA 1:A:96:ASP:C 1:A:97:SER:N 8 10.24 (1,49) 1:A:31:ASN:N 1:A:31:ASN:CA 1:A:31:ASN:C 1:A:32:GLU:N 4 10.23 (1,284) 1:A:31:ASN:N 1:A:31:ASN:CA 1:A:31:ASN:C 1:A:32:GLU:N 4 10.23 (1,49) 1:A:31:ASN:N 1:A:31:ASN:CA 1:A:31:ASN:C 1:A:32:GLU:N 8 9.79 (1,284) 1:A:37:ASN:N 1:A:31:ASN:CA 1:A:31:ASN:C 1:A:32:GLU:N 8 9.79 (1,58) 1:A:37:LYS:C 1:A:38:GLU:N 1:A:38:GLU:CA 1:A:38:GLU:C 3 9.69 (1,293) 1:A:37:LYS:C 1:A:38:GLU:N 1:A:38:GLU:CA 1:A:38:GLU:C 3 9.69 (1,423) 1:A:115:CYS:C 1:A:38:GLU:N 1:A:38:GLU:CA 1:A:38:GLU:C 3 9.69 (1,483) 1:A:15:CYS:N 1:A:115:CYS:CA 1:A:115:CYS:C 1:A:116:LEEN 13 9.58 (1,182) 1:A:49:THR:CA 1:A:49:THR:C 1:A:49:THR:C 1:A:49:THR:C 1:A:49:THR:C	· · /						
(1,49) 1:A:31:ASN:N 1:A:31:ASN:CA 1:A:31:ASN:C 1:A:32:GLU:N 4 10.23 (1,284) 1:A:31:ASN:N 1:A:31:ASN:CA 1:A:31:ASN:C 1:A:32:GLU:N 4 10.23 (1,49) 1:A:31:ASN:N 1:A:31:ASN:CA 1:A:31:ASN:C 1:A:32:GLU:N 8 9.79 (1,284) 1:A:31:ASN:N 1:A:31:ASN:CA 1:A:31:ASN:C 1:A:32:GLU:N 8 9.79 (1,58) 1:A:37:LYS:C 1:A:38:GLU:N 1:A:38:GLU:CA 1:A:38:GLU:C 3 9.69 (1,293) 1:A:37:LYS:C 1:A:38:GLU:N 1:A:38:GLU:CA 1:A:38:GLU:C 3 9.69 (1,233) 1:A:37:LYS:C 1:A:38:GLU:N 1:A:38:GLU:CA 1:A:38:GLU:C 3 9.69 (1,423) 1:A:15:CYS:N 1:A:15:CYS:CA 1:A:15:CYS:C 1:A:16:LEE.N 13 9.58 (1,387) 1:A:49:THR:N 1:A:15:CYS:CA 1:A:15:CYS:C 1:A:16:LEE.N 13 9.58 (1,387) 1:A:49:THR:N 1:A:29:THR:CA 1:A:49:THR:C 1:A:195:ALA:N 14 9	· · /						
(1,284) 1:A:31:ASN:N 1:A:31:ASN:CA 1:A:31:ASN:C 1:A:32:GLU:N 4 10.23 (1,49) 1:A:31:ASN:N 1:A:31:ASN:CA 1:A:31:ASN:C 1:A:32:GLU:N 8 9.79 (1,284) 1:A:31:ASN:N 1:A:31:ASN:CA 1:A:31:ASN:C 1:A:32:GLU:N 8 9.79 (1,284) 1:A:31:ASN:N 1:A:31:ASN:CA 1:A:31:ASN:C 1:A:32:GLU:N 8 9.79 (1,284) 1:A:31:ASN:N 1:A:31:ASN:CA 1:A:31:ASN:C 1:A:32:GLU:N 8 9.79 (1,423) 1:A:37:CYS:C 1:A:38:GLU:C 3 9.69 (1,293) 1:A:37:CYS:C 1:A:31:ECYS:CA 1:A:115:CYS:C 1:A:31:GIE:N 13 9.58 (1,423) 1:A:415:CYS:N 1:A:115:CYS:CA 1:A:115:CYS:C 1:A:116:ILE:N 13 9.58 (1,433) 1:A:415:CYS:N 1:A:115:CYS:CA 1:A:115:CYS:C 1:A:116:ILE:N 13 9.58 (1,182) 1:A:47thR:N 1:A:49t*THR:CA 1:A:49t*THR:C 1:A:495:ALA:N 14 9.49 (1,152)<	· · /						
(1,49) 1:A:31:ASN:N 1:A:31:ASN:CA 1:A:31:ASN:C 1:A:32:GLU:N 8 9.79 (1,284) 1:A:31:ASN:N 1:A:31:ASN:CA 1:A:31:ASN:C 1:A:32:GLU:N 8 9.79 (1,58) 1:A:37:LYS:C 1:A:38:GLU:N 1:A:38:GLU:CA 1:A:38:GLU:C 3 9.69 (1,293) 1:A:37:LYS:C 1:A:38:GLU:N 1:A:38:GLU:CA 1:A:38:GLU:C 3 9.69 (1,423) 1:A:31:EVS:C 1:A:38:GLU:CA 1:A:38:GLU:CA 3 9.69 (1,423) 1:A:31:EVS:C 1:A:38:GLU:CA 1:A:38:GLU:CA 3 9.69 (1,423) 1:A:31:EVS:C 1:A:38:GLU:CA 1:A:38:GLU:CA 3 9.69 (1,423) 1:A:41:EVS:C 1:A:41:EVS:C 1:A:41:GLIER. 3 9.58 (1,481) 1:A:41:EVS:CX 1:A:41:EVS:C 1:A:41:GLIER. 13 9.58 (1,387) 1:A:44:THR:N 1:A:41:EVS:CA 1:A:41:EVS:C 1:A:41:EVS:CA 1:A:41:EVS:CA 1:A:41:EVS:CA 1:A:49:THR:C 1:A:49:THR:C 1:A:49:THR:C 1:A:49:THR:C	/						
(1,284) 1:A:31:ASN:N 1:A:31:ASN:CA 1:A:31:ASN:C 1:A:32:GLU:N 8 9.79 (1,58) 1:A:37:LYS:C 1:A:38:GLU:N 1:A:38:GLU:CA 1:A:38:GLU:C 3 9.69 (1,293) 1:A:37:LYS:C 1:A:38:GLU:N 1:A:38:GLU:CA 1:A:38:GLU:C 3 9.69 (1,423) 1:A:115:CYS:N 1:A:115:CYS:CA 1:A:115:CYS:C 1:A:116:LE:N 13 9.58 (1,188) 1:A:115:CYS:N 1:A:115:CYS:CA 1:A:115:CYS:C 1:A:116:LE:N 13 9.58 (1,387) 1:A:94:THR:N 1:A:94:THR:CA 1:A:94:THR:C 1:A:95:ALA:N 14 9.49 (1,152) 1:A:94:THR:N 1:A:60:SER:CA 1:A:60:SER:C 1:A	/						
(1,58) 1:A:37:LYS:C 1:A:38:GLU:N 1:A:38:GLU:CA 1:A:38:GLU:C 3 9.69 (1,293) 1:A:37:LYS:C 1:A:38:GLU:N 1:A:38:GLU:CA 1:A:38:GLU:C 3 9.69 (1,423) 1:A:115:CYS:N 1:A:115:CYS:CA 1:A:115:CYS:C 1:A:116:LE:N 13 9.58 (1,387) 1:A:94:THR:N 1:A:94:THR:CA 1:A:94:THR:C 1:A:95:ALA:N 14 9.49 (1,152) 1:A:94:THR:N 1:A:94:THR:CA 1:A:94:THR:C 1:A:95:ALA:N 14 9.49 (1,152) 1:A:94:THR:N 1:A:60:SER:CA 1:A:60:SER:C 1:A:61:GLN:N 7 9.45 (1,349) 1:A:60:SER:N 1:A:60:SER:CA 1:A:60:SER:C 1:A:61:GLN:N 7 9.45 (1,373) 1:A:87:ARG:N 1:A:87:ARG:CA 1:A:87:ARG:C 1:A:88:THR:N 20 9.29 (1,386) 1:A:93:ARG:C 1:A:94:THR:N 1:A:94:THR:C 1:A:94:THR:C 19 9.26 (1,151) 1:A:93:ARG:C 1:A:94:THR:C 1:A:94:THR:C 19 9.26	/						
(1,293) 1:A:37:LYS:C 1:A:38:GLU:N 1:A:38:GLU:CA 1:A:38:GLU:C 3 9.69 (1,423) 1:A:115:CYS:N 1:A:115:CYS:CA 1:A:115:CYS:C 1:A:116:ILE:N 13 9.58 (1,188) 1:A:115:CYS:N 1:A:115:CYS:CA 1:A:115:CYS:C 1:A:116:ILE:N 13 9.58 (1,387) 1:A:94:THR:N 1:A:94:THR:CA 1:A:94:THR:C 1:A:95:ALA:N 14 9.49 (1,152) 1:A:94:THR:N 1:A:494:THR:CA 1:A:94:THR:C 1:A:95:ALA:N 14 9.49 (1,349) 1:A:60:SER:N 1:A:60:SER:CA 1:A:60:SER:C 1:A:61:GLN:N 7 9.45 (1,329) 1:A:60:SER:N 1:A:60:SER:CA 1:A:60:SER:C 1:A:61:GLN:N 7 9.45 (1,333) 1:A:87:ARG:N 1:A:87:ARG:CA 1:A:87:ARG:C 1:A:88:THR:N 20 9.29 (1,348) 1:A:93:ARG:C 1:A:94:THR:CA 1:A:94:THR:C 19 9.26 (1,351) 1:A:93:ARG:C 1:A:94:THR:CA 1:A:94:THR:C 19 9.26 (1,383)	(/ /						
(1,423) 1:A:115:CYS:N 1:A:115:CYS:CA 1:A:115:CYS:C 1:A:116:ILE:N 13 9.58	/						
(1,188) 1:A:115:CYS:N 1:A:115:CYS:CA 1:A:115:CYS:C 1:A:116:ILE:N 13 9.58 (1,387) 1:A:94:THR:N 1:A:94:THR:CA 1:A:94:THR:C 1:A:95:ALA:N 14 9.49 (1,152) 1:A:94:THR:N 1:A:94:THR:CA 1:A:94:THR:C 1:A:95:ALA:N 14 9.49 (1,349) 1:A:60:SER:N 1:A:60:SER:CA 1:A:60:SER:C 1:A:61:GLN:N 7 9.45 (1,329) 1:A:60:SER:N 1:A:60:SER:CA 1:A:60:SER:C 1:A:61:GLN:N 7 9.45 (1,373) 1:A:87:ARG:N 1:A:87:ARG:CA 1:A:87:ARG:C 1:A:88:ARG:C 1:A:88:THR:N 20 9.29 (1,138) 1:A:87:ARG:N 1:A:94:THR:N 1:A:94:THR:CA 1:A:94:THR:C 19 9.26 (1,151) 1:A:93:ARG:C 1:A:94:THR:N 1:A:94:THR:CA 1:A:94:THR:C 19 9.26 (1,151) 1:A:93:ARG:C 1:A:92:SER:CA 1:A:99:SER:C 1:A:93:ARG:N 19 9.12 (1,148) 1:A:92:SER:N 1:A:92:SER:CA 1:A:99:SER:C 1:A:93:ARG:N	/						
(1,387) 1:A:94:THR:N 1:A:94:THR:CA 1:A:94:THR:C 1:A:95:ALA:N 14 9.49 (1,152) 1:A:94:THR:N 1:A:94:THR:CA 1:A:94:THR:C 1:A:95:ALA:N 14 9.49 (1,94) 1:A:60:SER:N 1:A:60:SER:CA 1:A:60:SER:C 1:A:61:GLN:N 7 9.45 (1,329) 1:A:60:SER:N 1:A:60:SER:CA 1:A:60:SER:C 1:A:61:GLN:N 7 9.45 (1,373) 1:A:87:ARG:N 1:A:87:ARG:CA 1:A:87:ARG:C 1:A:88:THR:N 20 9.29 (1,138) 1:A:87:ARG:N 1:A:87:ARG:CA 1:A:87:ARG:C 1:A:88:THR:N 20 9.29 (1,386) 1:A:93:ARG:C 1:A:94:THR:N 1:A:94:THR:CA 1:A:94:THR:C 19 9.26 (1,151) 1:A:93:ARG:C 1:A:94:THR:N 1:A:94:THR:CA 1:A:94:THR:C 19 9.26 (1,383) 1:A:92:SER:N 1:A:92:SER:CA 1:A:93:ARG:N 19 9.12 (1,148) 1:A:92:SER:N 1:A:92:SER:CA 1:A:93:ARG:N 19 9.12 (1,389)	/						
(1,152) 1:A:94:THR:N 1:A:94:THR:CA 1:A:94:THR:C 1:A:95:ALA:N 14 9.49 (1,94) 1:A:60:SER:N 1:A:60:SER:CA 1:A:60:SER:C 1:A:61:GLN:N 7 9.45 (1,329) 1:A:60:SER:N 1:A:60:SER:CA 1:A:60:SER:C 1:A:61:GLN:N 7 9.45 (1,373) 1:A:87:ARG:N 1:A:87:ARG:CA 1:A:87:ARG:C 1:A:88:THR:N 20 9.29 (1,138) 1:A:87:ARG:N 1:A:87:ARG:CA 1:A:87:ARG:C 1:A:88:THR:N 20 9.29 (1,386) 1:A:93:ARG:C 1:A:94:THR:N 1:A:94:THR:CA 1:A:94:THR:C 19 9.26 (1,151) 1:A:93:ARG:C 1:A:94:THR:N 1:A:94:THR:CA 1:A:94:THR:C 19 9.26 (1,151) 1:A:92:SER:N 1:A:92:SER:CA 1:A:92:SER:CA 1:A:94:THR:CA 1:A:94:THR:C 19 9.26 (1,383) 1:A:92:SER:N 1:A:92:SER:CA 1:A:92:SER:C 1:A:93:ARG:N 19 9.12 (1,484) 1:A:92:SER:N 1:A:92:SER:CA 1:A:92:SER:C 1:A:93:ARG:N <td>(, ,</td> <td></td> <td></td> <td>I .</td> <td></td> <td></td> <td></td>	(, ,			I .			
(1,94) 1:A:60:SER:N 1:A:60:SER:CA 1:A:60:SER:C 1:A:61:GLN:N 7 9.45 (1,329) 1:A:60:SER:N 1:A:60:SER:CA 1:A:60:SER:C 1:A:61:GLN:N 7 9.45 (1,373) 1:A:87:ARG:N 1:A:87:ARG:CA 1:A:87:ARG:C 1:A:88:THR:N 20 9.29 (1,38) 1:A:87:ARG:N 1:A:87:ARG:CA 1:A:87:ARG:C 1:A:88:THR:N 20 9.29 (1,386) 1:A:93:ARG:C 1:A:94:THR:N 1:A:94:THR:CA 1:A:94:THR:C 19 9.26 (1,51) 1:A:93:ARG:C 1:A:94:THR:N 1:A:94:THR:CA 1:A:94:THR:C 19 9.26 (1,383) 1:A:93:ARG:C 1:A:94:THR:N 1:A:94:THR:CA 1:A:94:THR:C 19 9.26 (1,383) 1:A:92:SER:N 1:A:92:SER:CA 1:A:92:SER:C 1:A:93:ARG:N 19 9.12 (1,148) 1:A:95:ALA:N 1:A:95:SALA:CA 1:A:95:ALA:CA 1:A:95:ALA:C 1:A:96:ASP:N 5 8.94 (1,389) 1:A:95:ALA:N 1:A:85:MET:CA 1:A:85:MET:C 1:A:86:ILE:N	\ ' /			1:A:94:THR:C		14	
(1,329) 1:A:60:SER:N 1:A:60:SER:CA 1:A:60:SER:C 1:A:61:GLN:N 7 9.45 (1,373) 1:A:87:ARG:N 1:A:87:ARG:CA 1:A:87:ARG:C 1:A:88:THR:N 20 9.29 (1,138) 1:A:87:ARG:N 1:A:87:ARG:CA 1:A:87:ARG:C 1:A:88:THR:N 20 9.29 (1,386) 1:A:93:ARG:C 1:A:94:THR:N 1:A:94:THR:CA 1:A:94:THR:C 19 9.26 (1,151) 1:A:93:ARG:C 1:A:94:THR:N 1:A:94:THR:CA 1:A:94:THR:C 19 9.26 (1,383) 1:A:92:SER:N 1:A:92:SER:CA 1:A:92:SER:C 1:A:93:ARG:N 19 9.12 (1,488) 1:A:92:SER:N 1:A:92:SER:CA 1:A:92:SER:C 1:A:93:ARG:N 19 9.12 (1,389) 1:A:95:ALA:N 1:A:95:ALA:CA 1:A:95:ALA:C 1:A:96:ASP:N 5 8.94 (1,369) 1:A:85:MET:N 1:A:85:MET:CA 1:A:85:MET:C 1:A:85:MET:C 1:A:86:ILE:N 13 8.92 (1,134) 1:A:85:MET:N 1:A:85:MET:CA 1:A:85:MET:CA 1:A:85:MET:CA </td <td>(' /</td> <td>1:A:60:SER:N</td> <td>1:A:60:SER:CA</td> <td>1:A:60:SER:C</td> <td>1:A:61:GLN:N</td> <td>7</td> <td>9.45</td>	(' /	1:A:60:SER:N	1:A:60:SER:CA	1:A:60:SER:C	1:A:61:GLN:N	7	9.45
(1,373) 1:A:87:ARG:N 1:A:87:ARG:CA 1:A:87:ARG:C 1:A:88:THR:N 20 9.29 (1,138) 1:A:87:ARG:N 1:A:87:ARG:CA 1:A:87:ARG:C 1:A:88:THR:N 20 9.29 (1,386) 1:A:93:ARG:C 1:A:94:THR:N 1:A:94:THR:CA 1:A:94:THR:C 19 9.26 (1,151) 1:A:93:ARG:C 1:A:94:THR:N 1:A:94:THR:CA 1:A:94:THR:C 19 9.26 (1,383) 1:A:92:SER:N 1:A:92:SER:CA 1:A:92:SER:C 1:A:93:ARG:N 19 9.12 (1,148) 1:A:92:SER:N 1:A:92:SER:CA 1:A:92:SER:C 1:A:93:ARG:N 19 9.12 (1,389) 1:A:95:ALA:N 1:A:95:ALA:CA 1:A:95:ALA:C 1:A:96:ASP:N 5 8.94 (1,369) 1:A:85:MET:N 1:A:85:MET:CA 1:A:85:MET:C 1:A:86:ILE:N 13 8.92 (1,134) 1:A:85:MET:N 1:A:85:MET:CA 1:A:85:MET:C 1:A:86:ILE:N 13 8.92 (1,465) 1:A:138:LEU:C 1:A:139:HIS:N 1:A:139:HIS:CA 1:A:139:HIS:C 18	(' /	1:A:60:SER:N	1:A:60:SER:CA			7	
(1,138) 1:A:87:ARG:N 1:A:87:ARG:CA 1:A:87:ARG:C 1:A:88:THR:N 20 9.29 (1,386) 1:A:93:ARG:C 1:A:94:THR:N 1:A:94:THR:CA 1:A:94:THR:C 19 9.26 (1,151) 1:A:93:ARG:C 1:A:94:THR:N 1:A:94:THR:CA 1:A:94:THR:C 19 9.26 (1,383) 1:A:92:SER:N 1:A:92:SER:CA 1:A:92:SER:C 1:A:93:ARG:N 19 9.12 (1,148) 1:A:92:SER:N 1:A:92:SER:CA 1:A:92:SER:C 1:A:93:ARG:N 19 9.12 (1,389) 1:A:95:ALA:N 1:A:95:ALA:CA 1:A:95:ALA:C 1:A:96:ASP:N 5 8.94 (1,154) 1:A:95:ALA:N 1:A:95:ALA:CA 1:A:85:MET:C 1:A:86:ILE:N 3 8.92 (1,369) 1:A:85:MET:N 1:A:85:MET:CA 1:A:85:MET:C 1:A:86:ILE:N 13 8.92 (1,134) 1:A:85:MET:N 1:A:85:MET:CA 1:A:139:HIS:CA 1:A:139:HIS:C 18 8.83 (1,230) 1:A:138:LEU:C 1:A:139:HIS:N 1:A:139:HIS:CA 1:A:139:HIS:C 18	· · /					20	
(1,386) 1:A:93:ARG:C 1:A:94:THR:N 1:A:94:THR:CA 1:A:94:THR:C 19 9.26 (1,151) 1:A:93:ARG:C 1:A:94:THR:N 1:A:94:THR:CA 1:A:94:THR:C 19 9.26 (1,383) 1:A:92:SER:N 1:A:92:SER:CA 1:A:92:SER:C 1:A:93:ARG:N 19 9.12 (1,148) 1:A:92:SER:N 1:A:95:SER:CA 1:A:92:SER:C 1:A:93:ARG:N 19 9.12 (1,389) 1:A:95:ALA:N 1:A:95:ALA:CA 1:A:95:ALA:C 1:A:96:ASP:N 5 8.94 (1,154) 1:A:95:ALA:N 1:A:95:ALA:CA 1:A:95:ALA:C 1:A:96:ASP:N 5 8.94 (1,369) 1:A:85:MET:N 1:A:85:MET:CA 1:A:85:MET:C 1:A:86:ILE:N 13 8.92 (1,134) 1:A:85:MET:N 1:A:85:MET:CA 1:A:85:MET:C 1:A:86:ILE:N 13 8.92 (1,465) 1:A:138:LEU:C 1:A:139:HIS:N 1:A:139:HIS:CA 1:A:139:HIS:C 18 8.83 (1,230) 1:A:67:PHE:N 1:A:67:PHE:CA 1:A:67:PHE:C 1:A:68:THR:N 2	· · /					20	
(1,151) 1:A:93:ARG;C 1:A:94:THR:N 1:A:94:THR:CA 1:A:94:THR:C 19 9.26 (1,383) 1:A:92:SER:N 1:A:92:SER:CA 1:A:92:SER;C 1:A:93:ARG;N 19 9.12 (1,148) 1:A:92:SER:N 1:A:92:SER;CA 1:A:92:SER;C 1:A:93:ARG;N 19 9.12 (1,389) 1:A:95:ALA;N 1:A:95:ALA;CA 1:A:95:ALA;C 1:A:96:ASP;N 5 8.94 (1,154) 1:A:95:ALA;N 1:A:95:ALA;CA 1:A:95:ALA;C 1:A:96:ASP;N 5 8.94 (1,369) 1:A:85:MET;N 1:A:85:MET;CA 1:A:85:MET;C 1:A:86:ILE;N 13 8.92 (1,134) 1:A:85:MET;N 1:A:85:MET;CA 1:A:85:MET;C 1:A:86:ILE;N 13 8.92 (1,465) 1:A:138:LEU;C 1:A:139:HIS;N 1:A:139:HIS;CA 1:A:139:HIS;C 18 8.83 (1,230) 1:A:67:PHE;N 1:A:67:PHE;CA 1:A:67:PHE;C 1:A:68:THR;N 2 8.73 (1,105) 1:A:67:PHE;N 1:A:67:PHE;CA 1:A:67:PHE;C 1:A:68:THR;N 2	· · /	1:A:93:ARG:C	1:A:94:THR:N	1:A:94:THR:CA	1:A:94:THR:C	19	9.26
(1,383) 1:A:92:SER:N 1:A:92:SER:CA 1:A:92:SER:C 1:A:93:ARG:N 19 9.12 (1,148) 1:A:92:SER:N 1:A:92:SER:CA 1:A:92:SER:C 1:A:93:ARG:N 19 9.12 (1,389) 1:A:95:ALA:N 1:A:95:ALA:CA 1:A:95:ALA:C 1:A:96:ASP:N 5 8.94 (1,154) 1:A:95:ALA:N 1:A:95:ALA:CA 1:A:95:ALA:C 1:A:96:ASP:N 5 8.94 (1,369) 1:A:85:MET:N 1:A:85:MET:CA 1:A:85:MET:C 1:A:86:ILE:N 13 8.92 (1,134) 1:A:85:MET:N 1:A:85:MET:CA 1:A:85:MET:C 1:A:86:ILE:N 13 8.92 (1,465) 1:A:138:LEU:C 1:A:139:HIS:N 1:A:139:HIS:CA 1:A:139:HIS:C 18 8.83 (1,230) 1:A:138:LEU:C 1:A:139:HIS:N 1:A:139:HIS:CA 1:A:139:HIS:C 18 8.83 (1,340) 1:A:67:PHE:N 1:A:67:PHE:CA 1:A:68:THR:N 2 8.73 (1,105) 1:A:67:PHE:N 1:A:87:ARG:C 1:A:88:THR:N 19 8.7 (1,138) <td></td> <td>1:A:93:ARG:C</td> <td></td> <td></td> <td>1:A:94:THR:C</td> <td>19</td> <td></td>		1:A:93:ARG:C			1:A:94:THR:C	19	
(1,389) 1:A:95:ALA:N 1:A:95:ALA:CA 1:A:95:ALA:C 1:A:96:ASP:N 5 8.94 (1,154) 1:A:95:ALA:N 1:A:95:ALA:CA 1:A:95:ALA:C 1:A:96:ASP:N 5 8.94 (1,369) 1:A:85:MET:N 1:A:85:MET:CA 1:A:85:MET:C 1:A:86:ILE:N 13 8.92 (1,134) 1:A:85:MET:N 1:A:85:MET:CA 1:A:85:MET:C 1:A:86:ILE:N 13 8.92 (1,465) 1:A:138:LEU:C 1:A:139:HIS:N 1:A:139:HIS:CA 1:A:139:HIS:C 18 8.83 (1,230) 1:A:67:PHE:N 1:A:67:PHE:CA 1:A:67:PHE:C 1:A:68:THR:N 2 8.73 (1,340) 1:A:67:PHE:N 1:A:67:PHE:CA 1:A:67:PHE:C 1:A:68:THR:N 2 8.73 (1,373) 1:A:87:ARG:N 1:A:87:ARG:CA 1:A:87:ARG:C 1:A:88:THR:N 19 8.7 (1,38) 1:A:87:ARG:N 1:A:87:ARG:CA 1:A:89:GLU:C 1:A:40:GLY:N 15 8.67 (1,296) 1:A:39:GLU:N 1:A:39:GLU:CA 1:A:39:GLU:C 1:A:40:GLY:N 15	· · /	1:A:92:SER:N	1:A:92:SER:CA	1:A:92:SER:C	1:A:93:ARG:N	19	9.12
(1,389) 1:A:95:ALA:N 1:A:95:ALA:CA 1:A:95:ALA:C 1:A:96:ASP:N 5 8.94 (1,154) 1:A:95:ALA:N 1:A:95:ALA:CA 1:A:95:ALA:C 1:A:96:ASP:N 5 8.94 (1,369) 1:A:85:MET:N 1:A:85:MET:CA 1:A:85:MET:C 1:A:86:ILE:N 13 8.92 (1,134) 1:A:85:MET:N 1:A:85:MET:CA 1:A:85:MET:C 1:A:86:ILE:N 13 8.92 (1,465) 1:A:138:LEU:C 1:A:139:HIS:N 1:A:139:HIS:CA 1:A:139:HIS:C 18 8.83 (1,230) 1:A:138:LEU:C 1:A:139:HIS:N 1:A:139:HIS:CA 1:A:139:HIS:C 18 8.83 (1,340) 1:A:67:PHE:N 1:A:67:PHE:CA 1:A:67:PHE:C 1:A:68:THR:N 2 8.73 (1,105) 1:A:67:PHE:N 1:A:87:ARG:C 1:A:88:THR:N 19 8.7 (1,373) 1:A:87:ARG:N 1:A:87:ARG:CA 1:A:88:THR:N 19 8.7 (1,51) 1:A:39:GLU:N 1:A:39:GLU:CA 1:A:39:GLU:C 1:A:40:GLY:N 15 8.67 (1,296)	· · /	1:A:92:SER:N	1:A:92:SER:CA	1:A:92:SER:C	1:A:93:ARG:N	19	9.12
(1,154) 1:A:95:ALA:N 1:A:95:ALA:CA 1:A:95:ALA:C 1:A:96:ASP:N 5 8.94 (1,369) 1:A:85:MET:N 1:A:85:MET:CA 1:A:85:MET:C 1:A:86:ILE:N 13 8.92 (1,134) 1:A:85:MET:N 1:A:85:MET:CA 1:A:85:MET:C 1:A:86:ILE:N 13 8.92 (1,465) 1:A:138:LEU:C 1:A:139:HIS:N 1:A:139:HIS:CA 1:A:139:HIS:C 18 8.83 (1,230) 1:A:138:LEU:C 1:A:139:HIS:N 1:A:139:HIS:CA 1:A:139:HIS:C 18 8.83 (1,340) 1:A:67:PHE:N 1:A:67:PHE:CA 1:A:67:PHE:C 1:A:68:THR:N 2 8.73 (1,105) 1:A:67:PHE:N 1:A:67:PHE:CA 1:A:67:PHE:C 1:A:68:THR:N 2 8.73 (1,373) 1:A:87:ARG:N 1:A:87:ARG:CA 1:A:87:ARG:C 1:A:88:THR:N 19 8.7 (1,138) 1:A:39:GLU:N 1:A:39:GLU:CA 1:A:39:GLU:C 1:A:40:GLY:N 15 8.67 (1,296) 1:A:39:GLU:N 1:A:39:GLU:CA 1:A:39:GLU:C 1:A:40:GLY:N 15	· · /						
(1,369) 1:A:85:MET:N 1:A:85:MET:CA 1:A:85:MET:C 1:A:86:ILE:N 13 8.92 (1,134) 1:A:85:MET:N 1:A:85:MET:CA 1:A:85:MET:C 1:A:86:ILE:N 13 8.92 (1,465) 1:A:138:LEU:C 1:A:139:HIS:N 1:A:139:HIS:CA 1:A:139:HIS:C 18 8.83 (1,230) 1:A:138:LEU:C 1:A:139:HIS:N 1:A:139:HIS:CA 1:A:139:HIS:C 18 8.83 (1,340) 1:A:67:PHE:N 1:A:67:PHE:CA 1:A:67:PHE:C 1:A:68:THR:N 2 8.73 (1,105) 1:A:67:PHE:N 1:A:67:PHE:CA 1:A:67:PHE:C 1:A:68:THR:N 2 8.73 (1,373) 1:A:87:ARG:N 1:A:87:ARG:CA 1:A:87:ARG:C 1:A:88:THR:N 19 8.7 (1,138) 1:A:39:GLU:N 1:A:39:GLU:CA 1:A:39:GLU:C 1:A:40:GLY:N 15 8.67 (1,296) 1:A:39:GLU:N 1:A:39:GLU:CA 1:A:39:GLU:C 1:A:40:GLY:N 15 8.67							
(1,134) 1:A:85:MET:N 1:A:85:MET:CA 1:A:85:MET:C 1:A:86:ILE:N 13 8.92 (1,465) 1:A:138:LEU:C 1:A:139:HIS:N 1:A:139:HIS:CA 1:A:139:HIS:C 18 8.83 (1,230) 1:A:138:LEU:C 1:A:139:HIS:N 1:A:139:HIS:CA 1:A:139:HIS:C 18 8.83 (1,340) 1:A:67:PHE:N 1:A:67:PHE:CA 1:A:67:PHE:C 1:A:68:THR:N 2 8.73 (1,105) 1:A:67:PHE:N 1:A:67:PHE:CA 1:A:67:PHE:C 1:A:68:THR:N 2 8.73 (1,373) 1:A:87:ARG:N 1:A:87:ARG:CA 1:A:87:ARG:C 1:A:88:THR:N 19 8.7 (1,138) 1:A:87:ARG:N 1:A:39:GLU:CA 1:A:39:GLU:C 1:A:40:GLY:N 15 8.67 (1,296) 1:A:39:GLU:N 1:A:39:GLU:CA 1:A:39:GLU:C 1:A:40:GLY:N 15 8.67	· · /						
(1,465) 1:A:138:LEU:C 1:A:139:HIS:N 1:A:139:HIS:CA 1:A:139:HIS:C 18 8.83 (1,230) 1:A:138:LEU:C 1:A:139:HIS:N 1:A:139:HIS:CA 1:A:139:HIS:C 18 8.83 (1,340) 1:A:67:PHE:N 1:A:67:PHE:CA 1:A:67:PHE:C 1:A:68:THR:N 2 8.73 (1,105) 1:A:67:PHE:N 1:A:67:PHE:CA 1:A:67:PHE:C 1:A:68:THR:N 2 8.73 (1,373) 1:A:87:ARG:N 1:A:87:ARG:CA 1:A:87:ARG:C 1:A:88:THR:N 19 8.7 (1,138) 1:A:87:ARG:N 1:A:87:ARG:CA 1:A:87:ARG:C 1:A:88:THR:N 19 8.7 (1,61) 1:A:39:GLU:N 1:A:39:GLU:CA 1:A:39:GLU:C 1:A:40:GLY:N 15 8.67 (1,296) 1:A:39:GLU:N 1:A:39:GLU:CA 1:A:39:GLU:C 1:A:40:GLY:N 15 8.67							
(1,230) 1:A:138:LEU:C 1:A:139:HIS:N 1:A:139:HIS:CA 1:A:139:HIS:C 18 8.83 (1,340) 1:A:67:PHE:N 1:A:67:PHE:CA 1:A:67:PHE:C 1:A:68:THR:N 2 8.73 (1,105) 1:A:67:PHE:N 1:A:67:PHE:CA 1:A:67:PHE:C 1:A:68:THR:N 2 8.73 (1,373) 1:A:87:ARG:N 1:A:87:ARG:CA 1:A:87:ARG:C 1:A:88:THR:N 19 8.7 (1,138) 1:A:87:ARG:N 1:A:39:GLU:CA 1:A:39:GLU:C 1:A:40:GLY:N 15 8.67 (1,296) 1:A:39:GLU:N 1:A:39:GLU:CA 1:A:39:GLU:C 1:A:40:GLY:N 15 8.67	/						
(1,340) 1:A:67:PHE:N 1:A:67:PHE:CA 1:A:67:PHE:C 1:A:68:THR:N 2 8.73 (1,105) 1:A:67:PHE:N 1:A:67:PHE:CA 1:A:67:PHE:C 1:A:68:THR:N 2 8.73 (1,373) 1:A:87:ARG:N 1:A:87:ARG:CA 1:A:87:ARG:C 1:A:88:THR:N 19 8.7 (1,138) 1:A:87:ARG:N 1:A:87:ARG:CA 1:A:87:ARG:C 1:A:88:THR:N 19 8.7 (1,61) 1:A:39:GLU:N 1:A:39:GLU:CA 1:A:39:GLU:C 1:A:40:GLY:N 15 8.67 (1,296) 1:A:39:GLU:N 1:A:39:GLU:CA 1:A:39:GLU:C 1:A:40:GLY:N 15 8.67	/						
(1,105) 1:A:67:PHE:N 1:A:67:PHE:CA 1:A:67:PHE:C 1:A:68:THR:N 2 8.73 (1,373) 1:A:87:ARG:N 1:A:87:ARG:CA 1:A:87:ARG:C 1:A:88:THR:N 19 8.7 (1,138) 1:A:87:ARG:N 1:A:87:ARG:CA 1:A:87:ARG:C 1:A:88:THR:N 19 8.7 (1,61) 1:A:39:GLU:N 1:A:39:GLU:CA 1:A:39:GLU:C 1:A:40:GLY:N 15 8.67 (1,296) 1:A:39:GLU:N 1:A:39:GLU:CA 1:A:39:GLU:C 1:A:40:GLY:N 15 8.67							
(1,373) 1:A:87:ARG:N 1:A:87:ARG:CA 1:A:87:ARG:C 1:A:88:THR:N 19 8.7 (1,138) 1:A:87:ARG:N 1:A:87:ARG:CA 1:A:87:ARG:C 1:A:88:THR:N 19 8.7 (1,61) 1:A:39:GLU:N 1:A:39:GLU:CA 1:A:39:GLU:C 1:A:40:GLY:N 15 8.67 (1,296) 1:A:39:GLU:N 1:A:39:GLU:CA 1:A:39:GLU:C 1:A:40:GLY:N 15 8.67	/						
(1,138) 1:A:87:ARG:N 1:A:87:ARG:CA 1:A:87:ARG:C 1:A:88:THR:N 19 8.7 (1,61) 1:A:39:GLU:N 1:A:39:GLU:CA 1:A:39:GLU:C 1:A:40:GLY:N 15 8.67 (1,296) 1:A:39:GLU:N 1:A:39:GLU:CA 1:A:39:GLU:C 1:A:40:GLY:N 15 8.67	\ . /						
(1,61) 1:A:39:GLU:N 1:A:39:GLU:CA 1:A:39:GLU:C 1:A:40:GLY:N 15 8.67 (1,296) 1:A:39:GLU:N 1:A:39:GLU:CA 1:A:39:GLU:C 1:A:40:GLY:N 15 8.67	· · /						
(1,296) 1:A:39:GLU:N 1:A:39:GLU:CA 1:A:39:GLU:C 1:A:40:GLY:N 15 8.67	· · /						
	· · /						
(1,397) 1:A:99:LEU:N 1:A:99:LEU:CA 1:A:99:LEU:C 1:A:100:GLY:N 3 8.66	(1,397)	1:A:99:LEU:N	1:A:99:LEU:CA	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	3	8.66



	ed from previous pe	•			3.5.1.1	T70 1 10 ()
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	$\textbf{Violation} \ (\circ)$
(1,162)	1:A:99:LEU:N	1:A:99:LEU:CA	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	3	8.66
(1,412)	1:A:108:GLY:N	1:A:108:GLY:CA	1:A:108:GLY:C	1:A:109:PRO:N	3	8.62
(1,177)	1:A:108:GLY:N	1:A:108:GLY:CA	1:A:108:GLY:C	1:A:109:PRO:N	3	8.62
(1,58)	1:A:37:LYS:C	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	8	8.57
(1,293)	1:A:37:LYS:C	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	8	8.57
(1,94)	1:A:60:SER:N	1:A:60:SER:CA	1:A:60:SER:C	1:A:61:GLN:N	13	8.36
(1,329)	1:A:60:SER:N	1:A:60:SER:CA	1:A:60:SER:C	1:A:61:GLN:N	13	8.36
(1,456)	1:A:133:GLY:N	1:A:133:GLY:CA	1:A:133:GLY:C	1:A:134:TYR:N	4	7.85
(1,221)	1:A:133:GLY:N	1:A:133:GLY:CA	1:A:133:GLY:C	1:A:134:TYR:N	4	7.85
(1,338)	1:A:66:SER:N	1:A:66:SER:CA	1:A:66:SER:C	1:A:67:PHE:N	1	7.8
(1,103)	1:A:66:SER:N	1:A:66:SER:CA	1:A:66:SER:C	1:A:67:PHE:N	1	7.8
(1,391)	1:A:96:ASP:N	1:A:96:ASP:CA	1:A:96:ASP:C	1:A:97:SER:N	20	7.76
(1,156)	1:A:96:ASP:N	1:A:96:ASP:CA	1:A:96:ASP:C	1:A:97:SER:N	20	7.76
(1,391)	1:A:96:ASP:N	1:A:96:ASP:CA	1:A:96:ASP:C	1:A:97:SER:N	1	7.72
(1,156)	1:A:96:ASP:N	1:A:96:ASP:CA	1:A:96:ASP:C	1:A:97:SER:N	1	7.72
(1,421)	1:A:114:TYR:N	1:A:114:TYR:CA	1:A:114:TYR:C	1:A:115:CYS:N	9	7.67
(1,186)	1:A:114:TYR:N	1:A:114:TYR:CA	1:A:114:TYR:C	1:A:115:CYS:N	9	7.67
(1,345)	1:A:70:PRO:N	1:A:70:PRO:CA	1:A:70:PRO:C	1:A:71:ILE:N	14	7.59
(1,110)	1:A:70:PRO:N	1:A:70:PRO:CA	1:A:70:PRO:C	1:A:71:ILE:N	14	7.59
(1,79)	1:A:51:LEU:C	1:A:52:PHE:N	1:A:52:PHE:CA	1:A:52:PHE:C	4	7.56
(1,314)	1:A:51:LEU:C	1:A:52:PHE:N	1:A:52:PHE:CA	1:A:52:PHE:C	4	7.56
(1,389)	1:A:95:ALA:N	1:A:95:ALA:CA	1:A:95:ALA:C	1:A:96:ASP:N	17	7.48
(1,154)	1:A:95:ALA:N	1:A:95:ALA:CA	1:A:95:ALA:C	1:A:96:ASP:N	17	7.48
(1,89)	1:A:57:LYS:C	1:A:58:PHE:N	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:C	15	7.27
(1,324)	1:A:57:LYS:C	1:A:58:PHE:N	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:C	15	7.27
(1,59)	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	1:A:39:GLU:N	6	7.22
(1,294)	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	1:A:39:GLU:N	6	7.22
(1,455)	1:A:132:GLU:C	1:A:133:GLY:N	1:A:133:GLY:CA	1:A:133:GLY:C	5	7.21
(1,220)	1:A:132:GLU:C	1:A:133:GLY:N	1:A:133:GLY:CA	1:A:133:GLY:C	5	7.21
(1,389)	1:A:95:ALA:N	1:A:95:ALA:CA	1:A:95:ALA:C	1:A:96:ASP:N	10	7.18
(1,154)	1:A:95:ALA:N	1:A:95:ALA:CA	1:A:95:ALA:C	1:A:96:ASP:N	10	7.18
(1,419)	1:A:113:ARG:N	1:A:113:ARG:CA	1:A:113:ARG:C	1:A:114:TYR:N	13	7.11
(1,184)	1:A:113:ARG:N	1:A:113:ARG:CA	1:A:113:ARG:C	1:A:114:TYR:N	13	7.11
(1,42)	1:A:24:GLY:N	1:A:24:GLY:CA	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	11	6.97
(1,277)	1:A:24:GLY:N	1:A:24:GLY:CA	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	11	6.97
(1,456)	1:A:133:GLY:N	1:A:133:GLY:CA	1:A:133:GLY:C	1:A:134:TYR:N	12	6.94
(1,221)	1:A:133:GLY:N	1:A:133:GLY:CA	1:A:133:GLY:C	1:A:134:TYR:N	12	6.94
(1,87)	1:A:56:ASP:C	1:A:57:LYS:N	1:A:57:LYS:CA	1:A:57:LYS:C	8	6.9
(1,322)	1:A:56:ASP:C	1:A:57:LYS:N	1:A:57:LYS:CA	1:A:57:LYS:C	8	6.9
(1,456)	1:A:133:GLY:N	1:A:133:GLY:CA	1:A:133:GLY:C	1:A:134:TYR:N	18	6.86
(1,221)	1:A:133:GLY:N	1:A:133:GLY:CA	1:A:133:GLY:C	1:A:134:TYR:N	18	6.86
(1,246)	1:A:7:GLU:C	1:A:8:LYS:N	1:A:8:LYS:CA	1:A:8:LYS:C	12	6.8
(1,11)	1:A:7:GLU:C	1:A:8:LYS:N	1:A:8:LYS:CA	1:A:8:LYS:C	12	6.8
(1,59)	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	1:A:39:GLU:N	17	6.79
(1,294)	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	1:A:39:GLU:N	17	6.79
(1,397)	1:A:99:LEU:N	1:A:99:LEU:CA	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	4	6.78
(1,162)	1:A:99:LEU:N	1:A:99:LEU:CA	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	4	6.78
(1,42)	1:A:24:GLY:N	1:A:24:GLY:CA	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	8	6.77
(1,277)	1:A:24:GLY:N	1:A:24:GLY:CA	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	8	6.77
(1,261)	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	1:A:16:GLN:N	17	6.75
(1,26)	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	1:A:16:GLN:N	17	6.75



	ed from previous po	*				
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (\circ)
(1,58)	1:A:37:LYS:C	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	13	6.63
(1,293)	1:A:37:LYS:C	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	13	6.63
(1,80)	1:A:52:PHE:N	1:A:52:PHE:CA	1:A:52:PHE:C	1:A:53:THR:N	4	6.6
(1,374)	1:A:87:ARG:C	1:A:88:THR:N	1:A:88:THR:CA	1:A:88:THR:C	19	6.6
(1,315)	1:A:52:PHE:N	1:A:52:PHE:CA	1:A:52:PHE:C	1:A:53:THR:N	4	6.6
(1,139)	1:A:87:ARG:C	1:A:88:THR:N	1:A:88:THR:CA	1:A:88:THR:C	19	6.6
(1,395)	1:A:98:HIS:N	1:A:98:HIS:CA	1:A:98:HIS:C	1:A:99:LEU:N	19	6.55
(1,387)	1:A:94:THR:N	1:A:94:THR:CA	1:A:94:THR:C	1:A:95:ALA:N	6	6.55
(1,160)	1:A:98:HIS:N	1:A:98:HIS:CA	1:A:98:HIS:C	1:A:99:LEU:N	19	6.55
(1,152)	1:A:94:THR:N	1:A:94:THR:CA	1:A:94:THR:C	1:A:95:ALA:N	6	6.55
(1,388)	1:A:94:THR:C	1:A:95:ALA:N	1:A:95:ALA:CA	1:A:95:ALA:C	15	6.46
(1,153)	1:A:94:THR:C	1:A:95:ALA:N	1:A:95:ALA:CA	1:A:95:ALA:C	15	6.46
(1,49)	1:A:31:ASN:N	1:A:31:ASN:CA	1:A:31:ASN:C	1:A:32:GLU:N	7	6.45
(1,284)	1:A:31:ASN:N	1:A:31:ASN:CA	1:A:31:ASN:C	1:A:32:GLU:N	7	6.45
(1,391)	1:A:96:ASP:N	1:A:96:ASP:CA	1:A:96:ASP:C	1:A:97:SER:N	18	6.32
(1,156)	1:A:96:ASP:N	1:A:96:ASP:CA	1:A:96:ASP:C	1:A:97:SER:N	18	6.32
(1,94)	1:A:60:SER:N	1:A:60:SER:CA	1:A:60:SER:C	1:A:61:GLN:N	20	6.3
(1,329)	1:A:60:SER:N	1:A:60:SER:CA	1:A:60:SER:C	1:A:61:GLN:N	20	6.3
(1,389)	1:A:95:ALA:N	1:A:95:ALA:CA	1:A:95:ALA:C	1:A:96:ASP:N	3	6.28
(1,380)	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	1:A:91:ARG:CA	1:A:91:ARG:C	6	6.28
(1,154)	1:A:95:ALA:N	1:A:95:ALA:CA	1:A:95:ALA:C	1:A:96:ASP:N	3	6.28
(1,145)	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	1:A:91:ARG:CA	1:A:91:ARG:C	6	6.28
(1,42)	1:A:24:GLY:N	1:A:24:GLY:CA	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	10	6.27
(1,336)	1:A:65:PRO:N	1:A:65:PRO:CA	1:A:65:PRO:C	1:A:66:SER:N	17	6.27
(1,277)	1:A:24:GLY:N	1:A:24:GLY:CA	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	10	6.27
(1,101)	1:A:65:PRO:N	1:A:65:PRO:CA	1:A:65:PRO:C	1:A:66:SER:N	17	6.27
(1,336)	1:A:65:PRO:N	1:A:65:PRO:CA	1:A:65:PRO:C	1:A:66:SER:N	11	6.26
(1,101)	1:A:65:PRO:N	1:A:65:PRO:CA	1:A:65:PRO:C	1:A:66:SER:N	11	6.26
(1,391)	1:A:96:ASP:N	1:A:96:ASP:CA	1:A:96:ASP:C	1:A:97:SER:N	15	6.24
(1,156)	1:A:96:ASP:N	1:A:96:ASP:CA	1:A:96:ASP:C	1:A:97:SER:N	15	6.24
(1,391)	1:A:96:ASP:N	1:A:96:ASP:CA	1:A:96:ASP:C	1:A:97:SER:N	6	6.21
(1,156)	1:A:96:ASP:N	1:A:96:ASP:CA	1:A:96:ASP:C	1:A:97:SER:N	6	6.21
(1,395)	1:A:98:HIS:N	1:A:98:HIS:CA	1:A:98:HIS:C	1:A:99:LEU:N	13	6.17
(1,340)	1:A:67:PHE:N	1:A:67:PHE:CA	1:A:67:PHE:C	1:A:68:THR:N	1	6.17
(1,160)	1:A:98:HIS:N	1:A:98:HIS:CA	1:A:98:HIS:C	1:A:99:LEU:N	13	6.17
(1,105)	1:A:67:PHE:N	1:A:67:PHE:CA	1:A:67:PHE:C	1:A:68:THR:N	1	6.17
(1,388)	1:A:94:THR:C	1:A:95:ALA:N	1:A:95:ALA:CA	1:A:95:ALA:C	18	6.14
(1,153)	1:A:94:THR:C	1:A:95:ALA:N	1:A:95:ALA:CA	1:A:95:ALA:C	18	6.14
(1,456)	1:A:133:GLY:N	1:A:133:GLY:CA	1:A:133:GLY:C	1:A:134:TYR:N	16	6.04
(1,373)	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	1:A:88:THR:N	18	6.04
(1,338)	1:A:66:SER:N	1:A:66:SER:CA	1:A:66:SER:C	1:A:67:PHE:N	12	6.04
(1,221)	1:A:133:GLY:N	1:A:133:GLY:CA	1:A:133:GLY:C	1:A:134:TYR:N	16	6.04
(1,138)	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	1:A:88:THR:N	18	6.04
(1,103)	1:A:66:SER:N	1:A:66:SER:CA	1:A:66:SER:C	1:A:67:PHE:N	12	6.04
(1,351)	1:A:74:GLU:N	1:A:74:GLU:CA	1:A:74:GLU:C	1:A:75:VAL:N	5	6.02
(1,116)	1:A:74:GLU:N	1:A:74:GLU:CA	1:A:74:GLU:C	1:A:75:VAL:N	5	6.02
(1,423)	1:A:115:CYS:N	1:A:115:CYS:CA	1:A:115:CYS:C	1:A:116:ILE:N	6	6.0
(1,188)	1:A:115:CYS:N	1:A:115:CYS:CA	1:A:115:CYS:C	1:A:116:ILE:N	6	6.0
(1,380)	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	1:A:91:ARG:CA	1:A:91:ARG:C	11	5.99
(1,145)	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	1:A:91:ARG:CA	1:A:91:ARG:C	11	5.99
(1,397)	1:A:99:LEU:N	1:A:99:LEU:CA	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	20	5.98
		1		1	Continu	ed on next page



	ed from previous pe		A	A	24 11	T 70 1 10 ()
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (°)
(1,162)	1:A:99:LEU:N	1:A:99:LEU:CA	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	20	5.98
(1,345)	1:A:70:PRO:N	1:A:70:PRO:CA	1:A:70:PRO:C	1:A:71:ILE:N	16	5.96
(1,110)	1:A:70:PRO:N	1:A:70:PRO:CA	1:A:70:PRO:C	1:A:71:ILE:N	16	5.96
(1,390)	1:A:95:ALA:C	1:A:96:ASP:N	1:A:96:ASP:CA	1:A:96:ASP:C	4	5.88
(1,155)	1:A:95:ALA:C	1:A:96:ASP:N	1:A:96:ASP:CA	1:A:96:ASP:C	4	5.88
(1,42)	1:A:24:GLY:N	1:A:24:GLY:CA	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	14	5.84
(1,277)	1:A:24:GLY:N	1:A:24:GLY:CA	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	14	5.84
(1,260)	1:A:14:ARG:C	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	17	5.84
(1,25)	1:A:14:ARG:C	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	17	5.84
(1,349)	1:A:73:GLU:N	1:A:73:GLU:CA	1:A:73:GLU:C	1:A:74:GLU:N	14	5.83
(1,114)	1:A:73:GLU:N	1:A:73:GLU:CA	1:A:73:GLU:C	1:A:74:GLU:N	14	5.83
(1,345)	1:A:70:PRO:N	1:A:70:PRO:CA	1:A:70:PRO:C	1:A:71:ILE:N	7	5.82
(1,110)	1:A:70:PRO:N	1:A:70:PRO:CA	1:A:70:PRO:C	1:A:71:ILE:N	7	5.82
(1,419)	1:A:113:ARG:N	1:A:113:ARG:CA	1:A:113:ARG:C	1:A:114:TYR:N	1	5.81
(1,184)	1:A:113:ARG:N	1:A:113:ARG:CA	1:A:113:ARG:C	1:A:114:TYR:N	1	5.81
(1,57)	1:A:37:LYS:N	1:A:37:LYS:CA	1:A:37:LYS:C	1:A:38:GLU:N	15	5.76
(1,423)	1:A:115:CYS:N	1:A:115:CYS:CA	1:A:115:CYS:C	1:A:116:ILE:N	15	5.76
(1,292)	1:A:37:LYS:N	1:A:37:LYS:CA	1:A:37:LYS:C	1:A:38:GLU:N	15	5.76
(1,188)	1:A:115:CYS:N	1:A:115:CYS:CA	1:A:115:CYS:C	1:A:116:ILE:N	15	5.76
(1,336)	1:A:65:PRO:N	1:A:65:PRO:CA	1:A:65:PRO:C	1:A:66:SER:N	9	5.75
(1,101)	1:A:65:PRO:N	1:A:65:PRO:CA	1:A:65:PRO:C	1:A:66:SER:N	9	5.75
(1,423)	1:A:115:CYS:N	1:A:115:CYS:CA	1:A:115:CYS:C	1:A:116:ILE:N	10	5.72
(1,188)	1:A:115:CYS:N	1:A:115:CYS:CA	1:A:115:CYS:C	1:A:116:ILE:N	10	5.72
(1,423)	1:A:115:CYS:N	1:A:115:CYS:CA	1:A:115:CYS:C	1:A:116:ILE:N	16	5.71
(1,188)	1:A:115:CYS:N	1:A:115:CYS:CA	1:A:115:CYS:C	1:A:116:ILE:N	16	5.71
(1,395)	1:A:98:HIS:N	1:A:98:HIS:CA	1:A:98:HIS:C	1:A:99:LEU:N	18	5.67
(1,160)	1:A:98:HIS:N	1:A:98:HIS:CA	1:A:98:HIS:C	1:A:99:LEU:N	18	5.67
(1,419)	1:A:113:ARG:N	1:A:113:ARG:CA	1:A:113:ARG:C	1:A:114:TYR:N	18	5.66
(1,184)	1:A:113:ARG:N	1:A:113:ARG:CA	1:A:113:ARG:C	1:A:114:TYR:N	18	5.66
(1,365)	1:A:82:SER:N	1:A:82:SER:CA	1:A:82:SER:C	1:A:83:HIS:N	17	5.63
(1,130)	1:A:82:SER:N	1:A:82:SER:CA	1:A:82:SER:C	1:A:83:HIS:N	17	5.63
(1,464)	1:A:138:LEU:N	1:A:138:LEU:CA	1:A:138:LEU:C	1:A:139:HIS:N	7	5.61
(1,229)	1:A:138:LEU:N	1:A:138:LEU:CA	1:A:138:LEU:C	1:A:139:HIS:N	7	5.61
(1,94)	1:A:60:SER:N	1:A:60:SER:CA	1:A:60:SER:C	1:A:61:GLN:N	1	5.58
(1,329)	1:A:60:SER:N	1:A:60:SER:CA	1:A:60:SER:C	1:A:61:GLN:N	1	5.58
(1,58)	1:A:37:LYS:C	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	18	5.56
(1,293)	1:A:37:LYS:C	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	18	5.56
(1,387)	1:A:94:THR:N	1:A:94:THR:CA	1:A:94:THR:C	1:A:95:ALA:N	15	5.51
(1,152)	1:A:94:THR:N	1:A:94:THR:CA	1:A:94:THR:C	1:A:95:ALA:N	15	5.51
(1,456)	1:A:133:GLY:N	1:A:133:GLY:CA	1:A:133:GLY:C	1:A:134:TYR:N	15	5.49
(1,451)	1:A:130:LYS:C	1:A:131:GLU:N	1:A:131:GLU:CA	1:A:131:GLU:C	12	5.49
(1,221)	1:A:133:GLY:N	1:A:133:GLY:CA	1:A:133:GLY:C	1:A:134:TYR:N	15	5.49
(1,216)	1:A:130:LYS:C	1:A:131:GLU:N	1:A:131:GLU:CA	1:A:131:GLU:C	12	5.49
(1,459)	1:A:135:GLU:C	1:A:136:SER:N	1:A:136:SER:CA	1:A:136:SER:C	6	5.48
(1,423)	1:A:115:CYS:N	1:A:115:CYS:CA	1:A:115:CYS:C	1:A:116:ILE:N	5	5.48
(1,347)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:GLU:N	15	5.48
(1,224)	1:A:135:GLU:C	1:A:136:SER:N	1:A:136:SER:CA	1:A:136:SER:C	6	5.48
(1,188)	1:A:115:CYS:N	1:A:115:CYS:CA	1:A:115:CYS:C	1:A:116:ILE:N	5	5.48
(1,112)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:GLU:N	15	5.48
(1,423)	1:A:115:CYS:N	1:A:115:CYS:CA	1:A:115:CYS:C	1:A:116:ILE:N	3	5.47
_ \	1:A:115:CYS:N	1:A:115:CYS:CA	1:A:115:CYS:C	1:A:116:ILE:N	3	5.47



Key	$rac{d\ from\ previous\ po}{\mathbf{Atom-1}}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,374)	1:A:87:ARG:C	1:A:88:THR:N	1:A:88:THR:CA	1:A:88:THR:C	20	5.45
(1,139)	1:A:87:ARG:C	1:A:88:THR:N	1:A:88:THR:CA	1:A:88:THR:C	20	5.45
(1,458)	1:A:135:GLU:N	1:A:135:GLU:CA	1:A:135:GLU:C	1:A:136:SER:N	4	5.41
(1,223)	1:A:135:GLU:N	1:A:135:GLU:CA	1:A:135:GLU:C	1:A:136:SER:N	4	5.41
(1,394)	1:A:97:SER:C	1:A:98:HIS:N	1:A:98:HIS:CA	1:A:98:HIS:C	7	5.35
(1,159)	1:A:97:SER:C	1:A:98:HIS:N	1:A:98:HIS:CA	1:A:98:HIS:C	7	5.35
(1,416)	1:A:111:GLY:C	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	7	5.34
(1,181)	1:A:111:GLY:C	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	7	5.34
(1,416)	1:A:111:GLY:C	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	15	5.3
(1,181)	1:A:111:GLY:C	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	15	5.3
(1,423)	1:A:115:CYS:N	1:A:115:CYS:CA	1:A:115:CYS:C	1:A:116:ILE:N	11	5.29
(1,188)	1:A:115:CYS:N	1:A:115:CYS:CA	1:A:115:CYS:C	1:A:116:ILE:N	11	5.29
(1,42)	1:A:24:GLY:N	1:A:24:GLY:CA	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	6	5.22
(1,277)	1:A:24:GLY:N	1:A:24:GLY:CA	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	6	5.22
(1,456)	1:A:133:GLY:N	1:A:133:GLY:CA	1:A:133:GLY:C	1:A:134:TYR:N	1	5.14
(1,221)	1:A:133:GLY:N	1:A:133:GLY:CA	1:A:133:GLY:C	1:A:134:TYR:N	1	5.14
(1,87)	1:A:56:ASP:C	1:A:57:LYS:N	1:A:57:LYS:CA	1:A:57:LYS:C	15	5.13
(1,456)	1:A:133:GLY:N	1:A:133:GLY:CA	1:A:133:GLY:C	1:A:134:TYR:N	11	5.13
(1,322)	1:A:56:ASP:C	1:A:57:LYS:N	1:A:57:LYS:CA	1:A:57:LYS:C	15	5.13
(1,221)	1:A:133:GLY:N	1:A:133:GLY:CA	1:A:133:GLY:C	1:A:134:TYR:N	11	5.13
(1,470)	1:A:141:PHE:N	1:A:141:PHE:CA	1:A:141:PHE:C	1:A:142:ASN:N	18	5.12
(1,345)	1:A:70:PRO:N	1:A:70:PRO:CA	1:A:70:PRO:C	1:A:71:ILE:N	4	5.12
(1,235)	1:A:141:PHE:N	1:A:141:PHE:CA	1:A:141:PHE:C	1:A:142:ASN:N	18	5.12
(1,110)	1:A:70:PRO:N	1:A:70:PRO:CA	1:A:70:PRO:C	1:A:71:ILE:N	4	5.12
(1,465)	1:A:138:LEU:C	1:A:139:HIS:N	1:A:139:HIS:CA	1:A:139:HIS:C	4	5.09
(1,230)	1:A:138:LEU:C	1:A:139:HIS:N	1:A:139:HIS:CA	1:A:139:HIS:C	4	5.09
(1,421)	1:A:114:TYR:N	1:A:114:TYR:CA	1:A:114:TYR:C	1:A:115:CYS:N	11	5.05
(1,186)	1:A:114:TYR:N	1:A:114:TYR:CA	1:A:114:TYR:C	1:A:115:CYS:N	11	5.05
(1,387)	1:A:94:THR:N	1:A:94:THR:CA	1:A:94:THR:C	1:A:95:ALA:N	2	4.99
(1,345)	1:A:70:PRO:N	1:A:70:PRO:CA	1:A:70:PRO:C	1:A:71:ILE:N	8	4.99
(1,152)	1:A:94:THR:N	1:A:94:THR:CA	1:A:94:THR:C	1:A:95:ALA:N	2	4.99
(1,110)	1:A:70:PRO:N	1:A:70:PRO:CA	1:A:70:PRO:C	1:A:71:ILE:N	8	4.99
(1,397)	1:A:99:LEU:N	1:A:99:LEU:CA	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	12	4.98
(1,162)	1:A:99:LEU:N	1:A:99:LEU:CA	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	12	4.98
· · /	1:A:115:CYS:N	1:A:115:CYS:CA	1:A:115:CYS:C	1:A:116:ILE:N	7	4.97
(1,188)	1:A:115:CYS:N	1:A:115:CYS:CA	1:A:115:CYS:C	1:A:116:ILE:N	7	4.97
(1,390)	1:A:95:ALA:C	1:A:96:ASP:N	1:A:96:ASP:CA	1:A:96:ASP:C	17	4.93
(1,155)	1:A:95:ALA:C	1:A:96:ASP:N	1:A:96:ASP:CA	1:A:96:ASP:C	17	4.93
(1,378)	1:A:89:GLU:C	1:A:90:VAL:N	1:A:90:VAL:CA	1:A:90:VAL:C	12	4.91
(1,143)	1:A:89:GLU:C	1:A:90:VAL:N	1:A:90:VAL:CA	1:A:90:VAL:C	12	4.91
(1,342)	1:A:68:THR:N	1:A:68:THR:CA	1:A:68:THR:C	1:A:69:LYS:N	18	4.9
(1,107)	1:A:68:THR:N	1:A:68:THR:CA	1:A:68:THR:C	1:A:69:LYS:N	18	4.9
(1,387)	1:A:94:THR:N	1:A:94:THR:CA	1:A:94:THR:C	1:A:95:ALA:N	1	4.87
(1,152)	1:A:94:THR:N	1:A:94:THR:CA	1:A:94:THR:C	1:A:95:ALA:N	1	4.87
(1,391)	1:A:96:ASP:N	1:A:96:ASP:CA	1:A:96:ASP:C	1:A:97:SER:N	3	4.86
(1,156)	1:A:96:ASP:N	1:A:96:ASP:CA	1:A:96:ASP:C	1:A:97:SER:N	3	4.86
(1,371)	1:A:86:ILE:N	1:A:86:ILE:CA	1:A:86:ILE:C	1:A:87:ARG:N	15	4.76
(1,136)	1:A:86:ILE:N	1:A:86:ILE:CA	1:A:86:ILE:C	1:A:87:ARG:N	15	4.76
(1,465)	1:A:138:LEU:C	1:A:139:HIS:N	1:A:139:HIS:CA	1:A:139:HIS:C	8	4.75
(/ / /						
(1,230)	1:A:138:LEU:C	1:A:139:HIS:N	1:A:139:HIS:CA	1:A:139:HIS:C	8	4.75



	ed from previous pe					
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (\circ)
(1,416)	1:A:111:GLY:C	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	17	4.74
(1,184)	1:A:113:ARG:N	1:A:113:ARG:CA	1:A:113:ARG:C	1:A:114:TYR:N	12	4.74
(1,181)	1:A:111:GLY:C	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	17	4.74
(1,397)	1:A:99:LEU:N	1:A:99:LEU:CA	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	7	4.73
(1,162)	1:A:99:LEU:N	1:A:99:LEU:CA	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	7	4.73
(1,411)	1:A:107:PRO:C	1:A:108:GLY:N	1:A:108:GLY:CA	1:A:108:GLY:C	20	4.69
(1,176)	1:A:107:PRO:C	1:A:108:GLY:N	1:A:108:GLY:CA	1:A:108:GLY:C	20	4.69
(1,465)	1:A:138:LEU:C	1:A:139:HIS:N	1:A:139:HIS:CA	1:A:139:HIS:C	15	4.68
(1,230)	1:A:138:LEU:C	1:A:139:HIS:N	1:A:139:HIS:CA	1:A:139:HIS:C	15	4.68
(1,78)	1:A:50:PRO:N	1:A:50:PRO:CA	1:A:50:PRO:C	1:A:51:LEU:N	13	4.67
(1,421)	1:A:114:TYR:N	1:A:114:TYR:CA	1:A:114:TYR:C	1:A:115:CYS:N	13	4.67
(1,313)	1:A:50:PRO:N	1:A:50:PRO:CA	1:A:50:PRO:C	1:A:51:LEU:N	13	4.67
(1,186)	1:A:114:TYR:N	1:A:114:TYR:CA	1:A:114:TYR:C	1:A:115:CYS:N	13	4.67
(1,421)	1:A:114:TYR:N	1:A:114:TYR:CA	1:A:114:TYR:C	1:A:115:CYS:N	12	4.66
(1,186)	1:A:114:TYR:N	1:A:114:TYR:CA	1:A:114:TYR:C	1:A:115:CYS:N	12	4.66
(1,90)	1:A:58:PHE:N	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:C	1:A:59:ASP:N	11	4.64
(1,458)	1:A:135:GLU:N	1:A:135:GLU:CA	1:A:135:GLU:C	1:A:136:SER:N	8	4.64
(1,419)	1:A:113:ARG:N	1:A:113:ARG:CA	1:A:113:ARG:C	1:A:114:TYR:N	19	4.64
(1,325)	1:A:58:PHE:N	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:C	1:A:59:ASP:N	11	4.64
(1,223)	1:A:135:GLU:N	1:A:135:GLU:CA	1:A:135:GLU:C	1:A:136:SER:N	8	4.64
(1,184)	1:A:113:ARG:N	1:A:113:ARG:CA	1:A:113:ARG:C	1:A:114:TYR:N	19	4.64
(1,383)	1:A:92:SER:N	1:A:92:SER:CA	1:A:92:SER:C	1:A:93:ARG:N	6	4.57
(1,148)	1:A:92:SER:N	1:A:92:SER:CA	1:A:92:SER:C	1:A:93:ARG:N	6	4.57
(1,385)	1:A:93:ARG:N	1:A:93:ARG:CA	1:A:93:ARG:C	1:A:94:THR:N	19	4.54
(1,336)	1:A:65:PRO:N	1:A:65:PRO:CA	1:A:65:PRO:C	1:A:66:SER:N	12	4.54
(1,150)	1:A:93:ARG:N	1:A:93:ARG:CA	1:A:93:ARG:C	1:A:94:THR:N	19	4.54
(1,101)	1:A:65:PRO:N	1:A:65:PRO:CA	1:A:65:PRO:C	1:A:66:SER:N	12	4.54
(1,388)	1:A:94:THR:C	1:A:95:ALA:N	1:A:95:ALA:CA	1:A:95:ALA:C	1	4.53
(1,153)	1:A:94:THR:C	1:A:95:ALA:N	1:A:95:ALA:CA	1:A:95:ALA:C	1	4.53
(1,423)	1:A:115:CYS:N	1:A:115:CYS:CA	1:A:115:CYS:C	1:A:116:ILE:N	14	4.51
(1,365)	1:A:82:SER:N	1:A:82:SER:CA	1:A:82:SER:C	1:A:83:HIS:N	3	4.51
(1,188)	1:A:115:CYS:N	1:A:115:CYS:CA	1:A:115:CYS:C	1:A:116:ILE:N	14	4.51
(1,130)	1:A:82:SER:N	1:A:82:SER:CA	1:A:82:SER:C	1:A:83:HIS:N	3	4.51
(1,380)	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	1:A:91:ARG:CA	1:A:91:ARG:C	8	4.47
(1,145)	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	1:A:91:ARG:CA	1:A:91:ARG:C	8	4.47
(1,416)	1:A:111:GLY:C	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	5	4.46
(1,380)	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	1:A:91:ARG:CA	1:A:91:ARG:C	19	4.46
(1,349)	1:A:73:GLU:N	1:A:73:GLU:CA	1:A:73:GLU:C	1:A:74:GLU:N	1	4.46
(1,181)	1:A:111:GLY:C	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	5	4.46
(1,145)	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	1:A:91:ARG:CA	1:A:91:ARG:C	19	4.46
(1,114)	1:A:73:GLU:N	1:A:73:GLU:CA	1:A:73:GLU:C	1:A:74:GLU:N	1	4.46
(1,369)	1:A:85:MET:N	1:A:85:MET:CA	1:A:85:MET:C	1:A:86:ILE:N	17	4.45
(1,333) $(1,134)$	1:A:85:MET:N	1:A:85:MET:CA	1:A:85:MET:C	1:A:86:ILE:N	17	4.45
(1,347)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:GLU:N	13	4.39
(1,347) $(1,112)$	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:GLU:N	13	4.39
(1,112) $(1,470)$	1:A:141:PHE:N	1:A:141:PHE:CA	1:A:141:PHE:C	1:A:142:ASN:N	3	4.38
(1,470) $(1,235)$	1:A:141:PHE:N	1:A:141:PHE:CA	1:A:141:PHE:C	1:A:142:ASN:N	3	4.38
(1,299) $(1,89)$	1:A:57:LYS:C	1:A:58:PHE:N	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:C	18	4.37
(1,84)	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	1:A:55:LYS:N	6	4.37
(1,324)	1:A:57:LYS:C	1:A:58:PHE:N	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:C	18	4.37
(1,324) (1,319)	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	1:A:55:LYS:N	6	4.37
(1,519)	1:A:04:5£K:N	1:A:04:5EK:UA	1:A:04:5ER:U	1:A:99:L12:IN		4.31



(1,465) 1:A:138:LEU:C 1:A:139:HIS:N 1:A:139:HIS:CA 1:A:139:HIS:C 3 4. (1,465) 1:A:138:LEU:C 1:A:139:HIS:N 1:A:139:HIS:CA 1:A:139:HIS:C 13 4. (1,230) 1:A:138:LEU:C 1:A:139:HIS:N 1:A:139:HIS:CA 1:A:139:HIS:C 3 4. (1,230) 1:A:138:LEU:C 1:A:139:HIS:N 1:A:139:HIS:CA 1:A:139:HIS:C 3 4. (1,74) 1:A:46:VAL:C 1:A:47:SER:N 1:A:47:SER:CA 1:A:47:SER:C 5 4. (1,309) 1:A:46:VAL:C 1:A:47:SER:N 1:A:47:SER:CA 1:A:47:SER:C 5 4. (1,309) 1:A:46:VAL:C 1:A:47:SER:N 1:A:47:SER:CA 1:A:47:SER:C 5 4. (1,237) 1:A:3:TYR:N 1:A:3:TYR:CA 1:A:44:ASN:N 11 4. (1,2) 1:A:3:TYR:N 1:A:3:TYR:CA 1:A:4:ASN:N 11 4. (1,20) 1:A:3:6:GLN:N 1:A:6:GLN:CA 1:A:6:GLN:C 1:A:4:2SN:N 19 4. (1,343) 1:A:15:CY	ion (°) 36 36 36 36 37 38 38 38 38 38 38 38 38 38
(1,465) 1:A:138:LEU:C 1:A:139:HIS:N 1:A:139:HIS:CA 1:A:139:HIS:C 13 4. (1,230) 1:A:138:LEU:C 1:A:139:HIS:N 1:A:139:HIS:CA 1:A:139:HIS:C 3 4. (1,230) 1:A:138:LEU:C 1:A:139:HIS:N 1:A:139:HIS:CA 1:A:139:HIS:C 13 4. (1,74) 1:A:46:VAL:C 1:A:47:SER:N 1:A:47:SER:CA 1:A:47:SER:C 5 4. (1,309) 1:A:46:VAL:C 1:A:47:SER:N 1:A:47:SER:CA 1:A:47:SER:C 5 4. (1,309) 1:A:46:VAL:C 1:A:47:SER:N 1:A:47:SER:CB 5 4. (1,309) 1:A:46:VAL:C 1:A:47:SER:N 1:A:47:SER:CB 1:A:44:ASN:N 11 4. (1,27) 1:A:3:TYR:N 1:A:3:TYR:CA 1:A:3:TYR:C 1:A:44:ASN:N 11 4. (1,96) 1:A:61:GLN:N 1:A:61:GLN:CA 1:A:61:GLN:C 1:A:42:SN:N 19 4. (1,331) 1:A:61:GLN:N 1:A:61:GLN:CA 1:A:61:GLN:C 1:A:62:CYS:N 19 4. (1	36 36 36 37 38 38 38 31 31 31 32 29 27 27 27 27 27 27 27 22 22 22
(1,230) 1:A:138:LEU:C 1:A:139:HIS:N 1:A:139:HIS:CA 1:A:139:HIS:C 3 4. (1,230) 1:A:138:LEU:C 1:A:139:HIS:N 1:A:139:HIS:CA 1:A:139:HIS:C 13 4. (1,74) 1:A:46:VAL:C 1:A:47:SER:N 1:A:47:SER:CA 1:A:47:SER:C 5 4. (1,309) 1:A:46:VAL:C 1:A:47:SER:N 1:A:47:SER:CA 1:A:47:SER:C 5 4. (1,237) 1:A:3:TYR:N 1:A:3:TYR:CA 1:A:43:TYR:C 1:A:44:ASN:N 11 4. (1,2) 1:A:6:GLN:N 1:A:6:GLN:CA 1:A:6:GLN:C 1:A:15:CYS:N 19 4. (1,423) 1:A:115:CYS:N 1:A:115:CYS:CA 1:A:115:CYS:C 1:A:116:ILE:N 17 4 (1,488) 1:A:133:GLY:N 1:A:133:GLY:CA 1:A:133:GLY:C 1:A:134:TYR:N 3 </td <td>36 36 36 37 38 38 38 31 31 31 31 32 29 27 27 27 27 27 27 27 22 22 22</td>	36 36 36 37 38 38 38 31 31 31 31 32 29 27 27 27 27 27 27 27 22 22 22
(1,230) 1:A:138:LEU:C 1:A:139:HIS:N 1:A:139:HIS:CA 1:A:139:HIS:C 13 4. (1,74) 1:A:46:VAL:C 1:A:47:SER:N 1:A:47:SER:CA 1:A:47:SER:C 5 4. (1,309) 1:A:46:VAL:C 1:A:47:SER:N 1:A:47:SER:CA 1:A:47:SER:C 5 4. (1,237) 1:A:3:TYR:N 1:A:3:TYR:CA 1:A:3:TYR:C 1:A:4:ASN:N 11 4. (1,2) 1:A:3:TYR:N 1:A:3:TYR:CA 1:A:3:TYR:C 1:A:4:ASN:N 11 4. (1,96) 1:A:61:GLN:N 1:A:61:GLN:CA 1:A:61:GLN:C 1:A:62:CYS:N 19 4. (1,331) 1:A:61:GLN:N 1:A:61:GLN:CA 1:A:61:GLN:C 1:A:62:CYS:N 19 4. (1,423) 1:A:115:CYS:N 1:A:115:CYS:CA 1:A:115:CYS:C 1:A:116:LE:N 17 4 (1,486) 1:A:133:GLY:N 1:A:133:GLY:CA 1:A:133:GLY:C 1:A:134:TYR:N 3 4. (1,221) 1:A:133:GLY:N 1:A:136:SER:C 1:A:134:TYR:N 3 4. (1,239)	36 34 34 34 33 31 31 31 32 29 29 27 27 27 27 27 22 22 22
(1,74) 1:A:46:VAL:C 1:A:47:SER:N 1:A:47:SER:CA 1:A:47:SER:C 5 4. (1,309) 1:A:46:VAL:C 1:A:47:SER:N 1:A:47:SER:CA 1:A:47:SER:C 5 4. (1,237) 1:A:3:TYR:N 1:A:3:TYR:CA 1:A:3:TYR:C 1:A:4:ASN:N 11 4. (1,2) 1:A:3:TYR:N 1:A:3:TYR:CA 1:A:3:TYR:C 1:A:4:ASN:N 11 4. (1,96) 1:A:61:GLN:N 1:A:61:GLN:CA 1:A:61:GLN:C 1:A:62:CYS:N 19 4. (1,4331) 1:A:61:GLN:N 1:A:61:GLN:CA 1:A:61:GLN:C 1:A:62:CYS:N 19 4. (1,423) 1:A:115:CYS:N 1:A:115:CYS:CA 1:A:115:CYS:C 1:A:116:ILE:N 17 4 (1,418) 1:A:13:GLY:N 1:A:133:GLY:CA 1:A:133:GLY:C 1:A:116:ILE:N 17 4 (1,456) 1:A:133:GLY:N 1:A:133:GLY:CA 1:A:133:GLY:C 1:A:134:TYR:N 3 4. (1,221) 1:A:135:GLU:C 1:A:136:SER:N 1:A:136:SER:CA 1:A:136:SER:C 11 4. <	34 34 34 34 31 31 31 32 29 29 27 27 27 27 27 22 22 22
(1,309) 1:A:46:VAL:C 1:A:47:SER:N 1:A:47:SER:CA 1:A:47:SER:C 5 4. (1,237) 1:A:3:TYR:N 1:A:3:TYR:CA 1:A:3:TYR:C 1:A:4:ASN:N 11 4. (1,2) 1:A:3:TYR:N 1:A:3:TYR:CA 1:A:3:TYR:C 1:A:4:ASN:N 11 4. (1,96) 1:A:61:GLN:N 1:A:61:GLN:CA 1:A:61:GLN:C 1:A:62:CYS:N 19 4. (1,331) 1:A:61:GLN:N 1:A:61:GLN:CA 1:A:61:GLN:C 1:A:62:CYS:N 19 4. (1,423) 1:A:115:CYS:N 1:A:115:CYS:CA 1:A:115:CYS:C 1:A:116:ILE:N 17 4 (1,423) 1:A:13:GLY:N 1:A:13:GLY:CA 1:A:133:GLY:C 1:A:116:ILE:N 17 4 (1,458) 1:A:133:GLY:N 1:A:133:GLY:CA 1:A:133:GLY:C 1:A:134:TYR:N 3 4. (1,221) 1:A:133:GLY:C 1:A:133:GLY:C 1:A:134:TYR:N 3 4. (1,459) 1:A:135:GLU:C 1:A:136:SER:N 1:A:136:SER:CA 1:A:136:SER:C 11 4. (1,	34 34 34 31 31 32 29 29 27 27 27 27 27 22 22 22
(1,237) 1:A:3:TYR:N 1:A:3:TYR:CA 1:A:3:TYR:C 1:A:4:ASN:N 11 4. (1,2) 1:A:3:TYR:N 1:A:3:TYR:CA 1:A:3:TYR:C 1:A:4:ASN:N 11 4. (1,96) 1:A:61:GLN:N 1:A:61:GLN:CA 1:A:61:GLN:C 1:A:62:CYS:N 19 4. (1,331) 1:A:61:GLN:N 1:A:61:GLN:CA 1:A:61:GLN:C 1:A:62:CYS:N 19 4. (1,423) 1:A:115:CYS:N 1:A:115:CYS:CA 1:A:115:CYS:C 1:A:116:ILE:N 17 4 (1,188) 1:A:115:CYS:N 1:A:115:CYS:CA 1:A:115:CYS:C 1:A:116:ILE:N 17 4 (1,486) 1:A:133:GLY:N 1:A:135:GLY:CA 1:A:133:GLY:C 1:A:134:TYR:N 3 4. (1,221) 1:A:133:GLY:N 1:A:136:SER:N 1:A:136:SER:CA 1:A:134:TYR:N 3 4. (1,459) 1:A:135:GLU:C 1:A:136:SER:N 1:A:136:SER:CA 1:A:136:SER:C 11 4. (1,382) 1:A:98:HIS:N 1:A:99:HIS:CA 1:A:99:ER:CA 1:A:149:EER:C 13 4. <td>34 34 31 31 .3 .3 .3 .29 29 27 27 27 27 27 22 22 22</td>	34 34 31 31 .3 .3 .3 .29 29 27 27 27 27 27 22 22 22
(1,2) 1:A:3:TYR:N 1:A:3:TYR:CA 1:A:3:TYR:C 1:A:4:ASN:N 11 4. (1,96) 1:A:61:GLN:N 1:A:61:GLN:CA 1:A:61:GLN:C 1:A:62:CYS:N 19 4. (1,331) 1:A:61:GLN:N 1:A:61:GLN:CA 1:A:61:GLN:C 1:A:62:CYS:N 19 4. (1,423) 1:A:115:CYS:N 1:A:115:CYS:CA 1:A:115:CYS:C 1:A:116:ILE:N 17 4 (1,188) 1:A:115:CYS:N 1:A:115:CYS:CA 1:A:115:CYS:C 1:A:116:ILE:N 17 4 (1,456) 1:A:133:GLY:N 1:A:133:GLY:CA 1:A:133:GLY:C 1:A:134:TYR:N 3 4. (1,221) 1:A:133:GLY:N 1:A:133:GLY:CA 1:A:133:GLY:C 1:A:134:TYR:N 3 4. (1,221) 1:A:133:GLY:N 1:A:133:GLY:CA 1:A:133:GLY:C 1:A:134:TYR:N 3 4. (1,459) 1:A:135:GLU:C 1:A:136:SER:N 1:A:136:SER:CA 1:A:136:SER:C 11 4. (1,382) 1:A:99:HIS:N 1:A:99:SER:N 1:A:99:SER:CA 1:A:99:SER:C 13	34 31 31 .3 .3 .29 29 27 27 27 27 27 27 27 22 22 22
(1,96) 1:A:61:GLN:N 1:A:61:GLN:CA 1:A:61:GLN:C 1:A:62:CYS:N 19 4. (1,331) 1:A:61:GLN:N 1:A:61:GLN:CA 1:A:61:GLN:C 1:A:62:CYS:N 19 4. (1,423) 1:A:115:CYS:N 1:A:115:CYS:CA 1:A:115:CYS:C 1:A:116:ILE:N 17 4 (1,188) 1:A:115:CYS:N 1:A:13:GLY:CA 1:A:133:GLY:C 1:A:134:TYR:N 3 4. (1,456) 1:A:133:GLY:N 1:A:133:GLY:CA 1:A:133:GLY:C 1:A:134:TYR:N 3 4. (1,221) 1:A:133:GLY:N 1:A:136:SER:N 1:A:136:SER:CA 1:A:134:TYR:N 3 4. (1,459) 1:A:135:GLU:C 1:A:136:SER:N 1:A:136:SER:CA 1:A:136:SER:C 11 4. (1,382) 1:A:91:ARG:C 1:A:92:SER:N 1:A:92:SER:CA 1:A:99:LEU:N 6 4. (1,224) 1:A:91:ARG:C 1:A:98:HIS:CA 1:A:98:HIS:C 1:A:99:LEU:N 6 4. (1,147) 1:A:99:ARG:C 1:A:99:SER:CA 1:A:99:LEU:N 6 4.	31 31 .3 .3 .3 .29 29 27 27 27 27 27 27 22 22 22
(1,331) 1:A:61:GLN:N 1:A:61:GLN:CA 1:A:61:GLN:C 1:A:62:CYS:N 19 4. (1,423) 1:A:115:CYS:N 1:A:115:CYS:CA 1:A:115:CYS:C 1:A:116:ILE:N 17 4 (1,188) 1:A:115:CYS:N 1:A:115:CYS:CA 1:A:115:CYS:C 1:A:116:ILE:N 17 4 (1,456) 1:A:133:GLY:N 1:A:133:GLY:CA 1:A:133:GLY:C 1:A:134:TYR:N 3 4. (1,221) 1:A:133:GLY:N 1:A:133:GLY:CA 1:A:133:GLY:C 1:A:134:TYR:N 3 4. (1,221) 1:A:133:GLY:N 1:A:133:GLY:CA 1:A:133:GLY:C 1:A:134:TYR:N 3 4. (1,221) 1:A:133:GLY:N 1:A:133:GLY:CA 1:A:133:GLY:C 1:A:134:TYR:N 3 4. (1,459) 1:A:135:GLU:C 1:A:136:SER:N 1:A:136:SER:CA 1:A:199:LEU:N 6 4. (1,382) 1:A:91:ARG:C 1:A:92:SER:N 1:A:192:SER:CA 1:A:192:SER:C 13 4. (1,224) 1:A:191:ARG:C 1:A:98:HIS:CA 1:A:98:HIS:C 1:A:99:LEU:N 6	31 3 3 .29 .29 .27 .27 .27 .27 .27 .27 .22 .22
(1,423) 1:A:115:CYS:N 1:A:115:CYS:CA 1:A:115:CYS:C 1:A:116:ILE:N 17 4 (1,188) 1:A:115:CYS:N 1:A:115:CYS:CA 1:A:115:CYS:C 1:A:116:ILE:N 17 4 (1,456) 1:A:133:GLY:N 1:A:133:GLY:CA 1:A:133:GLY:C 1:A:134:TYR:N 3 4 (1,221) 1:A:135:GLU:C 1:A:136:SER:N 1:A:136:SER:CA 1:A:136:SER:C 11 4 (1,459) 1:A:135:GLU:C 1:A:136:SER:N 1:A:136:SER:CA 1:A:136:SER:C 11 4 (1,395) 1:A:98:HIS:N 1:A:98:HIS:CA 1:A:98:HIS:C 1:A:99:LEU:N 6 4 (1,382) 1:A:91:ARG:C 1:A:92:SER:N 1:A:92:SER:CA 1:A:99:LEU:N 6 4 (1,224) 1:A:135:GLU:C 1:A:136:SER:N 1:A:136:SER:CA 1:A:136:SER:C 11 4 (1,160) 1:A:98:HIS:N 1:A:98:HIS:CA 1:A:99:LEU:N 6 4 (1,147) 1:A:91:ARG:C 1:A:92:SER:N 1:A:92:SER:CA 1:A:92:SER:CA 1:A:92:SER:C 13	.3 .3 .29 29 27 27 27 27 27 27 27 22 22 22
(1,188) 1:A:115:CYS:N 1:A:115:CYS:CA 1:A:115:CYS:C 1:A:116:ILE:N 17 4 (1,456) 1:A:133:GLY:N 1:A:133:GLY:CA 1:A:133:GLY:C 1:A:134:TYR:N 3 4. (1,221) 1:A:133:GLY:N 1:A:133:GLY:CA 1:A:133:GLY:C 1:A:134:TYR:N 3 4. (1,459) 1:A:135:GLU:C 1:A:136:SER:N 1:A:136:SER:CA 1:A:136:SER:C 11 4. (1,395) 1:A:98:HIS:N 1:A:98:HIS:CA 1:A:98:HIS:C 1:A:99:LEU:N 6 4. (1,382) 1:A:91:ARG:C 1:A:92:SER:N 1:A:92:SER:CA 1:A:92:SER:C 13 4. (1,224) 1:A:135:GLU:C 1:A:136:SER:N 1:A:136:SER:CA 1:A:99:LEU:N 6 4. (1,160) 1:A:98:HIS:N 1:A:98:HIS:CA 1:A:99:LEU:N 6 4. (1,147) 1:A:91:ARG:C 1:A:92:SER:N 1:A:92:SER:CA 1:A:99:LEU:N 6 4. (1,80) 1:A:52:PHE:N 1:A:52:PHE:CA 1:A:53:THR:N 2 4. (1,470) <t< td=""><td>.3 29 29 27 27 27 27 27 27 27 22 22 22</td></t<>	.3 29 29 27 27 27 27 27 27 27 22 22 22
(1,456) 1:A:133:GLY:N 1:A:133:GLY:CA 1:A:133:GLY:C 1:A:134:TYR:N 3 4. (1,221) 1:A:133:GLY:N 1:A:133:GLY:CA 1:A:133:GLY:C 1:A:134:TYR:N 3 4. (1,459) 1:A:135:GLU:C 1:A:136:SER:N 1:A:136:SER:CA 1:A:136:SER:C 11 4. (1,395) 1:A:98:HIS:N 1:A:98:HIS:CA 1:A:98:HIS:C 1:A:99:LEU:N 6 4. (1,382) 1:A:91:ARG:C 1:A:92:SER:N 1:A:92:SER:CA 1:A:92:SER:C 13 4. (1,224) 1:A:135:GLU:C 1:A:136:SER:N 1:A:136:SER:CA 1:A:136:SER:C 11 4. (1,160) 1:A:98:HIS:N 1:A:98:HIS:CA 1:A:99:LEU:N 6 4. (1,470) 1:A:91:ARG:C 1:A:92:SER:N 1:A:92:SER:CA 1:A:99:LEU:N 6 4. (1,470) 1:A:52:PHE:N 1:A:52:PHE:CA 1:A:141:PHE:C 1:A:142:ASN:N 8 4. (1,235) 1:A:141:PHE:N 1:A:141:PHE:CA 1:A:141:PHE:C 1:A:142:ASN:N 8 4.	29 29 27 27 27 27 27 27 27 27 22 22
(1,221) 1:A:133:GLY:N 1:A:133:GLY:CA 1:A:133:GLY:C 1:A:134:TYR:N 3 4. (1,459) 1:A:135:GLU:C 1:A:136:SER:N 1:A:136:SER:CA 1:A:136:SER:C 11 4. (1,395) 1:A:98:HIS:N 1:A:98:HIS:CA 1:A:99:HIS:C 1:A:99:LEU:N 6 4. (1,382) 1:A:91:ARG:C 1:A:92:SER:N 1:A:92:SER:CA 1:A:92:SER:C 13 4. (1,224) 1:A:135:GLU:C 1:A:136:SER:N 1:A:136:SER:CA 1:A:136:SER:C 11 4. (1,160) 1:A:98:HIS:N 1:A:98:HIS:CA 1:A:98:HIS:C 1:A:99:LEU:N 6 4. (1,147) 1:A:91:ARG:C 1:A:92:SER:N 1:A:92:SER:CA 1:A:99:LEU:N 6 4. (1,80) 1:A:52:PHE:N 1:A:52:PHE:CA 1:A:53:THR:N 2 4. (1,470) 1:A:141:PHE:N 1:A:141:PHE:CA 1:A:141:PHE:C 1:A:53:THR:N 2 (1,315) 1:A:52:PHE:N 1:A:52:PHE:CA 1:A:53:THR:N 2 4. (1,235) 1:A:141:PHE:N	29 27 27 27 27 27 27 27 27 22 22 22
(1,459) 1:A:135:GLU:C 1:A:136:SER:N 1:A:136:SER:CA 1:A:136:SER:C 11 4. (1,395) 1:A:98:HIS:N 1:A:98:HIS:CA 1:A:98:HIS:C 1:A:99:LEU:N 6 4. (1,382) 1:A:91:ARG:C 1:A:92:SER:N 1:A:92:SER:CA 1:A:92:SER:C 13 4. (1,224) 1:A:135:GLU:C 1:A:136:SER:N 1:A:136:SER:CA 1:A:136:SER:C 11 4. (1,160) 1:A:98:HIS:N 1:A:98:HIS:CA 1:A:98:HIS:C 1:A:99:LEU:N 6 4. (1,147) 1:A:91:ARG:C 1:A:92:SER:N 1:A:92:SER:CA 1:A:99:LEU:N 6 4. (1,80) 1:A:52:PHE:N 1:A:52:PHE:CA 1:A:53:THR:N 2 4. (1,470) 1:A:141:PHE:N 1:A:141:PHE:CA 1:A:411:PHE:C 1:A:53:THR:N 2 4. (1,315) 1:A:52:PHE:N 1:A:52:PHE:CA 1:A:53:THR:N 2 4. (1,235) 1:A:141:PHE:N 1:A:141:PHE:CA 1:A:141:PHE:C 1:A:53:THR:N 2 4. (1,89) 1:A	27 27 27 27 27 27 27 27 22 22 22
(1,395) 1:A:98:HIS:N 1:A:98:HIS:CA 1:A:98:HIS:C 1:A:99:LEU:N 6 4. (1,382) 1:A:91:ARG:C 1:A:92:SER:N 1:A:92:SER:CA 1:A:92:SER:C 13 4. (1,224) 1:A:135:GLU:C 1:A:136:SER:N 1:A:136:SER:CA 1:A:136:SER:C 11 4. (1,160) 1:A:98:HIS:N 1:A:98:HIS:CA 1:A:99:LEU:N 6 4. (1,147) 1:A:91:ARG:C 1:A:92:SER:N 1:A:92:SER:CA 1:A:92:SER:C 13 4. (1,80) 1:A:52:PHE:N 1:A:52:PHE:CA 1:A:53:THR:N 2 4. (1,470) 1:A:141:PHE:N 1:A:141:PHE:CA 1:A:141:PHE:C 1:A:53:THR:N 2 4. (1,315) 1:A:52:PHE:N 1:A:52:PHE:CA 1:A:141:PHE:C 1:A:141:PHE:C 1:A:141:PHE:C 4. (1,235) 1:A:141:PHE:N 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:C 20 4 (1,89) 1:A:57:LYS:C 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:C 20 4 (1,49)	27 27 27 27 27 27 22 22
(1,382) 1:A:91:ARG:C 1:A:92:SER:N 1:A:92:SER:CA 1:A:92:SER:C 13 4. (1,224) 1:A:135:GLU:C 1:A:136:SER:N 1:A:136:SER:CA 1:A:136:SER:C 11 4. (1,160) 1:A:98:HIS:N 1:A:98:HIS:CA 1:A:99:LEU:N 6 4. (1,147) 1:A:91:ARG:C 1:A:92:SER:N 1:A:92:SER:CA 1:A:92:SER:C 13 4. (1,80) 1:A:52:PHE:N 1:A:52:PHE:CA 1:A:53:THR:N 2 4. (1,470) 1:A:141:PHE:N 1:A:141:PHE:CA 1:A:52:PHE:C 1:A:53:THR:N 2 4. (1,315) 1:A:52:PHE:N 1:A:52:PHE:CA 1:A:53:THR:N 2 4. (1,235) 1:A:141:PHE:N 1:A:141:PHE:CA 1:A:141:PHE:C 1:A:142:ASN:N 8 4. (1,89) 1:A:57:LYS:C 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:C 20 4 (1,49) 1:A:31:ASN:N 1:A:31:ASN:CA 1:A:31:ASN:C 1:A:32:GLU:N 19 4	27 27 27 27 27 22 22
(1,224) 1:A:135:GLU:C 1:A:136:SER:N 1:A:136:SER:CA 1:A:136:SER:C 11 4. (1,160) 1:A:98:HIS:N 1:A:98:HIS:CA 1:A:99:LEU:N 6 4. (1,147) 1:A:91:ARG:C 1:A:92:SER:N 1:A:92:SER:CA 1:A:92:SER:C 13 4. (1,80) 1:A:52:PHE:N 1:A:52:PHE:CA 1:A:52:PHE:C 1:A:53:THR:N 2 4. (1,470) 1:A:141:PHE:N 1:A:141:PHE:CA 1:A:141:PHE:C 1:A:53:THR:N 2 4. (1,315) 1:A:52:PHE:N 1:A:52:PHE:CA 1:A:52:PHE:C 1:A:53:THR:N 2 4. (1,235) 1:A:141:PHE:N 1:A:141:PHE:CA 1:A:141:PHE:C 1:A:142:ASN:N 8 4. (1,89) 1:A:57:LYS:C 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:C 20 4 (1,324) 1:A:31:ASN:N 1:A:31:ASN:CA 1:A:31:ASN:C 1:A:32:GLU:N 19 4	27 27 27 22 22
(1,160) 1:A:98:HIS:N 1:A:98:HIS:CA 1:A:98:HIS:C 1:A:99:LEU:N 6 4. (1,147) 1:A:91:ARG:C 1:A:92:SER:N 1:A:92:SER:CA 1:A:92:SER:C 13 4. (1,80) 1:A:52:PHE:N 1:A:52:PHE:CA 1:A:52:PHE:C 1:A:53:THR:N 2 4. (1,470) 1:A:141:PHE:N 1:A:141:PHE:CA 1:A:141:PHE:C 1:A:142:ASN:N 8 4. (1,315) 1:A:52:PHE:N 1:A:52:PHE:CA 1:A:52:PHE:C 1:A:53:THR:N 2 4. (1,235) 1:A:141:PHE:N 1:A:141:PHE:CA 1:A:141:PHE:C 1:A:142:ASN:N 8 4. (1,89) 1:A:57:LYS:C 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:C 20 4 (1,324) 1:A:57:LYS:C 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:C 20 4 (1,49) 1:A:31:ASN:N 1:A:31:ASN:CA 1:A:31:ASN:C 1:A:32:GLU:N 19 4	27 27 22 22
(1,147) 1:A:91:ARG:C 1:A:92:SER:N 1:A:92:SER:CA 1:A:92:SER:C 13 4. (1,80) 1:A:52:PHE:N 1:A:52:PHE:CA 1:A:52:PHE:C 1:A:53:THR:N 2 4. (1,470) 1:A:141:PHE:N 1:A:141:PHE:CA 1:A:141:PHE:C 1:A:142:ASN:N 8 4. (1,315) 1:A:52:PHE:N 1:A:52:PHE:CA 1:A:52:PHE:C 1:A:53:THR:N 2 4. (1,235) 1:A:141:PHE:N 1:A:141:PHE:CA 1:A:141:PHE:C 1:A:142:ASN:N 8 4. (1,89) 1:A:57:LYS:C 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:C 20 4 (1,324) 1:A:57:LYS:C 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:C 20 4 (1,49) 1:A:31:ASN:N 1:A:31:ASN:CA 1:A:31:ASN:C 1:A:32:GLU:N 19 4	.27 .22 .22
(1,80) 1:A:52:PHE:N 1:A:52:PHE:CA 1:A:52:PHE:C 1:A:53:THR:N 2 4. (1,470) 1:A:141:PHE:N 1:A:141:PHE:CA 1:A:141:PHE:C 1:A:142:ASN:N 8 4. (1,315) 1:A:52:PHE:N 1:A:52:PHE:CA 1:A:52:PHE:C 1:A:53:THR:N 2 4. (1,235) 1:A:141:PHE:N 1:A:141:PHE:CA 1:A:141:PHE:C 1:A:142:ASN:N 8 4. (1,89) 1:A:57:LYS:C 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:C 20 4 (1,324) 1:A:57:LYS:C 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:C 20 4 (1,49) 1:A:31:ASN:N 1:A:31:ASN:CA 1:A:31:ASN:C 1:A:32:GLU:N 19 4	.22
(1,470) 1:A:141:PHE:N 1:A:141:PHE:CA 1:A:141:PHE:C 1:A:142:ASN:N 8 4. (1,315) 1:A:52:PHE:N 1:A:52:PHE:CA 1:A:52:PHE:C 1:A:53:THR:N 2 4. (1,235) 1:A:141:PHE:N 1:A:141:PHE:CA 1:A:141:PHE:C 1:A:142:ASN:N 8 4. (1,89) 1:A:57:LYS:C 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:C 20 4 (1,324) 1:A:57:LYS:C 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:C 20 4 (1,49) 1:A:31:ASN:N 1:A:31:ASN:CA 1:A:31:ASN:C 1:A:32:GLU:N 19 4	.22
(1,315) 1:A:52:PHE:N 1:A:52:PHE:CA 1:A:52:PHE:C 1:A:53:THR:N 2 4. (1,235) 1:A:141:PHE:N 1:A:141:PHE:CA 1:A:141:PHE:C 1:A:142:ASN:N 8 4. (1,89) 1:A:57:LYS:C 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:C 20 4 (1,324) 1:A:57:LYS:C 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:C 20 4 (1,49) 1:A:31:ASN:N 1:A:31:ASN:CA 1:A:31:ASN:C 1:A:32:GLU:N 19 4	
(1,235) 1:A:141:PHE:N 1:A:141:PHE:CA 1:A:141:PHE:C 1:A:142:ASN:N 8 4 (1,89) 1:A:57:LYS:C 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:C 20 4 (1,324) 1:A:57:LYS:C 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:C 20 4 (1,49) 1:A:31:ASN:N 1:A:31:ASN:CA 1:A:31:ASN:C 1:A:32:GLU:N 19 4	.22
(1,89) 1:A:57:LYS:C 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:C 20 4 (1,324) 1:A:57:LYS:C 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:C 20 4 (1,49) 1:A:31:ASN:N 1:A:31:ASN:CA 1:A:31:ASN:C 1:A:32:GLU:N 19 4	
(1,324) 1:A:57:LYS:C 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:C 20 4 (1,49) 1:A:31:ASN:N 1:A:31:ASN:CA 1:A:31:ASN:C 1:A:32:GLU:N 19 4	.22
(1,49) 1:A:31:ASN:N 1:A:31:ASN:CA 1:A:31:ASN:C 1:A:32:GLU:N 19 4.	2
	2
(1,284) 1:A:31:ASN:N 1:A:31:ASN:CA 1:A:31:ASN:C 1:A:32:GLU:N 19 4.	.18
	.18
(1,78) 1:A:50:PRO:N 1:A:50:PRO:CA 1:A:50:PRO:C 1:A:51:LEU:N 5 4.	.12
(1,50) 1:A:31:ASN:C 1:A:32:GLU:N 1:A:32:GLU:CA 1:A:32:GLU:C 18 4.	.12
(1,313) 1:A:50:PRO:N 1:A:50:PRO:CA 1:A:50:PRO:C 1:A:51:LEU:N 5 4.	.12
(1,285) 1:A:31:ASN:C 1:A:32:GLU:N 1:A:32:GLU:CA 1:A:32:GLU:C 18 4.	.12
(1,458) 1:A:135:GLU:N 1:A:135:GLU:CA 1:A:135:GLU:C 1:A:136:SER:N 16 4	1
(1,223) 1:A:135:GLU:N 1:A:135:GLU:CA 1:A:135:GLU:C 1:A:136:SER:N 16 4	1
(1,419) 1:A:113:ARG:N 1:A:113:ARG:CA 1:A:113:ARG:C 1:A:114:TYR:N 20 4.	.08
(1,184) 1:A:113:ARG:N 1:A:113:ARG:CA 1:A:113:ARG:C 1:A:114:TYR:N 20 4.	.08
(1,47) 1:A:27:PRO:N 1:A:27:PRO:CA 1:A:27:PRO:C 1:A:28:PRO:N 12 4.	.03
(1,282) 1:A:27:PRO:N 1:A:27:PRO:CA 1:A:27:PRO:C 1:A:28:PRO:N 12 4.	.03
	.97
(1,162) 1:A:99:LEU:N 1:A:99:LEU:CA 1:A:99:LEU:C 1:A:100:GLY:N 8 3.	.97
(1,421) 1:A:114:TYR:N 1:A:114:TYR:CA 1:A:114:TYR:C 1:A:115:CYS:N 10 3.	.95
(1,186) 1:A:114:TYR:N 1:A:114:TYR:CA 1:A:114:TYR:C 1:A:115:CYS:N 10 3.	.95
(1,78) 1:A:50:PRO:N 1:A:50:PRO:CA 1:A:50:PRO:C 1:A:51:LEU:N 8 3.	.93
(1,313) 1:A:50:PRO:N 1:A:50:PRO:CA 1:A:50:PRO:C 1:A:51:LEU:N 8 3.	.93
(1,390) 1:A:95:ALA:C 1:A:96:ASP:N 1:A:96:ASP:CA 1:A:96:ASP:C 5 3.	.89
(1,155) 1:A:95:ALA:C 1:A:96:ASP:N 1:A:96:ASP:CA 1:A:96:ASP:C 5 3.	.89
(1,468) 1:A:140:LEU:N 1:A:140:LEU:CA 1:A:140:LEU:C 1:A:141:PHE:N 3 3.	.87
(1,233) 1:A:140:LEU:N 1:A:140:LEU:CA 1:A:140:LEU:C 1:A:141:PHE:N 3 3.	.87
(1,388) 1:A:94:THR:C 1:A:95:ALA:N 1:A:95:ALA:CA 1:A:95:ALA:C 8 3.	.86
(1,153) 1:A:94:THR:C 1:A:95:ALA:N 1:A:95:ALA:CA 1:A:95:ALA:C 8 3.	.86
(1,385) 1:A:93:ARG:N 1:A:93:ARG:CA 1:A:93:ARG:C 1:A:94:THR:N 5 3.	



Key	$rac{ed\ from\ previous\ po}{\mathbf{Atom-1}}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,150)	1:A:93:ARG:N	1:A:93:ARG:CA	1:A:93:ARG:C	1:A:94:THR:N	5	3.85
(1,459)	1:A:135:GLU:C	1:A:136:SER:N	1:A:136:SER:CA	1:A:136:SER:C	20	3.84
(1,224)	1:A:135:GLU:C	1:A:136:SER:N	1:A:136:SER:CA	1:A:136:SER:C	20	3.84
(1,395)	1:A:98:HIS:N	1:A:98:HIS:CA	1:A:98:HIS:C	1:A:99:LEU:N	9	3.82
(1,160)	1:A:98:HIS:N	1:A:98:HIS:CA	1:A:98:HIS:C	1:A:99:LEU:N	9	3.82
(1,78)	1:A:50:PRO:N	1:A:50:PRO:CA	1:A:50:PRO:C	1:A:51:LEU:N	11	3.8
(1,462)	1:A:137:TYR:N	1:A:137:TYR:CA	1:A:137:TYR:C	1:A:138:LEU:N	14	3.8
(1,313)	1:A:50:PRO:N	1:A:50:PRO:CA	1:A:50:PRO:C	1:A:51:LEU:N	11	3.8
(1,227)	1:A:137:TYR:N	1:A:137:TYR:CA	1:A:137:TYR:C	1:A:138:LEU:N	14	3.8
(1,416)	1:A:111:GLY:C	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	16	3.79
(1,181)	1:A:111:GLY:C	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	16	3.79
(1,416)	1:A:111:GLY:C	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	14	3.78
(1,181)	1:A:111:GLY:C	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	14	3.78
(1,90)	1:A:58:PHE:N	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:C	1:A:59:ASP:N	5	3.77
(1,343)	1:A:68:THR:C	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	11	3.77
(1,325)	1:A:58:PHE:N	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:C	1:A:59:ASP:N	5	3.77
(1,108)	1:A:68:THR:C	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	11	3.77
(1,470)	1:A:141:PHE:N	1:A:141:PHE:CA	1:A:141:PHE:C	1:A:142:ASN:N	5	3.76
(1,416)	1:A:111:GLY:C	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	9	3.76
(1,235)	1:A:141:PHE:N	1:A:141:PHE:CA	1:A:141:PHE:C	1:A:142:ASN:N	5	3.76
(1,181)	1:A:111:GLY:C	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	9	3.76
(1,237)	1:A:3:TYR:N	1:A:3:TYR:CA	1:A:3:TYR:C	1:A:4:ASN:N	7	3.71
(1,237) $(1,2)$	1:A:3:TYR:N	1:A:3:TYR:CA	1:A:3:TYR:C	1:A:4:ASN:N	7	3.71
(1,47)	1:A:27:PRO:N	1:A:27:PRO:CA	1:A:27:PRO:C	1:A:28:PRO:N	19	3.69
(1,282)	1:A:27:PRO:N	1:A:27:PRO:CA	1:A:27:PRO:C	1:A:28:PRO:N	19	3.69
(1,78)	1:A:50:PRO:N	1:A:50:PRO:CA	1:A:50:PRO:C	1:A:51:LEU:N	3	3.66
(1,380)	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	1:A:91:ARG:CA	1:A:91:ARG:C	13	3.66
(1,313)	1:A:50:PRO:N	1:A:50:PRO:CA	1:A:50:PRO:C	1:A:51:LEU:N	3	3.66
(1,145)	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	1:A:91:ARG:CA	1:A:91:ARG:C	13	3.66
(1,78)	1:A:50:PRO:N	1:A:50:PRO:CA	1:A:50:PRO:C	1:A:51:LEU:N	2	3.63
(1,58)	1:A:37:LYS:C	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	9	3.63
(1,459)	1:A:135:GLU:C	1:A:136:SER:N	1:A:136:SER:CA	1:A:136:SER:C	19	3.63
(1,387)	1:A:94:THR:N	1:A:94:THR:CA	1:A:94:THR:C	1:A:95:ALA:N	11	3.63
(1,313)	1:A:50:PRO:N	1:A:50:PRO:CA	1:A:50:PRO:C	1:A:51:LEU:N	2	3.63
(1,293)	1:A:37:LYS:C	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	9	3.63
(1,224)	1:A:135:GLU:C	1:A:136:SER:N	1:A:136:SER:CA	1:A:136:SER:C	19	3.63
(1,152)	1:A:94:THR:N	1:A:94:THR:CA	1:A:94:THR:C	1:A:95:ALA:N	11	3.63
(1,468)	1:A:140:LEU:N	1:A:140:LEU:CA	1:A:140:LEU:C	1:A:141:PHE:N	4	3.62
(1,233)	1:A:140:LEU:N	1:A:140:LEU:CA	1:A:140:LEU:C	1:A:141:PHE:N	4	3.62
(1,380)	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	1:A:91:ARG:CA	1:A:91:ARG:C	2	3.61
(1,145)	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	1:A:91:ARG:CA	1:A:91:ARG:C	2	3.61
(1,345)	1:A:70:PRO:N	1:A:70:PRO:CA	1:A:70:PRO:C	1:A:71:ILE:N	17	3.6
(1,110)	1:A:70:PRO:N	1:A:70:PRO:CA	1:A:70:PRO:C	1:A:71:ILE:N	17	3.6
(1,380)	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	1:A:91:ARG:CA	1:A:91:ARG:C	18	3.58
(1,145)	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	1:A:91:ARG:CA	1:A:91:ARG:C	18	3.58
(1,421)	1:A:114:TYR:N	1:A:114:TYR:CA	1:A:114:TYR:C	1:A:115:CYS:N	17	3.57
(1,186)	1:A:114:TYR:N	1:A:114:TYR:CA	1:A:114:TYR:C	1:A:115:CYS:N	17	3.57
(1,84)	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	1:A:55:LYS:N	4	3.56
(1,416)	1:A:111:GLY:C	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	4	3.56
(1,319)	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	1:A:55:LYS:N	4	3.56
(1,181)	1:A:111:GLY:C	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	4	3.56
(, -)		<u> </u>				ed on nert nage



Key	$rac{ed\ from\ previous\ po}{\mathbf{Atom-1}}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,87)	1:A:56:ASP:C	1:A:57:LYS:N	1:A:57:LYS:CA	1:A:57:LYS:C	7	3.55
(1,61)	1:A:39:GLU:N	1:A:39:GLU:CA	1:A:39:GLU:C	1:A:40:GLY:N	14	3.55
(1,368)	1:A:84:GLY:C	1:A:85:MET:N	1:A:85:MET:CA	1:A:85:MET:C	11	3.55
(1,322)	1:A:56:ASP:C	1:A:57:LYS:N	1:A:57:LYS:CA	1:A:57:LYS:C	7	3.55
(1,296)	1:A:39:GLU:N	1:A:39:GLU:CA	1:A:39:GLU:C	1:A:40:GLY:N	14	3.55
(1,133)	1:A:84:GLY:C	1:A:85:MET:N	1:A:85:MET:CA	1:A:85:MET:C	11	3.55
(1,411)	1:A:107:PRO:C	1:A:108:GLY:N	1:A:108:GLY:CA	1:A:108:GLY:C	13	3.54
(1,375)	1:A:88:THR:N	1:A:88:THR:CA	1:A:88:THR:C	1:A:89:GLU:N	12	3.54
(1,176)	1:A:107:PRO:C	1:A:108:GLY:N	1:A:108:GLY:CA	1:A:108:GLY:C	13	3.54
(1,140)	1:A:88:THR:N	1:A:88:THR:CA	1:A:88:THR:C	1:A:89:GLU:N	12	3.54
(1,394)	1:A:97:SER:C	1:A:98:HIS:N	1:A:98:HIS:CA	1:A:98:HIS:C	17	3.51
(1,159)	1:A:97:SER:C	1:A:98:HIS:N	1:A:98:HIS:CA	1:A:98:HIS:C	17	3.51
(1,82)	1:A:53:THR:N	1:A:53:THR:CA	1:A:53:THR:C	1:A:54:SER:N	1	3.5
(1,470)	1:A:141:PHE:N	1:A:141:PHE:CA	1:A:141:PHE:C	1:A:142:ASN:N	11	3.5
(1,347)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:GLU:N	5	3.5
(1,317)	1:A:53:THR:N	1:A:53:THR:CA	1:A:53:THR:C	1:A:54:SER:N	1	3.5
(1,235)	1:A:141:PHE:N	1:A:141:PHE:CA	1:A:141:PHE:C	1:A:142:ASN:N	11	3.5
(1,112)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:GLU:N	5	3.5
(1,391)	1:A:96:ASP:N	1:A:96:ASP:CA	1:A:96:ASP:C	1:A:97:SER:N	4	3.48
(1,156)	1:A:96:ASP:N	1:A:96:ASP:CA	1:A:96:ASP:C	1:A:97:SER:N	4	3.48
(1,375)	1:A:88:THR:N	1:A:88:THR:CA	1:A:88:THR:C	1:A:89:GLU:N	5	3.47
(1,340) $(1,140)$	1:A:88:THR:N	1:A:88:THR:CA	1:A:88:THR:C	1:A:89:GLU:N	5	3.47
(1,392)	1:A:96:ASP:C	1:A:97:SER:N	1:A:97:SER:CA	1:A:97:SER:C	8	3.45
(1,157)	1:A:96:ASP:C	1:A:97:SER:N	1:A:97:SER:CA	1:A:97:SER:C	8	3.45
(1,391)	1:A:96:ASP:N	1:A:96:ASP:CA	1:A:96:ASP:C	1:A:97:SER:N	5	3.43
(1,156)	1:A:96:ASP:N	1:A:96:ASP:CA	1:A:96:ASP:C	1:A:97:SER:N	5	3.43
(1,468)	1:A:140:LEU:N	1:A:140:LEU:CA	1:A:140:LEU:C	1:A:141:PHE:N	15	3.42
(1,386)	1:A:93:ARG:C	1:A:94:THR:N	1:A:94:THR:CA	1:A:94:THR:C	5	3.42
(1,233)	1:A:140:LEU:N	1:A:140:LEU:CA	1:A:140:LEU:C	1:A:141:PHE:N	15	3.42
(1,151)	1:A:93:ARG:C	1:A:94:THR:N	1:A:94:THR:CA	1:A:94:THR:C	5	3.42
(1,410)	1:A:107:PRO:N	1:A:107:PRO:CA	1:A:107:PRO:C	1:A:108:GLY:N	15	3.41
(1,175)	1:A:107:PRO:N	1:A:107:PRO:CA	1:A:107:PRO:C	1:A:108:GLY:N	15	3.41
(1,87)	1:A:56:ASP:C	1:A:57:LYS:N	1:A:57:LYS:CA	1:A:57:LYS:C	17	3.4
(1,322)	1:A:56:ASP:C	1:A:57:LYS:N	1:A:57:LYS:CA	1:A:57:LYS:C	17	3.4
(1,414)	1:A:109:PRO:C	1:A:110:ASN:N	1:A:110:ASN:CA	1:A:110:ASN:C	13	3.39
(1,179)	1:A:109:PRO:C	1:A:110:ASN:N	1:A:110:ASN:CA	1:A:110:ASN:C	13	3.39
(1,468)	1:A:140:LEU:N	1:A:140:LEU:CA	1:A:140:LEU:C	1:A:141:PHE:N	18	3.38
(1,340)	1:A:67:PHE:N	1:A:67:PHE:CA	1:A:67:PHE:C	1:A:68:THR:N	8	3.38
(1,233)	1:A:140:LEU:N	1:A:140:LEU:CA	1:A:140:LEU:C	1:A:141:PHE:N	18	3.38
(1,105)	1:A:67:PHE:N	1:A:67:PHE:CA	1:A:67:PHE:C	1:A:68:THR:N	8	3.38
(1,349)	1:A:73:GLU:N	1:A:73:GLU:CA	1:A:73:GLU:C	1:A:74:GLU:N	20	3.37
(1,114)	1:A:73:GLU:N	1:A:73:GLU:CA	1:A:73:GLU:C	1:A:74:GLU:N	20	3.37
(1,392)	1:A:96:ASP:C	1:A:97:SER:N	1:A:97:SER:CA	1:A:97:SER:C	1	3.36
(1,157)	1:A:96:ASP:C	1:A:97:SER:N	1:A:97:SER:CA	1:A:97:SER:C	1	3.36
(1,416)	1:A:111:GLY:C	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	8	3.35
(1,388)	1:A:94:THR:C	1:A:95:ALA:N	1:A:95:ALA:CA	1:A:95:ALA:C	9	3.35
(1,387)	1:A:94:THR:N	1:A:94:THR:CA	1:A:94:THR:C	1:A:95:ALA:N	8	3.35
(1,362)	1:A:79:LEU:C	1:A:80:ASP:N	1:A:80:ASP:CA	1:A:80:ASP:C	10	3.35
` ' /				1:A:112:LEU:C	8	3.35
(1,181)	1:A:111:GLY:C	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:U	0	ე.ეე
(1,181) (1,153)	1:A:111:GLY:C 1:A:94:THR:C	1:A:112:LEU:N 1:A:95:ALA:N	1:A:112:LEU:CA 1:A:95:ALA:CA	1:A:112:LEU:C 1:A:95:ALA:C	9	3.35



	ed from previous pe					
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (\circ)
(1,127)	1:A:79:LEU:C	1:A:80:ASP:N	1:A:80:ASP:CA	1:A:80:ASP:C	10	3.35
(1,57)	1:A:37:LYS:N	1:A:37:LYS:CA	1:A:37:LYS:C	1:A:38:GLU:N	10	3.34
(1,292)	1:A:37:LYS:N	1:A:37:LYS:CA	1:A:37:LYS:C	1:A:38:GLU:N	10	3.34
(1,391)	1:A:96:ASP:N	1:A:96:ASP:CA	1:A:96:ASP:C	1:A:97:SER:N	13	3.32
(1,156)	1:A:96:ASP:N	1:A:96:ASP:CA	1:A:96:ASP:C	1:A:97:SER:N	13	3.32
(1,364)	1:A:81:THR:C	1:A:82:SER:N	1:A:82:SER:CA	1:A:82:SER:C	1	3.31
(1,129)	1:A:81:THR:C	1:A:82:SER:N	1:A:82:SER:CA	1:A:82:SER:C	1	3.31
(1,90)	1:A:58:PHE:N	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:C	1:A:59:ASP:N	18	3.3
(1,416)	1:A:111:GLY:C	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	20	3.3
(1,349)	1:A:73:GLU:N	1:A:73:GLU:CA	1:A:73:GLU:C	1:A:74:GLU:N	7	3.3
(1,325)	1:A:58:PHE:N	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:C	1:A:59:ASP:N	18	3.3
(1,181)	1:A:111:GLY:C	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	20	3.3
(1,114)	1:A:73:GLU:N	1:A:73:GLU:CA	1:A:73:GLU:C	1:A:74:GLU:N	7	3.3
(1,387)	1:A:94:THR:N	1:A:94:THR:CA	1:A:94:THR:C	1:A:95:ALA:N	9	3.28
(1,387)	1:A:94:THR:N	1:A:94:THR:CA	1:A:94:THR:C	1:A:95:ALA:N	18	3.28
(1,152)	1:A:94:THR:N	1:A:94:THR:CA	1:A:94:THR:C	1:A:95:ALA:N	9	3.28
(1,152)	1:A:94:THR:N	1:A:94:THR:CA	1:A:94:THR:C	1:A:95:ALA:N	18	3.28
(1,455)	1:A:132:GLU:C	1:A:133:GLY:N	1:A:133:GLY:CA	1:A:133:GLY:C	11	3.25
(1,220)	1:A:132:GLU:C	1:A:133:GLY:N	1:A:133:GLY:CA	1:A:133:GLY:C	11	3.25
(1,50)	1:A:31:ASN:C	1:A:32:GLU:N	1:A:32:GLU:CA	1:A:32:GLU:C	10	3.24
(1,285)	1:A:31:ASN:C	1:A:32:GLU:N	1:A:32:GLU:CA	1:A:32:GLU:C	10	3.24
(1,52)	1:A:32:GLU:C	1:A:33:TYR:N	1:A:33:TYR:CA	1:A:33:TYR:C	7	3.23
(1,287)	1:A:32:GLU:C	1:A:33:TYR:N	1:A:33:TYR:CA	1:A:33:TYR:C	7	3.23
(1,65)	1:A:42:TYR:N	1:A:42:TYR:CA	1:A:42:TYR:C	1:A:43:VAL:N	3	3.22
(1,467)	1:A:139:HIS:C	1:A:140:LEU:N	1:A:140:LEU:CA	1:A:140:LEU:C	11	3.22
(1,300)	1:A:42:TYR:N	1:A:42:TYR:CA	1:A:42:TYR:C	1:A:43:VAL:N	3	3.22
(1,232)	1:A:139:HIS:C	1:A:140:LEU:N	1:A:140:LEU:CA	1:A:140:LEU:C	11	3.22
(1,77)	1:A:49:LYS:N	1:A:49:LYS:CA	1:A:49:LYS:C	1:A:50:PRO:N	18	3.21
(1,312)	1:A:49:LYS:N	1:A:49:LYS:CA	1:A:49:LYS:C	1:A:50:PRO:N	18	3.21
(1,84)	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	1:A:55:LYS:N	19	3.2
(1,319)	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	1:A:55:LYS:N	19	3.2
(1,423)	1:A:115:CYS:N	1:A:115:CYS:CA	1:A:115:CYS:C	1:A:116:ILE:N	2	3.18
(1,388)	1:A:94:THR:C	1:A:95:ALA:N	1:A:95:ALA:CA	1:A:95:ALA:C	6	3.18
(1,188)	1:A:115:CYS:N	1:A:115:CYS:CA	1:A:115:CYS:C	1:A:116:ILE:N	2	3.18
(1,153)	1:A:94:THR:C	1:A:95:ALA:N	1:A:95:ALA:CA	1:A:95:ALA:C	6	3.18
(1,421)	1:A:114:TYR:N	1:A:114:TYR:CA	1:A:114:TYR:C	1:A:115:CYS:N	1	3.17
(1,421)	1:A:114:TYR:N	1:A:114:TYR:CA	1:A:114:TYR:C	1:A:115:CYS:N	5	3.17
(1,254)	1:A:11:SER:C	1:A:12:LEU:N	1:A:12:LEU:CA	1:A:12:LEU:C	9	3.17
(1,19)	1:A:11:SER:C	1:A:12:LEU:N	1:A:12:LEU:CA	1:A:12:LEU:C	9	3.17
(1,186)	1:A:114:TYR:N	1:A:114:TYR:CA	1:A:114:TYR:C	1:A:115:CYS:N	1	3.17
(1,186)	1:A:114:TYR:N	1:A:114:TYR:CA	1:A:114:TYR:C	1:A:115:CYS:N	5	3.17
(1,92)	1:A:59:ASP:N	1:A:59:ASP:CA	1:A:59:ASP:C	1:A:60:SER:N	19	3.16
(1,397)	1:A:99:LEU:N	1:A:99:LEU:CA	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	6	3.16
(1,327)	1:A:59:ASP:N	1:A:59:ASP:CA	1:A:59:ASP:C	1:A:60:SER:N	19	3.16
(1,162)	1:A:99:LEU:N	1:A:99:LEU:CA	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	6	3.16
(1,90)	1:A:58:PHE:N	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:C	1:A:59:ASP:N	19	3.15
(1,367)	1:A:84:GLY:N	1:A:84:GLY:CA	1:A:84:GLY:C	1:A:85:MET:N	1	3.15
(1,325)	1:A:58:PHE:N	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:C	1:A:59:ASP:N	19	3.15
(1,329) $(1,132)$	1:A:84:GLY:N	1:A:84:GLY:CA	1:A:84:GLY:C	1:A:85:MET:N	1	3.15
(1,375)	1:A:88:THR:N	1:A:88:THR:CA	1:A:88:THR:C	1:A:89:GLU:N	9	3.14
(1,373) $(1,3)$	1:A:3:TYR:C	1:A:4:ASN:N	1:A:4:ASN:CA	1:A:4:ASN:C	20	3.14
(+,0)	1.11.0.1 110.0	1.71.1.710711.71	1.21.1.21011.021	1.71.1.71011.0		od on nort nage



Key	$\frac{ed\ from\ previous\ po}{\mathbf{Atom-1}}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,238)	1:A:3:TYR:C	1:A:4:ASN:N	1:A:4:ASN:CA	1:A:4:ASN:C	20	3.14
(1,237)	1:A:3:TYR:N	1:A:3:TYR:CA	1:A:3:TYR:C	1:A:4:ASN:N	20	3.14
(1,2)	1:A:3:TYR:N	1:A:3:TYR:CA	1:A:3:TYR:C	1:A:4:ASN:N	20	3.14
(1,140)	1:A:88:THR:N	1:A:88:THR:CA	1:A:88:THR:C	1:A:89:GLU:N	9	3.14
(1,88)	1:A:57:LYS:N	1:A:57:LYS:CA	1:A:57:LYS:C	1:A:58:PHE:N	12	3.11
(1,323)	1:A:57:LYS:N	1:A:57:LYS:CA	1:A:57:LYS:C	1:A:58:PHE:N	12	3.11
(1,351)	1:A:74:GLU:N	1:A:74:GLU:CA	1:A:74:GLU:C	1:A:75:VAL:N	19	3.09
(1,116)	1:A:74:GLU:N	1:A:74:GLU:CA	1:A:74:GLU:C	1:A:75:VAL:N	19	3.09
(1,416)	1:A:111:GLY:C	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	1	3.08
(1,181)	1:A:111:GLY:C	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	1	3.08
(1,468)	1:A:140:LEU:N	1:A:140:LEU:CA	1:A:140:LEU:C	1:A:141:PHE:N	9	3.07
(1,375)	1:A:88:THR:N	1:A:88:THR:CA	1:A:88:THR:C	1:A:89:GLU:N	20	3.07
(1,233)	1:A:140:LEU:N	1:A:140:LEU:CA	1:A:140:LEU:C	1:A:141:PHE:N	9	3.07
(1,140)	1:A:88:THR:N	1:A:88:THR:CA	1:A:88:THR:C	1:A:89:GLU:N	20	3.07
(1,397)	1:A:99:LEU:N	1:A:99:LEU:CA	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	5	3.06
(1,367) $(1,162)$	1:A:99:LEU:N	1:A:99:LEU:CA	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	5	3.06
(1,55)	1:A:35:ASP:N	1:A:35:ASP:CA	1:A:35:ASP:C	1:A:36:HIS:N	3	3.05
(1,290)	1:A:35:ASP:N	1:A:35:ASP:CA	1:A:35:ASP:C	1:A:36:HIS:N	3	3.05
(1,230) $(1,410)$	1:A:107:PRO:N	1:A:107:PRO:CA	1:A:107:PRO:C	1:A:108:GLY:N	11	3.04
(1,175)	1:A:107:PRO:N	1:A:107:PRO:CA	1:A:107:PRO:C	1:A:108:GLY:N	11	3.04
(1,84)	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	1:A:55:LYS:N	20	3.03
(1,392)	1:A:96:ASP:C	1:A:97:SER:N	1:A:97:SER:CA	1:A:97:SER:C	9	3.03
(1,357)	1:A:77:GLU:N	1:A:77:GLU:CA	1:A:77:GLU:C	1:A:78:LYS:N	16	3.03
(1,319)	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	1:A:55:LYS:N	20	3.03
(1,310) $(1,157)$	1:A:96:ASP:C	1:A:97:SER:N	1:A:97:SER:CA	1:A:97:SER:C	9	3.03
(1,122)	1:A:77:GLU:N	1:A:77:GLU:CA	1:A:77:GLU:C	1:A:78:LYS:N	16	3.03
(1,355)	1:A:76:GLU:N	1:A:76:GLU:CA	1:A:76:GLU:C	1:A:77:GLU:N	12	3.01
(1,120)	1:A:76:GLU:N	1:A:76:GLU:CA	1:A:76:GLU:C	1:A:77:GLU:N	12	3.01
(1,371)	1:A:86:ILE:N	1:A:86:ILE:CA	1:A:86:ILE:C	1:A:87:ARG:N	16	3.0
(1,136)	1:A:86:ILE:N	1:A:86:ILE:CA	1:A:86:ILE:C	1:A:87:ARG:N	16	3.0
(1,397)	1:A:99:LEU:N	1:A:99:LEU:CA	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	2	2.99
(1,162)	1:A:99:LEU:N	1:A:99:LEU:CA	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	2	2.99
(1,367)	1:A:84:GLY:N	1:A:84:GLY:CA	1:A:84:GLY:C	1:A:85:MET:N	19	2.98
(1,132)	1:A:84:GLY:N	1:A:84:GLY:CA	1:A:84:GLY:C	1:A:85:MET:N	19	2.98
(1,50)	1:A:31:ASN:C	1:A:32:GLU:N	1:A:32:GLU:CA	1:A:32:GLU:C	12	2.95
(1,285)	1:A:31:ASN:C	1:A:32:GLU:N	1:A:32:GLU:CA	1:A:32:GLU:C	12	2.95
(1,365)	1:A:82:SER:N	1:A:82:SER:CA	1:A:82:SER:C	1:A:83:HIS:N	11	2.94
(1,130)	1:A:82:SER:N	1:A:82:SER:CA	1:A:82:SER:C	1:A:83:HIS:N	11	2.94
(1,47)	1:A:27:PRO:N	1:A:27:PRO:CA	1:A:27:PRO:C	1:A:28:PRO:N	14	2.93
(1,282)	1:A:27:PRO:N	1:A:27:PRO:CA	1:A:27:PRO:C	1:A:28:PRO:N	14	2.93
(1,345)	1:A:70:PRO:N	1:A:70:PRO:CA	1:A:70:PRO:C	1:A:71:ILE:N	20	2.92
(1,110)	1:A:70:PRO:N	1:A:70:PRO:CA	1:A:70:PRO:C	1:A:71:ILE:N	20	2.92
(1,56)	1:A:36:HIS:C	1:A:37:LYS:N	1:A:37:LYS:CA	1:A:37:LYS:C	7	2.91
(1,42)	1:A:24:GLY:N	1:A:24:GLY:CA	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	13	2.91
(1,419)	1:A:113:ARG:N	1:A:113:ARG:CA	1:A:113:ARG:C	1:A:114:TYR:N	9	2.91
(1,291)	1:A:36:HIS:C	1:A:37:LYS:N	1:A:37:LYS:CA	1:A:37:LYS:C	7	2.91
(1,277)	1:A:24:GLY:N	1:A:24:GLY:CA	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	13	2.91
(1,184)	1:A:113:ARG:N	1:A:113:ARG:CA	1:A:113:ARG:C	1:A:114:TYR:N	9	2.91
(1,42)	1:A:24:GLY:N	1:A:24:GLY:CA	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	1	2.89
(1,363)	1:A:80:ASP:N	1:A:80:ASP:CA	1:A:80:ASP:C	1:A:81:THR:N	9	2.89
(1,336)	1:A:65:PRO:N	1:A:65:PRO:CA	1:A:65:PRO:C	1:A:66:SER:N	20	2.89
(2,000)	1.1.1.00.11 100.11	1.1.1.00.1.100.011		1.1.1.00.0116.11		ed on nert nage



	ed from previous pe					774 7 14
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (\circ)
(1,277)	1:A:24:GLY:N	1:A:24:GLY:CA	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	1	2.89
(1,128)	1:A:80:ASP:N	1:A:80:ASP:CA	1:A:80:ASP:C	1:A:81:THR:N	9	2.89
(1,101)	1:A:65:PRO:N	1:A:65:PRO:CA	1:A:65:PRO:C	1:A:66:SER:N	20	2.89
(1,367)	1:A:84:GLY:N	1:A:84:GLY:CA	1:A:84:GLY:C	1:A:85:MET:N	20	2.88
(1,132)	1:A:84:GLY:N	1:A:84:GLY:CA	1:A:84:GLY:C	1:A:85:MET:N	20	2.88
(1,464)	1:A:138:LEU:N	1:A:138:LEU:CA	1:A:138:LEU:C	1:A:139:HIS:N	10	2.87
(1,390)	1:A:95:ALA:C	1:A:96:ASP:N	1:A:96:ASP:CA	1:A:96:ASP:C	18	2.87
(1,229)	1:A:138:LEU:N	1:A:138:LEU:CA	1:A:138:LEU:C	1:A:139:HIS:N	10	2.87
(1,155)	1:A:95:ALA:C	1:A:96:ASP:N	1:A:96:ASP:CA	1:A:96:ASP:C	18	2.87
(1,385)	1:A:93:ARG:N	1:A:93:ARG:CA	1:A:93:ARG:C	1:A:94:THR:N	13	2.85
(1,150)	1:A:93:ARG:N	1:A:93:ARG:CA	1:A:93:ARG:C	1:A:94:THR:N	13	2.85
(1,455)	1:A:132:GLU:C	1:A:133:GLY:N	1:A:133:GLY:CA	1:A:133:GLY:C	18	2.84
(1,345)	1:A:70:PRO:N	1:A:70:PRO:CA	1:A:70:PRO:C	1:A:71:ILE:N	9	2.84
(1,220)	1:A:132:GLU:C	1:A:133:GLY:N	1:A:133:GLY:CA	1:A:133:GLY:C	18	2.84
(1,110)	1:A:70:PRO:N	1:A:70:PRO:CA	1:A:70:PRO:C	1:A:71:ILE:N	9	2.84
(1,84)	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	1:A:55:LYS:N	18	2.83
(1,319)	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	1:A:55:LYS:N	18	2.83
(1,338)	1:A:66:SER:N	1:A:66:SER:CA	1:A:66:SER:C	1:A:67:PHE:N	20	2.82
(1,103)	1:A:66:SER:N	1:A:66:SER:CA	1:A:66:SER:C	1:A:67:PHE:N	20	2.82
(1,78)	1:A:50:PRO:N	1:A:50:PRO:CA	1:A:50:PRO:C	1:A:51:LEU:N	16	2.81
(1,458)	1:A:135:GLU:N	1:A:135:GLU:CA	1:A:135:GLU:C	1:A:136:SER:N	12	2.81
(1,313)	1:A:50:PRO:N	1:A:50:PRO:CA	1:A:50:PRO:C	1:A:51:LEU:N	16	2.81
(1,223)	1:A:135:GLU:N	1:A:135:GLU:CA	1:A:135:GLU:C	1:A:136:SER:N	12	2.81
(1,388)	1:A:94:THR:C	1:A:95:ALA:N	1:A:95:ALA:CA	1:A:95:ALA:C	10	2.76
(1,367)	1:A:84:GLY:N	1:A:84:GLY:CA	1:A:84:GLY:C	1:A:85:MET:N	9	2.76
(1,153)	1:A:94:THR:C	1:A:95:ALA:N	1:A:95:ALA:CA	1:A:95:ALA:C	10	2.76
(1,132)	1:A:84:GLY:N	1:A:84:GLY:CA	1:A:84:GLY:C	1:A:85:MET:N	9	2.76
(1,342)	1:A:68:THR:N	1:A:68:THR:CA	1:A:68:THR:C	1:A:69:LYS:N	16	2.75
(1,107)	1:A:68:THR:N	1:A:68:THR:CA	1:A:68:THR:C	1:A:69:LYS:N	16	2.75
(1,464)	1:A:138:LEU:N	1:A:138:LEU:CA	1:A:138:LEU:C	1:A:139:HIS:N	20	2.74
(1,451)	1:A:130:LYS:C	1:A:131:GLU:N	1:A:131:GLU:CA	1:A:131:GLU:C	11	2.74
(1,191) $(1,229)$	1:A:138:LEU:N	1:A:138:LEU:CA	1:A:138:LEU:C	1:A:139:HIS:N	20	2.74
(1,216)	1:A:130:LYS:C	1:A:131:GLU:N	1:A:131:GLU:CA	1:A:131:GLU:C	11	2.74
(1,210) $(1,90)$	1:A:58:PHE:N	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:C	1:A:59:ASP:N	3	2.73
(1,83)	1:A:53:THR:C	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	13	2.73
(1,83) $(1,83)$	1:A:53:THR:C	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	15	2.73
(1,387)	1:A:94:THR:N	1:A:94:THR:CA	1:A:94:THR:C	1:A:95:ALA:N	13	2.73
(1,325)	1:A:58:PHE:N	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:C	1:A:59:AEA:N 1:A:59:ASP:N	3	2.73
(1,323) $(1,318)$	1:A:53:THR:C	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:59:ASF:N 1:A:54:SER:C	13	2.73
(1,318) $(1,318)$	1:A:53:THR:C	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA 1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	15	2.73
(1,318) $(1,152)$	1:A:94:THR:N	1:A:94:THR:CA	1:A:94:THR:C	1:A:95:ALA:N	13	2.73
	1:A:70:PRO:N	1:A:70:PRO:CA	1:A:70:PRO:C	1:A:93:ALA:N 1:A:71:ILE:N	15	2.73
(1,345)	1:A:70:PRO:N 1:A:70:PRO:N	1:A:70:PRO:CA 1:A:70:PRO:CA	1:A:70:PRO:C 1:A:70:PRO:C	1:A:71:ILE:N 1:A:71:ILE:N	15	2.72
(1,110)				1:A:71:ILE:N 1:A:102:VAL:N		
(1,401)	1:A:101:HIS:N	1:A:101:HIS:CA	1:A:101:HIS:C		5	2.71
(1,166)	1:A:101:HIS:N	1:A:101:HIS:CA	1:A:101:HIS:C	1:A:102:VAL:N	5	2.71
(1,468)	1:A:140:LEU:N	1:A:140:LEU:CA	1:A:140:LEU:C	1:A:141:PHE:N	13	2.7
(1,416)	1:A:111:GLY:C	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	12	2.7
(1,233)	1:A:140:LEU:N	1:A:140:LEU:CA	1:A:140:LEU:C	1:A:141:PHE:N	13	2.7
(1,181)	1:A:111:GLY:C	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	12	2.7
(1,78)	1:A:50:PRO:N	1:A:50:PRO:CA	1:A:50:PRO:C	1:A:51:LEU:N	9	2.69
(1,414)	1:A:109:PRO:C	1:A:110:ASN:N	1:A:110:ASN:CA	1:A:110:ASN:C	10	2.69 ed on next page



	ed from previous pe	•	A		3.6.1.1	T 70 1 10 ()
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,394)	1:A:97:SER:C	1:A:98:HIS:N	1:A:98:HIS:CA	1:A:98:HIS:C	16	2.69
(1,313)	1:A:50:PRO:N	1:A:50:PRO:CA	1:A:50:PRO:C	1:A:51:LEU:N	9	2.69
(1,179)	1:A:109:PRO:C	1:A:110:ASN:N	1:A:110:ASN:CA	1:A:110:ASN:C	10	2.69
(1,159)	1:A:97:SER:C	1:A:98:HIS:N	1:A:98:HIS:CA	1:A:98:HIS:C	16	2.69
(1,456)	1:A:133:GLY:N	1:A:133:GLY:CA	1:A:133:GLY:C	1:A:134:TYR:N	20	2.66
(1,221)	1:A:133:GLY:N	1:A:133:GLY:CA	1:A:133:GLY:C	1:A:134:TYR:N	20	2.66
(1,388)	1:A:94:THR:C	1:A:95:ALA:N	1:A:95:ALA:CA	1:A:95:ALA:C	2	2.65
(1,153)	1:A:94:THR:C	1:A:95:ALA:N	1:A:95:ALA:CA	1:A:95:ALA:C	2	2.65
(1,385)	1:A:93:ARG:N	1:A:93:ARG:CA	1:A:93:ARG:C	1:A:94:THR:N	9	2.64
(1,150)	1:A:93:ARG:N	1:A:93:ARG:CA	1:A:93:ARG:C	1:A:94:THR:N	9	2.64
(1,435)	1:A:122:ARG:N	1:A:122:ARG:CA	1:A:122:ARG:C	1:A:123:PHE:N	14	2.62
(1,416)	1:A:111:GLY:C	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	10	2.62
(1,200)	1:A:122:ARG:N	1:A:122:ARG:CA	1:A:122:ARG:C	1:A:123:PHE:N	14	2.62
(1,181)	1:A:111:GLY:C	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	10	2.62
(1,416)	1:A:111:GLY:C	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	19	2.6
(1,181)	1:A:111:GLY:C	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	19	2.6
(1,470)	1:A:141:PHE:N	1:A:141:PHE:CA	1:A:141:PHE:C	1:A:142:ASN:N	4	2.59
(1,455)	1:A:132:GLU:C	1:A:133:GLY:N	1:A:133:GLY:CA	1:A:133:GLY:C	7	2.59
(1,235)	1:A:141:PHE:N	1:A:141:PHE:CA	1:A:141:PHE:C	1:A:142:ASN:N	4	2.59
(1,220)	1:A:132:GLU:C	1:A:133:GLY:N	1:A:133:GLY:CA	1:A:133:GLY:C	7	2.59
(1,80)	1:A:52:PHE:N	1:A:52:PHE:CA	1:A:52:PHE:C	1:A:53:THR:N	20	2.58
(1,47)	1:A:27:PRO:N	1:A:27:PRO:CA	1:A:27:PRO:C	1:A:28:PRO:N	7	2.58
(1,386)	1:A:93:ARG:C	1:A:94:THR:N	1:A:94:THR:CA	1:A:94:THR:C	1	2.58
(1,34)	1:A:19:VAL:N	1:A:19:VAL:CA	1:A:19:VAL:C	1:A:20:THR:N	5	2.58
(1,315)	1:A:52:PHE:N	1:A:52:PHE:CA	1:A:52:PHE:C	1:A:53:THR:N	20	2.58
(1,282)	1:A:27:PRO:N	1:A:27:PRO:CA	1:A:27:PRO:C	1:A:28:PRO:N	7	2.58
(1,269)	1:A:19:VAL:N	1:A:19:VAL:CA	1:A:19:VAL:C	1:A:20:THR:N	5	2.58
(1,151)	1:A:93:ARG:C	1:A:94:THR:N	1:A:94:THR:CA	1:A:94:THR:C	1	2.58
(1,419)	1:A:113:ARG:N	1:A:113:ARG:CA	1:A:113:ARG:C	1:A:114:TYR:N	2	2.57
(1,184)	1:A:113:ARG:N	1:A:113:ARG:CA	1:A:113:ARG:C	1:A:114:TYR:N	2	2.57
(1,468)	1:A:140:LEU:N	1:A:140:LEU:CA	1:A:140:LEU:C	1:A:141:PHE:N	12	2.56
(1,386)	1:A:93:ARG:C	1:A:94:THR:N	1:A:94:THR:CA	1:A:94:THR:C	4	2.56
(1,233)	1:A:140:LEU:N	1:A:140:LEU:CA	1:A:140:LEU:C	1:A:141:PHE:N	12	2.56
(1,151)	1:A:93:ARG:C	1:A:94:THR:N	1:A:94:THR:CA	1:A:94:THR:C	4	2.56
(1,456)	1:A:133:GLY:N	1:A:133:GLY:CA	1:A:133:GLY:C	1:A:134:TYR:N	13	2.55
(1,385)	1:A:93:ARG:N	1:A:93:ARG:CA	1:A:93:ARG:C	1:A:94:THR:N	17	2.55
(1,221)	1:A:133:GLY:N	1:A:133:GLY:CA	1:A:133:GLY:C	1:A:134:TYR:N	13	2.55
(1,150)	1:A:93:ARG:N	1:A:93:ARG:CA	1:A:93:ARG:C	1:A:94:THR:N	17	2.55
(1,254)	1:A:11:SER:C	1:A:12:LEU:N	1:A:12:LEU:CA	1:A:12:LEU:C	12	2.54
(1,19)	1:A:11:SER:C	1:A:12:LEU:N	1:A:12:LEU:CA	1:A:12:LEU:C	12	2.54
(1,9)	1:A:6:GLU:C	1:A:7:GLU:N	1:A:7:GLU:CA	1:A:7:GLU:C	12	2.53
(1,429)	1:A:118:SER:N	1:A:118:SER:CA	1:A:118:SER:C	1:A:119:ALA:N	17	2.53
(1,380)	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	1:A:91:ARG:CA	1:A:91:ARG:C	9	2.53
(1,355)	1:A:76:GLU:N	1:A:76:GLU:CA	1:A:76:GLU:C	1:A:77:GLU:N	11	2.53
(1,244)	1:A:6:GLU:C	1:A:7:GLU:N	1:A:7:GLU:CA	1:A:7:GLU:C	12	2.53
(1,194)	1:A:118:SER:N	1:A:118:SER:CA	1:A:118:SER:C	1:A:119:ALA:N	17	2.53
(1,145)	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	1:A:91:ARG:CA	1:A:91:ARG:C	9	2.53
(1,120)	1:A:76:GLU:N	1:A:76:GLU:CA	1:A:76:GLU:C	1:A:77:GLU:N	11	2.53
(1,65)	1:A:42:TYR:N	1:A:42:TYR:CA	1:A:42:TYR:C	1:A:43:VAL:N	16	2.52
(1,300)	1:A:42:TYR:N	1:A:42:TYR:CA	1:A:42:TYR:C	1:A:43:VAL:N	16	2.52
(1,95)	1:A:60:SER:C	1:A:61:GLN:N	1:A:61:GLN:CA	1:A:61:GLN:C	7	2.51
(1,00)	1.11.00.0110.0	1.11.01.01.11	1.11.01.011.011	1.11.01.01.1.0		ad an nant naga



Key	$rac{ed\ from\ previous\ po}{\mathbf{Atom-1}}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,413)	1:A:109:PRO:N	1:A:109:PRO:CA	1:A:109:PRO:C	1:A:110:ASN:N	15	2.51
(1,383)	1:A:92:SER:N	1:A:92:SER:CA	1:A:92:SER:C	1:A:93:ARG:N	17	2.51
(1,330)	1:A:60:SER:C	1:A:61:GLN:N	1:A:61:GLN:CA	1:A:61:GLN:C	7	2.51
(1,178)	1:A:109:PRO:N	1:A:109:PRO:CA	1:A:109:PRO:C	1:A:110:ASN:N	15	2.51
(1,148)	1:A:92:SER:N	1:A:92:SER:CA	1:A:92:SER:C	1:A:93:ARG:N	17	2.51
(1,42)	1:A:24:GLY:N	1:A:24:GLY:CA	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	12	2.5
(1,277)	1:A:24:GLY:N	1:A:24:GLY:CA	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	12	2.5
(1,79)	1:A:51:LEU:C	1:A:52:PHE:N	1:A:52:PHE:CA	1:A:52:PHE:C	5	2.49
(1,75)	1:A:47:SER:N	1:A:47:SER:CA	1:A:47:SER:C	1:A:48:GLY:N	3	2.49
(1,416)	1:A:111:GLY:C	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	2	2.49
(1,380)	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	1:A:91:ARG:CA	1:A:91:ARG:C	12	2.49
(1,314)	1:A:51:LEU:C	1:A:52:PHE:N	1:A:52:PHE:CA	1:A:52:PHE:C	5	2.49
(1,310)	1:A:47:SER:N	1:A:47:SER:CA	1:A:47:SER:C	1:A:48:GLY:N	3	2.49
(1,181)	1:A:111:GLY:C	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	2	2.49
(1,145)	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	1:A:91:ARG:CA	1:A:91:ARG:C	12	2.49
(1,459)	1:A:135:GLU:C	1:A:136:SER:N	1:A:136:SER:CA	1:A:136:SER:C	1	2.47
(1,362)	1:A:79:LEU:C	1:A:80:ASP:N	1:A:80:ASP:CA	1:A:80:ASP:C	1	2.47
(1,224)	1:A:135:GLU:C	1:A:136:SER:N	1:A:136:SER:CA	1:A:136:SER:C	1	2.47
(1,127)	1:A:79:LEU:C	1:A:80:ASP:N	1:A:80:ASP:CA	1:A:80:ASP:C	1	2.47
(1,460)	1:A:136:SER:N	1:A:136:SER:CA	1:A:136:SER:C	1:A:137:TYR:N	6	2.46
(1,374)	1:A:87:ARG:C	1:A:88:THR:N	1:A:88:THR:CA	1:A:88:THR:C	18	2.46
(1,345)	1:A:70:PRO:N	1:A:70:PRO:CA	1:A:70:PRO:C	1:A:71:ILE:N	18	2.46
(1,225)	1:A:136:SER:N	1:A:136:SER:CA	1:A:136:SER:C	1:A:137:TYR:N	6	2.46
(1,139)	1:A:87:ARG:C	1:A:88:THR:N	1:A:88:THR:CA	1:A:88:THR:C	18	2.46
(1,110)	1:A:70:PRO:N	1:A:70:PRO:CA	1:A:70:PRO:C	1:A:71:ILE:N	18	2.46
(1,92)	1:A:59:ASP:N	1:A:59:ASP:CA	1:A:59:ASP:C	1:A:60:SER:N	1	2.45
(1,327)	1:A:59:ASP:N	1:A:59:ASP:CA	1:A:59:ASP:C	1:A:60:SER:N	1	2.45
(1,464)	1:A:138:LEU:N	1:A:138:LEU:CA	1:A:138:LEU:C	1:A:139:HIS:N	12	2.44
(1,387)	1:A:94:THR:N	1:A:94:THR:CA	1:A:94:THR:C	1:A:95:ALA:N	12	2.44
(1,229)	1:A:138:LEU:N	1:A:138:LEU:CA	1:A:138:LEU:C	1:A:139:HIS:N	12	2.44
(1,152)	1:A:94:THR:N	1:A:94:THR:CA	1:A:94:THR:C	1:A:95:ALA:N	12	2.44
(1,82)	1:A:53:THR:N	1:A:53:THR:CA	1:A:53:THR:C	1:A:54:SER:N	11	2.41
(1,317)	1:A:53:THR:N	1:A:53:THR:CA	1:A:53:THR:C	1:A:54:SER:N	11	2.41
(1,390)	1:A:95:ALA:C	1:A:96:ASP:N	1:A:96:ASP:CA	1:A:96:ASP:C	15	2.39
(1,155)	1:A:95:ALA:C	1:A:96:ASP:N	1:A:96:ASP:CA	1:A:96:ASP:C	15	2.39
(1,397)	1:A:99:LEU:N	1:A:99:LEU:CA	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	15	2.38
(1,162)	1:A:99:LEU:N	1:A:99:LEU:CA	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	15	2.38
(1,378)	1:A:89:GLU:C	1:A:90:VAL:N	1:A:90:VAL:CA	1:A:90:VAL:C	11	2.37
(1,363)	1:A:80:ASP:N	1:A:80:ASP:CA	1:A:80:ASP:C	1:A:81:THR:N	1	2.37
(1,143)	1:A:89:GLU:C	1:A:90:VAL:N	1:A:90:VAL:CA	1:A:90:VAL:C	11	2.37
(1,128)	1:A:80:ASP:N	1:A:80:ASP:CA	1:A:80:ASP:C	1:A:81:THR:N	1	2.37
(1,365)	1:A:82:SER:N	1:A:82:SER:CA	1:A:82:SER:C	1:A:83:HIS:N	1	2.36
(1,130)	1:A:82:SER:N	1:A:82:SER:CA	1:A:82:SER:C	1:A:83:HIS:N	1	2.36
(1,42)	1:A:24:GLY:N	1:A:24:GLY:CA	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	3	2.35
(1,410)	1:A:107:PRO:N	1:A:107:PRO:CA	1:A:107:PRO:C	1:A:108:GLY:N	14	2.35
(1,277)	1:A:24:GLY:N	1:A:24:GLY:CA	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	3	2.35
(1,175)	1:A:107:PRO:N	1:A:107:PRO:CA	1:A:107:PRO:C	1:A:108:GLY:N	14	2.35
(1,337)	1:A:65:PRO:C	1:A:66:SER:N	1:A:66:SER:CA	1:A:66:SER:C	15	2.34
(1,102)	1:A:65:PRO:C	1:A:66:SER:N	1:A:66:SER:CA	1:A:66:SER:C	15	2.34
(1,47)	1:A:27:PRO:N	1:A:27:PRO:CA	1:A:27:PRO:C	1:A:28:PRO:N	17	2.33
(1,282)	1:A:27:PRO:N	1:A:27:PRO:CA	1:A:27:PRO:C	1:A:28:PRO:N	17	2.33



Key	$rac{ed\ from\ previous\ po}{\mathbf{Atom-1}}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,261)	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	1:A:16:GLN:N	4	2.33
(1,26)	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	1:A:16:GLN:N	4	2.33
(1,47)	1:A:27:PRO:N	1:A:27:PRO:CA	1:A:27:PRO:C	1:A:28:PRO:N	15	2.32
(1,282)	1:A:27:PRO:N	1:A:27:PRO:CA	1:A:27:PRO:C	1:A:28:PRO:N	15	2.32
(1,42)	1:A:24:GLY:N	1:A:24:GLY:CA	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	20	2.31
(1,411)	1:A:107:PRO:C	1:A:108:GLY:N	1:A:108:GLY:CA	1:A:108:GLY:C	19	2.31
(1,277)	1:A:24:GLY:N	1:A:24:GLY:CA	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	20	2.31
(1,176)	1:A:107:PRO:C	1:A:108:GLY:N	1:A:108:GLY:CA	1:A:108:GLY:C	19	2.31
(1,468)	1:A:140:LEU:N	1:A:140:LEU:CA	1:A:140:LEU:C	1:A:141:PHE:N	8	2.3
(1,233)	1:A:140:LEU:N	1:A:140:LEU:CA	1:A:140:LEU:C	1:A:141:PHE:N	8	2.3
(1,368)	1:A:84:GLY:C	1:A:85:MET:N	1:A:85:MET:CA	1:A:85:MET:C	13	2.28
(1,355)	1:A:76:GLU:N	1:A:76:GLU:CA	1:A:76:GLU:C	1:A:77:GLU:N	17	2.28
(1,260)	1:A:14:ARG:C	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	2	2.28
(1,25)	1:A:14:ARG:C	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	2	2.28
(1,133)	1:A:84:GLY:C	1:A:85:MET:N	1:A:85:MET:CA	1:A:85:MET:C	13	2.28
(1,120)	1:A:76:GLU:N	1:A:76:GLU:CA	1:A:76:GLU:C	1:A:77:GLU:N	17	2.28
(1,419)	1:A:113:ARG:N	1:A:113:ARG:CA	1:A:113:ARG:C	1:A:114:TYR:N	11	2.27
(1,394)	1:A:97:SER:C	1:A:98:HIS:N	1:A:98:HIS:CA	1:A:98:HIS:C	18	2.27
(1,184)	1:A:113:ARG:N	1:A:113:ARG:CA	1:A:113:ARG:C	1:A:114:TYR:N	11	2.27
(1,159)	1:A:97:SER:C	1:A:98:HIS:N	1:A:98:HIS:CA	1:A:98:HIS:C	18	2.27
(1,461)	1:A:136:SER:C	1:A:137:TYR:N	1:A:137:TYR:CA	1:A:137:TYR:C	3	2.25
(1,226)	1:A:136:SER:C	1:A:137:TYR:N	1:A:137:TYR:CA	1:A:137:TYR:C	3	2.25
(1,397)	1:A:99:LEU:N	1:A:99:LEU:CA	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	1	2.24
(1,371)	1:A:86:ILE:N	1:A:86:ILE:CA	1:A:86:ILE:C	1:A:87:ARG:N	1	2.24
(1,162)	1:A:99:LEU:N	1:A:99:LEU:CA	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	1	2.24
(1,136)	1:A:86:ILE:N	1:A:86:ILE:CA	1:A:86:ILE:C	1:A:87:ARG:N	1	2.24
(1,347)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:GLU:N	2	2.22
(1,112)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:GLU:N	2	2.22
(1,392)	1:A:96:ASP:C	1:A:97:SER:N	1:A:97:SER:CA	1:A:97:SER:C	11	2.21
(1,157)	1:A:96:ASP:C	1:A:97:SER:N	1:A:97:SER:CA	1:A:97:SER:C	11	2.21
(1,455)	1:A:132:GLU:C	1:A:133:GLY:N	1:A:133:GLY:CA	1:A:133:GLY:C	1	2.2
(1,451)	1:A:130:LYS:C	1:A:131:GLU:N	1:A:131:GLU:CA	1:A:131:GLU:C	15	2.2
(1,220)	1:A:132:GLU:C	1:A:133:GLY:N	1:A:133:GLY:CA	1:A:133:GLY:C	1	2.2
(1,216)	1:A:130:LYS:C	1:A:131:GLU:N	1:A:131:GLU:CA	1:A:131:GLU:C	15	2.2
(1,461)	1:A:136:SER:C	1:A:137:TYR:N	1:A:137:TYR:CA	1:A:137:TYR:C	18	2.18
(1,226)	1:A:136:SER:C	1:A:137:TYR:N	1:A:137:TYR:CA	1:A:137:TYR:C	18	2.18
(1,99)	1:A:63:GLY:C	1:A:64:TRP:N	1:A:64:TRP:CA	1:A:64:TRP:C	18	2.17
(1,334)	1:A:63:GLY:C	1:A:64:TRP:N	1:A:64:TRP:CA	1:A:64:TRP:C	18	2.17
(1,28)	1:A:16:GLN:N	1:A:16:GLN:CA	1:A:16:GLN:C	1:A:17:TYR:N	17	2.16
(1,263)	1:A:16:GLN:N	1:A:16:GLN:CA	1:A:16:GLN:C	1:A:17:TYR:N	17	2.16
(1,57)	1:A:37:LYS:N	1:A:37:LYS:CA	1:A:37:LYS:C	1:A:38:GLU:N	8	2.15
(1,464)	1:A:138:LEU:N	1:A:138:LEU:CA	1:A:138:LEU:C	1:A:139:HIS:N	1	2.15
(1,347)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:GLU:N	11	2.15
(1,292)	1:A:37:LYS:N	1:A:37:LYS:CA	1:A:37:LYS:C	1:A:38:GLU:N	8	2.15
(1,229)	1:A:138:LEU:N	1:A:138:LEU:CA	1:A:138:LEU:C	1:A:139:HIS:N	1	2.15
(1,112)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:GLU:N	11	2.15
(1,375)	1:A:88:THR:N	1:A:88:THR:CA	1:A:88:THR:C	1:A:89:GLU:N	14	2.12
(1,355)	1:A:76:GLU:N	1:A:76:GLU:CA	1:A:76:GLU:C	1:A:77:GLU:N	14	2.12
(1,140)	1:A:88:THR:N	1:A:88:THR:CA	1:A:88:THR:C	1:A:89:GLU:N	14	2.12
(1,120)	1:A:76:GLU:N	1:A:76:GLU:CA	1:A:76:GLU:C	1:A:77:GLU:N	14	2.12
(1,92)	1:A:59:ASP:N	1:A:59:ASP:CA	1:A:59:ASP:C	1:A:60:SER:N	15	2.11



	ed from previous pe					
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (\circ)
(1,327)	1:A:59:ASP:N	1:A:59:ASP:CA	1:A:59:ASP:C	1:A:60:SER:N	15	2.11
(1,455)	1:A:132:GLU:C	1:A:133:GLY:N	1:A:133:GLY:CA	1:A:133:GLY:C	15	2.09
(1,419)	1:A:113:ARG:N	1:A:113:ARG:CA	1:A:113:ARG:C	1:A:114:TYR:N	5	2.09
(1,220)	1:A:132:GLU:C	1:A:133:GLY:N	1:A:133:GLY:CA	1:A:133:GLY:C	15	2.09
(1,184)	1:A:113:ARG:N	1:A:113:ARG:CA	1:A:113:ARG:C	1:A:114:TYR:N	5	2.09
(1,42)	1:A:24:GLY:N	1:A:24:GLY:CA	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	16	2.08
(1,410)	1:A:107:PRO:N	1:A:107:PRO:CA	1:A:107:PRO:C	1:A:108:GLY:N	7	2.08
(1,277)	1:A:24:GLY:N	1:A:24:GLY:CA	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	16	2.08
(1,175)	1:A:107:PRO:N	1:A:107:PRO:CA	1:A:107:PRO:C	1:A:108:GLY:N	7	2.08
(1,90)	1:A:58:PHE:N	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:C	1:A:59:ASP:N	15	2.07
(1,325)	1:A:58:PHE:N	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:C	1:A:59:ASP:N	15	2.07
(1,453)	1:A:131:GLU:C	1:A:132:GLU:N	1:A:132:GLU:CA	1:A:132:GLU:C	18	2.06
(1,421)	1:A:114:TYR:N	1:A:114:TYR:CA	1:A:114:TYR:C	1:A:115:CYS:N	3	2.06
(1,218)	1:A:131:GLU:C	1:A:132:GLU:N	1:A:132:GLU:CA	1:A:132:GLU:C	18	2.06
(1,186)	1:A:114:TYR:N	1:A:114:TYR:CA	1:A:114:TYR:C	1:A:115:CYS:N	3	2.06
(1,397)	1:A:99:LEU:N	1:A:99:LEU:CA	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	16	2.05
(1,162)	1:A:99:LEU:N	1:A:99:LEU:CA	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	16	2.05
(1,403)	1:A:102:VAL:N	1:A:102:VAL:CA	1:A:102:VAL:C	1:A:103:PHE:N	14	2.04
(1,168)	1:A:102:VAL:N	1:A:102:VAL:CA	1:A:102:VAL:C	1:A:103:PHE:N	14	2.04
(1,416)	1:A:111:GLY:C	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	3	2.03
(1,385)	1:A:93:ARG:N	1:A:93:ARG:CA	1:A:93:ARG:C	1:A:94:THR:N	18	2.03
(1,382)	1:A:91:ARG:C	1:A:92:SER:N	1:A:92:SER:CA	1:A:92:SER:C	15	2.03
(1,181)	1:A:111:GLY:C	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	3	2.03
(1,150)	1:A:93:ARG:N	1:A:93:ARG:CA	1:A:93:ARG:C	1:A:94:THR:N	18	2.03
(1,147)	1:A:91:ARG:C	1:A:92:SER:N	1:A:92:SER:CA	1:A:92:SER:C	15	2.03
(1,451)	1:A:130:LYS:C	1:A:131:GLU:N	1:A:131:GLU:CA	1:A:131:GLU:C	14	2.02
(1,395)	1:A:98:HIS:N	1:A:98:HIS:CA	1:A:98:HIS:C	1:A:99:LEU:N	15	2.02
(1,237)	1:A:3:TYR:N	1:A:3:TYR:CA	1:A:3:TYR:C	1:A:4:ASN:N	2	2.02
(1,216)	1:A:130:LYS:C	1:A:131:GLU:N	1:A:131:GLU:CA	1:A:131:GLU:C	14	2.02
(1,2)	1:A:3:TYR:N	1:A:3:TYR:CA	1:A:3:TYR:C	1:A:4:ASN:N	2	2.02
(1,160)	1:A:98:HIS:N	1:A:98:HIS:CA	1:A:98:HIS:C	1:A:99:LEU:N	15	2.02
(1,79)	1:A:51:LEU:C	1:A:52:PHE:N	1:A:52:PHE:CA	1:A:52:PHE:C	18	1.96
(1,314)	1:A:51:LEU:C	1:A:52:PHE:N	1:A:52:PHE:CA	1:A:52:PHE:C	18	1.96
(1,355)	1:A:76:GLU:N	1:A:76:GLU:CA	1:A:76:GLU:C	1:A:77:GLU:N	18	1.95
(1,120)	1:A:76:GLU:N	1:A:76:GLU:CA	1:A:76:GLU:C	1:A:77:GLU:N	18	1.95
(1,92)	1:A:59:ASP:N	1:A:59:ASP:CA	1:A:59:ASP:C	1:A:60:SER:N	11	1.92
(1,78)	1:A:50:PRO:N	1:A:50:PRO:CA	1:A:50:PRO:C	1:A:51:LEU:N	18	1.92
(1,327)	1:A:59:ASP:N	1:A:59:ASP:CA	1:A:59:ASP:C	1:A:60:SER:N	11	1.92
(1,313)	1:A:50:PRO:N	1:A:50:PRO:CA	1:A:50:PRO:C	1:A:51:LEU:N	18	1.92
(1,50)	1:A:31:ASN:C	1:A:32:GLU:N	1:A:32:GLU:CA	1:A:32:GLU:C	9	1.91
(1,285)	1:A:31:ASN:C	1:A:32:GLU:N	1:A:32:GLU:CA	1:A:32:GLU:C	9	1.91
(1,411)	1:A:107:PRO:C	1:A:108:GLY:N	1:A:108:GLY:CA	1:A:108:GLY:C	18	1.89
(1,311) $(1,397)$	1:A:99:LEU:N	1:A:99:LEU:CA	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	11	1.89
(1,394)	1:A:97:SER:C	1:A:98:HIS:N	1:A:98:HIS:CA	1:A:98:HIS:C	13	1.89
(1,374) $(1,374)$	1:A:87:ARG:C	1:A:88:THR:N	1:A:88:THR:CA	1:A:88:THR:C	9	1.89
(1,374) $(1,176)$	1:A:107:PRO:C	1:A:108:GLY:N	1:A:108:GLY:CA	1:A:108:GLY:C	18	1.89
(1,170) $(1,162)$	1:A:99:LEU:N	1:A:99:LEU:CA	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLT:C	11	1.89
(1,102) $(1,159)$	1:A:97:SER:C	1:A:98:HIS:N	1:A:98:HIS:CA	1:A:98:HIS:C	13	1.89
(1,139) $(1,139)$	1:A:87:ARG:C	1:A:98:THR:N	1:A:88:THR:CA	1:A:98:THR:C	9	1.89
(1,139) $(1,57)$	1:A:37:LYS:N	1:A:37:LYS:CA	1:A:37:LYS:C	1:A:38:GLU:N	19	1.88
,	1:A:88:THR:N	1:A:88:THR:CA	1:A:88:THR:C	1:A:89:GLU:N	17	1.88
(1,375)	1:A:00:1HK:N	1:A:00:1 HK:UA	1:A:00:1HK:U	1:A:09:GLU:N		1.88



	ed from previous pe				36 11	T70 1 .0 ()
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (\circ)
(1,292)	1:A:37:LYS:N	1:A:37:LYS:CA	1:A:37:LYS:C	1:A:38:GLU:N	19	1.88
(1,140)	1:A:88:THR:N	1:A:88:THR:CA	1:A:88:THR:C	1:A:89:GLU:N	17	1.88
(1,460)	1:A:136:SER:N	1:A:136:SER:CA	1:A:136:SER:C	1:A:137:TYR:N	11	1.87
(1,386)	1:A:93:ARG:C	1:A:94:THR:N	1:A:94:THR:CA	1:A:94:THR:C	8	1.87
(1,225)	1:A:136:SER:N	1:A:136:SER:CA	1:A:136:SER:C	1:A:137:TYR:N	11	1.87
(1,151)	1:A:93:ARG:C	1:A:94:THR:N	1:A:94:THR:CA	1:A:94:THR:C	8	1.87
(1,459)	1:A:135:GLU:C	1:A:136:SER:N	1:A:136:SER:CA	1:A:136:SER:C	15	1.86
(1,362)	1:A:79:LEU:C	1:A:80:ASP:N	1:A:80:ASP:CA	1:A:80:ASP:C	12	1.86
(1,355)	1:A:76:GLU:N	1:A:76:GLU:CA	1:A:76:GLU:C	1:A:77:GLU:N	1	1.86
(1,224)	1:A:135:GLU:C	1:A:136:SER:N	1:A:136:SER:CA	1:A:136:SER:C	15	1.86
(1,127)	1:A:79:LEU:C	1:A:80:ASP:N	1:A:80:ASP:CA	1:A:80:ASP:C	12	1.86
(1,120)	1:A:76:GLU:N	1:A:76:GLU:CA	1:A:76:GLU:C	1:A:77:GLU:N	1	1.86
(1,458)	1:A:135:GLU:N	1:A:135:GLU:CA	1:A:135:GLU:C	1:A:136:SER:N	18	1.84
(1,455)	1:A:132:GLU:C	1:A:133:GLY:N	1:A:133:GLY:CA	1:A:133:GLY:C	13	1.84
(1,451)	1:A:130:LYS:C	1:A:131:GLU:N	1:A:131:GLU:CA	1:A:131:GLU:C	4	1.84
(1,223)	1:A:135:GLU:N	1:A:135:GLU:CA	1:A:135:GLU:C	1:A:136:SER:N	18	1.84
(1,220)	1:A:132:GLU:C	1:A:133:GLY:N	1:A:133:GLY:CA	1:A:133:GLY:C	13	1.84
(1,216)	1:A:130:LYS:C	1:A:131:GLU:N	1:A:131:GLU:CA	1:A:131:GLU:C	4	1.84
(1,459)	1:A:135:GLU:C	1:A:136:SER:N	1:A:136:SER:CA	1:A:136:SER:C	7	1.83
(1,224)	1:A:135:GLU:C	1:A:136:SER:N	1:A:136:SER:CA	1:A:136:SER:C	7	1.83
(1,83)	1:A:53:THR:C	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	19	1.8
(1,451)	1:A:130:LYS:C	1:A:131:GLU:N	1:A:131:GLU:CA	1:A:131:GLU:C	10	1.8
(1,318)	1:A:53:THR:C	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	19	1.8
(1,216)	1:A:130:LYS:C	1:A:131:GLU:N	1:A:131:GLU:CA	1:A:131:GLU:C	10	1.8
(1,92)	1:A:59:ASP:N	1:A:59:ASP:CA	1:A:59:ASP:C	1:A:60:SER:N	9	1.79
(1,412)	1:A:108:GLY:N	1:A:108:GLY:CA	1:A:108:GLY:C	1:A:109:PRO:N	4	1.79
(1,383)	1:A:92:SER:N	1:A:92:SER:CA	1:A:92:SER:C	1:A:93:ARG:N	10	1.79
(1,327)	1:A:59:ASP:N	1:A:59:ASP:CA	1:A:59:ASP:C	1:A:60:SER:N	9	1.79
(1,177)	1:A:108:GLY:N	1:A:108:GLY:CA	1:A:108:GLY:C	1:A:109:PRO:N	4	1.79
(1,148)	1:A:92:SER:N	1:A:92:SER:CA	1:A:92:SER:C	1:A:93:ARG:N	10	1.79
(1,98)	1:A:62:CYS:N	1:A:62:CYS:CA	1:A:62:CYS:C	1:A:63:GLY:N	3	1.78
(1,460)	1:A:136:SER:N	1:A:136:SER:CA	1:A:136:SER:C	1:A:137:TYR:N	13	1.78
(1,4)	1:A:4:ASN:N	1:A:4:ASN:CA	1:A:4:ASN:C	1:A:5:LYS:N	5	1.78
(1,365)	1:A:82:SER:N	1:A:82:SER:CA	1:A:82:SER:C	1:A:83:HIS:N	19	1.78
(1,333)	1:A:62:CYS:N	1:A:62:CYS:CA	1:A:62:CYS:C	1:A:63:GLY:N	3	1.78
(1,239)	1:A:4:ASN:N	1:A:4:ASN:CA	1:A:4:ASN:C	1:A:5:LYS:N	5	1.78
(1,225)	1:A:136:SER:N	1:A:136:SER:CA	1:A:136:SER:C	1:A:137:TYR:N	13	1.78
(1,130)	1:A:82:SER:N	1:A:82:SER:CA	1:A:82:SER:C	1:A:83:HIS:N	19	1.78
(1,84)	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	1:A:55:LYS:N	8	1.77
(1,319)	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	1:A:55:LYS:N	8	1.77
(1,79)	1:A:51:LEU:C	1:A:52:PHE:N	1:A:52:PHE:CA	1:A:52:PHE:C	13	1.76
(1,42)	1:A:24:GLY:N	1:A:24:GLY:CA	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	5	1.76
(1,314)	1:A:51:LEU:C	1:A:52:PHE:N	1:A:52:PHE:CA	1:A:52:PHE:C	13	1.76
(1,314) $(1,277)$	1:A:24:GLY:N	1:A:24:GLY:CA	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	5	1.76
(1,386)	1:A:93:ARG:C	1:A:94:THR:N	1:A:94:THR:CA	1:A:94:THR:C	2	1.74
(1,350) $(1,151)$	1:A:93:ARG:C	1:A:94:THR:N	1:A:94:THR:CA	1:A:94:THR:C	2	1.74
(1,161) $(1,261)$	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	1:A:16:GLN:N	14	1.73
(1,261) $(1,26)$	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	1:A:16:GLN:N	14	1.73
(1,20) $(1,4)$	1:A:4:ASN:N	1:A:4:ASN:CA	1:A:4:ASN:C	1:A:5:LYS:N	1	1.72
(1,239)	1:A:4:ASN:N	1:A:4:ASN:CA 1:A:4:ASN:CA	1:A:4:ASN:C	1:A:5:LYS:N	1	1.72
(1,239) $(1,79)$	1:A:51:LEU:C	1:A:52:PHE:N	1:A:52:PHE:CA	1:A:52:PHE:C	20	1.71
(1,13)	1.71.01.1110.0	1.71.02.1 1115.11	1.11.02.1 HE.OA	1.71.02.1 111.0		1.11



(1,434) 1:A:51:LEUC	Key	$rac{ed\ from\ previous\ po}{\mathbf{Atom-1}}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,65)							, ,
(1,419) 1:A:113:ARG:N 1:A:113:ARG:CA 1:A:113:ARG:C 1:A:114:TYR:N 17 1.7 (1,300) 1:A:42:TYR:N 1:A:42:TYR:CA 1:A:42:TYR:CA 1:A:42:TYR:CA 1:A:43:VAL:N 2 1.7 (1,184) 1:A:113:ARG:N 1:A:413:ARG:CA 1:A:113:ARG:C 1:A:141:TYR:N 17 1.7 (1,75) 1:A:47:SER:N 1:A:47:SER:CA 1:A:47:SER:C 1:A:48:GLY:N 7 1.69 (1,401) 1:A:46:SER:N 1:A:46:SER:CA 1:A:47:SER:C 1:A:48:GLY:N 7 1.69 (1,310) 1:A:47:SER:N 1:A:47-SER:CA 1:A:47:SER:C 1:A:48:GLY:N 7 1.69 (1,101) 1:A:65:PRO:N 1:A:66:PRO:CA 1:A:46:SER:N 16 1.69 (1,464) 1:A:138:LEU:N 1:A:138:LEU:CA 1:A:138:LEU:C 1:A:138:LEU:C 1:A:138:LEU:C 1:A:139:HIS:N 9 1.68 (1,229) 1:A:138:LEU:N 1:A:138:LEU:CA 1:A:138:LEU:C 1:A:138:LEU:C 1:A:138:LEU:C 1:A:138:LEU:C 1:A:138:LEU:C 1:A:138:LEU:C 1:A:138:LEU:C	\ ' /					2	
(1,300) 1:A:42:TYR:N	(' /				1:A:114:TYR:N		
(1,184) 1:A:113:ARG:N 1:A:113:ARG:C 1:A:114:TYR:N 17 1.7 (1,75) 1:A:47:SER:N 1:A:47:SER:CA 1:A:47:SER:C 1:A:48:GIY:N 7 1.69 (1,336) 1:A:161:HIS:N 1:A:101:HIS:CA 1:A:101:HIS:C 1:A:102:VALEN 18 1.69 (1,336) 1:A:65:PRO:N 1:A:65:PRO:CA 1:A:65:PRO:C 1:A:66:SER:N 16 1.69 (1,310) 1:A:47:SER:CN 1:A:47:SER:CA 1:A:47:SER:C 1:A:48:GIY:N 7 1.69 (1,310) 1:A:47:SER:N 1:A:47:SER:CA 1:A:47:SER:C 1:A:48:GIY:N 7 1.69 (1,166) 1:A:101:HIS:N 1:A:101:HIS:CA 1:A:101:HIS:C 1:A:102:VALEN 18 1.69 (1,101) 1:A:65:PRO:N 1:A:65:PRO:CA 1:A:65:PRO:C 1:A:66:SER:N 16 1.69 (1,404) 1:A:33:LEU:N 1:A:33:LEU:CA 1:A:133:LEU:C 1:A:139:HIS:N 9 1.68 (1,423) 1:A:135:CSN 1:A:115:CYS:CA 1:A:115:CYS:CC 1:A:16:LEE:N 8 1.68 (1,295) 1:A:98:HIS:N 1:A:98:HIS:CA 1:A:198:HIS:C 1:A:199:LEU:N 8 1.68 (1,299) 1:A:33:LEU:N 1:A:133:LEU:CA 1:A:133:LEU:C 1:A:133:HIS:N 9 1.68 (1,299) 1:A:138:LEU:N 1:A:138:LEU:CA 1:A:138:LEU:C 1:A:138:LEU:N 8 1.68 (1,299) 1:A:38:LEU:N 1:A:135:CYS:CA 1:A:135:CYS:C 1:A:116:LEE:N 8 1.68 (1,100) 1:A:59:HIS:N 1:A:135:CYS:CA 1:A:135:LEU:N 8 1.68 (1,100) 1:A:59:HIS:N 1:A:136:SER:CA 1:A:98:HIS:C 1:A:99:LEU:N 8 1.68 (1,100) 1:A:59:HIS:N 1:A:59:ASP:N 1:A:59:ASP:C 1:A:156:CYS:C 1:	/	1:A:42:TYR:N	1:A:42:TYR:CA	1:A:42:TYR:C	1:A:43:VAL:N	2	
(1,75)	(' /	1:A:113:ARG:N	1:A:113:ARG:CA	1:A:113:ARG:C	1:A:114:TYR:N	17	1.7
(1.401) 1.A.101:HIS:N 1.A.101:HIS:C 1.A.101:HIS:C 1.A.102:VAL:N 18 1.69 (1.336) 1.A.65:PRO:N 1.A.65:PRO:CA 1.A.65:PRO:C 1.A.66:SER:N 16 1.69 (1.160) 1.A.47:SER:N 1.A.47:SER:C 1.A.47:SER:C 1.A.48:GIY:N 7 1.69 (1.160) 1.A.101:HIS:N 1.A.101:HIS:CA 1.A.101:HIS:C 1.A.102:VAL:N 18 1.69 (1.161) 1.A.65:PRO:N 1.A.65:PRO:CA 1.A.65:PRO:C 1.A.66:SER:N 16 1.69 (1.101) 1.A.65:PRO:N 1.A.15:PRO:CA 1.A.165:PRO:C 1.A.66:SER:N 16 1.69 (1.404) 1.A.138:LEU:N 1.A.138:LEU:N 1.A.138:LEU:C 1.A.138:LEU:C 1.A.138:HIS:N 9 1.68 (1.423) 1.A.15:CYS:N 1.A.115:CYS:CA 1.A.135:LEU:C 1.A.138:HIS:N 9 1.68 (1.423) 1.A.98:HIS:N 1.A.98:HIS:CA 1.A.98:HIS:CC 1.A.299:LEU:N 8 1.68 (1.229) 1.A.138:LEU:N 1.A.138:LEU:CA 1.A.438:LEU:C 1.A.138:HIS:N 9 1.68 (1.188) 1.A.115:CYS:N 1.A.115:CYS:CA 1.A.138:LEU:C 1.A.138:HIS:N 9 1.68 (1.188) 1.A.115:CYS:N 1.A.115:CYS:CA 1.A.138:LEU:C 1.A.139:HIS:N 9 1.68 (1.188) 1.A.138:LEU:N 1.A.138:LEU:CA 1.A.498:HIS:C 1.A.499:LEU:N 8 1.68 (1.100) 1.A.98:HIS:N 1.A.98:HIS:CA 1.A.98:HIS:C 1.A.499:LEU:N 8 1.68 (1.91) 1.A.55:PHE:C 1.A.136:SER:C 1.A.136:SER:C 1.A.136:SER:C 1.A.136:SER:C 1.A.136:SER:C 1.A.136:SER:C 1.A.136:SER:C 1.A.136:SER:C 1.A.137:TYR:N 1 1.67 (1.324) 1.A.55:PHE:C 1.A.136:SER:C 1.A.136:S	/						
(1,336) 1:A:65:PRO:N	(' /						
(1,310)	· · /						
(1,166) 1:A:101:HIS:N 1:A:101:HIS:CA 1:A:101:HIS:C 1:A:102:VAL:N 18 1.69 (1,101) 1:A:65:PRO:N 1:A:65:PRO:CA 1:A:65:PRO:C 1:A:165:CBR:N 16 1.69 (1,442) 1:A:138:LEU:N 1:A:138:LEU:CA 1:A:138:LEU:C 1:A:139:HIS:N 9 1.68 (1,423) 1:A:135:CYS:N 1:A:115:CYS:CA 1:A:115:CYS:C 1:A:116:LE:N 8 1.68 (1,395) 1:A:138:LEU:N 1:A:198:HIS:CA 1:A:198:HIS:C 1:A:99:LEU:N 8 1.68 (1,229) 1:A:138:LEU:N 1:A:115:CYS:CA 1:A:136:CYS:C 1:A:115:CYS:C 1:A:115:CYS:C 1:A:115:CYS:C 1:A:115:CYS:C 1:A:115:CYS:C 1:A:116:CYS:C 1:A:116:CYS:C 1:A:116:CYS:C 1:A:116:CYS:C 1:A:136:SPHE:C 1:A:59:ASP:CA 1:A:136:SPRICC 1:A:136:SPRICC <td>· · /</td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td>	· · /						
(1,101) 1:A:65:PRO:N 1:A:65:PRO:CA 1:A:65:PRO:C 1:A:66:SER:N 16 1.69 (1,464) 1:A:138:LEU:N 1:A:138:LEU:CA 1:A:138:LEU:C 1:A:115:CYS:C 1:A:115:CYS:N 9 1.68 (1,423) 1:A:15:CYS:N 1:A:115:CYS:CA 1:A:115:CYS:C 1:A:116:LE:N 8 1.68 (1,395) 1:A:98:HIS:N 1:A:98:HIS:CA 1:A:138:LEU:N 8 1.68 (1,229) 1:A:138:LEU:N 1:A:138:LEU:CA 1:A:138:LEU:C 1:A:139:HIS:N 9 1.68 (1,160) 1:A:98:HIS:N 1:A:115:CYS:CA 1:A:115:CYS:C 1:A:116:LLE:N 8 1.68 (1,160) 1:A:98:HIS:N 1:A:155:CYS:CA 1:A:116:LLE:N 8 1.68 (1,160) 1:A:98:HIS:N 1:A:498:HIS:CA 1:A:499:LEU:N 8 1.68 (1,160) 1:A:35:PHE:C 1:A:58:PHE:C 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:C 13 1.67 (1,480) 1:A:136:SER:N 1:A:136:SER:CA 1:A:136:SER:CA 1:A:137:TYR:N 1 1.67 <	· · /					18	
(1,464) 1:A:138:LEU:N 1:A:138:LEU:CA 1:A:138:LEU:C 1:A:139:HIS:N 9 1.68 (1,423) 1:A:115:CYS:N 1:A:115:CYS:CA 1:A:115:CYS:C 1:A:116:ILE:N 8 1.68 (1,395) 1:A:98:HIS:N 1:A:98:HIS:CA 1:A:138:LEU:N 1:A:138:LEU:CA 1:A:138:JEU:C 1:A:139:HIS:N 9 1.68 (1,188) 1:A:138:LEU:N 1:A:138:LEU:CA 1:A:138:JEU:C 1:A:139:HIS:N 9 1.68 (1,188) 1:A:138:LEU:N 1:A:136:CSCA 1:A:138:LEU:CS 1:A:116:ILE:N 8 1.68 (1,160) 1:A:58:HIS:N 1:A:39:ASP:N 1:A:59:ASP:CA 1:A:59:ASP:CD 13 1.67 (1,491) 1:A:58:PHE:C 1:A:59:ASP:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:C 13 1.67 (1,400) 1:A:136:SER:N 1:A:136:SER:CA 1:A:136:SER:C 1:A:137:TYR:N 1 1.67 (1,326) 1:A:58:PHE:C 1:A:59:ASP:ASP:ASP:ASP:ASP:ASP:ASP:ASP:ASP:ASP	· · /						
(1,423) 1:A:115:CYS:N 1:A:115:CYS:CA 1:A:115:CYS:C 1:A:116:ILE:N 8 1.68 (1,395) 1:A:98:HIS:N 1:A:98:HIS:CA 1:A:98:HIS:C 1:A:99:LEU:N 8 1.68 (1,229) 1:A:138:LEU:N 1:A:138:LEU:CA 1:A:138:LEU:C 1:A:139:HIS:N 9 1.68 (1,188) 1:A:115:CYS:N 1:A:115:CYS:C 1:A:131:EU:C 1:A:139:HIS:N 9 1.68 (1,160) 1:A:98:HIS:N 1:A:98:HIS:CA 1:A:499:LEU:N 8 1.68 (1,91) 1:A:58:PHE:C 1:A:59:ASP:N 1:A:59:ASP:CA 1:A:59:ASP:C 13 1.67 (1,480) 1:A:36:SER:N 1:A:136:SER:CA 1:A:136:SER:CA 1:A:58:PHE:C 13 1.67 (1,324) 1:A:58:PHE:C 1:A:58:PHE:C 1:A:58:PHE:C 13 1.67 (1,324) 1:A:57:LYS:C 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:C 13 1.67 (1,324) 1:A:58:PHE:C 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:C 13 1.67 (1,421	(' /						
(1,395) 1:A:98:HIS:N 1:A:98:HIS:CA 1:A:98:HIS:C 1:A:99:LEU:N 8 1.68 (1,229) 1:A:138:LEU:N 1:A:138:LEU:CA 1:A:138:LEU:C 1:A:139:HIS:N 9 1.68 (1,188) 1:A:115:CYS:N 1:A:115:CYS:CA 1:A:116:LEN 8 1.68 (1,160) 1:A:58:PHE:N 1:A:59:ASP:N 1:A:59:ASP:CA 1:A:59:ASP:CA 1:A:59:ASP:C 13 1.67 (1,80) 1:A:58:PHE:C 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:C 13 1.67 (1,89) 1:A:57:LYS:C 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:C 13 1.67 (1,326) 1:A:58:PHE:C 1:A:136:SER:CA 1:A:136:SER:C 1:A:57:LYS:C 13 1.67 (1,324) 1:A:57:LYS:C 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:C 13 1.67 (1,225) 1:A:136:SER:N 1:A:136:SER:CA 1:A:137:TYR:N 1 1.67 (1,225) 1:A:136:SER:N 1:A:14:TYR:CA 1:A:14:TYR:C 1:A:137:TYR:N 1 1.67 (1,421)<	(' /						
(1,229) 1:A:138:LEU:N 1:A:138:LEU:CA 1:A:138:LEU:C 1:A:139:HIS:N 9 1.68 (1,188) 1:A:115:CYS:N 1:A:115:CYS:CA 1:A:15:CYS:C 1:A:116:ILE:N 8 1.68 (1,160) 1:A:39:HIS:N 1:A:39:HIS:CA 1:A:39:HIS:C 1:A:459:ASP:N 1:A:59:ASP:CA 1:A:59:ASP:CA 1:A:59:ASP:CD 13 1.67 (1,89) 1:A:57:LYS:C 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:136:SER:C 1:A:137:TYR:N 1 1.67 (1,326) 1:A:36:SER:N 1:A:36:SER:CA 1:A:136:SER:C 1:A:359:ASP:C 13 1.67 (1,324) 1:A:35:PHE:C 1:A:58:PHE:N 1:A:59:ASP:CA 1:A:59:ASP:C 13 1.67 (1,225) 1:A:136:SER:N 1:A:136:SER:CA 1:A:439:ASP:C 13 1.67 (1,2324) 1:A:314:TYR:N 1:A:114:TYR:CA 1:A:114:TYR:CA 1:A:114:TYR:CA 1:A:115:CYS:N 1 1.67 (1,421) 1:A:114:TYR:N 1:A:114:TYR:CA 1:A:114:TYR:C 1:A:115:CYS:N 18 1.66 (1,382)	,						
(1,188) 1:A:115:CYS:N 1:A:115:CYS:CA 1:A:115:CYS:C 1:A:116:ILE:N 8 1.68 (1,160) 1:A:98:HIS:N 1:A:98:HIS:CA 1:A:98:HIS:C 1:A:99:LEU:N 8 1.68 (1,91) 1:A:58:PHE:C 1:A:59:ASP:N 1:A:59:ASP:CA 1:A:59:PHE:C 1:A:58:PHE:C 1:A:58:PHE:C 1:A:58:PHE:C 1:A:58:PHE:C 1:A:58:PHE:C 1:A:58:PHE:C 1:A:59:ASP:CA 1:A:67 1:A:20:DA:DA:DA:DA:DA:DA:DA:DA:DA:DA:DA:DA:DA:	· · /						
(1,160) 1:A:98:HIS:N 1:A:98:HIS:CA 1:A:98:HIS:C 1:A:99:LEU:N 8 1.68 (1,91) 1:A:58:PHE:C 1:A:59:ASP:N 1:A:59:ASP:CA 1:A:59:ASP:C 13 1.67 (1,89) 1:A:57:LYS:C 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:C 13 1.67 (1,460) 1:A:136:SER:N 1:A:136:SER:CA 1:A:136:SER:C 1:A:37:TYR:N 1 1.67 (1,326) 1:A:58:PHE:C 1:A:59:ASP:CA 1:A:59:ASP:C 13 1.67 (1,324) 1:A:57:LYS:C 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:C 13 1.67 (1,225) 1:A:136:SER:N 1:A:136:SER:CA 1:A:136:SER:C 1:A:137:TYR:N 1 1.67 (1,421) 1:A:114:TYR:N 1:A:114:TYR:CA 1:A:114:TYR:C 1:A:115:CYS:N 18 1.66 (1,382) 1:A:91:ARG:C 1:A:92:SER:N 1:A:92:SER:CA 1:A:115:CYS:N 18 1.66 (1,147) 1:A:14:TYR:N 1:A:14:TYR:CA 1:A:14:TYR:C 1:A:115:CYS:N 18 1.66 </td <td>\ ' /</td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td>	\ ' /						
(1,91) 1:A:58:PHE:C 1:A:59:ASP:N 1:A:59:ASP:CA 1:A:59:ASP:C 13 1.67 (1,89) 1:A:57:LYS:C 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:C 13 1.67 (1,460) 1:A:136:SER:N 1:A:136:SER:CA 1:A:136:SER:C 1:A:137:TYR:N 1 1.67 (1,326) 1:A:58:PHE:C 1:A:58:PHE:C 1:A:58:PHE:C 13 1.67 (1,324) 1:A:58:PHE:C 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:C 13 1.67 (1,324) 1:A:57:LYS:C 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:C 13 1.67 (1,324) 1:A:57:LYS:C 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:C 13 1.67 (1,324) 1:A:67:LYS:C 1:A:63:SER:CA 1:A:59:ASP:CA 1:A:59:ASP:CA 1:A:59:ASP:CA 1:A:59:ASP:CA 1:A:65:PRE:C 13 1.67 (1,421) 1:A:14:TYR:N 1:A:14:TYR:CA 1:A:14:TYR:C 1:A:114:TYR:C 1:A:115:CYS:N 18 1.66 (1,382) 1:A:49:1	\ ' /						
(1,89) 1:A:57:LYS:C 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:C 13 1.67 (1,460) 1:A:136:SER:N 1:A:136:SER:CA 1:A:136:SER:C 1:A:137:TYR:N 1 1.67 (1,326) 1:A:58:PHE:C 1:A:59:ASP:N 1:A:59:ASP:CA 1:A:59:ASP:C 13 1.67 (1,324) 1:A:57:LYS:C 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:C 13 1.67 (1,225) 1:A:136:SER:N 1:A:136:SER:CA 1:A:136:SER:C 1:A:137:TYR:N 1 1.67 (1,421) 1:A:14:TYR:N 1:A:14:TYR:CA 1:A:114:TYR:C 1:A:114:TYR:C 1:A:114:TYR:C 1:A:114:TYR:C 1:A:114:TYR:C 1:A:114:TYR:C 1:A:114:TYR:C 1:A:114:TYR:C 1:A:114:TYR:C 1:A:115:CYS:N 18 1.66 (1,147) 1:A:91:ARG:C 1:A:92:SER:N 1:A:92:SER:CA 1:A:192:SER:C 3 1.66 (1,410) 1:A:107:PRO:N 1:A:107:PRO:CA 1:A:107:PRO:C 1:A:108:GLY:N 9 1.65 (1,337) 1:A:65:PRO:C 1:A:66:SER:N 1:A:66:SER:CA	\ ' /						
(1,460) 1:A:136:SER:N 1:A:136:SER:CA 1:A:136:SER:C 1:A:137:TYR:N 1 1.67 (1,326) 1:A:58:PHE:C 1:A:59:ASP:N 1:A:59:ASP:CA 1:A:59:ASP:C 13 1.67 (1,324) 1:A:57:LYS:C 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:C 13 1.67 (1,225) 1:A:136:SER:N 1:A:136:SER:CA 1:A:136:SER:C 1:A:137:TYR:N 1 1.67 (1,421) 1:A:114:TYR:N 1:A:114:TYR:CA 1:A:114:TYR:C 1:A:115:CYS:N 18 1.66 (1,382) 1:A:91:ARG:C 1:A:92:SER:N 1:A:92:SER:CA 1:A:492:SER:C 3 1.66 (1,147) 1:A:91:ARG:C 1:A:92:SER:N 1:A:92:SER:CA 1:A:405:SER:C 3 1.66 (1,410) 1:A:107:PRO:N 1:A:107:PRO:CA 1:A:107:PRO:C 1:A:108:GLY:N 9 1.65 (1,337) 1:A:65:PRO:C 1:A:66:SER:N 1:A:66:SER:CA 1:A:66:SER:C 2 1.65 (1,341) 1:A:107:PRO:C 1:A:107:PRO:C 1:A:108:GLY:N 9 1.65	(' /						
(1,326) 1:A:58:PHE:C 1:A:59:ASP:N 1:A:59:ASP:CA 1:A:59:ASP:C 13 1.67 (1,324) 1:A:57:LYS:C 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:C 13 1.67 (1,225) 1:A:136:SER:N 1:A:136:SER:CA 1:A:136:SER;C 1:A:137:TYR:N 1 1.67 (1,421) 1:A:114:TYR:N 1:A:114:TYR:CA 1:A:114:TYR:C 1:A:115:CYS:N 18 1.66 (1,382) 1:A:91:ARG:C 1:A:92:SER:N 1:A:92:SER:CA 1:A:192:SER:C 3 1.66 (1,147) 1:A:491:ARG:C 1:A:92:SER:N 1:A:92:SER:CA 1:A:92:SER:C 3 1.66 (1,410) 1:A:107:PRO:N 1:A:107:PRO:CA 1:A:107:PRO:C 1:A:108:GLY:N 9 1.65 (1,337) 1:A:65:PRO:C 1:A:66:SER:N 1:A:66:SER:CA 1:A:66:SER:C 2 1.65 (1,102) 1:A:65:PRO:C 1:A:66:SER:N 1:A:66:SER:CA 1:A:108:GLY:N 9 1.65 (1,419) 1:A:13:ARG:N 1:A:13:ARG:CA 1:A:13:ARG:C 1:A:114:TYR:N 8 <td>(' /</td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td>	(' /						
(1,324) 1:A:57:LYS:C 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:C 13 1.67 (1,225) 1:A:136:SER:N 1:A:136:SER:CA 1:A:136:SER:C 1:A:137:TYR:N 1 1.67 (1,421) 1:A:14:TYR:N 1:A:114:TYR:CA 1:A:114:TYR:C 1:A:115:CYS:N 18 1.66 (1,382) 1:A:91:ARG:C 1:A:92:SER:N 1:A:92:SER:CA 1:A:92:SER:C 3 1.66 (1,186) 1:A:114:TYR:N 1:A:114:TYR:CA 1:A:114:TYR:C 1:A:115:CYS:N 18 1.66 (1,186) 1:A:114:TYR:N 1:A:114:TYR:CA 1:A:114:TYR:C 1:A:115:CYS:N 18 1.66 (1,186) 1:A:114:TYR:N 1:A:114:TYR:CA 1:A:114:TYR:C 1:A:115:CYS:N 18 1.66 (1,147) 1:A:19:ARG:C 1:A:92:SER:N 1:A:92:SER:CA 1:A:115:CYS:N 18 1.66 (1,471) 1:A:107:PRO:N 1:A:107:PRO:CA 1:A:107:PRO:C 1:A:108:GSR:CA 1:A:66:SER:C 2 1.65 (1,102) 1:A:65:PRO:C 1:A:108:GSR:N 1:A:108:GSR:CA	/						
(1,225) 1:A:136:SER:N 1:A:136:SER:CA 1:A:136:SER:C 1:A:137:TYR:N 1 1.67 (1,421) 1:A:114:TYR:N 1:A:114:TYR:CA 1:A:114:TYR:C 1:A:115:CYS:N 18 1.66 (1,382) 1:A:91:ARG:C 1:A:92:SER:N 1:A:92:SER:CA 1:A:92:SER:C 3 1.66 (1,186) 1:A:114:TYR:N 1:A:114:TYR:CA 1:A:114:TYR:C 1:A:115:CYS:N 18 1.66 (1,147) 1:A:91:ARG:C 1:A:92:SER:N 1:A:92:SER:CA 1:A:195:CYS:N 18 1.66 (1,410) 1:A:107:PRO:N 1:A:107:PRO:CA 1:A:107:PRO:C 1:A:108:GLY:N 9 1.65 (1,337) 1:A:65:PRO:C 1:A:66:SER:N 1:A:66:SER:CA 1:A:108:GLY:N 9 1.65 (1,175) 1:A:107:PRO:N 1:A:113:ARG:CA 1:A:114:TYR:N 8 1.64 <	/						
(1,421) 1:A:114:TYR:N 1:A:114:TYR:CA 1:A:114:TYR:C 1:A:115:CYS:N 18 1.66 (1,382) 1:A:91:ARG:C 1:A:92:SER:N 1:A:92:SER:CA 1:A:92:SER:C 3 1.66 (1,186) 1:A:114:TYR:N 1:A:114:TYR:CA 1:A:114:TYR:C 1:A:115:CYS:N 18 1.66 (1,147) 1:A:91:ARG:C 1:A:92:SER:N 1:A:92:SER:CA 1:A:92:SER:C 3 1.66 (1,410) 1:A:107:PRO:N 1:A:107:PRO:CA 1:A:107:PRO:C 1:A:108:GLY:N 9 1.65 (1,337) 1:A:65:PRO:C 1:A:66:SER:N 1:A:66:SER:CA 1:A:66:SER:C 2 1.65 (1,175) 1:A:107:PRO:N 1:A:107:PRO:CA 1:A:107:PRO:C 1:A:108:GLY:N 9 1.65 (1,102) 1:A:65:PRO:C 1:A:66:SER:N 1:A:66:SER:CA 1:A:66:SER:C 2 1.65 (1,419) 1:A:113:ARG:N 1:A:113:ARG:CA 1:A:113:ARG:C 1:A:114:TYR:N 8 1.64 (1,411) 1:A:107:PRO:C 1:A:108:GLY:N 1:A:108:GLY:CA 1:A:114:TYR:N <	(' /						
(1,382) 1:A:91:ARG:C 1:A:92:SER:N 1:A:92:SER:CA 1:A:92:SER:C 3 1.66 (1,186) 1:A:114:TYR:N 1:A:114:TYR:CA 1:A:114:TYR:C 1:A:115:CYS:N 18 1.66 (1,147) 1:A:91:ARG:C 1:A:92:SER:N 1:A:92:SER:CA 1:A:92:SER:C 3 1.66 (1,410) 1:A:107:PRO:N 1:A:107:PRO:CA 1:A:107:PRO:C 1:A:108:GLY:N 9 1.65 (1,337) 1:A:65:PRO:C 1:A:66:SER:N 1:A:66:SER:CA 1:A:66:SER:C 2 1.65 (1,175) 1:A:107:PRO:N 1:A:107:PRO:CA 1:A:107:PRO:C 1:A:108:GLY:N 9 1.65 (1,102) 1:A:65:PRO:C 1:A:66:SER:N 1:A:66:SER:CA 1:A:66:SER:C 2 1.65 (1,419) 1:A:13:ARG:N 1:A:113:ARG:CA 1:A:113:ARG:C 1:A:114:TYR:N 8 1.64 (1,141) 1:A:13:ARG:N 1:A:13:ARG:CA 1:A:113:ARG:C 1:A:114:TYR:N 8 1.64 (1,184) 1:A:13:ARG:N 1:A:13:08:GLY:N 1:A:108:GLY:CA 1:A:14:14:TYR:N <t< td=""><td>\ · /</td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td></t<>	\ · /						
(1,186) 1:A:114:TYR:N 1:A:114:TYR:CA 1:A:114:TYR:C 1:A:115:CYS:N 18 1.66 (1,147) 1:A:91:ARG:C 1:A:92:SER:N 1:A:92:SER:CA 1:A:92:SER:C 3 1.66 (1,410) 1:A:107:PRO:N 1:A:107:PRO:CA 1:A:107:PRO:C 1:A:108:GLY:N 9 1.65 (1,337) 1:A:65:PRO:C 1:A:66:SER:N 1:A:66:SER:CA 1:A:66:SER:C 2 1.65 (1,175) 1:A:107:PRO:N 1:A:107:PRO:CA 1:A:107:PRO:C 1:A:108:GLY:N 9 1.65 (1,102) 1:A:65:PRO:C 1:A:66:SER:N 1:A:66:SER:CA 1:A:66:SER:C 2 1.65 (1,419) 1:A:13:ARG:N 1:A:13:ARG:CA 1:A:113:ARG:C 1:A:114:TYR:N 8 1.64 (1,419) 1:A:13:ARG:N 1:A:108:GLY:N 1:A:108:GLY:C 9 1.64 (1,141) 1:A:107:PRO:C 1:A:108:GLY:C 1:A:114:TYR:N 8 1.64 (1,176) 1:A:107:PRO:C 1:A:108:GLY:N 1:A:108:GLY:C 9 1.64 (1,349) 1:A:73:G	· · /						
(1,147) 1:A:91:ARG:C 1:A:92:SER:N 1:A:92:SER:CA 1:A:92:SER:C 3 1.66 (1,410) 1:A:107:PRO:N 1:A:107:PRO:CA 1:A:107:PRO:C 1:A:108:GLY:N 9 1.65 (1,337) 1:A:65:PRO:C 1:A:66:SER:N 1:A:66:SER:CA 1:A:66:SER:C 2 1.65 (1,175) 1:A:107:PRO:N 1:A:107:PRO:CA 1:A:107:PRO:C 1:A:108:GLY:N 9 1.65 (1,102) 1:A:65:PRO:C 1:A:66:SER:N 1:A:66:SER:CA 1:A:108:GLY:N 9 1.65 (1,419) 1:A:113:ARG:N 1:A:13:ARG:CA 1:A:113:ARG:C 1:A:114:TYR:N 8 1.64 (1,411) 1:A:107:PRO:C 1:A:108:GLY:N 1:A:108:GLY:C 9 1.64 (1,184) 1:A:113:ARG:N 1:A:13:ARG:CA 1:A:13:ARG:C 1:A:114:TYR:N 8 1.64 (1,176) 1:A:107:PRO:C 1:A:108:GLY:N 1:A:108:GLY:C 9 1.64 (1,349) 1:A:73:GLU:N 1:A:108:GLY:N 1:A:108:GLY:C 9 1.64 (1,349) 1:A:60:SE	· · /						
(1,410) 1:A:107:PRO:N 1:A:107:PRO:CA 1:A:107:PRO:C 1:A:108:GLY:N 9 1.65 (1,337) 1:A:65:PRO:C 1:A:66:SER:N 1:A:66:SER:CA 1:A:66:SER:C 2 1.65 (1,175) 1:A:107:PRO:N 1:A:107:PRO:CA 1:A:107:PRO:C 1:A:108:GLY:N 9 1.65 (1,102) 1:A:65:PRO:C 1:A:66:SER:N 1:A:66:SER:CA 1:A:66:SER:C 2 1.65 (1,419) 1:A:113:ARG:N 1:A:113:ARG:CA 1:A:113:ARG:C 1:A:114:TYR:N 8 1.64 (1,411) 1:A:107:PRO:C 1:A:108:GLY:N 1:A:108:GLY:CA 1:A:108:GLY:C 9 1.64 (1,184) 1:A:113:ARG:N 1:A:108:GLY:N 1:A:108:GLY:CA 1:A:114:TYR:N 8 1.64 (1,176) 1:A:107:PRO:C 1:A:108:GLY:N 1:A:108:GLY:CA 1:A:108:GLY:C 9 1.64 (1,349) 1:A:73:GLU:N 1:A:73:GLU:CA 1:A:73:GLU:C 1:A:74:GLU:N 19 1.62 (1,95) 1:A:60:SER:C 1:A:61:GLN:N 1:A:61:GLN:CA 1:A:61:GLN:C <td< td=""><td>(' /</td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td></td<>	(' /						
(1,337) 1:A:65:PRO:C 1:A:66:SER:N 1:A:66:SER:CA 1:A:66:SER:C 2 1.65 (1,175) 1:A:107:PRO:N 1:A:107:PRO:CA 1:A:107:PRO:C 1:A:108:GLY:N 9 1.65 (1,102) 1:A:65:PRO:C 1:A:66:SER:N 1:A:66:SER:CA 1:A:66:SER:C 2 1.65 (1,419) 1:A:113:ARG:N 1:A:113:ARG:CA 1:A:113:ARG:C 1:A:114:TYR:N 8 1.64 (1,411) 1:A:107:PRO:C 1:A:108:GLY:N 1:A:108:GLY:CA 1:A:113:ARG:C 1:A:114:TYR:N 8 1.64 (1,184) 1:A:113:ARG:N 1:A:113:ARG:CA 1:A:113:ARG:C 1:A:114:TYR:N 8 1.64 (1,184) 1:A:107:PRO:C 1:A:108:GLY:N 1:A:108:GLY:CA 1:A:114:TYR:N 8 1.64 (1,176) 1:A:107:PRO:C 1:A:108:GLY:N 1:A:108:GLY:CA 1:A:108:GLY:CA 1:A:108:GLY:C 9 1.64 (1,349) 1:A:73:GLU:N 1:A:73:GLU:CA 1:A:73:GLU:N 19 1.62 (1,95) 1:A:60:SER:C 1:A:61:GLN:N 1:A:61:GLN:CA	\ · /						
(1,175) 1:A:107:PRO:N 1:A:107:PRO:CA 1:A:107:PRO:C 1:A:108:GLY:N 9 1.65 (1,102) 1:A:65:PRO:C 1:A:66:SER:N 1:A:66:SER:CA 1:A:66:SER:C 2 1.65 (1,419) 1:A:113:ARG:N 1:A:113:ARG:CA 1:A:113:ARG:C 1:A:114:TYR:N 8 1.64 (1,411) 1:A:107:PRO:C 1:A:108:GLY:N 1:A:108:GLY:CA 1:A:108:GLY:C 9 1.64 (1,184) 1:A:113:ARG:N 1:A:113:ARG:CA 1:A:113:ARG:C 1:A:114:TYR:N 8 1.64 (1,176) 1:A:107:PRO:C 1:A:108:GLY:N 1:A:108:GLY:CA 1:A:108:GLY:C 9 1.64 (1,349) 1:A:73:GLU:N 1:A:108:GLY:CA 1:A:74:GLU:N 19 1.62 (1,114) 1:A:73:GLU:N 1:A:73:GLU:CA 1:A:73:GLU:C 1:A:74:GLU:N 19 1.62 (1,95) 1:A:60:SER:C 1:A:61:GLN:N 1:A:61:GLN:CA 1:A:61:GLN:C 1 1.6 (1,367) 1:A:84:GLY:N 1:A:84:GLY:CA 1:A:84:GLY:C 1:A:85:MET:N 15 1.6	(' /						
(1,102) 1:A:65:PRO:C 1:A:66:SER:N 1:A:66:SER:CA 1:A:66:SER:C 2 1.65 (1,419) 1:A:113:ARG:N 1:A:113:ARG:CA 1:A:113:ARG:C 1:A:114:TYR:N 8 1.64 (1,411) 1:A:107:PRO:C 1:A:108:GLY:N 1:A:108:GLY:CA 1:A:108:GLY:C 9 1.64 (1,184) 1:A:113:ARG:N 1:A:113:ARG:CA 1:A:113:ARG:C 1:A:114:TYR:N 8 1.64 (1,176) 1:A:107:PRO:C 1:A:108:GLY:N 1:A:108:GLY:CA 1:A:108:GLY:C 9 1.64 (1,349) 1:A:73:GLU:N 1:A:73:GLU:CA 1:A:73:GLU:C 1:A:74:GLU:N 19 1.62 (1,114) 1:A:73:GLU:N 1:A:61:GLN:CA 1:A:74:GLU:N 19 1.62 (1,95) 1:A:60:SER:C 1:A:61:GLN:N 1:A:61:GLN:CA 1:A:61:GLN:C 1 1.6 (1,367) 1:A:84:GLY:N 1:A:84:GLY:CA 1:A:84:GLY:C 1:A:85:MET:N 15 1.6 (1,347) 1:A:60:SER:C 1:A:61:GLN:N 1:A:61:GLN:CA 1:A:61:GLN:C 1 1.6	` ' /					9	
(1,419) 1:A:113:ARG:N 1:A:113:ARG:CA 1:A:113:ARG:C 1:A:114:TYR:N 8 1.64 (1,411) 1:A:107:PRO:C 1:A:108:GLY:N 1:A:108:GLY:CA 1:A:108:GLY:C 9 1.64 (1,184) 1:A:113:ARG:N 1:A:113:ARG:CA 1:A:113:ARG:C 1:A:114:TYR:N 8 1.64 (1,176) 1:A:107:PRO:C 1:A:108:GLY:N 1:A:108:GLY:CA 1:A:108:GLY:C 9 1.64 (1,349) 1:A:73:GLU:N 1:A:73:GLU:CA 1:A:73:GLU:C 1:A:74:GLU:N 19 1.62 (1,114) 1:A:73:GLU:N 1:A:61:GLN:CA 1:A:74:GLU:N 19 1.62 (1,95) 1:A:60:SER:C 1:A:61:GLN:N 1:A:61:GLN:CA 1:A:61:GLN:C 1 1.6 (1,410) 1:A:107:PRO:N 1:A:107:PRO:CA 1:A:108:GLY:N 10 1.6 (1,367) 1:A:84:GLY:N 1:A:84:GLY:CA 1:A:84:GLY:C 1:A:85:MET:N 15 1.6 (1,347) 1:A:60:SER:C 1:A:61:GLN:N 1:A:61:GLN:CA 1:A:61:GLN:C 1 1.6	(' /	1:A:65:PRO:C	1:A:66:SER:N	1:A:66:SER:CA	1:A:66:SER:C	2	
(1,411) 1:A:107:PRO:C 1:A:108:GLY:N 1:A:108:GLY:CA 1:A:108:GLY:C 9 1.64 (1,184) 1:A:113:ARG:N 1:A:113:ARG:CA 1:A:113:ARG:C 1:A:114:TYR:N 8 1.64 (1,176) 1:A:107:PRO:C 1:A:108:GLY:N 1:A:108:GLY:CA 1:A:108:GLY:C 9 1.64 (1,349) 1:A:73:GLU:N 1:A:73:GLU:CA 1:A:73:GLU:C 1:A:74:GLU:N 19 1.62 (1,114) 1:A:73:GLU:N 1:A:61:GLN:CA 1:A:61:GLN:C 1 1.6 (1,95) 1:A:60:SER:C 1:A:61:GLN:N 1:A:61:GLN:CA 1:A:61:GLN:C 1 1.6 (1,410) 1:A:107:PRO:N 1:A:107:PRO:CA 1:A:107:PRO:C 1:A:108:GLY:N 10 1.6 (1,367) 1:A:84:GLY:N 1:A:84:GLY:CA 1:A:84:GLY:C 1:A:85:MET:N 15 1.6 (1,347) 1:A:72:GLU:N 1:A:61:GLN:CA 1:A:61:GLN:C 1 1.6 (1,330) 1:A:60:SER:C 1:A:61:GLN:N 1:A:61:GLN:CA 1:A:61:GLN:C 1 1.6	(' /		1:A:113:ARG:CA			8	
(1,184) 1:A:113:ARG:N 1:A:113:ARG:CA 1:A:113:ARG:C 1:A:114:TYR:N 8 1.64 (1,176) 1:A:107:PRO:C 1:A:108:GLY:N 1:A:108:GLY:CA 1:A:108:GLY:C 9 1.64 (1,349) 1:A:73:GLU:N 1:A:73:GLU:CA 1:A:73:GLU:C 1:A:74:GLU:N 19 1.62 (1,114) 1:A:60:SER:C 1:A:61:GLN:N 1:A:61:GLN:CA 1:A:61:GLN:C 1 1.6 (1,95) 1:A:60:SER:C 1:A:61:GLN:N 1:A:61:GLN:CA 1:A:61:GLN:C 1 1.6 (1,410) 1:A:107:PRO:N 1:A:107:PRO:CA 1:A:108:GLY:N 10 1.6 (1,367) 1:A:84:GLY:N 1:A:84:GLY:CA 1:A:84:GLY:C 1:A:85:MET:N 15 1.6 (1,347) 1:A:72:GLU:N 1:A:72:GLU:CA 1:A:72:GLU:C 1:A:73:GLU:N 18 1.6 (1,330) 1:A:60:SER:C 1:A:61:GLN:N 1:A:61:GLN:CA 1:A:61:GLN:C 1 1.6	\ ' /		1:A:108:GLY:N		1:A:108:GLY:C	9	
(1,176) 1:A:107:PRO:C 1:A:108:GLY:N 1:A:108:GLY:CA 1:A:108:GLY:C 9 1.64 (1,349) 1:A:73:GLU:N 1:A:73:GLU:CA 1:A:73:GLU:C 1:A:74:GLU:N 19 1.62 (1,114) 1:A:73:GLU:N 1:A:73:GLU:CA 1:A:73:GLU:C 1:A:74:GLU:N 19 1.62 (1,95) 1:A:60:SER:C 1:A:61:GLN:N 1:A:61:GLN:CA 1:A:61:GLN:C 1 1.6 (1,410) 1:A:107:PRO:N 1:A:107:PRO:CA 1:A:108:GLY:N 10 1.6 (1,367) 1:A:84:GLY:N 1:A:84:GLY:CA 1:A:84:GLY:C 1:A:85:MET:N 15 1.6 (1,347) 1:A:72:GLU:N 1:A:72:GLU:CA 1:A:72:GLU:C 1:A:73:GLU:N 18 1.6 (1,330) 1:A:60:SER:C 1:A:61:GLN:N 1:A:61:GLN:CA 1:A:61:GLN:C 1 1.6	\ ' /	1:A:113:ARG:N	1:A:113:ARG:CA	1:A:113:ARG:C	1:A:114:TYR:N	8	1.64
(1,349) 1:A:73:GLU:N 1:A:73:GLU:CA 1:A:73:GLU:C 1:A:74:GLU:N 19 1.62 (1,114) 1:A:73:GLU:N 1:A:73:GLU:CA 1:A:73:GLU:C 1:A:74:GLU:N 19 1.62 (1,95) 1:A:60:SER:C 1:A:61:GLN:N 1:A:61:GLN:CA 1:A:61:GLN:C 1 1.6 (1,410) 1:A:107:PRO:N 1:A:107:PRO:CA 1:A:107:PRO:C 1:A:108:GLY:N 10 1.6 (1,367) 1:A:84:GLY:N 1:A:84:GLY:CA 1:A:84:GLY:C 1:A:85:MET:N 15 1.6 (1,347) 1:A:72:GLU:N 1:A:72:GLU:CA 1:A:72:GLU:C 1:A:73:GLU:N 18 1.6 (1,330) 1:A:60:SER:C 1:A:61:GLN:N 1:A:61:GLN:CA 1:A:61:GLN:C 1 1.6	· · /	1:A:107:PRO:C	1:A:108:GLY:N	1:A:108:GLY:CA	1:A:108:GLY:C	9	
(1,114) 1:A:73:GLU:N 1:A:73:GLU:CA 1:A:73:GLU:C 1:A:74:GLU:N 19 1.62 (1,95) 1:A:60:SER:C 1:A:61:GLN:N 1:A:61:GLN:CA 1:A:61:GLN:C 1 1.6 (1,410) 1:A:107:PRO:N 1:A:107:PRO:CA 1:A:108:GLY:N 10 1.6 (1,367) 1:A:84:GLY:N 1:A:84:GLY:CA 1:A:84:GLY:C 1:A:85:MET:N 15 1.6 (1,347) 1:A:72:GLU:N 1:A:72:GLU:CA 1:A:72:GLU:C 1:A:73:GLU:N 18 1.6 (1,330) 1:A:60:SER:C 1:A:61:GLN:N 1:A:61:GLN:CA 1:A:61:GLN:C 1 1.6				1:A:73:GLU:C		19	
(1,410) 1:A:107:PRO:N 1:A:107:PRO:CA 1:A:107:PRO:C 1:A:108:GLY:N 10 1.6 (1,367) 1:A:84:GLY:N 1:A:84:GLY:CA 1:A:84:GLY:C 1:A:85:MET:N 15 1.6 (1,347) 1:A:72:GLU:N 1:A:72:GLU:CA 1:A:72:GLU:C 1:A:73:GLU:N 18 1.6 (1,330) 1:A:60:SER:C 1:A:61:GLN:N 1:A:61:GLN:CA 1:A:61:GLN:C 1 1.6	(1,114)	1:A:73:GLU:N	1:A:73:GLU:CA	1:A:73:GLU:C	1:A:74:GLU:N	19	1.62
(1,410) 1:A:107:PRO:N 1:A:107:PRO:CA 1:A:107:PRO:C 1:A:108:GLY:N 10 1.6 (1,367) 1:A:84:GLY:N 1:A:84:GLY:CA 1:A:84:GLY:C 1:A:85:MET:N 15 1.6 (1,347) 1:A:72:GLU:N 1:A:72:GLU:CA 1:A:72:GLU:C 1:A:73:GLU:N 18 1.6 (1,330) 1:A:60:SER:C 1:A:61:GLN:N 1:A:61:GLN:CA 1:A:61:GLN:C 1 1.6	(1,95)	1:A:60:SER:C	1:A:61:GLN:N	1:A:61:GLN:CA	1:A:61:GLN:C	1	1.6
(1,367) 1:A:84:GLY:N 1:A:84:GLY:CA 1:A:84:GLY:C 1:A:85:MET:N 15 1.6 (1,347) 1:A:72:GLU:N 1:A:72:GLU:CA 1:A:72:GLU:C 1:A:73:GLU:N 18 1.6 (1,330) 1:A:60:SER:C 1:A:61:GLN:N 1:A:61:GLN:CA 1:A:61:GLN:C 1 1.6	(' /	1:A:107:PRO:N	1:A:107:PRO:CA	1:A:107:PRO:C	1:A:108:GLY:N	10	1.6
(1,347) 1:A:72:GLU:N 1:A:72:GLU:CA 1:A:72:GLU:C 1:A:73:GLU:N 18 1.6 (1,330) 1:A:60:SER:C 1:A:61:GLN:N 1:A:61:GLN:CA 1:A:61:GLN:C 1 1.6	\ · /	1:A:84:GLY:N		1:A:84:GLY:C		15	
(1,330) 1:A:60:SER:C 1:A:61:GLN:N 1:A:61:GLN:CA 1:A:61:GLN:C 1 1.6	\ · /						
(1,175) 1:A:107:PRO:N 1:A:107:PRO:CA 1:A:107:PRO:C 1:A:108:GLY:N 10 1.6	\ · /		1:A:107:PRO:CA	1:A:107:PRO:C		10	
(1,132) 1:A:84:GLY:N 1:A:84:GLY:CA 1:A:84:GLY:C 1:A:85:MET:N 15 1.6	\ · /						
(1,112) 1:A:72:GLU:N 1:A:72:GLU:CA 1:A:72:GLU:C 1:A:73:GLU:N 18 1.6	\ · /						
(1,341) 1:A:67:PHE:C 1:A:68:THR:N 1:A:68:THR:CA 1:A:68:THR:C 19 1.59	\ · /						
(1,106) 1:A:67:PHE:C 1:A:68:THR:N 1:A:68:THR:CA 1:A:68:THR:C 19 1.59	· · /						
(1,83) 1:A:53:THR:C 1:A:54:SER:N 1:A:54:SER:CA 1:A:54:SER:C 9 1.58	(' /						
(1,318) 1:A:53:THR:C 1:A:54:SER:N 1:A:54:SER:CA 1:A:54:SER:C 9 1.58	· · /						
(1,79) 1:A:51:LEU:C 1:A:52:PHE:N 1:A:52:PHE:CA 1:A:52:PHE:C 14 1.56	\ ' /					14	
(1,455) 1:A:132:GLU:C 1:A:133:GLY:N 1:A:133:GLY:CA 1:A:133:GLY:C 16 1.56	· · /						



	ed from previous pe	-				
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (\circ)
(1,415)	1:A:110:ASN:N	1:A:110:ASN:CA	1:A:110:ASN:C	1:A:111:GLY:N	20	1.56
(1,395)	1:A:98:HIS:N	1:A:98:HIS:CA	1:A:98:HIS:C	1:A:99:LEU:N	11	1.56
(1,314)	1:A:51:LEU:C	1:A:52:PHE:N	1:A:52:PHE:CA	1:A:52:PHE:C	14	1.56
(1,220)	1:A:132:GLU:C	1:A:133:GLY:N	1:A:133:GLY:CA	1:A:133:GLY:C	16	1.56
(1,180)	1:A:110:ASN:N	1:A:110:ASN:CA	1:A:110:ASN:C	1:A:111:GLY:N	20	1.56
(1,160)	1:A:98:HIS:N	1:A:98:HIS:CA	1:A:98:HIS:C	1:A:99:LEU:N	11	1.56
(1,397)	1:A:99:LEU:N	1:A:99:LEU:CA	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	9	1.55
(1,363)	1:A:80:ASP:N	1:A:80:ASP:CA	1:A:80:ASP:C	1:A:81:THR:N	12	1.55
(1,162)	1:A:99:LEU:N	1:A:99:LEU:CA	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	9	1.55
(1,128)	1:A:80:ASP:N	1:A:80:ASP:CA	1:A:80:ASP:C	1:A:81:THR:N	12	1.55
(1,464)	1:A:138:LEU:N	1:A:138:LEU:CA	1:A:138:LEU:C	1:A:139:HIS:N	16	1.54
(1,455)	1:A:132:GLU:C	1:A:133:GLY:N	1:A:133:GLY:CA	1:A:133:GLY:C	20	1.54
(1,237)	1:A:3:TYR:N	1:A:3:TYR:CA	1:A:3:TYR:C	1:A:4:ASN:N	4	1.54
(1,229)	1:A:138:LEU:N	1:A:138:LEU:CA	1:A:138:LEU:C	1:A:139:HIS:N	16	1.54
(1,220)	1:A:132:GLU:C	1:A:133:GLY:N	1:A:133:GLY:CA	1:A:133:GLY:C	20	1.54
(1,2)	1:A:3:TYR:N	1:A:3:TYR:CA	1:A:3:TYR:C	1:A:4:ASN:N	4	1.54
(1,465)	1:A:138:LEU:C	1:A:139:HIS:N	1:A:139:HIS:CA	1:A:139:HIS:C	12	1.53
(1,453)	1:A:131:GLU:C	1:A:132:GLU:N	1:A:132:GLU:CA	1:A:132:GLU:C	12	1.53
(1,435)	1:A:122:ARG:N	1:A:122:ARG:CA	1:A:122:ARG:C	1:A:123:PHE:N	18	1.53
(1,230)	1:A:138:LEU:C	1:A:139:HIS:N	1:A:139:HIS:CA	1:A:139:HIS:C	12	1.53
(1,218)	1:A:131:GLU:C	1:A:132:GLU:N	1:A:132:GLU:CA	1:A:132:GLU:C	12	1.53
(1,200)	1:A:122:ARG:N	1:A:122:ARG:CA	1:A:122:ARG:C	1:A:123:PHE:N	18	1.53
(1,83)	1:A:53:THR:C	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	12	1.52
(1,78)	1:A:50:PRO:N	1:A:50:PRO:CA	1:A:50:PRO:C	1:A:51:LEU:N	6	1.52
(1,383)	1:A:92:SER:N	1:A:92:SER:CA	1:A:92:SER:C	1:A:93:ARG:N	15	1.52
(1,318)	1:A:53:THR:C	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	12	1.52
(1,313)	1:A:50:PRO:N	1:A:50:PRO:CA	1:A:50:PRO:C	1:A:51:LEU:N	6	1.52
(1,148)	1:A:92:SER:N	1:A:92:SER:CA	1:A:92:SER:C	1:A:93:ARG:N	15	1.52
(1,87)	1:A:56:ASP:C	1:A:57:LYS:N	1:A:57:LYS:CA	1:A:57:LYS:C	19	1.51
(1,465)	1:A:138:LEU:C	1:A:139:HIS:N	1:A:139:HIS:CA	1:A:139:HIS:C	10	1.51
(1,322)	1:A:56:ASP:C	1:A:57:LYS:N	1:A:57:LYS:CA	1:A:57:LYS:C	19	1.51
(1,230)	1:A:138:LEU:C	1:A:139:HIS:N	1:A:139:HIS:CA	1:A:139:HIS:C	10	1.51
(1,410)	1:A:107:PRO:N	1:A:107:PRO:CA	1:A:107:PRO:C	1:A:108:GLY:N	12	1.5
(1,336)	1:A:65:PRO:N	1:A:65:PRO:CA	1:A:65:PRO:C	1:A:66:SER:N	5	1.5
(1,175)		1:A:107:PRO:CA	1:A:107:PRO:C	1:A:108:GLY:N	12	1.5
(1,101)	1:A:65:PRO:N	1:A:65:PRO:CA	1:A:65:PRO:C	1:A:66:SER:N	5	1.5
(1,74)	1:A:46:VAL:C	1:A:47:SER:N	1:A:47:SER:CA	1:A:47:SER:C	18	1.47
(1,378)	1:A:89:GLU:C	1:A:90:VAL:N	1:A:90:VAL:CA	1:A:90:VAL:C	18	1.47
(1,309)	1:A:46:VAL:C	1:A:47:SER:N	1:A:47:SER:CA	1:A:47:SER:C	18	1.47
(1,363) $(1,143)$	1:A:89:GLU:C	1:A:90:VAL:N	1:A:90:VAL:CA	1:A:90:VAL:C	18	1.47
(1,13) $(1,8)$	1:A:6:GLU:N	1:A:6:GLU:CA	1:A:6:GLU:C	1:A:7:GLU:N	12	1.46
(1,392)	1:A:96:ASP:C	1:A:97:SER:N	1:A:97:SER:CA	1:A:97:SER:C	19	1.46
(1,332) $(1,243)$	1:A:6:GLU:N	1:A:6:GLU:CA	1:A:6:GLU:C	1:A:7:GLU:N	12	1.46
(1,243) $(1,157)$	1:A:96:ASP:C	1:A:97:SER:N	1:A:97:SER:CA	1:A:97:SER:C	19	1.46
(1,79)	1:A:51:LEU:C	1:A:52:PHE:N	1:A:52:PHE:CA	1:A:52:PHE:C	10	1.45
(1,375)	1:A:88:THR:N	1:A:88:THR:CA	1:A:88:THR:C	1:A:89:GLU:N	4	1.45
(1,314)	1:A:51:LEU:C	1:A:52:PHE:N	1:A:52:PHE:CA	1:A:52:PHE:C	10	1.45
(1,314) $(1,140)$	1:A:88:THR:N	1:A:88:THR:CA	1:A:88:THR:C	1:A:89:GLU:N	4	1.45
(1,140) $(1,89)$	1:A:57:LYS:C	1:A:58:PHE:N	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:C	14	1.44
(1,435)	1:A:122:ARG:N	1:A:122:ARG:CA	1:A:122:ARG:C	1:A:123:PHE:N	15	1.44
(1,385)	1:A:93:ARG:N	1:A:93:ARG:CA	1:A:93:ARG:C	1:A:94:THR:N	3	1.44
(1,000)	1.11.00.1110.11	1.11.00.1110.01	1.71.00.71160.0	1.71.01.11110.11		ad an next ness



	ed from previous pe	-			3.5.1.1	T70 1 .0 ()
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,324)	1:A:57:LYS:C	1:A:58:PHE:N	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:C	14	1.44
(1,200)	1:A:122:ARG:N	1:A:122:ARG:CA	1:A:122:ARG:C	1:A:123:PHE:N	15	1.44
(1,150)	1:A:93:ARG:N	1:A:93:ARG:CA	1:A:93:ARG:C	1:A:94:THR:N	3	1.44
(1,237)	1:A:3:TYR:N	1:A:3:TYR:CA	1:A:3:TYR:C	1:A:4:ASN:N	13	1.43
(1,2)	1:A:3:TYR:N	1:A:3:TYR:CA	1:A:3:TYR:C	1:A:4:ASN:N	13	1.43
(1,96)	1:A:61:GLN:N	1:A:61:GLN:CA	1:A:61:GLN:C	1:A:62:CYS:N	10	1.42
(1,45)	1:A:25:THR:C	1:A:26:GLU:N	1:A:26:GLU:CA	1:A:26:GLU:C	17	1.42
(1,331)	1:A:61:GLN:N	1:A:61:GLN:CA	1:A:61:GLN:C	1:A:62:CYS:N	10	1.42
(1,280)	1:A:25:THR:C	1:A:26:GLU:N	1:A:26:GLU:CA	1:A:26:GLU:C	17	1.42
(1,419)	1:A:113:ARG:N	1:A:113:ARG:CA	1:A:113:ARG:C	1:A:114:TYR:N	10	1.41
(1,184)	1:A:113:ARG:N	1:A:113:ARG:CA	1:A:113:ARG:C	1:A:114:TYR:N	10	1.41
(1,460)	1:A:136:SER:N	1:A:136:SER:CA	1:A:136:SER:C	1:A:137:TYR:N	5	1.4
(1,378)	1:A:89:GLU:C	1:A:90:VAL:N	1:A:90:VAL:CA	1:A:90:VAL:C	13	1.4
(1,254)	1:A:11:SER:C	1:A:12:LEU:N	1:A:12:LEU:CA	1:A:12:LEU:C	11	1.4
(1,225)	1:A:136:SER:N	1:A:136:SER:CA	1:A:136:SER:C	1:A:137:TYR:N	5	1.4
(1,19)	1:A:11:SER:C	1:A:12:LEU:N	1:A:12:LEU:CA	1:A:12:LEU:C	11	1.4
(1,143)	1:A:89:GLU:C	1:A:90:VAL:N	1:A:90:VAL:CA	1:A:90:VAL:C	13	1.4
(1,88)	1:A:57:LYS:N	1:A:57:LYS:CA	1:A:57:LYS:C	1:A:58:PHE:N	18	1.39
(1,364)	1:A:81:THR:C	1:A:82:SER:N	1:A:82:SER:CA	1:A:82:SER:C	11	1.39
(1,323)	1:A:57:LYS:N	1:A:57:LYS:CA	1:A:57:LYS:C	1:A:58:PHE:N	18	1.39
(1,129)	1:A:81:THR:C	1:A:82:SER:N	1:A:82:SER:CA	1:A:82:SER:C	11	1.39
(1,49)	1:A:31:ASN:N	1:A:31:ASN:CA	1:A:31:ASN:C	1:A:32:GLU:N	11	1.37
(1,371)	1:A:86:ILE:N	1:A:86:ILE:CA	1:A:86:ILE:C	1:A:87:ARG:N	4	1.37
(1,284)	1:A:31:ASN:N	1:A:31:ASN:CA	1:A:31:ASN:C	1:A:32:GLU:N	11	1.37
(1,136)	1:A:86:ILE:N	1:A:86:ILE:CA	1:A:86:ILE:C	1:A:87:ARG:N	4	1.37
(1,347)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:GLU:N	8	1.36
(1,112)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:GLU:N	8	1.36
(1,42)	1:A:24:GLY:N	1:A:24:GLY:CA	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	15	1.35
(1,403)	1:A:102:VAL:N	1:A:102:VAL:CA	1:A:102:VAL:C	1:A:103:PHE:N	19	1.35
(1,277)	1:A:24:GLY:N	1:A:24:GLY:CA	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	15	1.35
(1,168)	1:A:102:VAL:N	1:A:102:VAL:CA	1:A:102:VAL:C	1:A:103:PHE:N	19	1.35
(1,92)	1:A:59:ASP:N	1:A:59:ASP:CA	1:A:59:ASP:C	1:A:60:SER:N	18	1.34
(1,50)	1:A:31:ASN:C	1:A:32:GLU:N	1:A:32:GLU:CA	1:A:32:GLU:C	13	1.34
(1,464)	1:A:138:LEU:N	1:A:138:LEU:CA	1:A:138:LEU:C	1:A:139:HIS:N	6	1.34
(1,458)	1:A:135:GLU:N	1:A:135:GLU:CA	1:A:135:GLU:C	1:A:136:SER:N	10	1.34
(1,327)	1:A:59:ASP:N	1:A:59:ASP:CA	1:A:59:ASP:C	1:A:60:SER:N	18	1.34
(1,285)	1:A:31:ASN:C	1:A:32:GLU:N	1:A:32:GLU:CA	1:A:32:GLU:C	13	1.34
(1,229)	1:A:138:LEU:N	1:A:138:LEU:CA	1:A:138:LEU:C	1:A:139:HIS:N	6	1.34
(1,223)	1:A:135:GLU:N	1:A:135:GLU:CA	1:A:135:GLU:C	1:A:136:SER:N	10	1.34
(1,367)	1:A:84:GLY:N	1:A:84:GLY:CA	1:A:84:GLY:C	1:A:85:MET:N	11	1.33
(1,132)	1:A:84:GLY:N	1:A:84:GLY:CA	1:A:84:GLY:C	1:A:85:MET:N	11	1.33
(1,371)	1:A:86:ILE:N	1:A:86:ILE:CA	1:A:86:ILE:C	1:A:87:ARG:N	2	1.32
(1,136)	1:A:86:ILE:N	1:A:86:ILE:CA	1:A:86:ILE:C	1:A:87:ARG:N	2	1.32
(1,363)	1:A:80:ASP:N	1:A:80:ASP:CA	1:A:80:ASP:C	1:A:81:THR:N	10	1.31
(1,336)	1:A:65:PRO:N	1:A:65:PRO:CA	1:A:65:PRO:C	1:A:66:SER:N	2	1.31
(1,128)	1:A:80:ASP:N	1:A:80:ASP:CA	1:A:80:ASP:C	1:A:81:THR:N	10	1.31
(1,101)	1:A:65:PRO:N	1:A:65:PRO:CA	1:A:65:PRO:C	1:A:66:SER:N	2	1.31
(1,57)	1:A:37:LYS:N	1:A:37:LYS:CA	1:A:37:LYS:C	1:A:38:GLU:N	16	1.28
(1,292)	1:A:37:LYS:N	1:A:37:LYS:CA	1:A:37:LYS:C	1:A:38:GLU:N	16	1.28
(1,261)	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	1:A:16:GLN:N	2	1.28
(1,26)	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	1:A:16:GLN:N	2	1.28



	ed from previous pe					
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (\circ)
(1,386)	1:A:93:ARG:C	1:A:94:THR:N	1:A:94:THR:CA	1:A:94:THR:C	6	1.27
(1,349)	1:A:73:GLU:N	1:A:73:GLU:CA	1:A:73:GLU:C	1:A:74:GLU:N	6	1.27
(1,151)	1:A:93:ARG:C	1:A:94:THR:N	1:A:94:THR:CA	1:A:94:THR:C	6	1.27
(1,114)	1:A:73:GLU:N	1:A:73:GLU:CA	1:A:73:GLU:C	1:A:74:GLU:N	6	1.27
(1,74)	1:A:46:VAL:C	1:A:47:SER:N	1:A:47:SER:CA	1:A:47:SER:C	11	1.26
(1,455)	1:A:132:GLU:C	1:A:133:GLY:N	1:A:133:GLY:CA	1:A:133:GLY:C	6	1.26
(1,401)	1:A:101:HIS:N	1:A:101:HIS:CA	1:A:101:HIS:C	1:A:102:VAL:N	7	1.26
(1,309)	1:A:46:VAL:C	1:A:47:SER:N	1:A:47:SER:CA	1:A:47:SER:C	11	1.26
(1,220)	1:A:132:GLU:C	1:A:133:GLY:N	1:A:133:GLY:CA	1:A:133:GLY:C	6	1.26
(1,166)	1:A:101:HIS:N	1:A:101:HIS:CA	1:A:101:HIS:C	1:A:102:VAL:N	7	1.26
(1,90)	1:A:58:PHE:N	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:C	1:A:59:ASP:N	10	1.25
(1,51)	1:A:32:GLU:N	1:A:32:GLU:CA	1:A:32:GLU:C	1:A:33:TYR:N	16	1.25
(1,401)	1:A:101:HIS:N	1:A:101:HIS:CA	1:A:101:HIS:C	1:A:102:VAL:N	10	1.25
(1,325)	1:A:58:PHE:N	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:C	1:A:59:ASP:N	10	1.25
(1,286)	1:A:32:GLU:N	1:A:32:GLU:CA	1:A:32:GLU:C	1:A:33:TYR:N	16	1.25
(1,166)	1:A:101:HIS:N	1:A:101:HIS:CA	1:A:101:HIS:C	1:A:102:VAL:N	10	1.25
(1,78)	1:A:50:PRO:N	1:A:50:PRO:CA	1:A:50:PRO:C	1:A:51:LEU:N	10	1.24
(1,419)	1:A:113:ARG:N	1:A:113:ARG:CA	1:A:113:ARG:C	1:A:114:TYR:N	14	1.24
(1,362)	1:A:79:LEU:C	1:A:80:ASP:N	1:A:80:ASP:CA	1:A:80:ASP:C	13	1.24
(1,313)	1:A:50:PRO:N	1:A:50:PRO:CA	1:A:50:PRO:C	1:A:51:LEU:N	10	1.24
(1,184)	1:A:113:ARG:N	1:A:113:ARG:CA	1:A:113:ARG:C	1:A:114:TYR:N	14	1.24
(1,127)	1:A:79:LEU:C	1:A:80:ASP:N	1:A:80:ASP:CA	1:A:80:ASP:C	13	1.24
(1,455)	1:A:132:GLU:C	1:A:133:GLY:N	1:A:133:GLY:CA	1:A:133:GLY:C	4	1.23
(1,357)	1:A:77:GLU:N	1:A:77:GLU:CA	1:A:77:GLU:C	1:A:78:LYS:N	2	1.23
(1,352)	1:A:74:GLU:C	1:A:75:VAL:N	1:A:75:VAL:CA	1:A:75:VAL:C	16	1.23
(1,339)	1:A:66:SER:C	1:A:67:PHE:N	1:A:67:PHE:CA	1:A:67:PHE:C	2	1.23
(1,220)	1:A:132:GLU:C	1:A:133:GLY:N	1:A:133:GLY:CA	1:A:133:GLY:C	4	1.23
(1,122)	1:A:77:GLU:N	1:A:77:GLU:CA	1:A:77:GLU:C	1:A:78:LYS:N	2	1.23
(1,117)	1:A:74:GLU:C	1:A:75:VAL:N	1:A:75:VAL:CA	1:A:75:VAL:C	16	1.23
(1,104)	1:A:66:SER:C	1:A:67:PHE:N	1:A:67:PHE:CA	1:A:67:PHE:C	2	1.23
(1,464)	1:A:138:LEU:N	1:A:138:LEU:CA	1:A:138:LEU:C	1:A:139:HIS:N	5	1.22
(1,378)	1:A:89:GLU:C	1:A:90:VAL:N	1:A:90:VAL:CA	1:A:90:VAL:C	16	1.22
(1,354)	1:A:75:VAL:C	1:A:76:GLU:N	1:A:76:GLU:CA	1:A:76:GLU:C	20	1.22
(1,229)	1:A:138:LEU:N	1:A:138:LEU:CA	1:A:138:LEU:C	1:A:139:HIS:N	5	1.22
(1,143)	1:A:89:GLU:C	1:A:90:VAL:N	1:A:90:VAL:CA	1:A:90:VAL:C	16	1.22
(1,119)	1:A:75:VAL:C	1:A:76:GLU:N	1:A:76:GLU:CA	1:A:76:GLU:C	20	1.22
(1,84)	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	1:A:55:LYS:N	17	1.21
(1,76)	1:A:48:GLY:C	1:A:49:LYS:N	1:A:49:LYS:CA	1:A:49:LYS:C	10	1.21
(1,407)	1:A:105:ASP:N	1:A:105:ASP:CA	1:A:105:ASP:C	1:A:106:GLY:N	18	1.21
(1,350)	1:A:73:GLU:C	1:A:74:GLU:N	1:A:74:GLU:CA	1:A:74:GLU:C	14	1.21
(1,319)	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	1:A:55:LYS:N	17	1.21
(1,311)	1:A:48:GLY:C	1:A:49:LYS:N	1:A:49:LYS:CA	1:A:49:LYS:C	10	1.21
(1,311) $(1,172)$	1:A:105:ASP:N	1:A:105:ASP:CA	1:A:105:ASP:C	1:A:106:GLY:N	18	1.21
(1,112) $(1,115)$	1:A:73:GLU:C	1:A:74:GLU:N	1:A:74:GLU:CA	1:A:74:GLU:C	14	1.21
(1,421)	1:A:114:TYR:N	1:A:114:TYR:CA	1:A:114:TYR:C	1:A:115:CYS:N	19	1.2
(1,186)	1:A:114:TYR:N	1:A:114:TYR:CA	1:A:114:TYR:C	1:A:115:CYS:N	19	1.2
(1,336)	1:A:65:PRO:N	1:A:65:PRO:CA	1:A:65:PRO:C	1:A:66:SER:N	7	1.19
(1,101)	1:A:65:PRO:N	1:A:65:PRO:CA	1:A:65:PRO:C	1:A:66:SER:N	7	1.19
(1,431)	1:A:119:ALA:N	1:A:119:ALA:CA	1:A:119:ALA:C	1:A:120:ALA:N	15	1.18
(1,260)	1:A:14:ARG:C	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	4	1.18
(1,25)	1:A:14:ARG:C	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	4	1.18
(-,-)						ed on nert nage



Key Atom-1 Atom-2 Atom-3 (1,196) 1:A:119:ALA:N 1:A:119:ALA:CA 1:A:119:ALA:C (1,88) 1:A:57:LYS:N 1:A:57:LYS:CA 1:A:57:LYS:C (1,323) 1:A:57:LYS:N 1:A:57:LYS:CA 1:A:57:LYS:C (1,78) 1:A:50:PRO:N 1:A:50:PRO:CA 1:A:50:PRO:C (1,464) 1:A:138:LEU:N 1:A:138:LEU:CA 1:A:138:LEU:C (1,313) 1:A:50:PRO:N 1:A:50:PRO:CA 1:A:50:PRO:C (1,229) 1:A:138:LEU:N 1:A:138:LEU:CA 1:A:138:LEU:C (1,468) 1:A:140:LEU:N 1:A:140:LEU:CA 1:A:140:LEU:C (1,233) 1:A:140:LEU:N 1:A:140:LEU:CA 1:A:140:LEU:C (1,51) 1:A:32:GLU:N 1:A:32:GLU:CA 1:A:32:GLU:C	1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:N 1:A:51:LEU:N 1:A:139:HIS:N 1:A:139:HIS:N 1:A:141:PHE:N 1:A:141:PHE:N 1:A:33:TYR:N	Model 15 17 17 12 11 12 11 19 19	Violation (∘) 1.18 1.17 1.17 1.16 1.16 1.16 1.16
(1,88) 1:A:57:LYS:N 1:A:57:LYS:CA 1:A:57:LYS:C (1,323) 1:A:57:LYS:N 1:A:57:LYS:CA 1:A:57:LYS:C (1,78) 1:A:50:PRO:N 1:A:50:PRO:CA 1:A:50:PRO:C (1,464) 1:A:138:LEU:N 1:A:138:LEU:CA 1:A:138:LEU:C (1,313) 1:A:50:PRO:N 1:A:50:PRO:CA 1:A:50:PRO:C (1,229) 1:A:138:LEU:N 1:A:138:LEU:CA 1:A:138:LEU:C (1,468) 1:A:140:LEU:N 1:A:140:LEU:CA 1:A:140:LEU:C (1,233) 1:A:140:LEU:N 1:A:140:LEU:CA 1:A:140:LEU:C (1,51) 1:A:32:GLU:N 1:A:32:GLU:CA 1:A:32:GLU:C	1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:N 1:A:51:LEU:N 1:A:139:HIS:N 1:A:139:HIS:N 1:A:141:PHE:N 1:A:141:PHE:N 1:A:33:TYR:N	17 17 12 11 12 11 12 11	1.17 1.17 1.16 1.16 1.16 1.16
(1,323) 1:A:57:LYS:N 1:A:57:LYS:CA 1:A:57:LYS:C (1,78) 1:A:50:PRO:N 1:A:50:PRO:CA 1:A:50:PRO:C (1,464) 1:A:138:LEU:N 1:A:138:LEU:CA 1:A:138:LEU:C (1,313) 1:A:50:PRO:N 1:A:50:PRO:CA 1:A:50:PRO:C (1,229) 1:A:138:LEU:N 1:A:138:LEU:CA 1:A:138:LEU:C (1,468) 1:A:140:LEU:N 1:A:140:LEU:CA 1:A:140:LEU:C (1,233) 1:A:140:LEU:N 1:A:140:LEU:CA 1:A:140:LEU:C (1,51) 1:A:32:GLU:N 1:A:32:GLU:CA 1:A:32:GLU:C	1:A:58:PHE:N 1:A:51:LEU:N 2: 1:A:139:HIS:N 2: 1:A:51:LEU:N 2: 1:A:139:HIS:N 2: 1:A:141:PHE:N 2: 1:A:141:PHE:N 3: 1:A:33:TYR:N	17 12 11 12 11 12 11	1.17 1.16 1.16 1.16 1.16
(1,78) 1:A:50:PRO:N 1:A:50:PRO:CA 1:A:50:PRO:C (1,464) 1:A:138:LEU:N 1:A:138:LEU:CA 1:A:138:LEU:C (1,313) 1:A:50:PRO:N 1:A:50:PRO:CA 1:A:50:PRO:C (1,229) 1:A:138:LEU:N 1:A:138:LEU:CA 1:A:138:LEU:C (1,468) 1:A:140:LEU:N 1:A:140:LEU:CA 1:A:140:LEU:C (1,233) 1:A:140:LEU:N 1:A:140:LEU:CA 1:A:140:LEU:C (1,51) 1:A:32:GLU:N 1:A:32:GLU:CA 1:A:32:GLU:C	1:A:51:LEU:N 1:A:139:HIS:N 1:A:51:LEU:N 1:A:139:HIS:N 1:A:141:PHE:N 1:A:141:PHE:N 1:A:33:TYR:N	12 11 12 11 19	1.16 1.16 1.16 1.16
(1,464) 1:A:138:LEU:N 1:A:138:LEU:CA 1:A:138:LEU:C (1,313) 1:A:50:PRO:N 1:A:50:PRO:CA 1:A:50:PRO:C (1,229) 1:A:138:LEU:N 1:A:138:LEU:CA 1:A:138:LEU:C (1,468) 1:A:140:LEU:N 1:A:140:LEU:CA 1:A:140:LEU:C (1,233) 1:A:140:LEU:N 1:A:140:LEU:CA 1:A:140:LEU:C (1,51) 1:A:32:GLU:N 1:A:32:GLU:CA 1:A:32:GLU:C	1:A:139:HIS:N 1:A:51:LEU:N 1:A:139:HIS:N 1:A:141:PHE:N 1:A:141:PHE:N 1:A:33:TYR:N	11 12 11 19	1.16 1.16 1.16
(1,313) 1:A:50:PRO:N 1:A:50:PRO:CA 1:A:50:PRO:C (1,229) 1:A:138:LEU:N 1:A:138:LEU:CA 1:A:138:LEU:C (1,468) 1:A:140:LEU:N 1:A:140:LEU:CA 1:A:140:LEU:C (1,233) 1:A:140:LEU:N 1:A:140:LEU:CA 1:A:140:LEU:C (1,51) 1:A:32:GLU:N 1:A:32:GLU:CA 1:A:32:GLU:C	1:A:51:LEU:N 1:A:139:HIS:N 1:A:141:PHE:N 1:A:141:PHE:N 1:A:33:TYR:N	12 11 19	1.16 1.16
(1,229) 1:A:138:LEU:N 1:A:138:LEU:CA 1:A:138:LEU:C (1,468) 1:A:140:LEU:N 1:A:140:LEU:CA 1:A:140:LEU:C (1,233) 1:A:140:LEU:N 1:A:140:LEU:CA 1:A:140:LEU:C (1,51) 1:A:32:GLU:N 1:A:32:GLU:CA 1:A:32:GLU:C	1:A:139:HIS:N 1:A:141:PHE:N 1:A:141:PHE:N 1:A:33:TYR:N	11 19	1.16
(1,468) 1:A:140:LEU:N 1:A:140:LEU:CA 1:A:140:LEU:C (1,233) 1:A:140:LEU:N 1:A:140:LEU:CA 1:A:140:LEU:C (1,51) 1:A:32:GLU:N 1:A:32:GLU:CA 1:A:32:GLU:C	C 1:A:141:PHE:N C 1:A:141:PHE:N C 1:A:33:TYR:N	19	
(1,233) 1:A:140:LEU:N 1:A:140:LEU:CA 1:A:140:LEU:C (1,51) 1:A:32:GLU:N 1:A:32:GLU:CA 1:A:32:GLU:C	1:A:141:PHE:N 1:A:33:TYR:N	19	1.14
(1,51) 1:A:32:GLU:N 1:A:32:GLU:CA 1:A:32:GLU:C	1:A:33:TYR:N		1.14
		15	1.13
(1,286) 1:A:32:GLU:N 1:A:32:GLU:CA 1:A:32:GLU:C	/ 1.A.JJ.1 11v.1v	15	1.13
(1,6) 1:A:5:LYS:N 1:A:5:LYS:CA 1:A:5:LYS:C	1:A:6:GLU:N	5	1.12
(1,241) 1:A:5:LYS:N 1:A:5:LYS:CA 1:A:5:LYS:C	1:A:6:GLU:N	5	1.12
(1,87) 1:A:56:ASP:C 1:A:57:LYS:N 1:A:57:LYS:CA		4	1.11
(1,410) 1:A:107:PRO:N 1:A:107:PRO:CA 1:A:107:PRO:C		2	1.11
(1,322) 1:A:56:ASP:C 1:A:57:LYS:N 1:A:57:LYS:CA		4	1.11
(1,175) 1:A:107:PRO:N 1:A:107:PRO:CA 1:A:107:PRO:C		2	1.11
(1,87) 1:A:56:ASP:C 1:A:57:LYS:N 1:A:57:LYS:CA		2	1.1
(1,435) 1:A:122:ARG:N 1:A:122:ARG:CA 1:A:122:ARG:C		8	1.1
(1,401) 1:A:101:HIS:N 1:A:101:HIS:CA 1:A:101:HIS:C		19	1.1
(1,322) 1:A:56:ASP:C 1:A:57:LYS:N 1:A:57:LYS:CA		2	1.1
(1,237) 1:A:3:TYR:N 1:A:3:TYR:CA 1:A:3:TYR:C		9	1.1
(1,200) 1:A:122:ARG:N 1:A:122:ARG:CA 1:A:122:ARG:C		8	1.1
(1,2) 1:A:3:TYR:N 1:A:3:TYR:CA 1:A:3:TYR:C		9	1.1
(1,166) 1:A:101:HIS:N 1:A:101:HIS:CA 1:A:101:HIS:C		19	1.1
(1,437) 1:A:123:PHE:N 1:A:123:PHE:CA 1:A:123:PHE:C		11	1.09
(1,202) 1:A:123:PHE:N 1:A:123:PHE:CA 1:A:123:PHE:C		11	1.09
(1,406) 1:A:104:ASN:C 1:A:105:ASP:N 1:A:105:ASP:C		12	1.08
(1,374) 1:A:87:ARG:C 1:A:88:THR:N 1:A:88:THR:C.		6	1.08
(1,171) 1:A:104:ASN:C 1:A:105:ASP:N 1:A:105:ASP:C		12	1.08
(1,139) 1:A:87:ARG:C 1:A:88:THR:N 1:A:88:THR:C.		6	1.08
(1,386) 1:A:93:ARG:C 1:A:94:THR:N 1:A:94:THR:C.		11	1.07
(1,151) 1:A:93:ARG:C 1:A:94:THR:N 1:A:94:THR:C.		11	1.07
(1,392) 1:A:96:ASP:C 1:A:97:SER:N 1:A:97:SER:CA		2	1.06
(1,157) 1:A:96:ASP:C 1:A:97:SER:N 1:A:97:SER:CA	A 1:A:97:SER:C	2	1.06
(1,87) 1:A:56:ASP:C 1:A:57:LYS:N 1:A:57:LYS:CA		20	1.05
(1,411) 1:A:107:PRO:C 1:A:108:GLY:N 1:A:108:GLY:C		6	1.05
(1,351) 1:A:74:GLU:N 1:A:74:GLU:CA 1:A:74:GLU:C		3	1.05
(1,322) 1:A:56:ASP:C 1:A:57:LYS:N 1:A:57:LYS:CA		20	1.05
(1,176) 1:A:107:PRO:C 1:A:108:GLY:N 1:A:108:GLY:C		6	1.05
(1,116) 1:A:74:GLU:N 1:A:74:GLU:CA 1:A:74:GLU:C		3	1.05
(1,470) 1:A:141:PHE:N 1:A:141:PHE:CA 1:A:141:PHE:C		19	1.04
(1,235) 1:A:141:PHE:N 1:A:141:PHE:CA 1:A:141:PHE:C		19	1.04
(1,470) 1:A:141:PHE:N 1:A:141:PHE:CA 1:A:141:PHE:C		17	1.03
(1,379) 1:A:90:VAL:N 1:A:90:VAL:CA 1:A:90:VAL:C		14	1.03
(1,235) 1:A:141:PHE:N 1:A:141:PHE:CA 1:A:141:PHE:C		17	1.03
(1,144) 1:A:90:VAL:N 1:A:90:VAL:CA 1:A:90:VAL:C		14	1.03
(1,406) 1:A:104:ASN:C 1:A:105:ASP:N 1:A:105:ASP:C	A 1:A:105:ASP:C	9	1.01
(1,380) 1:A:90:VAL:C 1:A:91:ARG:N 1:A:91:ARG:C	A 1:A:91:ARG:C	3	1.01
(1,171) 1:A:104:ASN:C 1:A:105:ASP:N 1:A:105:ASP:C	A 1:A:105:ASP:C	9	1.01
(1,145) 1:A:90:VAL:C 1:A:91:ARG:N 1:A:91:ARG:C		3	1.01



	ed from previous po					
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (\circ)
(1,419)	1:A:113:ARG:N	1:A:113:ARG:CA	1:A:113:ARG:C	1:A:114:TYR:N	16	1.0
(1,184)	1:A:113:ARG:N	1:A:113:ARG:CA	1:A:113:ARG:C	1:A:114:TYR:N	16	1.0
(1,82)	1:A:53:THR:N	1:A:53:THR:CA	1:A:53:THR:C	1:A:54:SER:N	7	0.98
(1,392)	1:A:96:ASP:C	1:A:97:SER:N	1:A:97:SER:CA	1:A:97:SER:C	12	0.98
(1,317)	1:A:53:THR:N	1:A:53:THR:CA	1:A:53:THR:C	1:A:54:SER:N	7	0.98
(1,157)	1:A:96:ASP:C	1:A:97:SER:N	1:A:97:SER:CA	1:A:97:SER:C	12	0.98
(1,99)	1:A:63:GLY:C	1:A:64:TRP:N	1:A:64:TRP:CA	1:A:64:TRP:C	17	0.97
(1,365)	1:A:82:SER:N	1:A:82:SER:CA	1:A:82:SER:C	1:A:83:HIS:N	9	0.97
(1,334)	1:A:63:GLY:C	1:A:64:TRP:N	1:A:64:TRP:CA	1:A:64:TRP:C	17	0.97
(1,130)	1:A:82:SER:N	1:A:82:SER:CA	1:A:82:SER:C	1:A:83:HIS:N	9	0.97
(1,78)	1:A:50:PRO:N	1:A:50:PRO:CA	1:A:50:PRO:C	1:A:51:LEU:N	4	0.96
(1,313)	1:A:50:PRO:N	1:A:50:PRO:CA	1:A:50:PRO:C	1:A:51:LEU:N	4	0.96
(1,254)	1:A:11:SER:C	1:A:12:LEU:N	1:A:12:LEU:CA	1:A:12:LEU:C	16	0.96
(1,19)	1:A:11:SER:C	1:A:12:LEU:N	1:A:12:LEU:CA	1:A:12:LEU:C	16	0.96
(1,56)	1:A:36:HIS:C	1:A:37:LYS:N	1:A:37:LYS:CA	1:A:37:LYS:C	3	0.93
(1,414)	1:A:109:PRO:C	1:A:110:ASN:N	1:A:110:ASN:CA	1:A:110:ASN:C	18	0.93
(1,339)	1:A:66:SER:C	1:A:67:PHE:N	1:A:67:PHE:CA	1:A:67:PHE:C	6	0.93
(1,291)	1:A:36:HIS:C	1:A:37:LYS:N	1:A:37:LYS:CA	1:A:37:LYS:C	3	0.93
(1,254)	1:A:11:SER:C	1:A:12:LEU:N	1:A:12:LEU:CA	1:A:12:LEU:C	3	0.93
(1,19)	1:A:11:SER:C	1:A:12:LEU:N	1:A:12:LEU:CA	1:A:12:LEU:C	3	0.93
(1,179)	1:A:109:PRO:C	1:A:110:ASN:N	1:A:110:ASN:CA	1:A:110:ASN:C	18	0.93
(1,104)	1:A:66:SER:C	1:A:67:PHE:N	1:A:67:PHE:CA	1:A:67:PHE:C	6	0.93
(1,461)	1:A:136:SER:C	1:A:137:TYR:N	1:A:137:TYR:CA	1:A:137:TYR:C	13	0.92
(1,427)	1:A:117:ASN:N	1:A:117:ASN:CA	1:A:117:ASN:C	1:A:118:SER:N	2	0.92
(1,226)	1:A:136:SER:C	1:A:137:TYR:N	1:A:137:TYR:CA	1:A:137:TYR:C	13	0.92
(1,192)	1:A:117:ASN:N	1:A:117:ASN:CA	1:A:117:ASN:C	1:A:118:SER:N	2	0.92
(1,65)	1:A:42:TYR:N	1:A:42:TYR:CA	1:A:42:TYR:C	1:A:43:VAL:N	8	0.91
(1,63)	1:A:41:LEU:N	1:A:41:LEU:CA	1:A:41:LEU:C	1:A:42:TYR:N	11	0.91
(1,336)	1:A:65:PRO:N	1:A:65:PRO:CA	1:A:65:PRO:C	1:A:66:SER:N	1	0.91
(1,300)	1:A:42:TYR:N	1:A:42:TYR:CA	1:A:42:TYR:C	1:A:43:VAL:N	8	0.91
(1,298)	1:A:41:LEU:N	1:A:41:LEU:CA	1:A:41:LEU:C	1:A:42:TYR:N	11	0.91
(1,101)	1:A:65:PRO:N	1:A:65:PRO:CA	1:A:65:PRO:C	1:A:66:SER:N	1	0.91
(1,80)	1:A:52:PHE:N	1:A:52:PHE:CA	1:A:52:PHE:C	1:A:53:THR:N	11	0.9
(1,388)	1:A:94:THR:C	1:A:95:ALA:N	1:A:95:ALA:CA	1:A:95:ALA:C	11	0.9
(1,347)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:GLU:N	1	0.9
(1,315)	1:A:52:PHE:N	1:A:52:PHE:CA	1:A:52:PHE:C	1:A:53:THR:N	11	0.9
(1,153)	1:A:94:THR:C	1:A:95:ALA:N	1:A:95:ALA:CA	1:A:95:ALA:C	11	0.9
(1,112)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:GLU:N	1	0.9
(1,97)	1:A:61:GLN:C	1:A:62:CYS:N	1:A:62:CYS:CA	1:A:62:CYS:C	11	0.89
(1,414)	1:A:109:PRO:C	1:A:110:ASN:N	1:A:110:ASN:CA	1:A:110:ASN:C	4	0.89
(1,332)	1:A:61:GLN:C	1:A:62:CYS:N	1:A:62:CYS:CA	1:A:62:CYS:C	11	0.89
(1,332) $(1,179)$	1:A:109:PRO:C	1:A:110:ASN:N	1:A:110:ASN:CA	1:A:110:ASN:C	4	0.89
(1,435)	1:A:122:ARG:N	1:A:122:ARG:CA	1:A:122:ARG:C	1:A:123:PHE:N	20	0.88
(1,390)	1:A:95:ALA:C	1:A:96:ASP:N	1:A:96:ASP:CA	1:A:96:ASP:C	10	0.88
(1,342)	1:A:68:THR:N	1:A:68:THR:CA	1:A:68:THR:C	1:A:69:LYS:N	14	0.88
(1,335)	1:A:64:TRP:N	1:A:64:TRP:CA	1:A:64:TRP:C	1:A:65:PRO:N	15	0.88
(1,300) $(1,200)$	1:A:122:ARG:N	1:A:122:ARG:CA	1:A:122:ARG:C	1:A:123:PHE:N	20	0.88
(1,255) $(1,155)$	1:A:95:ALA:C	1:A:96:ASP:N	1:A:96:ASP:CA	1:A:96:ASP:C	10	0.88
(1,100) $(1,107)$	1:A:68:THR:N	1:A:68:THR:CA	1:A:68:THR:C	1:A:69:LYS:N	14	0.88
(1,107) $(1,100)$	1:A:64:TRP:N	1:A:64:TRP:CA	1:A:64:TRP:C	1:A:65:PRO:N	15	0.88
(1,100) $(1,355)$	1:A:76:GLU:N	1:A:76:GLU:CA	1:A:76:GLU:C	1:A:77:GLU:N	7	0.86
(1,555)	1.A.10.GLU:N	1.A.10.GLU.CA	1.A.10.GLU:U	I.A.II.GLU.N		0.00



Key	$\frac{d\ from\ previous\ po}{\mathbf{Atom-1}}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,260)	1:A:14:ARG:C	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	12	0.86
(1,25)	1:A:14:ARG:C	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	12	0.86
(1,120)	1:A:76:GLU:N	1:A:76:GLU:CA	1:A:76:GLU:C	1:A:77:GLU:N	7	0.86
(1,78)	1:A:50:PRO:N	1:A:50:PRO:CA	1:A:50:PRO:C	1:A:51:LEU:N	14	0.85
(1,466)	1:A:139:HIS:N	1:A:139:HIS:CA	1:A:139:HIS:C	1:A:140:LEU:N	15	0.85
(1,396)	1:A:98:HIS:C	1:A:99:LEU:N	1:A:99:LEU:CA	1:A:99:LEU:C	19	0.85
(1,385)	1:A:93:ARG:N	1:A:93:ARG:CA	1:A:93:ARG:C	1:A:94:THR:N	4	0.85
(1,375)	1:A:88:THR:N	1:A:88:THR:CA	1:A:88:THR:C	1:A:89:GLU:N	3	0.85
(1,355)	1:A:76:GLU:N	1:A:76:GLU:CA	1:A:76:GLU:C	1:A:77:GLU:N	19	0.85
(1,313)	1:A:50:PRO:N	1:A:50:PRO:CA	1:A:50:PRO:C	1:A:51:LEU:N	14	0.85
(1,237)	1:A:3:TYR:N	1:A:3:TYR:CA	1:A:3:TYR:C	1:A:4:ASN:N	6	0.85
(1,231)	1:A:139:HIS:N	1:A:139:HIS:CA	1:A:139:HIS:C	1:A:140:LEU:N	15	0.85
(1,2)	1:A:3:TYR:N	1:A:3:TYR:CA	1:A:3:TYR:C	1:A:4:ASN:N	6	0.85
(1,161)	1:A:98:HIS:C	1:A:99:LEU:N	1:A:99:LEU:CA	1:A:99:LEU:C	19	0.85
(1,150)	1:A:93:ARG:N	1:A:93:ARG:CA	1:A:93:ARG:C	1:A:94:THR:N	4	0.85
(1,140)	1:A:88:THR:N	1:A:88:THR:CA	1:A:88:THR:C	1:A:89:GLU:N	3	0.85
(1,120)	1:A:76:GLU:N	1:A:76:GLU:CA	1:A:76:GLU:C	1:A:77:GLU:N	19	0.85
(1,347)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:GLU:N	4	0.84
(1,112)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:GLU:N	4	0.84
(1,470)	1:A:141:PHE:N	1:A:141:PHE:CA	1:A:141:PHE:C	1:A:142:ASN:N	14	0.83
(1,347)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:GLU:N	20	0.83
(1,235)	1:A:141:PHE:N	1:A:141:PHE:CA	1:A:141:PHE:C	1:A:142:ASN:N	14	0.83
(1,112)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:GLU:N	20	0.83
(1,86)	1:A:55:LYS:N	1:A:55:LYS:CA	1:A:55:LYS:C	1:A:56:ASP:N	7	0.82
(1,321)	1:A:55:LYS:N	1:A:55:LYS:CA	1:A:55:LYS:C	1:A:56:ASP:N	7	0.82
(1,468)	1:A:140:LEU:N	1:A:140:LEU:CA	1:A:140:LEU:C	1:A:141:PHE:N	10	0.81
(1,456)	1:A:133:GLY:N	1:A:133:GLY:CA	1:A:133:GLY:C	1:A:134:TYR:N	6	0.81
(1,384)	1:A:92:SER:C	1:A:93:ARG:N	1:A:93:ARG:CA	1:A:93:ARG:C	11	0.81
(1,233)	1:A:140:LEU:N	1:A:140:LEU:CA	1:A:140:LEU:C	1:A:141:PHE:N	10	0.81
(1,221)	1:A:133:GLY:N	1:A:133:GLY:CA	1:A:133:GLY:C	1:A:134:TYR:N	6	0.81
(1,149)	1:A:92:SER:C	1:A:93:ARG:N	1:A:93:ARG:CA	1:A:93:ARG:C	11	0.81
(1,391)	1:A:96:ASP:N	1:A:96:ASP:CA	1:A:96:ASP:C	1:A:97:SER:N	10	0.8
(1,156)	1:A:96:ASP:N	1:A:96:ASP:CA	1:A:96:ASP:C	1:A:97:SER:N	10	0.8
(1,65)	1:A:42:TYR:N	1:A:42:TYR:CA	1:A:42:TYR:C	1:A:43:VAL:N	17	0.79
(1,47)	1:A:27:PRO:N	1:A:27:PRO:CA	1:A:27:PRO:C	1:A:28:PRO:N	9	0.79
(1,350)	1:A:73:GLU:C	1:A:74:GLU:N	1:A:74:GLU:CA	1:A:74:GLU:C	15	0.79
(1,300)	1:A:42:TYR:N	1:A:42:TYR:CA	1:A:42:TYR:C	1:A:43:VAL:N	17	0.79
(1,282)	1:A:27:PRO:N	1:A:27:PRO:CA	1:A:27:PRO:C	1:A:28:PRO:N	9	0.79
(1,115)	1:A:73:GLU:C	1:A:74:GLU:N	1:A:74:GLU:CA	1:A:74:GLU:C	15	0.79
(1,349)	1:A:73:GLU:N	1:A:73:GLU:CA	1:A:73:GLU:C	1:A:74:GLU:N	8	0.78
(1,114)	1:A:73:GLU:N	1:A:73:GLU:CA	1:A:73:GLU:C	1:A:74:GLU:N	8	0.78
(1,336)	1:A:65:PRO:N	1:A:65:PRO:CA	1:A:65:PRO:C	1:A:66:SER:N	4	0.77
(1,336)	1:A:65:PRO:N	1:A:65:PRO:CA	1:A:65:PRO:C	1:A:66:SER:N	10	0.77
(1,27)	1:A:15:MET:C	1:A:16:GLN:N	1:A:16:GLN:CA	1:A:16:GLN:C	17	0.77
(1,262)	1:A:15:MET:C	1:A:16:GLN:N	1:A:16:GLN:CA	1:A:16:GLN:C	17	0.77
(1,101)	1:A:65:PRO:N	1:A:65:PRO:CA	1:A:65:PRO:C	1:A:66:SER:N	4	0.77
(1,101)	1:A:65:PRO:N	1:A:65:PRO:CA	1:A:65:PRO:C	1:A:66:SER:N	10	0.77
(1,355)	1:A:76:GLU:N	1:A:76:GLU:CA	1:A:76:GLU:C	1:A:77:GLU:N	20	0.76
	1 A 70 OT II N	1:A:76:GLU:CA	1:A:76:GLU:C	1:A:77:GLU:N	20	0.76
(1,120)	1:A:76:GLU:N	1.A.70.GLU.CA	1.71.10.000.0	1.11.11.010.11	1 20	00
` ' /	1:A:76:GLU:N 1:A:140:LEU:N	1:A:140:LEU:CA	1:A:140:LEU:C	1:A:141:PHE:N	17	0.75



Key	$rac{ed\ from\ previous\ po}{\mathbf{Atom-1}}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,347)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:GLU:N	14	0.75
(1,233)	1:A:140:LEU:N	1:A:140:LEU:CA	1:A:140:LEU:C	1:A:141:PHE:N	17	0.75
(1,112)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:GLU:N	3	0.75
(1,112)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:GLU:N	14	0.75
(1,61)	1:A:39:GLU:N	1:A:39:GLU:CA	1:A:39:GLU:C	1:A:40:GLY:N	9	0.74
(1,459)	1:A:135:GLU:C	1:A:136:SER:N	1:A:136:SER:CA	1:A:136:SER:C	16	0.74
(1,375)	1:A:88:THR:N	1:A:88:THR:CA	1:A:88:THR:C	1:A:89:GLU:N	19	0.74
(1,350)	1:A:73:GLU:C	1:A:74:GLU:N	1:A:74:GLU:CA	1:A:74:GLU:C	3	0.74
(1,296)	1:A:39:GLU:N	1:A:39:GLU:CA	1:A:39:GLU:C	1:A:40:GLY:N	9	0.74
(1,224)	1:A:135:GLU:C	1:A:136:SER:N	1:A:136:SER:CA	1:A:136:SER:C	16	0.74
(1,140)	1:A:88:THR:N	1:A:88:THR:CA	1:A:88:THR:C	1:A:89:GLU:N	19	0.74
(1,115)	1:A:73:GLU:C	1:A:74:GLU:N	1:A:74:GLU:CA	1:A:74:GLU:C	3	0.74
(1,82)	1:A:53:THR:N	1:A:53:THR:CA	1:A:53:THR:C	1:A:54:SER:N	2	0.73
(1,404)	1:A:102:VAL:C	1:A:103:PHE:N	1:A:103:PHE:CA	1:A:103:PHE:C	17	0.73
(1,317)	1:A:53:THR:N	1:A:53:THR:CA	1:A:53:THR:C	1:A:54:SER:N	2	0.73
(1,169)	1:A:102:VAL:C	1:A:103:PHE:N	1:A:103:PHE:CA	1:A:103:PHE:C	17	0.73
(1,339)	1:A:66:SER:C	1:A:67:PHE:N	1:A:67:PHE:CA	1:A:67:PHE:C	8	0.71
(1,104)	1:A:66:SER:C	1:A:67:PHE:N	1:A:67:PHE:CA	1:A:67:PHE:C	8	0.71
(1,419)	1:A:113:ARG:N	1:A:113:ARG:CA	1:A:113:ARG:C	1:A:114:TYR:N	4	0.7
(1,184)	1:A:113:ARG:N	1:A:113:ARG:CA	1:A:113:ARG:C	1:A:114:TYR:N	4	0.7
(1,460)	1:A:136:SER:N	1:A:136:SER:CA	1:A:136:SER:C	1:A:137:TYR:N	8	0.69
(1,385)	1:A:93:ARG:N	1:A:93:ARG:CA	1:A:93:ARG:C	1:A:94:THR:N	15	0.69
(1,225)	1:A:136:SER:N	1:A:136:SER:CA	1:A:136:SER:C	1:A:137:TYR:N	8	0.69
(1,150)	1:A:93:ARG:N	1:A:93:ARG:CA	1:A:93:ARG:C	1:A:94:THR:N	15	0.69
(1,77)	1:A:49:LYS:N	1:A:49:LYS:CA	1:A:49:LYS:C	1:A:50:PRO:N	16	0.67
(1,421)	1:A:114:TYR:N	1:A:114:TYR:CA	1:A:114:TYR:C	1:A:115:CYS:N	4	0.67
(1,406)	1:A:104:ASN:C	1:A:105:ASP:N	1:A:105:ASP:CA	1:A:105:ASP:C	17	0.67
(1,396)	1:A:98:HIS:C	1:A:99:LEU:N	1:A:99:LEU:CA	1:A:99:LEU:C	18	0.67
(1,312)	1:A:49:LYS:N	1:A:49:LYS:CA	1:A:49:LYS:C	1:A:50:PRO:N	16	0.67
(1,186)	1:A:114:TYR:N	1:A:114:TYR:CA	1:A:114:TYR:C	1:A:115:CYS:N	4	0.67
(1,171)	1:A:104:ASN:C	1:A:105:ASP:N	1:A:105:ASP:CA	1:A:105:ASP:C	17	0.67
(1,161)	1:A:98:HIS:C	1:A:99:LEU:N	1:A:99:LEU:CA	1:A:99:LEU:C	18	0.67
(1,384)	1:A:92:SER:C	1:A:93:ARG:N	1:A:93:ARG:CA	1:A:93:ARG:C	2	0.66
(1,374)	1:A:87:ARG:C	1:A:88:THR:N	1:A:88:THR:CA	1:A:88:THR:C	5	0.66
(1,149)	1:A:92:SER:C	1:A:93:ARG:N	1:A:93:ARG:CA	1:A:93:ARG:C	2	0.66
(1,139)	1:A:87:ARG:C	1:A:88:THR:N	1:A:88:THR:CA	1:A:88:THR:C	5	0.66
(1,414)	1:A:109:PRO:C	1:A:110:ASN:N	1:A:110:ASN:CA	1:A:110:ASN:C	1	0.65
(1,406)	1:A:104:ASN:C	1:A:105:ASP:N	1:A:105:ASP:CA	1:A:105:ASP:C	6	0.65
(1,349)	1:A:73:GLU:N	1:A:73:GLU:CA	1:A:73:GLU:C	1:A:74:GLU:N	9	0.65
(1,179)	1:A:109:PRO:C	1:A:110:ASN:N	1:A:110:ASN:CA	1:A:110:ASN:C	1	0.65
(1,171)	1:A:104:ASN:C	1:A:105:ASP:N	1:A:105:ASP:CA	1:A:105:ASP:C	6	0.65
(1,114)	1:A:73:GLU:N	1:A:73:GLU:CA	1:A:73:GLU:C	1:A:74:GLU:N	9	0.65
(1,355)	1:A:76:GLU:N	1:A:76:GLU:CA	1:A:76:GLU:C	1:A:77:GLU:N	9	0.64
(1,349)	1:A:73:GLU:N	1:A:73:GLU:CA	1:A:73:GLU:C	1:A:74:GLU:N	12	0.64
(1,120)	1:A:76:GLU:N	1:A:76:GLU:CA	1:A:76:GLU:C	1:A:77:GLU:N	9	0.64
(1,114)	1:A:73:GLU:N	1:A:73:GLU:CA	1:A:73:GLU:C	1:A:74:GLU:N	12	0.64
(1,87)	1:A:56:ASP:C	1:A:57:LYS:N	1:A:57:LYS:CA	1:A:57:LYS:C	6	0.62
(1,322)	1:A:56:ASP:C	1:A:57:LYS:N	1:A:57:LYS:CA	1:A:57:LYS:C	6	0.62
(1,97)	1:A:61:GLN:C	1:A:62:CYS:N	1:A:62:CYS:CA	1:A:62:CYS:C	3	0.61
(1,78)	1:A:50:PRO:N	1:A:50:PRO:CA	1:A:50:PRO:C	1:A:51:LEU:N	7	0.61
(1,332)	1:A:61:GLN:C	1:A:62:CYS:N	1:A:62:CYS:CA	1:A:62:CYS:C	3	ed on next nage



	ed from previous pe	*	.		36 11	T70 1 10 ()
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (\circ)
(1,313)	1:A:50:PRO:N	1:A:50:PRO:CA	1:A:50:PRO:C	1:A:51:LEU:N	7	0.61
(1,395)	1:A:98:HIS:N	1:A:98:HIS:CA	1:A:98:HIS:C	1:A:99:LEU:N	17	0.6
(1,358)	1:A:77:GLU:C	1:A:78:LYS:N	1:A:78:LYS:CA	1:A:78:LYS:C	10	0.6
(1,160)	1:A:98:HIS:N	1:A:98:HIS:CA	1:A:98:HIS:C	1:A:99:LEU:N	17	0.6
(1,123)	1:A:77:GLU:C	1:A:78:LYS:N	1:A:78:LYS:CA	1:A:78:LYS:C	10	0.6
(1,65)	1:A:42:TYR:N	1:A:42:TYR:CA	1:A:42:TYR:C	1:A:43:VAL:N	12	0.59
(1,300)	1:A:42:TYR:N	1:A:42:TYR:CA	1:A:42:TYR:C	1:A:43:VAL:N	12	0.59
(1,57)	1:A:37:LYS:N	1:A:37:LYS:CA	1:A:37:LYS:C	1:A:38:GLU:N	13	0.58
(1,292)	1:A:37:LYS:N	1:A:37:LYS:CA	1:A:37:LYS:C	1:A:38:GLU:N	13	0.58
(1,345)	1:A:70:PRO:N	1:A:70:PRO:CA	1:A:70:PRO:C	1:A:71:ILE:N	2	0.57
(1,110)	1:A:70:PRO:N	1:A:70:PRO:CA	1:A:70:PRO:C	1:A:71:ILE:N	2	0.57
(1,406)	1:A:104:ASN:C	1:A:105:ASP:N	1:A:105:ASP:CA	1:A:105:ASP:C	15	0.56
(1,171)	1:A:104:ASN:C	1:A:105:ASP:N	1:A:105:ASP:CA	1:A:105:ASP:C	15	0.56
(1,371)	1:A:86:ILE:N	1:A:86:ILE:CA	1:A:86:ILE:C	1:A:87:ARG:N	7	0.55
(1,136)	1:A:86:ILE:N	1:A:86:ILE:CA	1:A:86:ILE:C	1:A:87:ARG:N	7	0.55
(1,61)	1:A:39:GLU:N	1:A:39:GLU:CA	1:A:39:GLU:C	1:A:40:GLY:N	16	0.54
(1,464)	1:A:138:LEU:N	1:A:138:LEU:CA	1:A:138:LEU:C	1:A:139:HIS:N	19	0.54
(1,384)	1:A:92:SER:C	1:A:93:ARG:N	1:A:93:ARG:CA	1:A:93:ARG:C	6	0.54
(1,296)	1:A:39:GLU:N	1:A:39:GLU:CA	1:A:39:GLU:C	1:A:40:GLY:N	16	0.54
(1,229)	1:A:138:LEU:N	1:A:138:LEU:CA	1:A:138:LEU:C	1:A:139:HIS:N	19	0.54
(1,149)	1:A:92:SER:C	1:A:93:ARG:N	1:A:93:ARG:CA	1:A:93:ARG:C	6	0.54
(1,65)	1:A:42:TYR:N	1:A:42:TYR:CA	1:A:42:TYR:C	1:A:43:VAL:N	20	0.53
(1,419)	1:A:113:ARG:N	1:A:113:ARG:CA	1:A:113:ARG:C	1:A:114:TYR:N	3	0.53
(1,300)	1:A:42:TYR:N	1:A:42:TYR:CA	1:A:42:TYR:C	1:A:43:VAL:N	20	0.53
(1,184)	1:A:113:ARG:N	1:A:113:ARG:CA	1:A:113:ARG:C	1:A:114:TYR:N	3	0.53
(1,4)	1:A:4:ASN:N	1:A:4:ASN:CA	1:A:4:ASN:C	1:A:5:LYS:N	6	0.52
(1,394)	1:A:97:SER:C	1:A:98:HIS:N	1:A:98:HIS:CA	1:A:98:HIS:C	4	0.52
(1,239)	1:A:4:ASN:N	1:A:4:ASN:CA	1:A:4:ASN:C	1:A:5:LYS:N	6	0.52
(1,159)	1:A:97:SER:C	1:A:98:HIS:N	1:A:98:HIS:CA	1:A:98:HIS:C	4	0.52
(1,84)	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	1:A:55:LYS:N	9	0.51
(1,78)	1:A:50:PRO:N	1:A:50:PRO:CA	1:A:50:PRO:C	1:A:51:LEU:N	1	0.51
(1,410)	1:A:107:PRO:N	1:A:107:PRO:CA	1:A:107:PRO:C	1:A:108:GLY:N	3	0.51
(1,386)	1:A:93:ARG:C	1:A:94:THR:N	1:A:94:THR:CA	1:A:94:THR:C	7	0.51
(1,375)	1:A:88:THR:N	1:A:88:THR:CA	1:A:88:THR:C	1:A:89:GLU:N	15	0.51
(1,319)	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	1:A:55:LYS:N	9	0.51
(1,313)	1:A:50:PRO:N	1:A:50:PRO:CA	1:A:50:PRO:C	1:A:51:LEU:N	1	0.51
(1,175)	1:A:107:PRO:N	1:A:107:PRO:CA	1:A:107:PRO:C	1:A:108:GLY:N	3	0.51
(1,151)	1:A:93:ARG:C	1:A:94:THR:N	1:A:94:THR:CA	1:A:94:THR:C	7	0.51
(1,140)	1:A:88:THR:N	1:A:88:THR:CA	1:A:88:THR:C	1:A:89:GLU:N	15	0.51
(1,79)	1:A:51:LEU:C	1:A:52:PHE:N	1:A:52:PHE:CA	1:A:52:PHE:C	15	0.5
(1,470)	1:A:141:PHE:N	1:A:141:PHE:CA	1:A:141:PHE:C	1:A:142:ASN:N	1	0.5
(1,451)	1:A:130:LYS:C	1:A:131:GLU:N	1:A:131:GLU:CA	1:A:131:GLU:C	18	0.5
(1,314)	1:A:51:LEU:C	1:A:52:PHE:N	1:A:52:PHE:CA	1:A:52:PHE:C	15	0.5
(1,311) $(1,235)$	1:A:141:PHE:N	1:A:141:PHE:CA	1:A:141:PHE:C	1:A:142:ASN:N	1	0.5
(1,216)	1:A:130:LYS:C	1:A:131:GLU:N	1:A:131:GLU:CA	1:A:131:GLU:C	18	0.5
(1,397)	1:A:99:LEU:N	1:A:99:LEU:CA	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	14	0.49
(1,162)	1:A:99:LEU:N	1:A:99:LEU:CA	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	14	0.49
(1,93)	1:A:59:ASP:C	1:A:60:SER:N	1:A:60:SER:CA	1:A:60:SER:C	2	0.48
(1,89)	1:A:57:LYS:C	1:A:58:PHE:N	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:C	4	0.48
(1,52)	1:A:32:GLU:C	1:A:33:TYR:N	1:A:33:TYR:CA	1:A:33:TYR:C	17	0.48
(1,464)	1:A:138:LEU:N	1:A:138:LEU:CA	1:A:138:LEU:C	1:A:139:HIS:N	8	0.48
(-,-0-)						od on next ness



	Key	$rac{ed\ from\ previous\ po}{\mathbf{Atom-1}}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
							` ,
	· · /						
(1,234)	· · /						
1,287	· · /						
(1,29) 1:A-1381.EU.N	· · /						
	· · /						
(1,341) 1-A:67:PHEC	_ ` ' /						
(1.341)	· · /						
(1,34)	· · /						
(1,269 1:A:19-VALEN	· · /						
(1,106) 1:A:67:PHE.C	· · /						
(1,78)	(' /						
(1,345) 1:A:70:PRO:N 1:A:70:PRO:CA 1:A:70:PRO:C 1:A:71:HE:N 12 0.46 (1,313) 1:A:50:PRO:N 1:A:50:PRO:CA 1:A:50:PRO:C 1:A:51:LEU:N 19 0.46 (1,10) 1:A:70:PRO:N 1:A:70:PRO:C 1:A:71:LEN 12 0.46 (1,56) 1:A:36:HIS:C 1:A:37:LYS:N 1:A:37:LYS:CA 1:A:37:LYS:C 4 0.45 (1,291) 1:A:36:HIS:C 1:A:37:LYS:N 1:A:37:LYS:CA 1:A:37:LYS:C 4 0.45 (1,459) 1:A:313:GU:C 1:A:36:SER:N 1:A:36:SER:CA 1:A:37:LYS:C 4 0.44 (1,294) 1:A:313:GU:C 1:A:36:SER:N 1:A:36:SER:CA 1:A:36:SER:C 4 0.44 (1,284) 1:A:34:TYR:C 1:A:34:SER:C 2 0 0.42 (1,65) 1:A:34:TYR:C 1:A:34:SER:C 1 0 0.42 (1,367) 1:A:34:TYR:C 1:A:34:SER:C 2 0 0 0 (1,311) 1:A:32:GU:N 1:A:32:GU:C 1:A:33:GU:N	(, ,						
(1,313)	(' /						
(1,110) 1:A:70:PRO:N 1:A:70:PRO:C 1:A:71:ILE:N 12 0.46 (1,56) 1:A:36:HIS:C 1:A:37:LYS:N 1:A:37:LYS:C 4 0.45 (1,291) 1:A:36:HIS:C 1:A:37:LYS:N 1:A:37:LYS:C 4 0.45 (1,459) 1:A:136:SGLU:C 1:A:136:SER:N 1:A:136:SER:C 1:A:37:LYS:C 4 0.45 (1,459) 1:A:135:GLU:C 1:A:136:SER:N 1:A:136:SER:C 1:A:136:SER:C 4 0.44 (1,224) 1:A:135:GLU:C 1:A:136:SER:N 1:A:136:SER:C 1:A:136:SER:C 4 0.44 (1,83) 1:A:53:THR:C 1:A:54:SER:N 1:A:136:SER:C 1:A:136:SER:C 20 0.42 (1,65) 1:A:42:TYR:N 1:A:42:TYR:C 1:A:54:SER:C 20 0.42 (1,65) 1:A:42:TYR:N 1:A:42:TYR:C 1:A:54:SER:C 20 0.42 (1,347) 1:A:72:GLU:N 1:A:72:GLU:C 1:A:72:GLU:N 10 0.42 (1,318) 1:A:53:THR:C 1:A:54:SER:N 1:A:54:SER:C 20 0.42 (1,318) 1:A:53:THR:C 1:A:54:SER:N 1:A:54:SER:C 20 0.42 (1,318) 1:A:53:THR:C 1:A:54:SER:N 1:A:54:SER:C 20 0.42 (1,300) 1:A:42:TYR:N 1:A:42:TYR:C 1:A:43:SAL:N 11 0.42 (1,112) 1:A:72:GLU:N 1:A:72:GLU:CA 1:A:72:GLU:C 1:A:73:GLU:N 10 0.42 (1,112) 1:A:72:GLU:N 1:A:72:GLU:CA 1:A:72:GLU:C 1:A:73:GLU:N 10 0.42 (1,112) 1:A:72:GLU:N 1:A:72:GLU:CA 1:A:72:GLU:C 1:A:73:GLU:N 10 0.42 (1,112) 1:A:72:GLU:N 1:A:39:GLU:CA 1:A:39:GLU:C 1:A:43:SAL:N 11 0.42 (1,130) 1:A:39:GLU:N 1:A:39:GLU:CA 1:A:39:GLU:C 1:A:40:GLY:N 8 0.4 (1,36) 1:A:39:GLU:N 1:A:39:GLU:CA 1:A:39:GLU:C 1:A:40:GLY:N 8 0.4 (1,36) 1:A:39:GLU:N 1:A:39:GLU:CA 1:A:39:GLU:CA 1:A:44:ASN:C 10 0.4 (1,238) 1:A:3TYR:C 1:A:4:ASN:N 1:A:4:ASN:C 10 0.4 (1,499) 1:A:140:LBU:C 1:A:44:ASN:N 1:A:4:ASN:C 10 0.4 (1,499) 1:A:140:LBU:C 1:A:44:ASN:N 1:A:4:ASN:C 10 0.4 (1,499) 1:A:140:LBU:C 1:A:141:PHE:N 1:A:44:ASN:C 10 0.4 (1,499) 1:A:140:LBU:C 1:A:141:PHE:N 1:A:141:PHE:C 16 0.39 (1,449) 1:A:141:ARG:N 1:A:141:PHE:N 1:A:141:PHE:C 16 0.39 (1,449) 1:A:141:ARG:N 1:A:141:ARG:C 1:A:141:PHE:N 1:A:141:PHE:C 16 0.39 (1,449) 1:A:141:ARG:N 1:A:141:ARG:C 1:A:141:ARG:C 1:A:141:PHE:C 16 0.39 (1,449) 1:A:141:ARG:N 1:A:141:ARG:C 1:A:141:ARG:C 1:A:141:PHE:C 16 0.39 (1,449) 1:A:141:ARG:N 1:A:141:ARG:C 1:A:14	· · /						
(1,56)	· · /						
Carrier Carr	· · /						
(1,459) 1:A:135:GLU:C 1:A:136:SER:N 1:A:136:SER:CA 1:A:136:SER:C 4 0.44 (1,224) 1:A:135:GLU:C 1:A:136:SER:N 1:A:136:SER:CA 1:A:136:SER:C 4 0.44 (1,83) 1:A:53:THR:C 1:A:54:SER:N 1:A:54:SER:CA 1:A:54:SER:C 20 0.42 (1,65) 1:A:42:TYR:N 1:A:42:TYR:CA 1:A:42:TYR:CA 1:A:54:SER:C 20 0.42 (1,347) 1:A:72:GLU:N 1:A:72:GLU:CA 1:A:72:GLU:C 1:A:43:VAL:N 11 0.42 (1,347) 1:A:72:GLU:N 1:A:72:GLU:CA 1:A:72:GLU:C 1:A:73:GLU:N 10 0.42 (1,348) 1:A:53:THR:C 1:A:54:SER:N 1:A:54:SER:CA 1:A:54:SER:CC 20 0.42 (1,300) 1:A:32:TYR:N 1:A:42:TYR:CA 1:A:42:TYR:C 1:A:43:VAL:N 11 0.42 (1,112) 1:A:72:GLU:N 1:A:72:GLU:CA 1:A:42:TYR:C 1:A:43:VAL:N 11 0.42 (1,112) 1:A:72:GLU:N 1:A:72:GLU:CA 1:A:72:GLU:C 1:A:73:GLU:N 10 0.42 (1,61) 1:A:39:GLU:N 1:A:39:GLU:CA 1:A:39:GLU:C 1:A:40:GLY:N 8 0.4 (1,396) 1:A:39:HIS:C 1:A:49:SLEU:N 1:A:49:SLEU:C 1:A:40:GLY:N 8 0.4 (1,296) 1:A:39:GLU:N 1:A:39:GLU:CA 1:A:39:GLU:CA 1:A:40:GLY:N 8 0.4 (1,296) 1:A:39:GLU:N 1:A:39:GLU:CA 1:A:39:GLU:C 1:A:40:GLY:N 8 0.4 (1,296) 1:A:39:GLU:N 1:A:44:ASN:N 1:A:4:ASN:CA 1:A:44:ASN:C 10 0.4 (1,296) 1:A:39:GLU:C 1:A:44:ASN:N 1:A:4:ASN:CA 1:A:44:ASN:C 10 0.4 (1,499) 1:A:14:AS:HIS:C 1:A:44:ASN:N 1:A:4:ASN:CA 1:A:44:ASN:C 10 0.4 (1,499) 1:A:14:AS:HIS:C 1:A:44:ASN:N 1:A:4:ASN:CA 1:A:44:ASN:C 10 0.4 (1,499) 1:A:14:AS:HIS:C 1:A:44:ASN:C 1:A:14:PHE:C	(' /						
(1,224) 1:A:135:GLU:C 1:A:136:SER:N 1:A:136:SER:CA 1:A:136:SER:C 4 0.44 (1,83) 1:A:53:THR:C 1:A:54:SER:N 1:A:54:SER:CA 1:A:42:TYR:C 20 0.42 (1,65) 1:A:42:TYR:N 1:A:42:TYR:CA 1:A:43:VAL:N 11 0.42 (1,347) 1:A:72:GLU:N 1:A:72:GLU:CA 1:A:42:TYR:C 1:A:43:VAL:N 10 0.42 (1,318) 1:A:53:THR:C 1:A:54:SER:N 1:A:54:SER:CA 1:A:54:SER:C 20 0.42 (1,300) 1:A:42:TYR:N 1:A:42:TYR:CA 1:A:42:TYR:C 1:A:43:VAL:N 11 0.42 (1,300) 1:A:39:GLU:N 1:A:42:TYR:CA 1:A:43:TYR:C 1:A:43:TYR:C 1:A:44:ASN:N 10 0.42 (1,31) 1:A:39:GLU:N 1:A:39:GLU:CA 1:A:39:GLU:CA 1:A:43:SN:CA 1:A:44:GLY:N 8 0.4 (1,238) 1:A:33:GU:N 1:A:44:ASN:CA 1:A:44:ASN:C 10 0.4 (1,234) 1:A:34:SIB:SC 1:A:39:GU:CA 1:A:43:ASN:C 10 0.4	· · /						
(1,83) 1:A:53:THR:C 1:A:54:SER:N 1:A:54:SER:CA 1:A:54:SER:C 20 0.42 (1,65) 1:A:42:TYR:N 1:A:42:TYR:CA 1:A:42:TYR:C 1:A:43:VAL:N 11 0.42 (1,347) 1:A:72:GLU:N 1:A:72:GLU:CA 1:A:72:GLU:C 1:A:73:GLU:N 10 0.42 (1,318) 1:A:53:THR:C 1:A:54:SER:N 1:A:54:SER:CA 1:A:54:SER:C 20 0.42 (1,300) 1:A:42:TYR:N 1:A:54:SER:N 1:A:54:SER:CA 1:A:54:SER:C 20 0.42 (1,300) 1:A:42:TYR:N 1:A:42:TYR:CA 1:A:42:TYR:C 1:A:43:VAL:N 11 0.42 (1,112) 1:A:72:GLU:N 1:A:72:GLU:CA 1:A:72:GLU:C 1:A:73:GLU:N 10 0.42 (1,112) 1:A:72:GLU:N 1:A:72:GLU:CA 1:A:72:GLU:C 1:A:73:GLU:N 10 0.42 (1,61) 1:A:39:GLU:N 1:A:39:GLU:CA 1:A:39:GLU:C 1:A:40:GLY:N 8 0.4 (1,396) 1:A:99:HIS:C 1:A:99:LEU:N 1:A:99:LEU:CA 1:A:99:LEU:C 9 0.4 (1,3) 6 1:A:39:GLU:N 1:A:39:GLU:CA 1:A:4:ASN:C 10 0.4 (1,296) 1:A:39:GLU:N 1:A:39:GLU:CA 1:A:4:ASN:C 11 0.4 (1,296) 1:A:39:GLU:N 1:A:39:GLU:CA 1:A:4:ASN:CA 1:A:4:ASN:C 10 0.4 (1,238) 1:A:3:TYR:C 1:A:4:ASN:N 1:A:4:ASN:CA 1:A:4:ASN:C 10 0.4 (1,469) 1:A:39:HIS:C 1:A:99:LEU:N 1:A:99:LEU:CA 1:A:40:GLY:N 8 0.4 (1,238) 1:A:3:TYR:C 1:A:4:ASN:N 1:A:4:ASN:CA 1:A:4:ASN:C 10 0.4 (1,469) 1:A:141:PHE:N 1:A:199:LEU:CA 1:A:499:LEU:C 9 0.4 (1,469) 1:A:141:ASR:GC 1:A:141:PHE:N 1:A:13:ARG:C 1:A:141:PHE:C 16 0.39 (1,419) 1:A:13:ARG:N 1:A:113:ARG:C 1:A:113:ARG:C 1:A:114:TYR:N 15 0.39 (1,491) 1:A:13:ARG:N 1:A:113:ARG:CA 1:A:113:ARG:C 1:A:114:TYR:N 15 0.39 (1,234) 1:A:57:LYS:C 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:C 2 0.38 (1,324) 1:A:57:LYS:C 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:C 2 0.38 (1,52) 1:A:35:GLU:C 1:A:135:GLU:C 1:A:135:GLU:C 5 0.36 (1,457) 1:A:134:TYR:C 1:A:135:GLU:N 1:A:135:GLU:C 1:A:135:GLU:C 5 0.36 (1,457) 1:A:135:GLU:C 1:A:135:GLU:C 1:A:135:GLU:C 5 0.36 (1,457) 1:A:135:GLU:C 1:A:135:GLU:N 1:A:135:GLU	· · /						
(1,65) 1:A:42:TYR:N 1:A:42:TYR:CA 1:A:42:TYR:C 1:A:43:VAL:N 11 0.42 (1,347) 1:A:72:GLU:N 1:A:72:GLU:CA 1:A:72:GLU:C 1:A:73:GLU:N 10 0.42 (1,347) 1:A:53:THR:C 1:A:54:SER:N 1:A:54:SER:CA 1:A:54:SER:CD 0 0.42 (1,300) 1:A:42:TYR:N 1:A:42:TYR:CA 1:A:43:VAL:N 11 0.42 (1,112) 1:A:72:GLU:N 1:A:72:GLU:CA 1:A:42:TYR:C 1:A:43:VAL:N 11 0.42 (1,61) 1:A:39:GLU:N 1:A:39:GLU:CA 1:A:39:GLU:C 1:A:40:GLY:N 8 0.4 (1,396) 1:A:98:HIS:C 1:A:43:SN:CA 1:A:44:SN:CA 1:A:49:GLY:N 8 0.4 (1,396) 1:A:39:GLU:N 1:A:39:GLU:CA 1:A:39:GLU:CA 1:A:49:LU:CA 1:A:49:LU:CA 0.4 0.4 (1,238) 1:A:31:AI:TYR:C 1:A:4:ASN:N 1:A:4:ASN:CA 1:A:44:ASN:C 10 0.4 (1,238) 1:A:33:GLU:C 1:A:4:ASN:N 1:A:4:ASN:CA 1:A:4:ASN:C 10 0.4	· · /						
(1,347) 1:A:72:GLU:N 1:A:72:GLU:CA 1:A:72:GLU:C 1:A:73:GLU:N 10 0.42 (1,318) 1:A:53:THR:C 1:A:54:SER:N 1:A:54:SER:CA 1:A:54:SER:C 20 0.42 (1,318) 1:A:52:THR:C 1:A:54:SER:N 1:A:54:SER:CA 1:A:54:SER:C 20 0.42 (1,310) 1:A:42:TYR:N 1:A:42:TYR:C 1:A:43:VAL:N 11 0.42 (1,112) 1:A:72:GLU:N 1:A:72:GLU:N 1:0 0.42 (1,112) 1:A:39:GLU:N 1:A:39:GLU:CA 1:A:43:GUY:N 8 0.4 (1,396) 1:A:98:HIS:C 1:A:49:DLU:N 1:A:39:GLU:CA 1:A:49:DLU:CA 1:A:44:ASN:CA 1:A:44:ASN:C 10 0.4 (1,33) 1:A:33:TYR:C 1:A:4:ASN:N 1:A:4:ASN:CA 1:A:4:4SN:C 1:A:4:4SN:C 1:A:4:4SN:C 1:A:4:4SN:C 1:A:4:4SN:C 1:A:4:4SN:C 1 0.4 (1,234) 1:A:39:HIS:C 1:A:4:4SN:N 1:A:4:ASN:CA 1:A:4:4:PHE:C 1:A:99:LEU:CA 1:A:39:GLU:C 9 0.4 (1,469)	· · /						
(1,318) 1:A:53:THR:C 1:A:54:SER:N 1:A:54:SER:C 20 0.42 (1,300) 1:A:42:TYR:N 1:A:42:TYR:Ca 1:A:42:TYR:C 1:A:43:VALN 11 0.42 (1,112) 1:A:72:GLU:N 1:A:72:GLU:Ca 1:A:73:GLU:N 10 0.42 (1,112) 1:A:73:GLU:N 1:A:39:GLU:Ca 1:A:73:GLU:N 10 0.42 (1,61) 1:A:39:GLU:N 1:A:39:GLU:Ca 1:A:49:LEU:Ca 9 0.4 (1,396) 1:A:39:GLU:N 1:A:39:GLU:Ca 1:A:49:LEU:Ca 1:A:49:LEU:Ca 9 0.4 (1,296) 1:A:39:GLU:N 1:A:39:GLU:Ca 1:A:49:LEU:Ca 1:A:49:LEU:Ca 1:A:49:LEU:Ca 1:A:49:LEU:Ca 1:A:49:LEU:Ca 1:A:49:LEU:Ca 1:A:49:LEU:Ca 1:A:49:LEU:Ca 1:A:44:ASN:Ca 1 0.4 (1,496) 1:A:140:LEU:C 1:A:141:PHE:N 1:A:141:PHE:Ca <	· · /						
(1,300) 1:A:42:TYR:N 1:A:42:TYR:CA 1:A:42:TYR:C 1:A:43:VAL:N 11 0.42 (1,112) 1:A:72:GLU:N 1:A:72:GLU:CA 1:A:72:GLU:C 1:A:73:GLU:N 10 0.42 (1,61) 1:A:39:GLU:N 1:A:39:GLU:CA 1:A:39:GLU:C 1:A:40:GLY:N 8 0.4 (1,396) 1:A:98:HIS:C 1:A:99:LEU:N 1:A:99:LEU:CA 1:A:39:GLU:C 9 0.4 (1,3) 6 1:A:98:HIS:C 1:A:4:ASN:N 1:A:4:ASN:CA 1:A:4:ASN:C 10 0.4 (1,296) 1:A:39:GLU:N 1:A:39:GLU:CA 1:A:39:GLU:C 1:A:40:GLY:N 8 0.4 (1,296) 1:A:39:GLU:N 1:A:39:GLU:CA 1:A:39:GLU:C 1:A:40:GLY:N 8 0.4 (1,238) 1:A:3:TYR:C 1:A:4:ASN:N 1:A:4:ASN:CA 1:A:4:ASN:C 10 0.4 (1,266) 1:A:39:GLU:N 1:A:39:LEU:N 1:A:99:LEU:CA 1:A:99:LEU:C 9 0.4 (1,469) 1:A:140:LEU:C 1:A:44:PHE:N 1:A:141:PHE:CA 1:A:141:PHE:C 16 0.39 (1,419) 1:A:13:ARG:N 1:A:13:ARG:CA 1:A:141:PHE:CA 1:A:141:PHE:C 16 0.39 (1,234) 1:A:140:LEU:C 1:A:141:PHE:N 1:A:141:PHE:CA 1:A:141:PHE:C 16 0.39 (1,184) 1:A:13:ARG:N 1:A:13:ARG:CA 1:A:113:ARG:C 1:A:141:PHE:C 16 0.39 (1,184) 1:A:13:ARG:N 1:A:13:ARG:CA 1:A:13:ARG:C 1:A:141:PHE:C 16 0.39 (1,89) 1:A:57:LYS:C 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:C 2 0.38 (1,324) 1:A:32:GLU:C 1:A:33:TYR:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:33:TYR:C 6 0.36 (1,410) 1:A:107:PRO:N 1:A:135:GLU:N 1:A:33:TYR:C 1:A:135:GLU:C 5 0.36 (1,410) 1:A:107:PRO:N 1:A:107:PRO:CA 1:A:107:PRO:C 1:A:135:GLU:C 5 0.36 (1,410) 1:A:107:PRO:N 1:A:107:PRO:CA 1:A:107:PRO:C 1:A:135:GLU:C 5 0.36 (1,222) 1:A:134:TYR:C 1:A:135:GLU:N 1:A:135:GLU:CA 1:A:135:GLU:C 5 0.36 (1,222) 1:A:134:TYR:C 1:A:135:GLU:N 1:A:135:GLU:CA 1:A:135:GLU:C 5 0.36 (1,222) 1:A:134:TYR:C 1:A:135:GLU:N 1:A:135:GLU:CA 1:A:135:GLU:C 5 0.36 (1,235) 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:C 1:A:135:GLU:C 5 0.36 (1,235) 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:C 1 0.36 (1,235) 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:CA	· · /						
(1,112) 1:A:72:GLU:N 1:A:72:GLU:CA 1:A:72:GLU:C 1:A:73:GLU:N 10 0.42 (1,61) 1:A:39:GLU:N 1:A:39:GLU:CA 1:A:39:GLU:C 1:A:40:GLY:N 8 0.4 (1,396) 1:A:98:HIS:C 1:A:99:LEU:N 1:A:39:LEU:CA 1:A:43:SN:C 9 0.4 (1,3) 1:A:3:TYR:C 1:A:4:ASN:N 1:A:4:ASN:CA 1:A:4:ASN:C 10 0.4 (1,296) 1:A:39:GLU:N 1:A:39:GLU:CA 1:A:39:GLU:C 1:A:44:ASN:C 10 0.4 (1,238) 1:A:33:TYR:C 1:A:4:ASN:N 1:A:4:ASN:CA 1:A:4A:ASN:C 10 0.4 (1,238) 1:A:3:TYR:C 1:A:4:ASN:N 1:A:43:PHE:CA 1:A:4A:SN:C 10 0.4 (1,328) 1:A:3:H3:C 1:A:4:ASN:N 1:A:44:ASN:C 10 0.4 (1,469) 1:A:141:PHE:C 1:A:44:PHE:C 16 0.39 (1,419) 1:A:13:ARG:N 1:A:13:ARG:CA 1:A:141:PHE:CA 1:A:141:PHE:C 16 0.39 (1,89) 1:A:57:LYS:C 1:A:58:PHE:N	· · /						
(1,61) 1:A:39:GLU:N 1:A:39:GLU:CA 1:A:39:GLU:C 1:A:40:GLY:N 8 0.4 (1,396) 1:A:98:HIS:C 1:A:499:LEU:N 1:A:399:LEU:CA 1:A:499:LEU:C 9 0.4 (1,3) 1:A:39:HIS:C 1:A:4:ASN:N 1:A:4:ASN:CA 1:A:4:ASN:C 10 0.4 (1,296) 1:A:39:GLU:N 1:A:39:GLU:CA 1:A:39:GLU:C 1:A:4:ASN:C 10 0.4 (1,238) 1:A:31:TYR:C 1:A:4:ASN:N 1:A:4:ASN:CA 1:A:4:ASN:C 10 0.4 (1,161) 1:A:98:HIS:C 1:A:4:ASN:N 1:A:4:ASN:CA 1:A:4:ASN:C 10 0.4 (1,469) 1:A:141:PHE:C 1:A:499:LEU:C 9 0.4 (1,469) 1:A:13:ARG:N 1:A:13:ARG:CA 1:A:113:ARG:C 1:A:114:PHE:C 16 0.39 (1,419) 1:A:13:ARG:N 1:A:13:ARG:CA 1:A:13:ARG:C 1:A:141:PHE:C 16 0.39 (1,234) 1:A:13:ARG:N 1:A:13:ARG:CA 1:A:13:ARG:C 1:A:141:TYR:N 15 0.39 (1,184) 1:A	· · /						
(1,396) 1:A:98:HIS:C 1:A:99:LEU:N 1:A:99:LEU:CA 1:A:99:LEU:C 9 0.4 (1,3) 1:A:3:TYR:C 1:A:4:ASN:N 1:A:4:ASN:CA 1:A:4:ASN:C 10 0.4 (1,296) 1:A:39:GLU:N 1:A:39:GLU:CA 1:A:39:GLU:C 1:A:40:GLY:N 8 0.4 (1,238) 1:A:3:TYR:C 1:A:4:ASN:N 1:A:4:ASN:CA 1:A:4:ASN:C 10 0.4 (1,161) 1:A:98:HIS:C 1:A:499:LEU:N 1:A:499:LEU:CA 1:A:99:LEU:C 9 0.4 (1,469) 1:A:140:LEU:C 1:A:141:PHE:N 1:A:141:PHE:CA 1:A:141:PHE:C 16 0.39 (1,419) 1:A:113:ARG:N 1:A:141:PHE:N 1:A:141:PHE:CA 1:A:141:PHE:C 16 0.39 (1,234) 1:A:141:PHE:N 1:A:141:PHE:CA 1:A:141:PHE:C 16 0.39 (1,344) 1:A:13:ARG:N 1:A:131:ARG:CA 1:A:141:PHE:C 16 0.39 (1,89) 1:A:57:LYS:C 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:C 2 0.38 (1,324)	(' /						
(1,3) 1:A:3:TYR:C 1:A:4:ASN:N 1:A:4:ASN:CA 1:A:4:ASN:C 10 0.4 (1,296) 1:A:39:GLU:N 1:A:39:GLU:CA 1:A:39:GLU:C 1:A:40:GLY:N 8 0.4 (1,238) 1:A:3:TYR:C 1:A:4:ASN:N 1:A:4:ASN:CA 1:A:4:ASN:C 10 0.4 (1,161) 1:A:9:HIS:C 1:A:49:LEU:N 1:A:49:LEU:CA 1:A:49:LEU:C 9 0.4 (1,469) 1:A:140:LEU:C 1:A:141:PHE:N 1:A:141:PHE:CA 1:A:141:PHE:C 16 0.39 (1,419) 1:A:13:ARG:N 1:A:113:ARG:CA 1:A:113:ARG:C 1:A:141:PHE:CA 1:A:141:PHE:C 16 0.39 (1,234) 1:A:140:LEU:C 1:A:13:ARG:CA 1:A:13:ARG:C 1:A:141:PHE:CA 1:A:141:PHE:C 16 0.39 (1,89) 1:A:57:LYS:C 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:141:TYR:N 15 0.39 (1,89) 1:A:57:LYS:C 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:C 2 0.38 (1,324) 1:A:32:GLU:C 1:A:33:TYR:N 1:A:33:TYR:C	(' /						
(1,296) 1:A:39:GLU:N 1:A:39:GLU:CA 1:A:39:GLU:C 1:A:40:GLY:N 8 0.4 (1,238) 1:A:3:TYR:C 1:A:4:ASN:N 1:A:4:ASN:CA 1:A:4:ASN:C 10 0.4 (1,161) 1:A:98:HIS:C 1:A:99:LEU:N 1:A:99:LEU:CA 1:A:99:LEU:C 9 0.4 (1,469) 1:A:140:LEU:C 1:A:141:PHE:N 1:A:141:PHE:CA 1:A:141:PHE:C 16 0.39 (1,419) 1:A:13:ARG:N 1:A:13:ARG:CA 1:A:113:ARG:C 1:A:114:TYR:N 15 0.39 (1,234) 1:A:140:LEU:C 1:A:141:PHE:N 1:A:141:PHE:CA 1:A:141:PHE:C 16 0.39 (1,344) 1:A:13:ARG:N 1:A:13:ARG:CA 1:A:13:ARG:C 1:A:141:PHE:C 16 0.39 (1,184) 1:A:13:ARG:N 1:A:13:ARG:CA 1:A:13:ARG:C 1:A:141:PHE:C 16 0.39 (1,89) 1:A:57:LYS:C 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:C 2 0.38 (1,324) 1:A:32:GLU:C 1:A:33:TYR:N 1:A:33:TYR:CA 1:A:33:TYR:C 6	(' /						
(1,238) 1:A:3:TYR:C 1:A:4:ASN:N 1:A:4:ASN:CA 1:A:4:ASN:C 10 0.4 (1,161) 1:A:98:HIS:C 1:A:99:LEU:N 1:A:99:LEU:CA 1:A:99:LEU:C 9 0.4 (1,469) 1:A:140:LEU:C 1:A:141:PHE:N 1:A:141:PHE:CA 1:A:141:PHE:C 16 0.39 (1,419) 1:A:113:ARG:N 1:A:113:ARG:CA 1:A:113:ARG:C 1:A:141:PHE:C 16 0.39 (1,234) 1:A:140:LEU:C 1:A:141:PHE:N 1:A:141:PHE:CA 1:A:141:PHE:C 16 0.39 (1,184) 1:A:13:ARG:N 1:A:13:ARG:CA 1:A:13:ARG:C 1:A:141:PHE:C 16 0.39 (1,89) 1:A:57:LYS:C 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:C 2 0.38 (1,324) 1:A:32:GLU:C 1:A:33:TYR:N 1:A:33:TYR:CA 1:A:33:TYR:C 2 0.38 (1,457) 1:A:34:TYR:C 1:A:135:GLU:N 1:A:135:GLU:CA 1:A:135:GLU:C 5 0.36 (1,470) 1:A:32:GLU:C 1:A:33:TYR:N 1:A:135:GLU:CA 1:A:135:GLU:C 5	(' ' /						
(1,161) 1:A:99:HIS:C 1:A:99:LEU:N 1:A:99:LEU:CA 1:A:99:LEU:C 9 0.4 (1,469) 1:A:140:LEU:C 1:A:141:PHE:N 1:A:141:PHE:CA 1:A:141:PHE:C 16 0.39 (1,419) 1:A:113:ARG:N 1:A:113:ARG:CA 1:A:113:ARG:C 1:A:114:PHE:C 16 0.39 (1,234) 1:A:140:LEU:C 1:A:141:PHE:N 1:A:141:PHE:CA 1:A:141:PHE:C 16 0.39 (1,184) 1:A:13:ARG:N 1:A:13:ARG:CA 1:A:113:ARG:C 1:A:114:TYR:N 15 0.39 (1,89) 1:A:57:LYS:C 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:C 2 0.38 (1,324) 1:A:57:LYS:C 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:C 2 0.38 (1,324) 1:A:32:GLU:C 1:A:33:TYR:N 1:A:33:TYR:CA 1:A:33:TYR:C 6 0.36 (1,457) 1:A:134:TYR:C 1:A:135:GLU:N 1:A:135:GLU:CA 1:A:135:GLU:C 5 0.36 (1,410) 1:A:107:PRO:N 1:A:137:PRO:CA 1:A:108:GLY:N 17 0.36	(, ,						
(1,469) 1:A:140:LEU:C 1:A:141:PHE:N 1:A:141:PHE:CA 1:A:141:PHE:C 16 0.39 (1,419) 1:A:113:ARG:N 1:A:113:ARG:CA 1:A:113:ARG:C 1:A:114:TYR:N 15 0.39 (1,234) 1:A:140:LEU:C 1:A:141:PHE:N 1:A:141:PHE:CA 1:A:141:PHE:C 16 0.39 (1,184) 1:A:113:ARG:N 1:A:113:ARG:CA 1:A:113:ARG:C 1:A:114:TYR:N 15 0.39 (1,89) 1:A:57:LYS:C 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:C 2 0.38 (1,324) 1:A:57:LYS:C 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:C 2 0.38 (1,324) 1:A:32:GLU:C 1:A:33:TYR:N 1:A:33:TYR:CA 1:A:33:TYR:C 6 0.36 (1,457) 1:A:134:TYR:C 1:A:135:GLU:N 1:A:107:PRO:C 1:A:108:GLY:N 17 0.36 (1,287) 1:A:33:TYR:C 1:A:33:TYR:CA 1:A:33:TYR:C 6 0.36 (1,287) 1:A:135:GLU:C 1:A:135:GLU:CA 1:A:135:GLU:C 5 0.36 <	(' /						
(1,419) 1:A:113:ARG:N 1:A:113:ARG:CA 1:A:113:ARG:C 1:A:114:TYR:N 15 0.39 (1,234) 1:A:140:LEU:C 1:A:141:PHE:N 1:A:141:PHE:CA 1:A:141:PHE:C 16 0.39 (1,184) 1:A:113:ARG:N 1:A:113:ARG:CA 1:A:113:ARG:C 1:A:114:TYR:N 15 0.39 (1,89) 1:A:57:LYS:C 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:C 2 0.38 (1,324) 1:A:57:LYS:C 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:C 2 0.38 (1,52) 1:A:32:GLU:C 1:A:33:TYR:N 1:A:33:TYR:CA 1:A:33:TYR:C 6 0.36 (1,457) 1:A:134:TYR:C 1:A:135:GLU:N 1:A:107:PRO:C 1:A:108:GLY:N 17 0.36 (1,287) 1:A:32:GLU:C 1:A:33:TYR:N 1:A:33:TYR:CA 1:A:135:GLU:C 5 0.36 (1,287) 1:A:134:TYR:C 1:A:135:GLU:N 1:A:135:GLU:C 5 0.36 (1,287) 1:A:134:TYR:C 1:A:135:GLU:N 1:A:135:GLU:C 5 0.36 (· · /						
(1,234) 1:A:140:LEU:C 1:A:141:PHE:N 1:A:141:PHE:CA 1:A:141:PHE:C 16 0.39 (1,184) 1:A:113:ARG:N 1:A:113:ARG:CA 1:A:113:ARG:C 1:A:114:TYR:N 15 0.39 (1,89) 1:A:57:LYS:C 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:C 2 0.38 (1,324) 1:A:57:LYS:C 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:C 2 0.38 (1,52) 1:A:32:GLU:C 1:A:33:TYR:N 1:A:33:TYR:CA 1:A:33:TYR:C 6 0.36 (1,457) 1:A:134:TYR:C 1:A:135:GLU:N 1:A:135:GLU:CA 1:A:108:GLY:N 17 0.36 (1,410) 1:A:107:PRO:N 1:A:137:GLU:N 1:A:33:TYR:CA 1:A:108:GLY:N 17 0.36 (1,287) 1:A:134:TYR:C 1:A:135:GLU:N 1:A:135:GLU:CA 1:A:135:GLU:C 5 0.36 (1,222) 1:A:134:TYR:C 1:A:135:GLU:N 1:A:135:GLU:CA 1:A:108:GLY:N 17 0.36 (1,175) 1:A:107:PRO:N 1:A:107:PRO:CA 1:A:107:PRO:C 1:A:108:GLY:N	` ' /	1:A:113:ARG:N					
(1,184) 1:A:113:ARG:N 1:A:113:ARG:CA 1:A:113:ARG:C 1:A:114:TYR:N 15 0.39 (1,89) 1:A:57:LYS:C 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:C 2 0.38 (1,324) 1:A:57:LYS:C 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:C 2 0.38 (1,52) 1:A:32:GLU:C 1:A:33:TYR:N 1:A:33:TYR:CA 1:A:33:TYR:C 6 0.36 (1,457) 1:A:134:TYR:C 1:A:135:GLU:N 1:A:107:PRO:C 1:A:108:GLY:N 17 0.36 (1,410) 1:A:107:PRO:N 1:A:107:PRO:CA 1:A:107:PRO:C 1:A:108:GLY:N 17 0.36 (1,287) 1:A:32:GLU:C 1:A:33:TYR:N 1:A:33:TYR:CA 1:A:33:TYR:C 6 0.36 (1,222) 1:A:134:TYR:C 1:A:135:GLU:N 1:A:135:GLU:CA 1:A:135:GLU:C 5 0.36 (1,79) 1:A:107:PRO:N 1:A:107:PRO:CA 1:A:107:PRO:C 1:A:108:GLY:N 17 0.36 (1,325) 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:59:ASP:N 14 0.35	· · /	1:A:140:LEU:C	1:A:141:PHE:N	1:A:141:PHE:CA	1:A:141:PHE:C	16	
(1,89) 1:A:57:LYS:C 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:C 2 0.38 (1,324) 1:A:57:LYS:C 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:C 2 0.38 (1,52) 1:A:32:GLU:C 1:A:33:TYR:N 1:A:33:TYR:CA 1:A:33:TYR:C 6 0.36 (1,457) 1:A:134:TYR:C 1:A:135:GLU:N 1:A:135:GLU:CA 1:A:108:GLY:N 17 0.36 (1,410) 1:A:32:GLU:C 1:A:33:TYR:N 1:A:33:TYR:CA 1:A:33:TYR:C 6 0.36 (1,287) 1:A:32:GLU:C 1:A:33:TYR:N 1:A:33:TYR:CA 1:A:33:TYR:C 6 0.36 (1,287) 1:A:34:TYR:C 1:A:33:TYR:N 1:A:33:TYR:CA 1:A:33:TYR:C 6 0.36 (1,222) 1:A:134:TYR:C 1:A:135:GLU:N 1:A:135:GLU:CA 1:A:135:GLU:C 5 0.36 (1,175) 1:A:107:PRO:N 1:A:107:PRO:CA 1:A:107:PRO:C 1:A:108:GLY:N 17 0.36 (1,90) 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:59:ASP:N 14 0.35							
(1,324) 1:A:57:LYS:C 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:C 2 0.38 (1,52) 1:A:32:GLU:C 1:A:33:TYR:N 1:A:33:TYR:CA 1:A:33:TYR:C 6 0.36 (1,457) 1:A:134:TYR:C 1:A:135:GLU:N 1:A:135:GLU:CA 1:A:108:GLY:N 17 0.36 (1,410) 1:A:107:PRO:N 1:A:107:PRO:CA 1:A:107:PRO:C 1:A:108:GLY:N 17 0.36 (1,287) 1:A:32:GLU:C 1:A:33:TYR:N 1:A:33:TYR:CA 1:A:33:TYR:C 6 0.36 (1,287) 1:A:134:TYR:C 1:A:135:GLU:N 1:A:135:GLU:CA 1:A:135:GLU:C 5 0.36 (1,222) 1:A:134:TYR:C 1:A:135:GLU:N 1:A:135:GLU:CA 1:A:108:GLU:C 5 0.36 (1,175) 1:A:107:PRO:N 1:A:107:PRO:CA 1:A:107:PRO:C 1:A:108:GLU:N 17 0.36 (1,90) 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:59:ASP:N 14 0.35 (1,325) 1:A:58:PHE:N 1:A:59:PHE:CA 1:A:59:ASP:N 14 0.34	· · /					2	
(1,52) 1:A:32:GLU:C 1:A:33:TYR:N 1:A:33:TYR:CA 1:A:33:TYR:C 6 0.36 (1,457) 1:A:134:TYR:C 1:A:135:GLU:N 1:A:135:GLU:CA 1:A:135:GLU:C 5 0.36 (1,410) 1:A:107:PRO:N 1:A:107:PRO:CA 1:A:107:PRO:C 1:A:108:GLY:N 17 0.36 (1,287) 1:A:32:GLU:C 1:A:33:TYR:N 1:A:33:TYR:CA 1:A:33:TYR:C 6 0.36 (1,287) 1:A:134:TYR:C 1:A:135:GLU:N 1:A:35:GLU:CA 1:A:135:GLU:C 5 0.36 (1,222) 1:A:134:TYR:C 1:A:135:GLU:N 1:A:135:GLU:CA 1:A:135:GLU:C 5 0.36 (1,175) 1:A:107:PRO:N 1:A:107:PRO:CA 1:A:108:GLY:N 17 0.36 (1,90) 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:59:ASP:N 14 0.35 (1,325) 1:A:55:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:59:ASP:N 14 0.35 (1,79) 1:A:51:LEU:C 1:A:55:PHE:N 1:A:55:PHE:CA 1:A:59:ASP:CA 1:A:105:ASP:C 14 0.34 (. ,						
(1,457) 1:A:134:TYR:C 1:A:135:GLU:N 1:A:135:GLU:CA 1:A:135:GLU:C 5 0.36 (1,410) 1:A:107:PRO:N 1:A:107:PRO:CA 1:A:107:PRO:C 1:A:108:GLY:N 17 0.36 (1,287) 1:A:32:GLU:C 1:A:33:TYR:N 1:A:33:TYR:CA 1:A:33:TYR:C 6 0.36 (1,222) 1:A:134:TYR:C 1:A:135:GLU:N 1:A:135:GLU:CA 1:A:135:GLU:C 5 0.36 (1,175) 1:A:107:PRO:N 1:A:107:PRO:CA 1:A:107:PRO:C 1:A:108:GLY:N 17 0.36 (1,90) 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:C 1:A:59:ASP:N 14 0.35 (1,325) 1:A:55:PHE:N 1:A:52:PHE:CA 1:A:52:PHE:CA 1:A:52:PHE:C 2 0.34 (1,406) 1:A:104:ASN:C 1:A:105:ASP:N 1:A:105:ASP:CA 1:A:105:ASP:C 14 0.34 (1,355) 1:A:76:GLU:N 1:A:76:GLU:CA 1:A:76:GLU:C 1:A:77:GLU:N 6 0.34	· · /						
(1,410) 1:A:107:PRO:N 1:A:107:PRO:CA 1:A:107:PRO:C 1:A:108:GLY:N 17 0.36 (1,287) 1:A:32:GLU:C 1:A:33:TYR:N 1:A:33:TYR:CA 1:A:33:TYR:C 6 0.36 (1,222) 1:A:134:TYR:C 1:A:135:GLU:N 1:A:135:GLU:CA 1:A:135:GLU:C 5 0.36 (1,175) 1:A:107:PRO:N 1:A:107:PRO:CA 1:A:107:PRO:C 1:A:108:GLY:N 17 0.36 (1,90) 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:C 1:A:59:ASP:N 14 0.35 (1,325) 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:59:ASP:N 14 0.35 (1,79) 1:A:51:LEU:C 1:A:52:PHE:N 1:A:52:PHE:CA 1:A:52:PHE:C 2 0.34 (1,406) 1:A:104:ASN:C 1:A:105:ASP:N 1:A:105:ASP:CA 1:A:105:ASP:C 14 0.34 (1,355) 1:A:76:GLU:N 1:A:76:GLU:CA 1:A:76:GLU:C 1:A:77:GLU:N 6 0.34	. ,						
(1,287) 1:A:32:GLU:C 1:A:33:TYR:N 1:A:33:TYR:CA 1:A:33:TYR:C 6 0.36 (1,222) 1:A:134:TYR:C 1:A:135:GLU:N 1:A:135:GLU:CA 1:A:135:GLU:C 5 0.36 (1,175) 1:A:107:PRO:N 1:A:107:PRO:CA 1:A:107:PRO:C 1:A:108:GLY:N 17 0.36 (1,90) 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:C 1:A:59:ASP:N 14 0.35 (1,325) 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:C 1:A:59:ASP:N 14 0.35 (1,79) 1:A:51:LEU:C 1:A:52:PHE:N 1:A:52:PHE:CA 1:A:52:PHE:CA 1:A:52:PHE:C 2 0.34 (1,406) 1:A:104:ASN:C 1:A:105:ASP:N 1:A:105:ASP:CA 1:A:105:ASP:C 14 0.34 (1,355) 1:A:76:GLU:N 1:A:76:GLU:CA 1:A:76:GLU:C 1:A:77:GLU:N 6 0.34	· · /						
(1,222) 1:A:134:TYR:C 1:A:135:GLU:N 1:A:135:GLU:CA 1:A:135:GLU:C 5 0.36 (1,175) 1:A:107:PRO:N 1:A:107:PRO:CA 1:A:107:PRO:C 1:A:108:GLY:N 17 0.36 (1,90) 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:C 1:A:59:ASP:N 14 0.35 (1,325) 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:59:ASP:N 14 0.35 (1,79) 1:A:51:LEU:C 1:A:52:PHE:N 1:A:52:PHE:CA 1:A:52:PHE:C 2 0.34 (1,406) 1:A:104:ASN:C 1:A:105:ASP:N 1:A:105:ASP:CA 1:A:105:ASP:C 14 0.34 (1,355) 1:A:76:GLU:N 1:A:76:GLU:CA 1:A:76:GLU:C 1:A:77:GLU:N 6 0.34	· · /						
(1,175) 1:A:107:PRO:N 1:A:107:PRO:CA 1:A:107:PRO:C 1:A:108:GLY:N 17 0.36 (1,90) 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:C 1:A:59:ASP:N 14 0.35 (1,325) 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:C 1:A:59:ASP:N 14 0.35 (1,79) 1:A:51:LEU:C 1:A:52:PHE:N 1:A:52:PHE:CA 1:A:52:PHE:C 2 0.34 (1,406) 1:A:104:ASN:C 1:A:105:ASP:N 1:A:105:ASP:CA 1:A:105:ASP:C 14 0.34 (1,355) 1:A:76:GLU:N 1:A:76:GLU:CA 1:A:76:GLU:C 1:A:77:GLU:N 6 0.34							
(1,90) 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:C 1:A:59:ASP:N 14 0.35 (1,325) 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:C 1:A:59:ASP:N 14 0.35 (1,79) 1:A:51:LEU:C 1:A:52:PHE:N 1:A:52:PHE:CA 1:A:52:PHE:C 2 0.34 (1,406) 1:A:104:ASN:C 1:A:105:ASP:N 1:A:105:ASP:CA 1:A:105:ASP:C 14 0.34 (1,355) 1:A:76:GLU:N 1:A:76:GLU:CA 1:A:76:GLU:C 1:A:77:GLU:N 6 0.34	_ ` ' /						
(1,325) 1:A:58:PHE:N 1:A:58:PHE:CA 1:A:58:PHE:C 1:A:59:ASP:N 14 0.35 (1,79) 1:A:51:LEU:C 1:A:52:PHE:N 1:A:52:PHE:CA 1:A:52:PHE:C 2 0.34 (1,406) 1:A:104:ASN:C 1:A:105:ASP:N 1:A:105:ASP:CA 1:A:105:ASP:C 14 0.34 (1,355) 1:A:76:GLU:N 1:A:76:GLU:CA 1:A:76:GLU:C 1:A:77:GLU:N 6 0.34	/						
(1,79) 1:A:51:LEU:C 1:A:52:PHE:N 1:A:52:PHE:CA 1:A:52:PHE:C 2 0.34 (1,406) 1:A:104:ASN:C 1:A:105:ASP:N 1:A:105:ASP:CA 1:A:105:ASP:C 14 0.34 (1,355) 1:A:76:GLU:N 1:A:76:GLU:CA 1:A:76:GLU:C 1:A:77:GLU:N 6 0.34	/						
(1,406) 1:A:104:ASN:C 1:A:105:ASP:N 1:A:105:ASP:CA 1:A:105:ASP:C 14 0.34 (1,355) 1:A:76:GLU:N 1:A:76:GLU:CA 1:A:76:GLU:C 1:A:77:GLU:N 6 0.34	/						
(1,355) 1:A:76:GLU:N 1:A:76:GLU:CA 1:A:76:GLU:C 1:A:77:GLU:N 6 0.34	/					14	
	· · /						
	` ' /						
(1,171) 1:A:104:ASN:C 1:A:105:ASP:N 1:A:105:ASP:CA 1:A:105:ASP:C 14 0.34	` ' /						



	ed from previous po					
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (\circ)
(1,120)	1:A:76:GLU:N	1:A:76:GLU:CA	1:A:76:GLU:C	1:A:77:GLU:N	6	0.34
(1,469)	1:A:140:LEU:C	1:A:141:PHE:N	1:A:141:PHE:CA	1:A:141:PHE:C	20	0.33
(1,234)	1:A:140:LEU:C	1:A:141:PHE:N	1:A:141:PHE:CA	1:A:141:PHE:C	20	0.33
(1,91)	1:A:58:PHE:C	1:A:59:ASP:N	1:A:59:ASP:CA	1:A:59:ASP:C	17	0.32
(1,83)	1:A:53:THR:C	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	6	0.32
(1,78)	1:A:50:PRO:N	1:A:50:PRO:CA	1:A:50:PRO:C	1:A:51:LEU:N	20	0.32
(1,335)	1:A:64:TRP:N	1:A:64:TRP:CA	1:A:64:TRP:C	1:A:65:PRO:N	11	0.32
(1,326)	1:A:58:PHE:C	1:A:59:ASP:N	1:A:59:ASP:CA	1:A:59:ASP:C	17	0.32
(1,318)	1:A:53:THR:C	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	6	0.32
(1,313)	1:A:50:PRO:N	1:A:50:PRO:CA	1:A:50:PRO:C	1:A:51:LEU:N	20	0.32
(1,100)	1:A:64:TRP:N	1:A:64:TRP:CA	1:A:64:TRP:C	1:A:65:PRO:N	11	0.32
(1,74)	1:A:46:VAL:C	1:A:47:SER:N	1:A:47:SER:CA	1:A:47:SER:C	16	0.31
(1,396)	1:A:98:HIS:C	1:A:99:LEU:N	1:A:99:LEU:CA	1:A:99:LEU:C	1	0.31
(1,388)	1:A:94:THR:C	1:A:95:ALA:N	1:A:95:ALA:CA	1:A:95:ALA:C	13	0.31
(1,309)	1:A:46:VAL:C	1:A:47:SER:N	1:A:47:SER:CA	1:A:47:SER:C	16	0.31
(1,161)	1:A:98:HIS:C	1:A:99:LEU:N	1:A:99:LEU:CA	1:A:99:LEU:C	1	0.31
(1,153)	1:A:94:THR:C	1:A:95:ALA:N	1:A:95:ALA:CA	1:A:95:ALA:C	13	0.31
(1,340)	1:A:67:PHE:N	1:A:67:PHE:CA	1:A:67:PHE:C	1:A:68:THR:N	20	0.3
(1,105)	1:A:67:PHE:N	1:A:67:PHE:CA	1:A:67:PHE:C	1:A:68:THR:N	20	0.3
(1,439)	1:A:124:VAL:N	1:A:124:VAL:CA	1:A:124:VAL:C	1:A:125:PRO:N	3	0.29
(1,423)	1:A:115:CYS:N	1:A:115:CYS:CA	1:A:115:CYS:C	1:A:116:ILE:N	19	0.29
(1,204)	1:A:124:VAL:N	1:A:124:VAL:CA	1:A:124:VAL:C	1:A:125:PRO:N	3	0.29
(1,188)	1:A:115:CYS:N	1:A:115:CYS:CA	1:A:115:CYS:C	1:A:116:ILE:N	19	0.29
(1,91)	1:A:58:PHE:C	1:A:59:ASP:N	1:A:59:ASP:CA	1:A:59:ASP:C	16	0.28
(1,385)	1:A:93:ARG:N	1:A:93:ARG:CA	1:A:93:ARG:C	1:A:94:THR:N	10	0.28
(1,326)	1:A:58:PHE:C	1:A:59:ASP:N	1:A:59:ASP:CA	1:A:59:ASP:C	16	0.28
(1,150)	1:A:93:ARG:N	1:A:93:ARG:CA	1:A:93:ARG:C	1:A:94:THR:N	10	0.28
(1,416)	1:A:111:GLY:C	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	6	0.27
(1,355)	1:A:76:GLU:N	1:A:76:GLU:CA	1:A:76:GLU:C	1:A:77:GLU:N	10	0.27
(1,181)	1:A:111:GLY:C	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	6	0.27
(1,120)	1:A:76:GLU:N	1:A:76:GLU:CA	1:A:76:GLU:C	1:A:77:GLU:N	10	0.27
(1,42)	1:A:24:GLY:N	1:A:24:GLY:CA	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	4	0.26
(1,277)	1:A:24:GLY:N	1:A:24:GLY:CA	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	4	0.26
(1,370)	1:A:85:MET:C	1:A:86:ILE:N	1:A:86:ILE:CA	1:A:86:ILE:C	12	0.25
(1,246)	1:A:7:GLU:C	1:A:8:LYS:N	1:A:8:LYS:CA	1:A:8:LYS:C	20	0.25
(1,135)	1:A:85:MET:C	1:A:86:ILE:N	1:A:86:ILE:CA	1:A:86:ILE:C	12	0.25
(1,11)	1:A:7:GLU:C	1:A:8:LYS:N	1:A:8:LYS:CA	1:A:8:LYS:C	20	0.25
(1,455)	1:A:132:GLU:C	1:A:133:GLY:N	1:A:133:GLY:CA	1:A:133:GLY:C	3	0.24
(1,220)	1:A:132:GLU:C	1:A:133:GLY:N	1:A:133:GLY:CA	1:A:133:GLY:C	3	0.24
(1,453)	1:A:131:GLU:C	1:A:132:GLU:N	1:A:132:GLU:CA	1:A:132:GLU:C	14	0.23
(1,380)	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	1:A:91:ARG:CA	1:A:91:ARG:C	1	0.23
(1,378)	1:A:89:GLU:C	1:A:90:VAL:N	1:A:90:VAL:CA	1:A:90:VAL:C	1	0.23
(1,218)	1:A:131:GLU:C	1:A:132:GLU:N	1:A:132:GLU:CA	1:A:132:GLU:C	14	0.23
(1,145)	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	1:A:91:ARG:CA	1:A:91:ARG:C	1	0.23
(1,143)	1:A:89:GLU:C	1:A:90:VAL:N	1:A:90:VAL:CA	1:A:90:VAL:C	1	0.23
(1,65)	1:A:42:TYR:N	1:A:42:TYR:CA	1:A:42:TYR:C	1:A:43:VAL:N	19	0.21
(1,378)	1:A:89:GLU:C	1:A:90:VAL:N	1:A:90:VAL:CA	1:A:90:VAL:C	4	0.21
(1,369)	1:A:85:MET:N	1:A:85:MET:CA	1:A:85:MET:C	1:A:86:ILE:N	20	0.21
(1,365)	1:A:82:SER:N	1:A:82:SER:CA	1:A:82:SER:C	1:A:83:HIS:N	6	0.21
(1,300)	1:A:42:TYR:N	1:A:42:TYR:CA	1:A:42:TYR:C	1:A:43:VAL:N	19	0.21
(1,3)	1:A:3:TYR:C	1:A:4:ASN:N	1:A:4:ASN:CA	1:A:4:ASN:C	17	0.21



Key	$rac{ed\ from\ previous\ po}{\mathbf{Atom-1}}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,238)	1:A:3:TYR:C	1:A:4:ASN:N	1:A:4:ASN:CA	1:A:4:ASN:C	17	0.21
(1,143)	1:A:89:GLU:C	1:A:90:VAL:N	1:A:90:VAL:CA	1:A:90:VAL:C	4	0.21
(1,134)	1:A:85:MET:N	1:A:85:MET:CA	1:A:85:MET:C	1:A:86:ILE:N	20	0.21
(1,130)	1:A:82:SER:N	1:A:82:SER:CA	1:A:82:SER:C	1:A:83:HIS:N	6	0.21
(1,97)	1:A:61:GLN:C	1:A:62:CYS:N	1:A:62:CYS:CA	1:A:62:CYS:C	6	0.19
(1,414)	1:A:109:PRO:C	1:A:110:ASN:N	1:A:110:ASN:CA	1:A:110:ASN:C	6	0.19
(1,4)	1:A:4:ASN:N	1:A:4:ASN:CA	1:A:4:ASN:C	1:A:5:LYS:N	9	0.19
(1,332)	1:A:61:GLN:C	1:A:62:CYS:N	1:A:62:CYS:CA	1:A:62:CYS:C	6	0.19
(1,239)	1:A:4:ASN:N	1:A:4:ASN:CA	1:A:4:ASN:C	1:A:5:LYS:N	9	0.19
(1,179)	1:A:109:PRO:C	1:A:110:ASN:N	1:A:110:ASN:CA	1:A:110:ASN:C	6	0.19
(1,97)	1:A:61:GLN:C	1:A:62:CYS:N	1:A:62:CYS:CA	1:A:62:CYS:C	20	0.18
(1,84)	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	1:A:55:LYS:N	13	0.18
(1,332)	1:A:61:GLN:C	1:A:62:CYS:N	1:A:62:CYS:CA	1:A:62:CYS:C	20	0.18
(1,319)	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	1:A:55:LYS:N	13	0.18
(1,462)	1:A:137:TYR:N	1:A:137:TYR:CA	1:A:137:TYR:C	1:A:138:LEU:N	12	0.17
(1,227)	1:A:137:TYR:N	1:A:137:TYR:CA	1:A:137:TYR:C	1:A:138:LEU:N	12	0.17
(1,435)	1:A:122:ARG:N	1:A:122:ARG:CA	1:A:122:ARG:C	1:A:123:PHE:N	12	0.16
(1,42)	1:A:24:GLY:N	1:A:24:GLY:CA	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	19	0.16
(1,335)	1:A:64:TRP:N	1:A:64:TRP:CA	1:A:64:TRP:C	1:A:65:PRO:N	2	0.16
(1,277)	1:A:24:GLY:N	1:A:24:GLY:CA	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	19	0.16
(1,200)	1:A:122:ARG:N	1:A:122:ARG:CA	1:A:122:ARG:C	1:A:123:PHE:N	12	0.16
(1,100)	1:A:64:TRP:N	1:A:64:TRP:CA	1:A:64:TRP:C	1:A:65:PRO:N	2	0.16
(1,456)	1:A:133:GLY:N	1:A:133:GLY:CA	1:A:133:GLY:C	1:A:134:TYR:N	19	0.15
(1,413)	1:A:109:PRO:N	1:A:109:PRO:CA	1:A:109:PRO:C	1:A:110:ASN:N	4	0.15
(1,410)	1:A:107:PRO:N	1:A:107:PRO:CA	1:A:107:PRO:C	1:A:108:GLY:N	16	0.15
(1,347)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:GLU:N	17	0.15
(1,336)	1:A:65:PRO:N	1:A:65:PRO:CA	1:A:65:PRO:C	1:A:66:SER:N	13	0.15
(1,221)	1:A:133:GLY:N	1:A:133:GLY:CA	1:A:133:GLY:C	1:A:134:TYR:N	19	0.15
(1,178)	1:A:109:PRO:N	1:A:109:PRO:CA	1:A:109:PRO:C	1:A:110:ASN:N	4	0.15
(1,175)	1:A:107:PRO:N	1:A:107:PRO:CA	1:A:107:PRO:C	1:A:108:GLY:N	16	0.15
(1,112)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:GLU:N	17	0.15
(1,101)	1:A:65:PRO:N	1:A:65:PRO:CA	1:A:65:PRO:C	1:A:66:SER:N	13	0.15
(1,85)	1:A:54:SER:C	1:A:55:LYS:N	1:A:55:LYS:CA	1:A:55:LYS:C	6	0.14
(1,401)	1:A:101:HIS:N	1:A:101:HIS:CA	1:A:101:HIS:C	1:A:102:VAL:N	15	0.14
(1,395)	1:A:98:HIS:N	1:A:98:HIS:CA	1:A:98:HIS:C	1:A:99:LEU:N	5	0.14
(1,342)	1:A:68:THR:N	1:A:68:THR:CA	1:A:68:THR:C	1:A:69:LYS:N	4	0.14
(1,336)	1:A:65:PRO:N	1:A:65:PRO:CA	1:A:65:PRO:C	1:A:66:SER:N	18	0.14
(1,320)	1:A:54:SER:C	1:A:55:LYS:N	1:A:55:LYS:CA	1:A:55:LYS:C	6	0.14
(1,166)	1:A:101:HIS:N	1:A:101:HIS:CA	1:A:101:HIS:C	1:A:102:VAL:N	15	0.14
(1,160)	1:A:98:HIS:N	1:A:98:HIS:CA	1:A:98:HIS:C	1:A:99:LEU:N	5	0.14
(1,107)	1:A:68:THR:N	1:A:68:THR:CA	1:A:68:THR:C	1:A:69:LYS:N	4	0.14
(1,101)	1:A:65:PRO:N	1:A:65:PRO:CA	1:A:65:PRO:C	1:A:66:SER:N	18	0.14
(1,87)	1:A:56:ASP:C	1:A:57:LYS:N	1:A:57:LYS:CA	1:A:57:LYS:C	16	0.13
(1,414)	1:A:109:PRO:C	1:A:110:ASN:N	1:A:110:ASN:CA	1:A:110:ASN:C	3	0.13
(1,322)	1:A:56:ASP:C	1:A:57:LYS:N	1:A:57:LYS:CA	1:A:57:LYS:C	16	0.13
(1,245)	1:A:7:GLU:N	1:A:7:GLU:CA	1:A:7:GLU:C	1:A:8:LYS:N	8	0.13
(1,179)	1:A:109:PRO:C	1:A:110:ASN:N	1:A:110:ASN:CA	1:A:110:ASN:C	3	0.13
(1,10)	1:A:7:GLU:N	1:A:7:GLU:CA	1:A:7:GLU:C	1:A:8:LYS:N	8	0.13
(1,56)	1:A:36:HIS:C	1:A:37:LYS:N	1:A:37:LYS:CA	1:A:37:LYS:C	9	0.12
(1,291)	1:A:36:HIS:C	1:A:37:LYS:N	1:A:37:LYS:CA	1:A:37:LYS:C	9	0.12
(1,397)	1:A:99:LEU:N	1:A:99:LEU:CA	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	19	0.11



Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	
(1,345)	1:A:70:PRO:N	1:A:70:PRO:CA	1:A:70:PRO:C	1:A:71:ILE:N	11	0.11
(1,162)	1:A:99:LEU:N	1:A:99:LEU:CA	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	19	0.11
(1,110)	1:A:70:PRO:N	1:A:70:PRO:CA	1:A:70:PRO:C	1:A:71:ILE:N	11	0.11
(1,49)	1:A:31:ASN:N	1:A:31:ASN:CA	1:A:31:ASN:C	1:A:32:GLU:N	16	0.09
(1,284)	1:A:31:ASN:N	1:A:31:ASN:CA	1:A:31:ASN:C	1:A:32:GLU:N	16	0.09
(1,51)	1:A:32:GLU:N	1:A:32:GLU:CA	1:A:32:GLU:C	1:A:33:TYR:N	17	0.08
(1,374)	1:A:87:ARG:C	1:A:88:THR:N	1:A:88:THR:CA	1:A:88:THR:C	10	0.08
(1,286)	1:A:32:GLU:N	1:A:32:GLU:CA	1:A:32:GLU:C	1:A:33:TYR:N	17	0.08
(1,254)	1:A:11:SER:C	1:A:12:LEU:N	1:A:12:LEU:CA	1:A:12:LEU:C	4	0.08
(1,19)	1:A:11:SER:C	1:A:12:LEU:N	1:A:12:LEU:CA	1:A:12:LEU:C	4	0.08
(1,139)	1:A:87:ARG:C	1:A:88:THR:N	1:A:88:THR:CA	1:A:88:THR:C	10	0.08
(1,78)	1:A:50:PRO:N	1:A:50:PRO:CA	1:A:50:PRO:C	1:A:51:LEU:N	17	0.07
(1,56)	1:A:36:HIS:C	1:A:37:LYS:N	1:A:37:LYS:CA	1:A:37:LYS:C	15	0.07
(1,347)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:GLU:N	19	0.07
(1,313)	1:A:50:PRO:N	1:A:50:PRO:CA	1:A:50:PRO:C	1:A:51:LEU:N	17	0.07
(1,291)	1:A:36:HIS:C	1:A:37:LYS:N	1:A:37:LYS:CA	1:A:37:LYS:C	15	0.07
(1,112)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:GLU:N	19	0.07
(1,380)	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	1:A:91:ARG:CA	1:A:91:ARG:C	15	0.06
(1,145)	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	1:A:91:ARG:CA	1:A:91:ARG:C	15	0.06
(1,84)	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	1:A:55:LYS:N	10	0.05
(1,467)	1:A:139:HIS:C	1:A:140:LEU:N	1:A:140:LEU:CA	1:A:140:LEU:C	7	0.05
(1,378)	1:A:89:GLU:C	1:A:90:VAL:N	1:A:90:VAL:CA	1:A:90:VAL:C	8	0.05
(1,319)	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	1:A:55:LYS:N	10	0.05
(1,232)	1:A:139:HIS:C	1:A:140:LEU:N	1:A:140:LEU:CA	1:A:140:LEU:C	7	0.05
(1,143)	1:A:89:GLU:C	1:A:90:VAL:N	1:A:90:VAL:CA	1:A:90:VAL:C	8	0.05
(1,97)	1:A:61:GLN:C	1:A:62:CYS:N	1:A:62:CYS:CA	1:A:62:CYS:C	10	0.04
(1,431)	1:A:119:ALA:N	1:A:119:ALA:CA	1:A:119:ALA:C	1:A:120:ALA:N	18	0.04
(1,380)	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	1:A:91:ARG:CA	1:A:91:ARG:C	7	0.04
(1,332)	1:A:61:GLN:C	1:A:62:CYS:N	1:A:62:CYS:CA	1:A:62:CYS:C	10	0.04
(1,196)	1:A:119:ALA:N	1:A:119:ALA:CA	1:A:119:ALA:C	1:A:120:ALA:N	18	0.04
(1,145)	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	1:A:91:ARG:CA	1:A:91:ARG:C	7	0.04
(1,98)	1:A:62:CYS:N	1:A:62:CYS:CA	1:A:62:CYS:C	1:A:63:GLY:N	6	0.03
(1,467)	1:A:139:HIS:C	1:A:140:LEU:N	1:A:140:LEU:CA	1:A:140:LEU:C	6	0.03
(1,333)	1:A:62:CYS:N	1:A:62:CYS:CA	1:A:62:CYS:C	1:A:63:GLY:N	6	0.03
(1,232)	1:A:139:HIS:C	1:A:140:LEU:N	1:A:140:LEU:CA	1:A:140:LEU:C	6	0.03
(1,404)	1:A:102:VAL:C	1:A:103:PHE:N	1:A:103:PHE:CA	1:A:103:PHE:C	15	0.01
(1,349)	1:A:73:GLU:N	1:A:73:GLU:CA	1:A:73:GLU:C	1:A:74:GLU:N	3	0.01
(1,169)	1:A:102:VAL:C	1:A:103:PHE:N	1:A:103:PHE:CA	1:A:103:PHE:C	15	0.01
(1,114)	1:A:73:GLU:N	1:A:73:GLU:CA	1:A:73:GLU:C	1:A:74:GLU:N	3	0.01

