

wwPDB NMR Structure Validation Summary Report (i)

Apr 2, 2020 – 11:22 AM CDT

PDB ID 2KW5

> Title Solution NMR Structure of the Slr1183 protein from Synechocystis sp. PCC

> > 6803, Northeast Structural Genomics Consortium Target SgR145

Authors : Rossi, P.; Forouhar, F.; Lee, H.; Lange, O.; Mao, B.; Lemak, A.; Maglaqui, M.;

> Belote, R.; Ciccosanti, C.; Foote, E.; Sahdev, S.; Acton, T.; Xiao, R.; Everett, J.; Baker, D.; Montelione, G.T.; Northeast Structural Genomics Consortium

(NESG)

Deposited on 2010-03-31

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)

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

PANAV Wang et al. (2010)

ShiftChecker 2.6.dev1v1.2

BMRB Restraints Analalysis Ideal geometry (proteins) Engh & Huber (2001)

Ideal geometry (DNA, RNA) Parkinson et al. (1996)

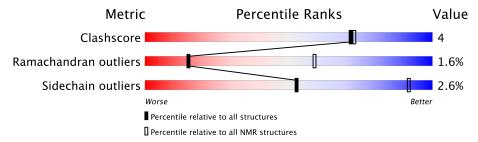
Validation Pipeline (wwPDB-VP) $2.6. ext{dev}1$

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 43%.

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 $(\# \mathrm{Entries})$ | $rac{	ext{NMR archive}}{	ext{(\#Entries)}}$ |
|-----------------------|---------------------------------------|--|
| 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 ch | ain | |
|-----|-------|--------|---------------|-----|-----|
| 1 | A | 202 | 66% | 5% | 28% |



2 Ensemble composition and analysis (i)

This entry contains 20 models. Model 16 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 as representative, based on the following criterion: *lowest energy*.

The following residues are included in the computation of the global validation metrics.

| Well-defined (core) protein residues | | | | | |
|--------------------------------------|--------------------------|-------------------|--------------|--|--|
| Well-defined core | Residue range (total) | Backbone RMSD (Å) | Medoid model | | |
| 1 | A:20-A:37, A:41-A:133, | 0.55 | 16 | | |
| | A:149-A:172, A:186-A:195 | | | | |
| | (145) | | | | |

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 5 clusters and 3 single-model clusters were found.

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



3 Entry composition (i)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 3141 atoms, of which 1560 are hydrogens and 0 are deuteriums.

• Molecule 1 is a protein called Slr1183 protein.

| Mol | Chain | Residues | Atoms | | | | Trace | | |
|-----|-------|----------|-------|------|------|-----|-------|---|---|
| 1 | Λ | 202 | Total | С | Н | N | О | S | 0 |
| 1 | A | 202 | 3141 | 1007 | 1560 | 269 | 301 | 4 | 0 |

There are 8 discrepancies between the modelled and reference sequences:

| Chain | Residue | Modelled | Actual | Comment | Reference |
|-------|---------|----------|--------|----------------|------------|
| A | 195 | LEU | - | EXPRESSION TAG | UNP P74712 |
| A | 196 | GLU | - | EXPRESSION TAG | UNP P74712 |
| A | 197 | HIS | - | EXPRESSION TAG | UNP P74712 |
| A | 198 | HIS | - | EXPRESSION TAG | UNP P74712 |
| A | 199 | HIS | - | EXPRESSION TAG | UNP P74712 |
| A | 200 | HIS | - | EXPRESSION TAG | UNP P74712 |
| A | 201 | HIS | - | EXPRESSION TAG | UNP P74712 |
| A | 202 | HIS | - | EXPRESSION TAG | UNP P74712 |

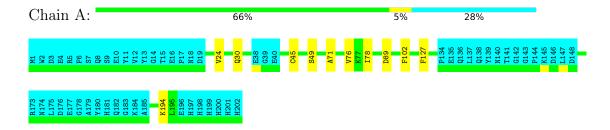


4 Residue-property plots (i)

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.

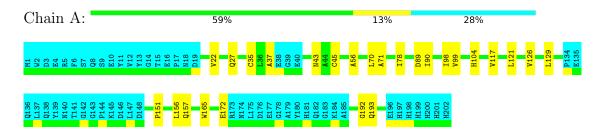
• Molecule 1: Slr1183 protein



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

The representative model is number 16. Colouring as in section 4.1 above.

• Molecule 1: Slr1183 protein





Refinement protocol and experimental data overview (i) 5



Of the 100 calculated structures, 20 were deposited, based on the following criterion: structures with the lowest energy.

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

| Software name | Classification | Version |
|---------------|-----------------------|---------|
| CNS | refinement | |
| CNS | structure solution | |
| CNS | geometry optimization | |
| CYANA | refinement | 3.0 |
| CYANA | geometry optimization | 3.0 |
| CYANA | structure solution | 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) | 2kw5_nmr.cif |
|--|--------------|
| Number of chemical shift lists | 1 |
| Total number of shifts | 1149 |
| Number of shifts mapped to atoms | 885 |
| Number of unparsed shifts | 176 |
| Number of shifts with mapping errors | 0 |
| Number of shifts with mapping warnings | 88 |
| Assignment completeness (well-defined parts) | 43% |

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.

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

6.2 Too-close contacts (i)

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

| Mol | Chain | Non-H | H(model) | H(added) | Clashes |
|-----|-------|-------|----------|----------|---------|
| 1 | A | 1105 | 1153 | 1152 | 9±2 |
| All | All | 22100 | 23060 | 23040 | 173 |

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

| Atom 1 | Atom-1 Atom-2 | | $Distance(\mathring{A})$ | ${f Models}$ | |
|-----------------|------------------|------|--------------------------|--------------|-------|
| Atom-1 | | | Distance(A) | Worst | Total |
| 1:A:45:CYS:HB3 | 1:A:67:ALA:HA | 0.68 | 1.65 | 18 | 2 |
| 1:A:151:PRO:HB2 | 1:A:156:LEU:HD11 | 0.66 | 1.66 | 10 | 3 |
| 1:A:45:CYS:SG | 1:A:67:ALA:HA | 0.64 | 2.32 | 14 | 7 |
| 1:A:37:ALA:HB2 | 1:A:58:ASP:HA | 0.64 | 1.69 | 2 | 2 |
| 1:A:35:CYS:SG | 1:A:54:VAL:HG13 | 0.64 | 2.33 | 4 | 1 |

6.3 Torsion angles (i)

6.3.1 Protein backbone (i)

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



| Mol | Chain | Analysed | Favoured | Allowed | Outliers | Perce | entiles |
|-----|-------|-----------------|---------------|-------------|------------|-------|---------|
| 1 | A | 145/202 (72%) | 133±2 (92±2%) | 10±2 (7±2%) | 2±1 (2±0%) | 15 | 59 |
| All | All | 2900/4040 (72%) | 2658 (92%) | 197 (7%) | 45 (2%) | 15 | 59 |

5 of 9 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 | 102 | PHE | 19 |
| 1 | A | 30 | GLN | 11 |
| 1 | A | 37 | ALA | 5 |
| 1 | A | 20 | PHE | 3 |
| 1 | A | 83 | SER | 3 |

6.3.2 Protein sidechains (i)

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

| Mol | Chain | Analysed | Rotameric | Outliers | Percentiles | | |
|-----|-------|-----------------|---------------|------------|-------------|----|--|
| 1 | A | 120/169 (71%) | 117±1 (97±1%) | 3±1 (3±1%) | 53 | 92 | |
| All | All | 2400/3380 (71%) | 2337 (97%) | 63 (3%) | 53 | 92 | |

5 of 18 unique residues with a non-rotameric sidechain are listed below. They are sorted by the frequency of occurrence in the ensemble.

| Mol | Chain | Res | V - | Models (Total) |
|-----|-------|-----|-----|----------------|
| 1 | A | 89 | ASP | 15 |
| 1 | A | 127 | PHE | 13 |
| 1 | A | 172 | GLU | 6 |
| 1 | A | 122 | LYS | 5 |
| 1 | A | 194 | LYS | 3 |

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 43% for the well-defined parts and 36% for the entire structure.

7.1 Chemical shift list 1

File name: 2kw5_nmr.cif

Chemical shift list name: nef_chemical_shift_list_tbl

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 | 1149 |
|---|------|
| Number of shifts mapped to atoms | 885 |
| Number of unparsed shifts | 176 |
| Number of shifts with mapping errors | 0 |
| Number of shifts with mapping warnings | 88 |
| Number of shift outliers (ShiftChecker) | 0 |

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

• Chemical shift has been reported more than once. First 5 (of 176) occurrences are reported below.

| Shift ID | Chain | Pec | Tune | Atom | | Shift Dat | a |
|----------|-------|-----|------|------|-------|-------------|-----------|
| | Chain | Res | Type | Atom | Value | Uncertainty | Ambiguity |
| 6 | A | 12 | VAL | HG1% | 0.716 | 0.030 | 1 |
| 7 | A | 12 | VAL | HG1% | 0.716 | 0.030 | 1 |
| 9 | A | 12 | VAL | HG2% | 0.752 | 0.030 | 1 |
| 10 | A | 12 | VAL | HG2% | 0.752 | 0.030 | 1 |
| 15 | A | 21 | LEU | HD1% | 0.774 | 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 88) occurrences are reported below.

| Chain | Dog | Type | Atom | | Shift Dat | a |
|-------|-----|------|------------------|-------|--------------------------|-----------|
| Chain | nes | Type | Atom | Value | Shift Dat Uncertainty | Ambiguity |
| A | 150 | LEU | $\mathrm{HD}2\%$ | 0.447 | 0.03 | 1 |
| A | 126 | VAL | HG2% | 0.928 | 0.03 | 1 |



Continued from previous page...

| Chain | Pag | Ттто | Atom | | Shift Dat | a |
|-------|-----|------|------|-------|--------------------------|-----------|
| Chain | nes | Туре | Atom | Value | Shift Dat Uncertainty | Ambiguity |
| A | 54 | VAL | HG1% | 0.955 | 0.03 | 1 |
| A | 64 | LEU | HD2% | 0.656 | 0.03 | 1 |
| A | 187 | LEU | HD1% | 0.701 | 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 |
|----------------------------|----------|-----------------------------------|-------------------------------------|
| $^{13}\mathrm{C}_{\alpha}$ | 165 | -0.33 ± 0.10 | None needed ($< 0.5 \text{ ppm}$) |
| $^{13}C_{\beta}$ | 151 | 0.17 ± 0.12 | None needed ($< 0.5 \text{ ppm}$) |
| ¹³ C′ | 163 | -0.22 ± 0.10 | None needed ($< 0.5 \text{ ppm}$) |
| ^{15}N | 156 | 0.01 ± 0.32 | None needed ($< 0.5 \text{ ppm}$) |

7.1.3 Completeness of resonance assignments (i)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the well-defined regions of the structure. The overall completeness is 43%, i.e. 760 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 1748. 35 out of 36 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

| | Total | $^{1}\mathrm{H}$ | $^{13}\mathbf{C}$ | $^{15}{ m N}$ |
|-----------|----------------|------------------|-------------------|---------------|
| Backbone | 546/713 (77%) | 133/284 (47%) | 280/290 (97%) | 133/139 (96%) |
| Sidechain | 210/925 (23%) | 0/537~(0%) | 210/355~(59%) | 0/33 (0%) |
| Aromatic | 4/110 (4%) | 2/58 (3%) | 0/48 (0%) | 2/4 (50%) |
| Overall | 760/1748 (43%) | 135/879 (15%) | 490/693 (71%) | 135/176 (77%) |

7.1.4 Statistically unusual chemical shifts (i)

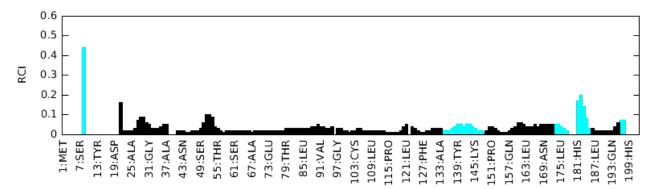
There are no statistically unusual chemical shifts.

7.1.5 Random Coil Index (RCI) plots (i)

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



Random coil index (RCI) for chain A:





8 Distance restraints analysis

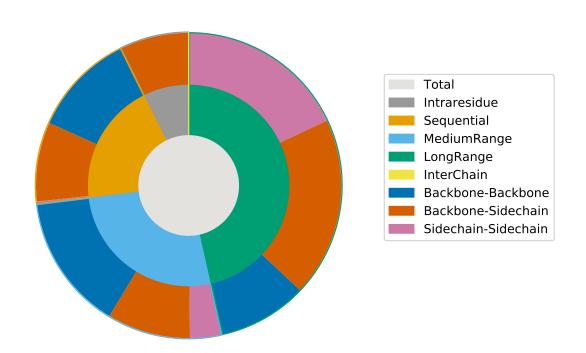
8.1 Distance restraints summary

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

| Dogtrointa turo | $B-B^1(H^4)$ | $B-S^2(H^4)$ | C C3(TT4) | Total | | |
|--|---------------------------|---------------------------|--------------|--------------|--------|--------|
| Restraints type | D-D (I 1) | D-S -(H -) | $S-S^3(H^4)$ | $Total(H^4)$ | RR^5 | $\%^6$ |
| Intraresidue ($ i-j =0$) | 0(0) | 82(0) | 0(0) | 82(0) | 0.4 | 7.3 |
| Sequential (i-j =1) | 123(0) | 94(0) | 3(0) | 220(0) | 1.1 | 19.6 |
| Medium range ($ i-j >1$ and $ i-j <5$) | 161(58) | 99(0) | 38(0) | 298(58) | 1.5 | 26.6 |
| Long range (i-j ≥5) | 106(34) | 213(0) | 202(0) | 521(34) | 2.7 | 46.5 |
| Inter chain | 0(0) | 0(0) | 0(0) | 0(0) | 0.0 | 0.0 |
| Total | 390(92) | 488(0) | 243(0) | 1121(92) | 5.8 | 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





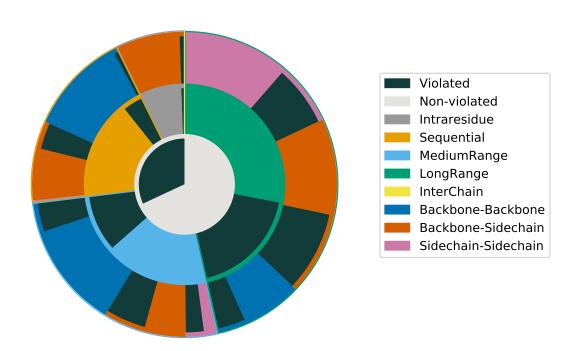
8.2 Distance violations summary

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-5 (%) | S-S'(%) | $Total(\%^4)$ | RR^5 | $\%^6$ |
| Intraresidue ($ i-j =0$) | 0(0.0) | 6(7.3) | 0(0.0) | 6(7.3) | 0.0 | 1.7 |
| Sequential (i-j =1) | 6(4.9) | 32(34.0) | 0(0.0) | 38(17.3) | 0.2 | 10.6 |
| Medium range ($ i-j >1$ and $ i-j <5$) | 36(22.4) | 49(49.5) | 22(57.9) | 107(35.9) | 0.6 | 29.9 |
| Long range (i-j ≥5) | 35(33.0) | 98(46.0) | 74(36.6) | 207(39.7) | 1.1 | 57.8 |
| Inter chain | 0(0.0) | 0(0.0) | 0(0.0) | 0(0.0) | 0.0 | 0.0 |
| Total | 77(19.7) | 185(37.9) | 96(39.5) | 358(31.9) | 1.8 | 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





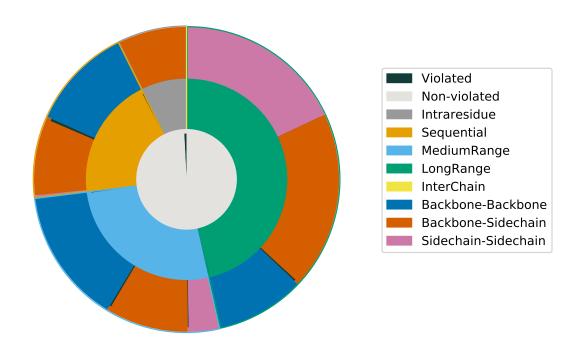
8.3 Consistent distance violations summary

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

| Destroints true | $B-B^{1}(\%^{4})$ | $B-S^2(\%^4)$ | $S-S^3(\%^4)$ | Total | | |
|--|-------------------|----------------|---------------|---------------|--------|--------|
| Restraints type | D-D (%) | D-5 (%) | S-S'(%) | $Total(\%^4)$ | RR^5 | $\%^6$ |
| Intraresidue ($ i-j =0$) | 0(0.0) | 0(0.0) | 0(0.0) | 0(0.0) | 0.0 | 0.0 |
| Sequential (i-j =1) | 0(0.0) | 3(3.2) | 0(0.0) | 3(1.4) | 0.0 | 33.3 |
| Medium range ($ i-j >1$ and $ i-j <5$) | 0(0.0) | 2(2.0) | 1(2.6) | 3(1.0) | 0.0 | 33.3 |
| Long range (i-j ≥5) | 1(0.9) | 2(0.9) | 0(0.0) | 3(0.6) | 0.0 | 33.3 |
| Inter chain | 0(0.0) | 0(0.0) | 0(0.0) | 0(0.0) | 0.0 | 0.0 |
| Total | 1(0.3) | 7(1.4) | 1(0.4) | 9(0.8) | 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 | 97.3 | 0.2 |
| 0.2-0.5 | 13.9 | 0.49 |
| 0.5-1.0 | 0.2 | 1.0 |
| 1.0-2.0 | 0.9 | 1.78 |
| 2.0-5.0 | 0.1 | 2.2 |
| 5.0< | None | None |

8.5 Distance violations in ensemble

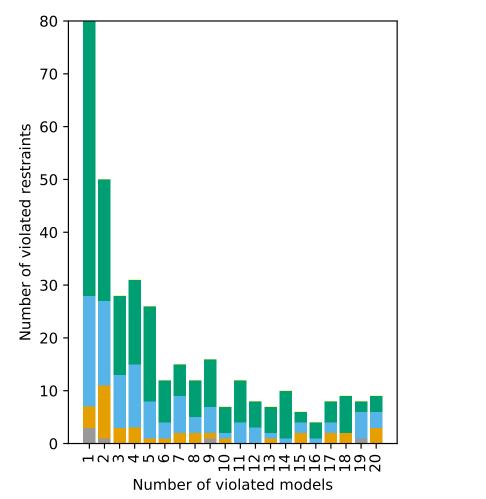
The restraints are grouped based on the number of violated models and listed here.

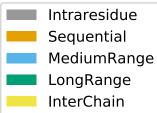
| I | | f violat | ted re | strair | nts | No. of violated models |
|--------|--------|----------|--------|--------|----------------------|------------------------|
| IR^1 | SQ^2 | MR^3 | LR^4 | IC^5 | Total | No. of violated models |
| 3 | 4 | 21 | 52 | 0 | 80 | 1 |
| 1 | 10 | 16 | 23 | 0 | 50 | 2 |
| 0 | 3 | 10 | 15 | 0 | 28 | 3 |
| 0 | 3 | 12 | 16 | 0 | 31 | 4 |
| 0 | 1 | 7 | 18 | 0 | 26 | 5 |
| 0 | 1 | 3 | 8 | 0 | 12 | 6 |
| 0 | 2 | 7 | 6 | 0 | 15 | 7 |
| 0 | 2 | 3 | 7 | 0 | 12 | 8 |
| 1 | 1 | 5 | 9 | 0 | 16 | 9 |
| 0 | 1 | 1 | 5 | 0 | 7 | 10 |
| 0 | 0 | 4 | 8 | 0 | 12 | 11 |
| 0 | 0 | 3 | 5 | 0 | 8 | 12 |
| 0 | 1 | 1 | 5 | 0 | 7 | 13 |
| 0 | 0 | 1 | 9 | 0 | 10 | 14 |
| 0 | 2 | 2 | 2 | 0 | 6 | 15 |
| 0 | 0 | 1 | 3 | 0 | 4 | 16 |
| 0 | 2 | 2 | 4 | 0 | 8 | 17 |
| 0 | 2 | 0 | 7 | 0 | 9 | 18 |
| 1 | 0 | 5 | 2 | 0 | 8 | 19 |
| 0 | 3 | 3 | 3 | 0 | 9 | 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





76 intraresidue restraints, 182 sequential restraints, 191 medium range restraints,314 long range restraints and 0 inter chain restraints are not violated. In total, 763 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 | | No. of violations | | | | | Mean (Å) | Max (Å) |
|----------|--------|-------------------|-----------|--------|--------|-------|----------|---------|
| | IR^1 | SQ^2 | $ m MR^3$ | LR^4 | IC^5 | Total | Mean (A) | Max (A) |
| 1 | 2 | 16 | 34 | 58 | 0 | 110 | 0.12 | 1.64 |
| 2 | 2 | 14 | 29 | 68 | 0 | 113 | 0.11 | 1.65 |
| 3 | 2 | 12 | 29 | 66 | 0 | 109 | 0.11 | 1.52 |
| 4 | 3 | 13 | 36 | 71 | 0 | 123 | 0.11 | 1.48 |
| 5 | 1 | 18 | 31 | 62 | 0 | 112 | 0.11 | 1.28 |



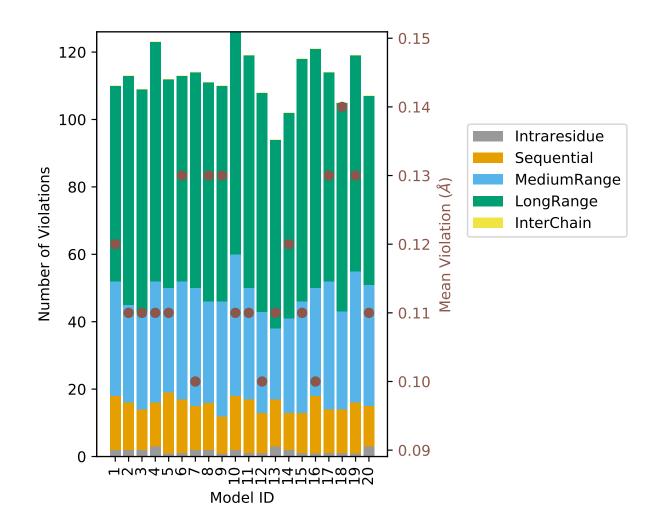
Continued from previous page...

| Model ID | | | o. of v | iolati | ons | | Mean (Å) | Max (Å) |
|-----------|--------|--------|---------|--------|--------|-------|----------|---------|
| Wiodei 1D | IR^1 | SQ^2 | MR^3 | LR^4 | IC^5 | Total | Mean (A) | Max (A) |
| 6 | 1 | 16 | 35 | 61 | 0 | 113 | 0.13 | 1.36 |
| 7 | 2 | 13 | 35 | 64 | 0 | 114 | 0.1 | 0.4 |
| 8 | 2 | 14 | 30 | 65 | 0 | 111 | 0.13 | 2.2 |
| 9 | 1 | 11 | 34 | 64 | 0 | 110 | 0.13 | 1.78 |
| 10 | 2 | 16 | 42 | 66 | 0 | 126 | 0.11 | 1.35 |
| 11 | 1 | 16 | 33 | 69 | 0 | 119 | 0.11 | 1.59 |
| 12 | 1 | 12 | 30 | 65 | 0 | 108 | 0.1 | 1.27 |
| 13 | 3 | 14 | 21 | 56 | 0 | 94 | 0.11 | 1.26 |
| 14 | 2 | 11 | 28 | 61 | 0 | 102 | 0.12 | 1.69 |
| 15 | 1 | 12 | 33 | 72 | 0 | 118 | 0.11 | 1.51 |
| 16 | 1 | 17 | 32 | 71 | 0 | 121 | 0.1 | 0.82 |
| 17 | 1 | 13 | 38 | 62 | 0 | 114 | 0.13 | 1.75 |
| 18 | 1 | 13 | 29 | 62 | 0 | 105 | 0.14 | 1.41 |
| 19 | 1 | 15 | 39 | 64 | 0 | 119 | 0.13 | 1.54 |
| 20 | 3 | 12 | 36 | 56 | 0 | 107 | 0.11 | 0.43 |

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



8.6.1 Bar graph: Violations in each model

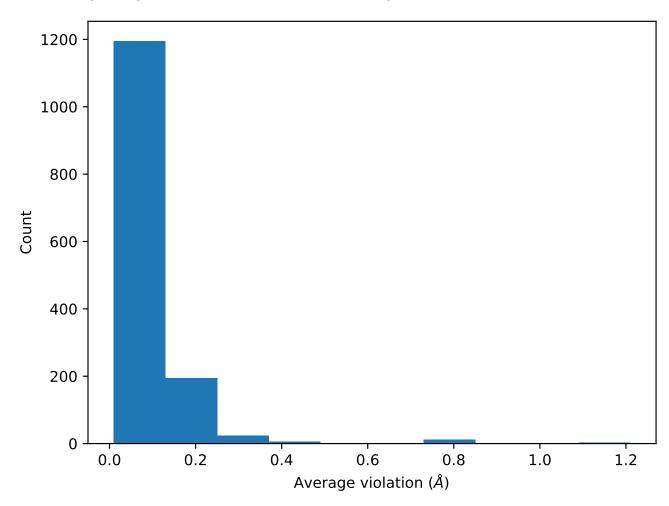




8.7 Most violated distance restraints

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) |
|---------|------------------|------------------|--------|----------|---------|
| (1,964) | 1:A:116:LYS:H | 1:A:117:VAL:HG21 | 20 | 0.12 | 0.19 |
| (1,964) | 1:A:116:LYS:H | 1:A:117:VAL:HG22 | 20 | 0.12 | 0.19 |
| (1,964) | 1:A:116:LYS:H | 1:A:117:VAL:HG23 | 20 | 0.12 | 0.19 |
| (1,914) | 1:A:147:LEU:HD11 | 1:A:148:ASP:H | 20 | 0.35 | 0.49 |
| (1,914) | 1:A:147:LEU:HD12 | 1:A:148:ASP:H | 20 | 0.35 | 0.49 |
| (1,914) | 1:A:147:LEU:HD13 | 1:A:148:ASP:H | 20 | 0.35 | 0.49 |



Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models | Mean (Å) | Max (Å) |
|---------|------------------|------------------|--------|----------|---------|
| (1,854) | 1:A:131:GLY:H | 1:A:153:LEU:HD21 | 20 | 0.17 | 1.39 |
| (1,854) | 1:A:131:GLY:H | 1:A:153:LEU:HD22 | 20 | 0.17 | 1.39 |
| (1,854) | 1:A:131:GLY:H | 1:A:153:LEU:HD23 | 20 | 0.17 | 1.39 |
| (1,827) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:36:LEU:H | 20 | 0.14 | 0.24 |
| (1,827) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:36:LEU:H | 20 | 0.14 | 0.24 |
| (1,827) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:36:LEU:H | 20 | 0.14 | 0.24 |
| (1,596) | 1:A:164:ASN:H | 1:A:195:LEU:H | 20 | 0.14 | 0.3 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD11 | 1:A:190:LEU:HD11 | 20 | 0.11 | 0.21 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD11 | 1:A:190:LEU:HD12 | 20 | 0.11 | 0.21 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD11 | 1:A:190:LEU:HD13 | 20 | 0.11 | 0.21 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD12 | 1:A:190:LEU:HD11 | 20 | 0.11 | 0.21 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD12 | 1:A:190:LEU:HD12 | 20 | 0.11 | 0.21 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD12 | 1:A:190:LEU:HD13 | 20 | 0.11 | 0.21 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD13 | 1:A:190:LEU:HD11 | 20 | 0.11 | 0.21 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD13 | 1:A:190:LEU:HD12 | 20 | 0.11 | 0.21 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD13 | 1:A:190:LEU:HD13 | 20 | 0.11 | 0.21 |
| (1,295) | 1:A:153:LEU:H | 1:A:190:LEU:HD21 | 20 | 0.12 | 0.2 |
| (1,295) | 1:A:153:LEU:H | 1:A:190:LEU:HD22 | 20 | 0.12 | 0.2 |
| (1,295) | 1:A:153:LEU:H | 1:A:190:LEU:HD23 | 20 | 0.12 | 0.2 |
| (1,266) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:118:TYR:H | 20 | 0.22 | 0.37 |
| (1,266) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:118:TYR:H | 20 | 0.22 | 0.37 |
| (1,266) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:118:TYR:H | 20 | 0.22 | 0.37 |
| (1,225) | 1:A:163:LEU:HD11 | 1:A:165:TRP:H | 20 | 0.38 | 0.45 |
| (1,225) | 1:A:163:LEU:HD12 | 1:A:165:TRP:H | 20 | 0.38 | 0.45 |
| (1,225) | 1:A:163:LEU:HD13 | 1:A:165:TRP:H | 20 | 0.38 | 0.45 |
| (1,988) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:H | 19 | 0.1 | 0.28 |
| (1,988) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:H | 19 | 0.1 | 0.28 |
| (1,988) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:H | 19 | 0.1 | 0.28 |
| (1,936) | 1:A:153:LEU:HD21 | 1:A:157:GLN:H | 19 | 0.17 | 0.26 |
| (1,936) | 1:A:153:LEU:HD22 | 1:A:157:GLN:H | 19 | 0.17 | 0.26 |
| (1,936) | 1:A:153:LEU:HD23 | 1:A:157:GLN:H | 19 | 0.17 | 0.26 |
| (1,897) | 1:A:163:LEU:HD21 | 1:A:193:GLN:H | 19 | 0.12 | 0.24 |
| (1,897) | 1:A:163:LEU:HD22 | 1:A:193:GLN:H | 19 | 0.12 | 0.24 |
| (1,897) | 1:A:163:LEU:HD23 | 1:A:193:GLN:H | 19 | 0.12 | 0.24 |
| (1,885) | 1:A:50:LEU:H | 1:A:54:VAL:HG21 | 19 | 0.1 | 0.17 |
| (1,885) | 1:A:50:LEU:H | 1:A:54:VAL:HG22 | 19 | 0.1 | 0.17 |
| (1,885) | 1:A:50:LEU:H | 1:A:54:VAL:HG23 | 19 | 0.1 | 0.17 |
| (1,229) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:147:LEU:HD21 | 19 | 0.16 | 0.61 |
| (1,229) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:147:LEU:HD22 | 19 | 0.16 | 0.61 |
| (1,229) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:147:LEU:HD23 | 19 | 0.16 | 0.61 |
| (1,205) | 1:A:24:VAL:HG11 | 1:A:192:GLY:H | 19 | 0.07 | 0.15 |
| (1,205) | 1:A:24:VAL:HG12 | 1:A:192:GLY:H | 19 | 0.07 | 0.15 |



Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models | Mean (Å) | Max (Å) |
|----------|------------------|------------------|--------|----------|---------|
| (1,205) | 1:A:24:VAL:HG13 | 1:A:192:GLY:H | 19 | 0.07 | 0.15 |
| (1,1084) | 1:A:154:GLU:O | 1:A:158:SER:H | 19 | 0.18 | 0.26 |
| (1,1070) | 1:A:108:SER:O | 1:A:112:GLN:H | 19 | 0.14 | 0.3 |
| (1,994) | 1:A:79:THR:H | 1:A:54:VAL:H | 18 | 0.13 | 0.33 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:117:VAL:HG11 | 18 | 0.26 | 0.36 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:117:VAL:HG12 | 18 | 0.26 | 0.36 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:117:VAL:HG13 | 18 | 0.26 | 0.36 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:117:VAL:HG11 | 18 | 0.26 | 0.36 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:117:VAL:HG12 | 18 | 0.26 | 0.36 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:117:VAL:HG13 | 18 | 0.26 | 0.36 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:117:VAL:HG11 | 18 | 0.26 | 0.36 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:117:VAL:HG12 | 18 | 0.26 | 0.36 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:117:VAL:HG13 | 18 | 0.26 | 0.36 |
| (1,467) | 1:A:62:VAL:HG11 | 1:A:63:GLY:H | 18 | 0.07 | 0.14 |
| (1,467) | 1:A:62:VAL:HG12 | 1:A:63:GLY:H | 18 | 0.07 | 0.14 |
| (1,467) | 1:A:62:VAL:HG13 | 1:A:63:GLY:H | 18 | 0.07 | 0.14 |
| (1,399) | 1:A:34:LEU:H | 1:A:99:VAL:HG21 | 18 | 0.09 | 0.2 |
| (1,399) | 1:A:34:LEU:H | 1:A:99:VAL:HG22 | 18 | 0.09 | 0.2 |
| (1,399) | 1:A:34:LEU:H | 1:A:99:VAL:HG23 | 18 | 0.09 | 0.2 |
| (1,296) | 1:A:137:LEU:HD11 | 1:A:149:LEU:H | 18 | 0.21 | 0.38 |
| (1,296) | 1:A:137:LEU:HD12 | 1:A:149:LEU:H | 18 | 0.21 | 0.38 |
| (1,296) | 1:A:137:LEU:HD13 | 1:A:149:LEU:H | 18 | 0.21 | 0.38 |
| (1,217) | 1:A:163:LEU:HD11 | 1:A:195:LEU:H | 18 | 0.13 | 0.19 |
| (1,217) | 1:A:163:LEU:HD12 | 1:A:195:LEU:H | 18 | 0.13 | 0.19 |
| (1,217) | 1:A:163:LEU:HD13 | 1:A:195:LEU:H | 18 | 0.13 | 0.19 |
| (1,174) | 1:A:61:SER:H | 1:A:62:VAL:HG11 | 18 | 0.1 | 0.15 |
| (1,174) | 1:A:61:SER:H | 1:A:62:VAL:HG12 | 18 | 0.1 | 0.15 |
| (1,174) | 1:A:61:SER:H | 1:A:62:VAL:HG13 | 18 | 0.1 | 0.15 |
| (1,1099) | 1:A:124:GLY:O | 1:A:98:ILE:H | 18 | 0.14 | 0.35 |
| (1,1003) | 1:A:59:GLN:H | 1:A:37:ALA:H | 18 | 0.16 | 0.44 |
| (1,635) | 1:A:113:LEU:H | 1:A:114:TYR:H | 17 | 0.06 | 0.11 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD21 | 17 | 0.18 | 0.27 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD22 | 17 | 0.18 | 0.27 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD23 | 17 | 0.18 | 0.27 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD21 | 17 | 0.18 | 0.27 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD22 | 17 | 0.18 | 0.27 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD23 | 17 | 0.18 | 0.27 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD21 | 17 | 0.18 | 0.27 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD22 | 17 | 0.18 | 0.27 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD23 | 17 | 0.18 | 0.27 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD11 | 1:A:54:VAL:HG21 | 17 | 0.13 | 0.23 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD11 | 1:A:54:VAL:HG22 | 17 | 0.13 | 0.23 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models | Mean (Å) | Max (Å) |
|----------|------------------|------------------|--------|----------|---------|
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD11 | 1:A:54:VAL:HG23 | 17 | 0.13 | 0.23 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD12 | 1:A:54:VAL:HG21 | 17 | 0.13 | 0.23 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD12 | 1:A:54:VAL:HG22 | 17 | 0.13 | 0.23 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD12 | 1:A:54:VAL:HG23 | 17 | 0.13 | 0.23 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD13 | 1:A:54:VAL:HG21 | 17 | 0.13 | 0.23 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD13 | 1:A:54:VAL:HG22 | 17 | 0.13 | 0.23 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD13 | 1:A:54:VAL:HG23 | 17 | 0.13 | 0.23 |
| (1,507) | 1:A:37:ALA:H | 1:A:57:VAL:HG21 | 17 | 0.18 | 0.37 |
| (1,507) | 1:A:37:ALA:H | 1:A:57:VAL:HG22 | 17 | 0.18 | 0.37 |
| (1,507) | 1:A:37:ALA:H | 1:A:57:VAL:HG23 | 17 | 0.18 | 0.37 |
| (1,263) | 1:A:163:LEU:HD11 | 1:A:164:ASN:H | 17 | 0.05 | 0.12 |
| (1,263) | 1:A:163:LEU:HD12 | 1:A:164:ASN:H | 17 | 0.05 | 0.12 |
| (1,263) | 1:A:163:LEU:HD13 | 1:A:164:ASN:H | 17 | 0.05 | 0.12 |
| (1,232) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:H | 17 | 1.21 | 1.78 |
| (1,232) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:H | 17 | 1.21 | 1.78 |
| (1,232) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:H | 17 | 1.21 | 1.78 |
| (1,201) | 1:A:157:GLN:H | 1:A:190:LEU:HD21 | 17 | 0.08 | 0.2 |
| (1,201) | 1:A:157:GLN:H | 1:A:190:LEU:HD22 | 17 | 0.08 | 0.2 |
| (1,201) | 1:A:157:GLN:H | 1:A:190:LEU:HD23 | 17 | 0.08 | 0.2 |
| (1,1034) | 1:A:23:SER:O | 1:A:27:GLN:H | 17 | 0.14 | 0.29 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD21 | 1:A:150:LEU:HD21 | 16 | 0.13 | 0.27 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD21 | 1:A:150:LEU:HD22 | 16 | 0.13 | 0.27 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD21 | 1:A:150:LEU:HD23 | 16 | 0.13 | 0.27 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD22 | 1:A:150:LEU:HD21 | 16 | 0.13 | 0.27 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD22 | 1:A:150:LEU:HD22 | 16 | 0.13 | 0.27 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD22 | 1:A:150:LEU:HD23 | 16 | 0.13 | 0.27 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD23 | 1:A:150:LEU:HD21 | 16 | 0.13 | 0.27 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD23 | 1:A:150:LEU:HD22 | 16 | 0.13 | 0.27 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD23 | | 16 | 0.13 | 0.27 |
| (1,570) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:145:LYS:H | 16 | 0.12 | 0.29 |
| (1,570) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:145:LYS:H | 16 | 0.12 | 0.29 |
| (1,570) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:145:LYS:H | 16 | 0.12 | 0.29 |
| (1,346) | 1:A:175:LEU:HD21 | 1:A:184:LYS:H | 16 | 0.12 | 0.33 |
| (1,346) | 1:A:175:LEU:HD22 | 1:A:184:LYS:H | 16 | 0.12 | 0.33 |
| (1,346) | 1:A:175:LEU:HD23 | 1:A:184:LYS:H | 16 | 0.12 | 0.33 |
| (1,1017) | 1:A:101:ILE:HA | 1:A:128:ILE:H | 16 | 0.08 | 0.2 |
| (1,913) | 1:A:137:LEU:HD11 | 1:A:148:ASP:H | 15 | 0.42 | 0.82 |
| (1,913) | 1:A:137:LEU:HD12 | 1:A:148:ASP:H | 15 | 0.42 | 0.82 |
| (1,913) | 1:A:137:LEU:HD13 | 1:A:148:ASP:H | 15 | 0.42 | 0.82 |
| (1,809) | 1:A:91:VAL:HG11 | 1:A:92:ALA:H | 15 | 0.11 | 0.19 |
| (1,809) | 1:A:91:VAL:HG12 | 1:A:92:ALA:H | 15 | 0.11 | 0.19 |
| (1,809) | 1:A:91:VAL:HG13 | 1:A:92:ALA:H | 15 | 0.11 | 0.19 |



Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models | Mean (Å) | Max (Å) |
|---------|------------------|------------------|--------|----------|---------|
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD11 | 1:A:117:VAL:HG11 | 15 | 0.06 | 0.11 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD11 | 1:A:117:VAL:HG12 | 15 | 0.06 | 0.11 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD11 | 1:A:117:VAL:HG13 | 15 | 0.06 | 0.11 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD12 | 1:A:117:VAL:HG11 | 15 | 0.06 | 0.11 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD12 | 1:A:117:VAL:HG12 | 15 | 0.06 | 0.11 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD12 | 1:A:117:VAL:HG13 | 15 | 0.06 | 0.11 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD13 | 1:A:117:VAL:HG11 | 15 | 0.06 | 0.11 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD13 | 1:A:117:VAL:HG12 | 15 | 0.06 | 0.11 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD13 | 1:A:117:VAL:HG13 | 15 | 0.06 | 0.11 |
| (1,453) | 1:A:118:TYR:H | 1:A:121:LEU:HD21 | 15 | 0.13 | 0.34 |
| (1,453) | 1:A:118:TYR:H | 1:A:121:LEU:HD22 | 15 | 0.13 | 0.34 |
| (1,453) | 1:A:118:TYR:H | 1:A:121:LEU:HD23 | 15 | 0.13 | 0.34 |
| (1,382) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:167:ILE:HD11 | 15 | 0.12 | 0.29 |
| (1,382) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:167:ILE:HD12 | 15 | 0.12 | 0.29 |
| (1,382) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:167:ILE:HD13 | 15 | 0.12 | 0.29 |
| (1,334) | 1:A:90:ILE:H | 1:A:91:VAL:HG21 | 15 | 0.13 | 0.28 |
| (1,334) | 1:A:90:ILE:H | 1:A:91:VAL:HG22 | 15 | 0.13 | 0.28 |
| (1,334) | 1:A:90:ILE:H | 1:A:91:VAL:HG23 | 15 | 0.13 | 0.28 |
| (1,902) | 1:A:153:LEU:HD11 | 1:A:169:ASN:H | 14 | 0.07 | 0.22 |
| (1,902) | 1:A:153:LEU:HD12 | 1:A:169:ASN:H | 14 | 0.07 | 0.22 |
| (1,902) | 1:A:153:LEU:HD13 | 1:A:169:ASN:H | 14 | 0.07 | 0.22 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD21 | 1:A:99:VAL:HG21 | 14 | 0.07 | 0.1 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD21 | 1:A:99:VAL:HG22 | 14 | 0.07 | 0.1 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD21 | 1:A:99:VAL:HG23 | 14 | 0.07 | 0.1 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD22 | 1:A:99:VAL:HG21 | 14 | 0.07 | 0.1 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD22 | 1:A:99:VAL:HG22 | 14 | 0.07 | 0.1 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD22 | 1:A:99:VAL:HG23 | 14 | 0.07 | 0.1 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD23 | 1:A:99:VAL:HG21 | 14 | 0.07 | 0.1 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD23 | 1:A:99:VAL:HG22 | 14 | 0.07 | 0.1 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD23 | 1:A:99:VAL:HG23 | 14 | 0.07 | 0.1 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD11 | 14 | 0.16 | 0.3 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD12 | 14 | 0.16 | 0.3 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD13 | 14 | 0.16 | 0.3 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD11 | 14 | 0.16 | 0.3 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD12 | 14 | 0.16 | 0.3 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD13 | 14 | 0.16 | 0.3 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD11 | 14 | 0.16 | 0.3 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD12 | 14 | 0.16 | 0.3 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD13 | 14 | 0.16 | 0.3 |
| (1,579) | 1:A:169:ASN:H | 1:A:189:GLN:H | 14 | 0.05 | 0.09 |
| (1,535) | 1:A:74:LYS:H | 1:A:76:VAL:HG11 | 14 | 0.1 | 0.25 |
| (1,535) | 1:A:74:LYS:H | 1:A:76:VAL:HG12 | 14 | 0.1 | 0.25 |



Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models | Mean (Å) | Max (Å) |
|----------|------------------|------------------|--------|----------|---------|
| (1,535) | 1:A:74:LYS:H | 1:A:76:VAL:HG13 | 14 | 0.1 | 0.25 |
| (1,259) | 1:A:71:ALA:H | 1:A:78:ILE:HD11 | 14 | 0.11 | 0.21 |
| (1,259) | 1:A:71:ALA:H | 1:A:78:ILE:HD12 | 14 | 0.11 | 0.21 |
| (1,259) | 1:A:71:ALA:H | 1:A:78:ILE:HD13 | 14 | 0.11 | 0.21 |
| (1,250) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:84:ASN:H | 14 | 0.16 | 0.27 |
| (1,250) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:84:ASN:H | 14 | 0.16 | 0.27 |
| (1,250) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:84:ASN:H | 14 | 0.16 | 0.27 |
| (1,123) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:128:ILE:HD11 | 14 | 0.06 | 0.13 |
| (1,123) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:128:ILE:HD12 | 14 | 0.06 | 0.13 |
| (1,123) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:128:ILE:HD13 | 14 | 0.06 | 0.13 |
| (1,1113) | 1:A:127:PHE:H | 1:A:192:GLY:O | 14 | 0.11 | 0.19 |
| (1,1105) | 1:A:102:PHE:H | 1:A:128:ILE:O | 14 | 0.13 | 0.27 |
| (1,841) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:146:ASP:H | 13 | 0.19 | 0.32 |
| (1,841) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:146:ASP:H | 13 | 0.19 | 0.32 |
| (1,841) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:146:ASP:H | 13 | 0.19 | 0.32 |
| (1,811) | 1:A:146:ASP:H | 1:A:147:LEU:HD11 | 13 | 0.14 | 0.27 |
| (1,811) | 1:A:146:ASP:H | 1:A:147:LEU:HD12 | 13 | 0.14 | 0.27 |
| (1,811) | 1:A:146:ASP:H | 1:A:147:LEU:HD13 | 13 | 0.14 | 0.27 |
| (1,810) | 1:A:136:GLN:H | 1:A:147:LEU:HD11 | 13 | 0.11 | 0.23 |
| (1,810) | 1:A:136:GLN:H | 1:A:147:LEU:HD12 | 13 | 0.11 | 0.23 |
| (1,810) | 1:A:136:GLN:H | 1:A:147:LEU:HD13 | 13 | 0.11 | 0.23 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD21 | 1:A:195:LEU:HD21 | 13 | 0.12 | 0.23 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD21 | 1:A:195:LEU:HD22 | 13 | 0.12 | 0.23 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD21 | 1:A:195:LEU:HD23 | 13 | 0.12 | 0.23 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD22 | 1:A:195:LEU:HD21 | 13 | 0.12 | 0.23 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD22 | 1:A:195:LEU:HD22 | 13 | 0.12 | 0.23 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD22 | 1:A:195:LEU:HD23 | 13 | 0.12 | 0.23 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD23 | 1:A:195:LEU:HD21 | 13 | 0.12 | 0.23 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD23 | 1:A:195:LEU:HD22 | 13 | 0.12 | 0.23 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD23 | 1:A:195:LEU:HD23 | 13 | 0.12 | 0.23 |
| (1,226) | 1:A:57:VAL:HG11 | 1:A:82:GLN:H | 13 | 0.13 | 0.27 |
| (1,226) | 1:A:57:VAL:HG12 | 1:A:82:GLN:H | 13 | 0.13 | 0.27 |
| (1,226) | 1:A:57:VAL:HG13 | 1:A:82:GLN:H | 13 | 0.13 | 0.27 |
| (1,1046) | 1:A:46:PHE:O | 1:A:50:LEU:H | 13 | 0.05 | 0.13 |
| (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:85:LEU:HD21 | 13 | 0.09 | 0.18 |
| (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:85:LEU:HD22 | 13 | 0.09 | 0.18 |
| (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:85:LEU:HD23 | 13 | 0.09 | 0.18 |
| (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:85:LEU:HD21 | 13 | 0.09 | 0.18 |
| (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:85:LEU:HD22 | 13 | 0.09 | 0.18 |
| (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:85:LEU:HD23 | 13 | 0.09 | 0.18 |
| (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:85:LEU:HD21 | 13 | 0.09 | 0.18 |
| (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:85:LEU:HD22 | 13 | 0.09 | 0.18 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models | Mean (Å) | Max (Å) |
|----------|------------------|------------------|--------|----------|---------|
| (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:85:LEU:HD23 | 13 | 0.09 | 0.18 |
| (1,891) | 1:A:125:GLY:H | 1:A:163:LEU:HD21 | 12 | 0.09 | 0.18 |
| (1,891) | 1:A:125:GLY:H | 1:A:163:LEU:HD22 | 12 | 0.09 | 0.18 |
| (1,891) | 1:A:125:GLY:H | 1:A:163:LEU:HD23 | 12 | 0.09 | 0.18 |
| (1,848) | 1:A:91:VAL:HG21 | 1:A:95:TRP:HE1 | 12 | 0.13 | 0.25 |
| (1,848) | 1:A:91:VAL:HG22 | 1:A:95:TRP:HE1 | 12 | 0.13 | 0.25 |
| (1,848) | 1:A:91:VAL:HG23 | 1:A:95:TRP:HE1 | 12 | 0.13 | 0.25 |
| (1,806) | 1:A:166:LEU:HD21 | 1:A:193:GLN:H | 12 | 0.07 | 0.19 |
| (1,806) | 1:A:166:LEU:HD22 | 1:A:193:GLN:H | 12 | 0.07 | 0.19 |
| (1,806) | 1:A:166:LEU:HD23 | 1:A:193:GLN:H | 12 | 0.07 | 0.19 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD11 | 1:A:78:ILE:HD11 | 12 | 0.15 | 0.23 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD11 | 1:A:78:ILE:HD12 | 12 | 0.15 | 0.23 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD11 | 1:A:78:ILE:HD13 | 12 | 0.15 | 0.23 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD12 | 1:A:78:ILE:HD11 | 12 | 0.15 | 0.23 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD12 | 1:A:78:ILE:HD12 | 12 | 0.15 | 0.23 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD12 | 1:A:78:ILE:HD13 | 12 | 0.15 | 0.23 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD13 | 1:A:78:ILE:HD11 | 12 | 0.15 | 0.23 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD13 | 1:A:78:ILE:HD12 | 12 | 0.15 | 0.23 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD13 | 1:A:78:ILE:HD13 | 12 | 0.15 | 0.23 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD21 | 1:A:160:LEU:HD11 | 12 | 0.1 | 0.31 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD21 | 1:A:160:LEU:HD12 | 12 | 0.1 | 0.31 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD21 | 1:A:160:LEU:HD13 | 12 | 0.1 | 0.31 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD22 | 1:A:160:LEU:HD11 | 12 | 0.1 | 0.31 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD22 | 1:A:160:LEU:HD12 | 12 | 0.1 | 0.31 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD22 | 1:A:160:LEU:HD13 | 12 | 0.1 | 0.31 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD23 | 1:A:160:LEU:HD11 | 12 | 0.1 | 0.31 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD23 | 1:A:160:LEU:HD12 | 12 | 0.1 | 0.31 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD23 | 1:A:160:LEU:HD13 | 12 | 0.1 | 0.31 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG21 | 1:A:128:ILE:HD11 | 12 | 0.07 | 0.16 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG21 | 1:A:128:ILE:HD12 | 12 | 0.07 | 0.16 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG21 | 1:A:128:ILE:HD13 | 12 | 0.07 | 0.16 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG22 | 1:A:128:ILE:HD11 | 12 | 0.07 | 0.16 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG22 | 1:A:128:ILE:HD12 | 12 | 0.07 | 0.16 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG22 | 1:A:128:ILE:HD13 | 12 | 0.07 | 0.16 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG23 | 1:A:128:ILE:HD11 | 12 | 0.07 | 0.16 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG23 | 1:A:128:ILE:HD12 | 12 | 0.07 | 0.16 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG23 | 1:A:128:ILE:HD13 | 12 | 0.07 | 0.16 |
| (1,212) | 1:A:86:ALA:H | 1:A:88:PHE:H | 12 | 0.05 | 0.09 |
| (1,1016) | 1:A:165:TRP:HZ3 | 1:A:127:PHE:HZ | 12 | 0.07 | 0.16 |
| (1,993) | 1:A:36:LEU:H | 1:A:99:VAL:H | 11 | 0.05 | 0.12 |
| (1,989) | 1:A:163:LEU:HD11 | 1:A:165:TRP:HE1 | 11 | 0.04 | 0.1 |
| (1,989) | 1:A:163:LEU:HD12 | 1:A:165:TRP:HE1 | 11 | 0.04 | 0.1 |



Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models | Mean (Å) | Max (Å) |
|---------|------------------|------------------|--------|----------|---------|
| (1,989) | 1:A:163:LEU:HD13 | 1:A:165:TRP:HE1 | 11 | 0.04 | 0.1 |
| (1,954) | 1:A:70:LEU:H | 1:A:78:ILE:HD11 | 11 | 0.08 | 0.16 |
| (1,954) | 1:A:70:LEU:H | 1:A:78:ILE:HD12 | 11 | 0.08 | 0.16 |
| (1,954) | 1:A:70:LEU:H | 1:A:78:ILE:HD13 | 11 | 0.08 | 0.16 |
| (1,776) | 1:A:153:LEU:HD11 | 1:A:190:LEU:HD11 | 11 | 0.06 | 0.12 |
| (1,776) | 1:A:153:LEU:HD11 | 1:A:190:LEU:HD12 | 11 | 0.06 | 0.12 |
| (1,776) | 1:A:153:LEU:HD11 | 1:A:190:LEU:HD13 | 11 | 0.06 | 0.12 |
| (1,776) | 1:A:153:LEU:HD12 | 1:A:190:LEU:HD11 | 11 | 0.06 | 0.12 |
| (1,776) | 1:A:153:LEU:HD12 | 1:A:190:LEU:HD12 | 11 | 0.06 | 0.12 |
| (1,776) | 1:A:153:LEU:HD12 | 1:A:190:LEU:HD13 | 11 | 0.06 | 0.12 |
| (1,776) | 1:A:153:LEU:HD13 | 1:A:190:LEU:HD11 | 11 | 0.06 | 0.12 |
| (1,776) | 1:A:153:LEU:HD13 | 1:A:190:LEU:HD12 | 11 | 0.06 | 0.12 |
| (1,776) | 1:A:153:LEU:HD13 | 1:A:190:LEU:HD13 | 11 | 0.06 | 0.12 |
| (1,572) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:28:ILE:HD11 | 11 | 0.17 | 0.25 |
| (1,572) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:28:ILE:HD12 | 11 | 0.17 | 0.25 |
| (1,572) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:28:ILE:HD13 | 11 | 0.17 | 0.25 |
| (1,572) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:28:ILE:HD11 | 11 | 0.17 | 0.25 |
| (1,572) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:28:ILE:HD12 | 11 | 0.17 | 0.25 |
| (1,572) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:28:ILE:HD13 | 11 | 0.17 | 0.25 |
| (1,572) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:28:ILE:HD11 | 11 | 0.17 | 0.25 |
| (1,572) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:28:ILE:HD12 | 11 | 0.17 | 0.25 |
| (1,572) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:28:ILE:HD13 | 11 | 0.17 | 0.25 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:85:LEU:HD11 | 11 | 0.07 | 0.15 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:85:LEU:HD12 | 11 | 0.07 | 0.15 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:85:LEU:HD13 | 11 | 0.07 | 0.15 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:85:LEU:HD11 | 11 | 0.07 | 0.15 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:85:LEU:HD12 | 11 | 0.07 | 0.15 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:85:LEU:HD13 | 11 | 0.07 | 0.15 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:85:LEU:HD11 | 11 | 0.07 | 0.15 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:85:LEU:HD12 | 11 | 0.07 | 0.15 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:85:LEU:HD13 | 11 | 0.07 | 0.15 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD21 | 1:A:81:VAL:HG11 | 11 | 0.06 | 0.11 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD21 | 1:A:81:VAL:HG12 | 11 | 0.06 | 0.11 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD21 | 1:A:81:VAL:HG13 | 11 | 0.06 | 0.11 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD22 | 1:A:81:VAL:HG11 | 11 | 0.06 | 0.11 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD22 | 1:A:81:VAL:HG12 | 11 | 0.06 | 0.11 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD22 | 1:A:81:VAL:HG13 | 11 | 0.06 | 0.11 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD23 | 1:A:81:VAL:HG11 | 11 | 0.06 | 0.11 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD23 | 1:A:81:VAL:HG12 | 11 | 0.06 | 0.11 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD23 | 1:A:81:VAL:HG13 | 11 | 0.06 | 0.11 |
| (1,511) | 1:A:145:LYS:H | 1:A:149:LEU:HD21 | 11 | 0.08 | 0.13 |
| (1,511) | 1:A:145:LYS:H | 1:A:149:LEU:HD22 | 11 | 0.08 | 0.13 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models | Mean (Å) | Max (Å) |
|---------|------------------|------------------|--------|----------|---------|
| (1,511) | 1:A:145:LYS:H | 1:A:149:LEU:HD23 | 11 | 0.08 | 0.13 |
| (1,510) | 1:A:137:LEU:HD11 | 1:A:150:LEU:H | 11 | 0.2 | 0.41 |
| (1,510) | 1:A:137:LEU:HD12 | 1:A:150:LEU:H | 11 | 0.2 | 0.41 |
| (1,510) | 1:A:137:LEU:HD13 | 1:A:150:LEU:H | 11 | 0.2 | 0.41 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:109:LEU:HD21 | 11 | 0.03 | 0.07 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:109:LEU:HD22 | 11 | 0.03 | 0.07 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:109:LEU:HD23 | 11 | 0.03 | 0.07 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:109:LEU:HD21 | 11 | 0.03 | 0.07 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:109:LEU:HD22 | 11 | 0.03 | 0.07 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:109:LEU:HD23 | 11 | 0.03 | 0.07 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:109:LEU:HD21 | 11 | 0.03 | 0.07 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:109:LEU:HD22 | 11 | 0.03 | 0.07 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:109:LEU:HD23 | 11 | 0.03 | 0.07 |
| (1,207) | 1:A:60:SER:H | 1:A:64:LEU:HD11 | 11 | 0.04 | 0.07 |
| (1,207) | 1:A:60:SER:H | 1:A:64:LEU:HD12 | 11 | 0.04 | 0.07 |
| (1,207) | 1:A:60:SER:H | 1:A:64:LEU:HD13 | 11 | 0.04 | 0.07 |
| (1,153) | 1:A:57:VAL:H | 1:A:81:VAL:HG21 | 11 | 0.05 | 0.09 |
| (1,153) | 1:A:57:VAL:H | 1:A:81:VAL:HG22 | 11 | 0.05 | 0.09 |
| (1,153) | 1:A:57:VAL:H | 1:A:81:VAL:HG23 | 11 | 0.05 | 0.09 |
| (1,910) | 1:A:81:VAL:HG11 | 1:A:82:GLN:H | 10 | 0.13 | 0.24 |
| (1,910) | 1:A:81:VAL:HG12 | 1:A:82:GLN:H | 10 | 0.13 | 0.24 |
| (1,910) | 1:A:81:VAL:HG13 | 1:A:82:GLN:H | 10 | 0.13 | 0.24 |
| (1,896) | 1:A:166:LEU:HD11 | 1:A:193:GLN:H | 10 | 0.12 | 0.2 |
| (1,896) | 1:A:166:LEU:HD12 | 1:A:193:GLN:H | 10 | 0.12 | 0.2 |
| (1,896) | 1:A:166:LEU:HD13 | 1:A:193:GLN:H | 10 | 0.12 | 0.2 |
| (1,79) | 1:A:175:LEU:HD21 | 1:A:185:ALA:H | 10 | 0.06 | 0.13 |
| (1,79) | 1:A:175:LEU:HD22 | 1:A:185:ALA:H | 10 | 0.06 | 0.13 |
| (1,79) | 1:A:175:LEU:HD23 | 1:A:185:ALA:H | 10 | 0.06 | 0.13 |
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD11 | 1:A:163:LEU:HD21 | 10 | 0.1 | 0.21 |
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD11 | 1:A:163:LEU:HD22 | 10 | 0.1 | 0.21 |
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD11 | 1:A:163:LEU:HD23 | 10 | 0.1 | 0.21 |
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD12 | 1:A:163:LEU:HD21 | 10 | 0.1 | 0.21 |
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD12 | 1:A:163:LEU:HD22 | 10 | 0.1 | 0.21 |
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD12 | 1:A:163:LEU:HD23 | 10 | 0.1 | 0.21 |
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD13 | 1:A:163:LEU:HD21 | 10 | 0.1 | 0.21 |
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD13 | 1:A:163:LEU:HD22 | 10 | 0.1 | 0.21 |
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD13 | 1:A:163:LEU:HD23 | 10 | 0.1 | 0.21 |
| (1,543) | 1:A:129:LEU:HD11 | 1:A:156:LEU:HD11 | 10 | 0.04 | 0.07 |
| (1,543) | 1:A:129:LEU:HD11 | 1:A:156:LEU:HD12 | 10 | 0.04 | 0.07 |
| (1,543) | 1:A:129:LEU:HD11 | 1:A:156:LEU:HD13 | 10 | 0.04 | 0.07 |
| (1,543) | 1:A:129:LEU:HD12 | 1:A:156:LEU:HD11 | 10 | 0.04 | 0.07 |
| (1,543) | 1:A:129:LEU:HD12 | 1:A:156:LEU:HD12 | 10 | 0.04 | 0.07 |



Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models | Mean (Å) | Max (Å) |
|----------|------------------|------------------|--------|----------|---------|
| (1,543) | 1:A:129:LEU:HD12 | 1:A:156:LEU:HD13 | 10 | 0.04 | 0.07 |
| (1,543) | 1:A:129:LEU:HD13 | 1:A:156:LEU:HD11 | 10 | 0.04 | 0.07 |
| (1,543) | 1:A:129:LEU:HD13 | 1:A:156:LEU:HD12 | 10 | 0.04 | 0.07 |
| (1,543) | 1:A:129:LEU:HD13 | 1:A:156:LEU:HD13 | 10 | 0.04 | 0.07 |
| (1,1098) | 1:A:124:GLY:O | 1:A:98:ILE:N | 10 | 0.07 | 0.13 |
| (1,108) | 1:A:145:LYS:H | 1:A:148:ASP:H | 10 | 0.11 | 0.27 |
| (1,912) | 1:A:56:ALA:H | 1:A:81:VAL:HG21 | 9 | 0.08 | 0.14 |
| (1,912) | 1:A:56:ALA:H | 1:A:81:VAL:HG22 | 9 | 0.08 | 0.14 |
| (1,912) | 1:A:56:ALA:H | 1:A:81:VAL:HG23 | 9 | 0.08 | 0.14 |
| (1,798) | 1:A:86:ALA:H | 1:A:109:LEU:HD11 | 9 | 0.05 | 0.1 |
| (1,798) | 1:A:86:ALA:H | 1:A:109:LEU:HD12 | 9 | 0.05 | 0.1 |
| (1,798) | 1:A:86:ALA:H | 1:A:109:LEU:HD13 | 9 | 0.05 | 0.1 |
| (1,781) | 1:A:126:VAL:HG11 | 1:A:194:LYS:H | 9 | 0.1 | 0.22 |
| (1,781) | 1:A:126:VAL:HG12 | 1:A:194:LYS:H | 9 | 0.1 | 0.22 |
| (1,781) | 1:A:126:VAL:HG13 | 1:A:194:LYS:H | 9 | 0.1 | 0.22 |
| (1,750) | 1:A:81:VAL:HG21 | 1:A:85:LEU:HD21 | 9 | 0.09 | 0.2 |
| (1,750) | 1:A:81:VAL:HG21 | 1:A:85:LEU:HD22 | 9 | 0.09 | 0.2 |
| (1,750) | 1:A:81:VAL:HG21 | 1:A:85:LEU:HD23 | 9 | 0.09 | 0.2 |
| (1,750) | 1:A:81:VAL:HG22 | 1:A:85:LEU:HD21 | 9 | 0.09 | 0.2 |
| (1,750) | 1:A:81:VAL:HG22 | 1:A:85:LEU:HD22 | 9 | 0.09 | 0.2 |
| (1,750) | 1:A:81:VAL:HG22 | 1:A:85:LEU:HD23 | 9 | 0.09 | 0.2 |
| (1,750) | 1:A:81:VAL:HG23 | 1:A:85:LEU:HD21 | 9 | 0.09 | 0.2 |
| (1,750) | 1:A:81:VAL:HG23 | 1:A:85:LEU:HD22 | 9 | 0.09 | 0.2 |
| (1,750) | 1:A:81:VAL:HG23 | 1:A:85:LEU:HD23 | 9 | 0.09 | 0.2 |
| (1,518) | 1:A:117:VAL:HG11 | 1:A:121:LEU:HD11 | 9 | 0.16 | 0.35 |
| (1,518) | 1:A:117:VAL:HG11 | 1:A:121:LEU:HD12 | 9 | 0.16 | 0.35 |
| (1,518) | 1:A:117:VAL:HG11 | 1:A:121:LEU:HD13 | 9 | 0.16 | 0.35 |
| (1,518) | 1:A:117:VAL:HG12 | 1:A:121:LEU:HD11 | 9 | 0.16 | 0.35 |
| (1,518) | 1:A:117:VAL:HG12 | 1:A:121:LEU:HD12 | 9 | 0.16 | 0.35 |
| (1,518) | 1:A:117:VAL:HG12 | 1:A:121:LEU:HD13 | 9 | 0.16 | 0.35 |
| (1,518) | 1:A:117:VAL:HG13 | 1:A:121:LEU:HD11 | 9 | 0.16 | 0.35 |
| (1,518) | 1:A:117:VAL:HG13 | 1:A:121:LEU:HD12 | 9 | 0.16 | 0.35 |
| (1,518) | 1:A:117:VAL:HG13 | 1:A:121:LEU:HD13 | 9 | 0.16 | 0.35 |
| (1,508) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:85:LEU:HD21 | 9 | 0.07 | 0.13 |
| (1,508) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:85:LEU:HD22 | 9 | 0.07 | 0.13 |
| (1,508) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:85:LEU:HD23 | 9 | 0.07 | 0.13 |
| (1,508) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:85:LEU:HD21 | 9 | 0.07 | 0.13 |
| (1,508) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:85:LEU:HD22 | 9 | 0.07 | 0.13 |
| (1,508) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:85:LEU:HD23 | 9 | 0.07 | 0.13 |
| (1,508) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:85:LEU:HD21 | 9 | 0.07 | 0.13 |
| (1,508) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:85:LEU:HD22 | 9 | 0.07 | 0.13 |
| (1,508) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:85:LEU:HD23 | 9 | 0.07 | 0.13 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models | Mean (Å) | Max (Å) |
|----------|------------------|------------------|--------|----------|---------|
| (1,420) | 1:A:171:LEU:H | 1:A:171:LEU:HD21 | 9 | 0.04 | 0.07 |
| (1,420) | 1:A:171:LEU:H | 1:A:171:LEU:HD22 | 9 | 0.04 | 0.07 |
| (1,420) | 1:A:171:LEU:H | 1:A:171:LEU:HD23 | 9 | 0.04 | 0.07 |
| (1,407) | 1:A:126:VAL:HG11 | 1:A:163:LEU:HD21 | 9 | 0.07 | 0.13 |
| (1,407) | 1:A:126:VAL:HG11 | 1:A:163:LEU:HD22 | 9 | 0.07 | 0.13 |
| (1,407) | 1:A:126:VAL:HG11 | 1:A:163:LEU:HD23 | 9 | 0.07 | 0.13 |
| (1,407) | 1:A:126:VAL:HG12 | 1:A:163:LEU:HD21 | 9 | 0.07 | 0.13 |
| (1,407) | 1:A:126:VAL:HG12 | 1:A:163:LEU:HD22 | 9 | 0.07 | 0.13 |
| (1,407) | 1:A:126:VAL:HG12 | 1:A:163:LEU:HD23 | 9 | 0.07 | 0.13 |
| (1,407) | 1:A:126:VAL:HG13 | 1:A:163:LEU:HD21 | 9 | 0.07 | 0.13 |
| (1,407) | 1:A:126:VAL:HG13 | 1:A:163:LEU:HD22 | 9 | 0.07 | 0.13 |
| (1,407) | 1:A:126:VAL:HG13 | 1:A:163:LEU:HD23 | 9 | 0.07 | 0.13 |
| (1,338) | 1:A:48:ALA:H | 1:A:54:VAL:HG11 | 9 | 0.05 | 0.09 |
| (1,338) | 1:A:48:ALA:H | 1:A:54:VAL:HG12 | 9 | 0.05 | 0.09 |
| (1,338) | 1:A:48:ALA:H | 1:A:54:VAL:HG13 | 9 | 0.05 | 0.09 |
| (1,310) | 1:A:173:ARG:H | 1:A:187:LEU:HD11 | 9 | 0.07 | 0.21 |
| (1,310) | 1:A:173:ARG:H | 1:A:187:LEU:HD12 | 9 | 0.07 | 0.21 |
| (1,310) | 1:A:173:ARG:H | 1:A:187:LEU:HD13 | 9 | 0.07 | 0.21 |
| (1,289) | 1:A:101:ILE:HD11 | 1:A:128:ILE:H | 9 | 0.07 | 0.12 |
| (1,289) | 1:A:101:ILE:HD12 | 1:A:128:ILE:H | 9 | 0.07 | 0.12 |
| (1,289) | 1:A:101:ILE:HD13 | 1:A:128:ILE:H | 9 | 0.07 | 0.12 |
| (1,233) | 1:A:54:VAL:HG11 | 1:A:55:THR:H | 9 | 0.07 | 0.13 |
| (1,233) | 1:A:54:VAL:HG12 | 1:A:55:THR:H | 9 | 0.07 | 0.13 |
| (1,233) | 1:A:54:VAL:HG13 | 1:A:55:THR:H | 9 | 0.07 | 0.13 |
| (1,202) | 1:A:138:GLN:H | 1:A:147:LEU:HD21 | 9 | 0.78 | 2.2 |
| (1,202) | 1:A:138:GLN:H | 1:A:147:LEU:HD22 | 9 | 0.78 | 2.2 |
| (1,202) | 1:A:138:GLN:H | 1:A:147:LEU:HD23 | 9 | 0.78 | 2.2 |
| (1,1085) | 1:A:154:GLU:O | 1:A:158:SER:N | 9 | 0.05 | 0.08 |
| (1,1032) | 1:A:22:VAL:O | 1:A:26:ASN:H | 9 | 0.11 | 0.2 |
| (1,1026) | 1:A:95:TRP:HE1 | 1:A:91:VAL:H | 9 | 0.08 | 0.18 |
| (1,942) | 1:A:49:SER:H | 1:A:50:LEU:HD21 | 8 | 0.05 | 0.08 |
| (1,942) | 1:A:49:SER:H | 1:A:50:LEU:HD22 | 8 | 0.05 | 0.08 |
| (1,942) | 1:A:49:SER:H | 1:A:50:LEU:HD23 | 8 | 0.05 | 0.08 |
| (1,932) | 1:A:172:GLU:H | 1:A:187:LEU:HD11 | 8 | 0.07 | 0.11 |
| (1,932) | 1:A:172:GLU:H | 1:A:187:LEU:HD12 | 8 | 0.07 | 0.11 |
| (1,932) | 1:A:172:GLU:H | 1:A:187:LEU:HD13 | 8 | 0.07 | 0.11 |
| (1,801) | 1:A:113:LEU:HD11 | 1:A:116:LYS:H | 8 | 0.1 | 0.19 |
| (1,801) | 1:A:113:LEU:HD12 | 1:A:116:LYS:H | 8 | 0.1 | 0.19 |
| (1,801) | 1:A:113:LEU:HD13 | 1:A:116:LYS:H | 8 | 0.1 | 0.19 |
| (1,778) | 1:A:166:LEU:H | 1:A:191:LEU:HD11 | 8 | 0.04 | 0.07 |
| (1,778) | 1:A:166:LEU:H | 1:A:191:LEU:HD12 | 8 | 0.04 | 0.07 |
| (1,778) | 1:A:166:LEU:H | 1:A:191:LEU:HD13 | 8 | 0.04 | 0.07 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models | Mean (Å) | Max (Å) |
|---------|------------------|------------------|--------|----------|---------|
| (1,773) | 1:A:126:VAL:HG21 | 1:A:166:LEU:HD11 | 8 | 0.07 | 0.11 |
| (1,773) | 1:A:126:VAL:HG21 | 1:A:166:LEU:HD12 | 8 | 0.07 | 0.11 |
| (1,773) | 1:A:126:VAL:HG21 | 1:A:166:LEU:HD13 | 8 | 0.07 | 0.11 |
| (1,773) | 1:A:126:VAL:HG22 | 1:A:166:LEU:HD11 | 8 | 0.07 | 0.11 |
| (1,773) | 1:A:126:VAL:HG22 | 1:A:166:LEU:HD12 | 8 | 0.07 | 0.11 |
| (1,773) | 1:A:126:VAL:HG22 | 1:A:166:LEU:HD13 | 8 | 0.07 | 0.11 |
| (1,773) | 1:A:126:VAL:HG23 | 1:A:166:LEU:HD11 | 8 | 0.07 | 0.11 |
| (1,773) | 1:A:126:VAL:HG23 | 1:A:166:LEU:HD12 | 8 | 0.07 | 0.11 |
| (1,773) | 1:A:126:VAL:HG23 | 1:A:166:LEU:HD13 | 8 | 0.07 | 0.11 |
| (1,574) | 1:A:36:LEU:HD11 | 1:A:85:LEU:HD21 | 8 | 0.07 | 0.11 |
| (1,574) | 1:A:36:LEU:HD11 | 1:A:85:LEU:HD22 | 8 | 0.07 | 0.11 |
| (1,574) | 1:A:36:LEU:HD11 | 1:A:85:LEU:HD23 | 8 | 0.07 | 0.11 |
| (1,574) | 1:A:36:LEU:HD12 | 1:A:85:LEU:HD21 | 8 | 0.07 | 0.11 |
| (1,574) | 1:A:36:LEU:HD12 | 1:A:85:LEU:HD22 | 8 | 0.07 | 0.11 |
| (1,574) | 1:A:36:LEU:HD12 | 1:A:85:LEU:HD23 | 8 | 0.07 | 0.11 |
| (1,574) | 1:A:36:LEU:HD13 | 1:A:85:LEU:HD21 | 8 | 0.07 | 0.11 |
| (1,574) | 1:A:36:LEU:HD13 | 1:A:85:LEU:HD22 | 8 | 0.07 | 0.11 |
| (1,574) | 1:A:36:LEU:HD13 | 1:A:85:LEU:HD23 | 8 | 0.07 | 0.11 |
| (1,560) | 1:A:47:LEU:HD21 | 1:A:50:LEU:HD21 | 8 | 0.05 | 0.12 |
| (1,560) | 1:A:47:LEU:HD21 | 1:A:50:LEU:HD22 | 8 | 0.05 | 0.12 |
| (1,560) | 1:A:47:LEU:HD21 | 1:A:50:LEU:HD23 | 8 | 0.05 | 0.12 |
| (1,560) | 1:A:47:LEU:HD22 | 1:A:50:LEU:HD21 | 8 | 0.05 | 0.12 |
| (1,560) | 1:A:47:LEU:HD22 | 1:A:50:LEU:HD22 | 8 | 0.05 | 0.12 |
| (1,560) | 1:A:47:LEU:HD22 | 1:A:50:LEU:HD23 | 8 | 0.05 | 0.12 |
| (1,560) | 1:A:47:LEU:HD23 | 1:A:50:LEU:HD21 | 8 | 0.05 | 0.12 |
| (1,560) | 1:A:47:LEU:HD23 | 1:A:50:LEU:HD22 | 8 | 0.05 | 0.12 |
| (1,560) | 1:A:47:LEU:HD23 | 1:A:50:LEU:HD23 | 8 | 0.05 | 0.12 |
| (1,392) | 1:A:63:GLY:H | 1:A:64:LEU:HD21 | 8 | 0.06 | 0.12 |
| (1,392) | 1:A:63:GLY:H | 1:A:64:LEU:HD22 | 8 | 0.06 | 0.12 |
| (1,392) | 1:A:63:GLY:H | 1:A:64:LEU:HD23 | 8 | 0.06 | 0.12 |
| (1,358) | 1:A:90:ILE:HD11 | 1:A:113:LEU:HD11 | 8 | 0.06 | 0.09 |
| (1,358) | 1:A:90:ILE:HD11 | 1:A:113:LEU:HD12 | 8 | 0.06 | 0.09 |
| (1,358) | 1:A:90:ILE:HD11 | 1:A:113:LEU:HD13 | 8 | 0.06 | 0.09 |
| (1,358) | 1:A:90:ILE:HD12 | 1:A:113:LEU:HD11 | 8 | 0.06 | 0.09 |
| (1,358) | 1:A:90:ILE:HD12 | 1:A:113:LEU:HD12 | 8 | 0.06 | 0.09 |
| (1,358) | 1:A:90:ILE:HD12 | 1:A:113:LEU:HD13 | 8 | 0.06 | 0.09 |
| (1,358) | 1:A:90:ILE:HD13 | 1:A:113:LEU:HD11 | 8 | 0.06 | 0.09 |
| (1,358) | 1:A:90:ILE:HD13 | 1:A:113:LEU:HD12 | 8 | 0.06 | 0.09 |
| (1,358) | 1:A:90:ILE:HD13 | 1:A:113:LEU:HD13 | 8 | 0.06 | 0.09 |
| (1,260) | 1:A:171:LEU:HD21 | 1:A:189:GLN:H | 8 | 0.05 | 0.08 |
| (1,260) | 1:A:171:LEU:HD22 | 1:A:189:GLN:H | 8 | 0.05 | 0.08 |
| (1,260) | 1:A:171:LEU:HD23 | 1:A:189:GLN:H | 8 | 0.05 | 0.08 |



Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models | Mean (Å) | Max (Å) |
|---------|------------------|------------------|--------|----------|---------|
| (1,206) | 1:A:60:SER:H | 1:A:62:VAL:HG21 | 8 | 0.09 | 0.17 |
| (1,206) | 1:A:60:SER:H | 1:A:62:VAL:HG22 | 8 | 0.09 | 0.17 |
| (1,206) | 1:A:60:SER:H | 1:A:62:VAL:HG23 | 8 | 0.09 | 0.17 |
| (1,158) | 1:A:163:LEU:H | 1:A:195:LEU:HD21 | 8 | 0.11 | 0.22 |
| (1,158) | 1:A:163:LEU:H | 1:A:195:LEU:HD22 | 8 | 0.11 | 0.22 |
| (1,158) | 1:A:163:LEU:H | 1:A:195:LEU:HD23 | 8 | 0.11 | 0.22 |
| (1,972) | 1:A:85:LEU:HD21 | 1:A:89:ASP:H | 7 | 0.1 | 0.15 |
| (1,972) | 1:A:85:LEU:HD22 | 1:A:89:ASP:H | 7 | 0.1 | 0.15 |
| (1,972) | 1:A:85:LEU:HD23 | 1:A:89:ASP:H | 7 | 0.1 | 0.15 |
| (1,91) | 1:A:112:GLN:H | 1:A:114:TYR:H | 7 | 0.05 | 0.09 |
| (1,831) | 1:A:117:VAL:HG11 | 1:A:118:TYR:H | 7 | 0.08 | 0.17 |
| (1,831) | 1:A:117:VAL:HG12 | 1:A:118:TYR:H | 7 | 0.08 | 0.17 |
| (1,831) | 1:A:117:VAL:HG13 | 1:A:118:TYR:H | 7 | 0.08 | 0.17 |
| (1,567) | 1:A:70:LEU:HD11 | 1:A:74:LYS:H | 7 | 0.07 | 0.11 |
| (1,567) | 1:A:70:LEU:HD12 | 1:A:74:LYS:H | 7 | 0.07 | 0.11 |
| (1,567) | 1:A:70:LEU:HD13 | 1:A:74:LYS:H | 7 | 0.07 | 0.11 |
| (1,558) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:109:LEU:HD11 | 7 | 0.06 | 0.08 |
| (1,558) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:109:LEU:HD12 | 7 | 0.06 | 0.08 |
| (1,558) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:109:LEU:HD13 | 7 | 0.06 | 0.08 |
| (1,558) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:109:LEU:HD11 | 7 | 0.06 | 0.08 |
| (1,558) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:109:LEU:HD12 | 7 | 0.06 | 0.08 |
| (1,558) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:109:LEU:HD13 | 7 | 0.06 | 0.08 |
| (1,558) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:109:LEU:HD11 | 7 | 0.06 | 0.08 |
| (1,558) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:109:LEU:HD12 | 7 | 0.06 | 0.08 |
| (1,558) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:109:LEU:HD13 | 7 | 0.06 | 0.08 |
| (1,462) | 1:A:129:LEU:HD11 | 1:A:153:LEU:HD21 | 7 | 0.06 | 0.09 |
| (1,462) | 1:A:129:LEU:HD11 | 1:A:153:LEU:HD22 | 7 | 0.06 | 0.09 |
| (1,462) | 1:A:129:LEU:HD11 | 1:A:153:LEU:HD23 | 7 | 0.06 | 0.09 |
| (1,462) | 1:A:129:LEU:HD12 | 1:A:153:LEU:HD21 | 7 | 0.06 | 0.09 |
| (1,462) | 1:A:129:LEU:HD12 | 1:A:153:LEU:HD22 | 7 | 0.06 | 0.09 |
| (1,462) | 1:A:129:LEU:HD12 | 1:A:153:LEU:HD23 | 7 | 0.06 | 0.09 |
| (1,462) | 1:A:129:LEU:HD13 | 1:A:153:LEU:HD21 | 7 | 0.06 | 0.09 |
| (1,462) | 1:A:129:LEU:HD13 | 1:A:153:LEU:HD22 | 7 | 0.06 | 0.09 |
| (1,462) | 1:A:129:LEU:HD13 | 1:A:153:LEU:HD23 | 7 | 0.06 | 0.09 |
| (1,455) | 1:A:121:LEU:HD21 | 1:A:160:LEU:HD21 | 7 | 0.06 | 0.14 |
| (1,455) | 1:A:121:LEU:HD21 | 1:A:160:LEU:HD22 | 7 | 0.06 | 0.14 |
| (1,455) | 1:A:121:LEU:HD21 | 1:A:160:LEU:HD23 | 7 | 0.06 | 0.14 |
| (1,455) | 1:A:121:LEU:HD22 | 1:A:160:LEU:HD21 | 7 | 0.06 | 0.14 |
| (1,455) | 1:A:121:LEU:HD22 | 1:A:160:LEU:HD22 | 7 | 0.06 | 0.14 |
| (1,455) | 1:A:121:LEU:HD22 | 1:A:160:LEU:HD23 | 7 | 0.06 | 0.14 |
| (1,455) | 1:A:121:LEU:HD23 | 1:A:160:LEU:HD21 | 7 | 0.06 | 0.14 |
| (1,455) | 1:A:121:LEU:HD23 | 1:A:160:LEU:HD22 | 7 | 0.06 | 0.14 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models | Mean (Å) | Max (Å) |
|----------|------------------|------------------|--------|----------|---------|
| (1,455) | 1:A:121:LEU:HD23 | 1:A:160:LEU:HD23 | 7 | 0.06 | 0.14 |
| (1,390) | 1:A:47:LEU:H | 1:A:50:LEU:HD21 | 7 | 0.06 | 0.1 |
| (1,390) | 1:A:47:LEU:H | 1:A:50:LEU:HD22 | 7 | 0.06 | 0.1 |
| (1,390) | 1:A:47:LEU:H | 1:A:50:LEU:HD23 | 7 | 0.06 | 0.1 |
| (1,311) | 1:A:51:GLY:H | 1:A:76:VAL:HG11 | 7 | 0.13 | 0.21 |
| (1,311) | 1:A:51:GLY:H | 1:A:76:VAL:HG12 | 7 | 0.13 | 0.21 |
| (1,311) | 1:A:51:GLY:H | 1:A:76:VAL:HG13 | 7 | 0.13 | 0.21 |
| (1,254) | 1:A:57:VAL:HG11 | 1:A:83:SER:H | 7 | 0.11 | 0.28 |
| (1,254) | 1:A:57:VAL:HG12 | 1:A:83:SER:H | 7 | 0.11 | 0.28 |
| (1,254) | 1:A:57:VAL:HG13 | 1:A:83:SER:H | 7 | 0.11 | 0.28 |
| (1,236) | 1:A:21:LEU:HD11 | 1:A:25:ALA:H | 7 | 0.05 | 0.11 |
| (1,236) | 1:A:21:LEU:HD12 | 1:A:25:ALA:H | 7 | 0.05 | 0.11 |
| (1,236) | 1:A:21:LEU:HD13 | 1:A:25:ALA:H | 7 | 0.05 | 0.11 |
| (1,230) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:150:LEU:HD21 | 7 | 0.09 | 0.23 |
| (1,230) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:150:LEU:HD22 | 7 | 0.09 | 0.23 |
| (1,230) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:150:LEU:HD23 | 7 | 0.09 | 0.23 |
| (1,176) | 1:A:186:ALA:H | 1:A:187:LEU:HD21 | 7 | 0.06 | 0.14 |
| (1,176) | 1:A:186:ALA:H | 1:A:187:LEU:HD22 | 7 | 0.06 | 0.14 |
| (1,176) | 1:A:186:ALA:H | 1:A:187:LEU:HD23 | 7 | 0.06 | 0.14 |
| (1,163) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:81:VAL:H | 7 | 0.05 | 0.09 |
| (1,163) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:81:VAL:H | 7 | 0.05 | 0.09 |
| (1,163) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:81:VAL:H | 7 | 0.05 | 0.09 |
| (1,1006) | 1:A:100:SER:H | 1:A:126:VAL:H | 7 | 0.1 | 0.15 |
| (1,962) | 1:A:26:ASN:H | 1:A:28:ILE:HD11 | 6 | 0.03 | 0.07 |
| (1,962) | 1:A:26:ASN:H | 1:A:28:ILE:HD12 | 6 | 0.03 | 0.07 |
| (1,962) | 1:A:26:ASN:H | 1:A:28:ILE:HD13 | 6 | 0.03 | 0.07 |
| (1,915) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:148:ASP:H | 6 | 0.17 | 0.3 |
| (1,915) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:148:ASP:H | 6 | 0.17 | 0.3 |
| (1,915) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:148:ASP:H | 6 | 0.17 | 0.3 |
| (1,900) | 1:A:153:LEU:H | 1:A:190:LEU:HD11 | 6 | 0.08 | 0.15 |
| (1,900) | 1:A:153:LEU:H | 1:A:190:LEU:HD12 | 6 | 0.08 | 0.15 |
| (1,900) | 1:A:153:LEU:H | 1:A:190:LEU:HD13 | 6 | 0.08 | 0.15 |
| (1,815) | 1:A:170:ASN:H | 1:A:171:LEU:HD21 | 6 | 0.03 | 0.07 |
| (1,815) | 1:A:170:ASN:H | 1:A:171:LEU:HD22 | 6 | 0.03 | 0.07 |
| (1,815) | 1:A:170:ASN:H | 1:A:171:LEU:HD23 | 6 | 0.03 | 0.07 |
| (1,814) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:150:LEU:HD11 | 6 | 0.15 | 0.27 |
| (1,814) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:150:LEU:HD12 | 6 | 0.15 | 0.27 |
| (1,814) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:150:LEU:HD13 | 6 | 0.15 | 0.27 |
| (1,812) | 1:A:130:GLU:H | 1:A:156:LEU:HD11 | 6 | 0.08 | 0.16 |
| (1,812) | 1:A:130:GLU:H | 1:A:156:LEU:HD12 | 6 | 0.08 | 0.16 |
| (1,812) | 1:A:130:GLU:H | 1:A:156:LEU:HD13 | 6 | 0.08 | 0.16 |
| (1,769) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:121:LEU:HD11 | 6 | 0.05 | 0.08 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models | Mean (Å) | Max (Å) |
|---------|-----------------|------------------|--------|----------|---------|
| (1,769) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:121:LEU:HD12 | 6 | 0.05 | 0.08 |
| (1,769) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:121:LEU:HD13 | 6 | 0.05 | 0.08 |
| (1,769) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:121:LEU:HD11 | 6 | 0.05 | 0.08 |
| (1,769) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:121:LEU:HD12 | 6 | 0.05 | 0.08 |
| (1,769) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:121:LEU:HD13 | 6 | 0.05 | 0.08 |
| (1,769) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:121:LEU:HD11 | 6 | 0.05 | 0.08 |
| (1,769) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:121:LEU:HD12 | 6 | 0.05 | 0.08 |
| (1,769) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:121:LEU:HD13 | 6 | 0.05 | 0.08 |
| (1,665) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:121:LEU:HD21 | 6 | 0.06 | 0.1 |
| (1,665) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:121:LEU:HD22 | 6 | 0.06 | 0.1 |
| (1,665) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:121:LEU:HD23 | 6 | 0.06 | 0.1 |
| (1,665) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:121:LEU:HD21 | 6 | 0.06 | 0.1 |
| (1,665) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:121:LEU:HD22 | 6 | 0.06 | 0.1 |
| (1,665) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:121:LEU:HD23 | 6 | 0.06 | 0.1 |
| (1,665) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:121:LEU:HD21 | 6 | 0.06 | 0.1 |
| (1,665) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:121:LEU:HD22 | 6 | 0.06 | 0.1 |
| (1,665) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:121:LEU:HD23 | 6 | 0.06 | 0.1 |
| (1,480) | 1:A:57:VAL:HG11 | 1:A:81:VAL:HG21 | 6 | 0.05 | 0.07 |
| (1,480) | 1:A:57:VAL:HG11 | 1:A:81:VAL:HG22 | 6 | 0.05 | 0.07 |
| (1,480) | 1:A:57:VAL:HG11 | 1:A:81:VAL:HG23 | 6 | 0.05 | 0.07 |
| (1,480) | 1:A:57:VAL:HG12 | 1:A:81:VAL:HG21 | 6 | 0.05 | 0.07 |
| (1,480) | 1:A:57:VAL:HG12 | 1:A:81:VAL:HG22 | 6 | 0.05 | 0.07 |
| (1,480) | 1:A:57:VAL:HG12 | 1:A:81:VAL:HG23 | 6 | 0.05 | 0.07 |
| (1,480) | 1:A:57:VAL:HG13 | 1:A:81:VAL:HG21 | 6 | 0.05 | 0.07 |
| (1,480) | 1:A:57:VAL:HG13 | 1:A:81:VAL:HG22 | 6 | 0.05 | 0.07 |
| (1,480) | 1:A:57:VAL:HG13 | 1:A:81:VAL:HG23 | 6 | 0.05 | 0.07 |
| (1,446) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:36:LEU:HD21 | 6 | 0.04 | 0.07 |
| (1,446) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:36:LEU:HD22 | 6 | 0.04 | 0.07 |
| (1,446) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:36:LEU:HD23 | 6 | 0.04 | 0.07 |
| (1,446) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:36:LEU:HD21 | 6 | 0.04 | 0.07 |
| (1,446) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:36:LEU:HD22 | 6 | 0.04 | 0.07 |
| (1,446) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:36:LEU:HD23 | 6 | 0.04 | 0.07 |
| (1,446) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:36:LEU:HD21 | 6 | 0.04 | 0.07 |
| (1,446) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:36:LEU:HD22 | 6 | 0.04 | 0.07 |
| (1,446) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:36:LEU:HD23 | 6 | 0.04 | 0.07 |
| (1,272) | 1:A:124:GLY:H | 1:A:163:LEU:HD21 | 6 | 0.08 | 0.19 |
| (1,272) | 1:A:124:GLY:H | 1:A:163:LEU:HD22 | 6 | 0.08 | 0.19 |
| (1,272) | 1:A:124:GLY:H | 1:A:163:LEU:HD23 | 6 | 0.08 | 0.19 |
| (1,152) | 1:A:37:ALA:H | 1:A:57:VAL:H | 6 | 0.1 | 0.17 |
| (1,937) | 1:A:167:ILE:H | 1:A:191:LEU:HD21 | 5 | 0.03 | 0.06 |
| (1,937) | 1:A:167:ILE:H | 1:A:191:LEU:HD22 | 5 | 0.03 | 0.06 |
| (1,937) | 1:A:167:ILE:H | 1:A:191:LEU:HD23 | 5 | 0.03 | 0.06 |



Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models | Mean (Å) | Max (Å) |
|---------|------------------|------------------|--------|----------|---------|
| (1,924) | 1:A:27:GLN:H | 1:A:126:VAL:HG21 | 5 | 0.09 | 0.24 |
| (1,924) | 1:A:27:GLN:H | 1:A:126:VAL:HG22 | 5 | 0.09 | 0.24 |
| (1,924) | 1:A:27:GLN:H | 1:A:126:VAL:HG23 | 5 | 0.09 | 0.24 |
| (1,917) | 1:A:154:GLU:H | 1:A:190:LEU:HD21 | 5 | 0.06 | 0.18 |
| (1,917) | 1:A:154:GLU:H | 1:A:190:LEU:HD22 | 5 | 0.06 | 0.18 |
| (1,917) | 1:A:154:GLU:H | 1:A:190:LEU:HD23 | 5 | 0.06 | 0.18 |
| (1,911) | 1:A:56:ALA:H | 1:A:64:LEU:HD11 | 5 | 0.04 | 0.06 |
| (1,911) | 1:A:56:ALA:H | 1:A:64:LEU:HD12 | 5 | 0.04 | 0.06 |
| (1,911) | 1:A:56:ALA:H | 1:A:64:LEU:HD13 | 5 | 0.04 | 0.06 |
| (1,907) | 1:A:33:ILE:H | 1:A:54:VAL:HG21 | 5 | 0.05 | 0.09 |
| (1,907) | 1:A:33:ILE:H | 1:A:54:VAL:HG22 | 5 | 0.05 | 0.09 |
| (1,907) | 1:A:33:ILE:H | 1:A:54:VAL:HG23 | 5 | 0.05 | 0.09 |
| (1,823) | 1:A:23:SER:H | 1:A:24:VAL:HG21 | 5 | 0.07 | 0.12 |
| (1,823) | 1:A:23:SER:H | 1:A:24:VAL:HG22 | 5 | 0.07 | 0.12 |
| (1,823) | 1:A:23:SER:H | 1:A:24:VAL:HG23 | 5 | 0.07 | 0.12 |
| (1,822) | 1:A:90:ILE:HD11 | 1:A:116:LYS:H | 5 | 0.12 | 0.25 |
| (1,822) | 1:A:90:ILE:HD12 | 1:A:116:LYS:H | 5 | 0.12 | 0.25 |
| (1,822) | 1:A:90:ILE:HD13 | 1:A:116:LYS:H | 5 | 0.12 | 0.25 |
| (1,679) | 1:A:171:LEU:HD11 | 1:A:187:LEU:HD11 | 5 | 0.06 | 0.1 |
| (1,679) | 1:A:171:LEU:HD11 | 1:A:187:LEU:HD12 | 5 | 0.06 | 0.1 |
| (1,679) | 1:A:171:LEU:HD11 | 1:A:187:LEU:HD13 | 5 | 0.06 | 0.1 |
| (1,679) | 1:A:171:LEU:HD12 | 1:A:187:LEU:HD11 | 5 | 0.06 | 0.1 |
| (1,679) | 1:A:171:LEU:HD12 | 1:A:187:LEU:HD12 | 5 | 0.06 | 0.1 |
| (1,679) | 1:A:171:LEU:HD12 | 1:A:187:LEU:HD13 | 5 | 0.06 | 0.1 |
| (1,679) | 1:A:171:LEU:HD13 | 1:A:187:LEU:HD11 | 5 | 0.06 | 0.1 |
| (1,679) | 1:A:171:LEU:HD13 | 1:A:187:LEU:HD12 | 5 | 0.06 | 0.1 |
| (1,679) | 1:A:171:LEU:HD13 | 1:A:187:LEU:HD13 | 5 | 0.06 | 0.1 |
| (1,654) | 1:A:60:SER:H | 1:A:83:SER:H | 5 | 0.13 | 0.28 |
| (1,628) | 1:A:145:LYS:H | 1:A:147:LEU:H | 5 | 0.05 | 0.1 |
| (1,622) | 1:A:133:ALA:H | 1:A:137:LEU:H | 5 | 0.17 | 0.3 |
| (1,425) | 1:A:24:VAL:HG11 | 1:A:191:LEU:HD21 | 5 | 0.03 | 0.04 |
| (1,425) | 1:A:24:VAL:HG11 | 1:A:191:LEU:HD22 | 5 | 0.03 | 0.04 |
| (1,425) | 1:A:24:VAL:HG11 | 1:A:191:LEU:HD23 | 5 | 0.03 | 0.04 |
| (1,425) | 1:A:24:VAL:HG12 | 1:A:191:LEU:HD21 | 5 | 0.03 | 0.04 |
| (1,425) | 1:A:24:VAL:HG12 | 1:A:191:LEU:HD22 | 5 | 0.03 | 0.04 |
| (1,425) | 1:A:24:VAL:HG12 | 1:A:191:LEU:HD23 | 5 | 0.03 | 0.04 |
| (1,425) | 1:A:24:VAL:HG13 | 1:A:191:LEU:HD21 | 5 | 0.03 | 0.04 |
| (1,425) | 1:A:24:VAL:HG13 | 1:A:191:LEU:HD22 | 5 | 0.03 | 0.04 |
| (1,425) | 1:A:24:VAL:HG13 | 1:A:191:LEU:HD23 | 5 | 0.03 | 0.04 |
| (1,422) | 1:A:47:LEU:HD11 | 1:A:99:VAL:HG11 | 5 | 0.05 | 0.09 |
| (1,422) | 1:A:47:LEU:HD11 | 1:A:99:VAL:HG12 | 5 | 0.05 | 0.09 |
| (1,422) | 1:A:47:LEU:HD11 | 1:A:99:VAL:HG13 | 5 | 0.05 | 0.09 |



Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models | Mean (Å) | Max (Å) |
|----------|------------------|------------------|--------|----------|---------|
| (1,422) | 1:A:47:LEU:HD12 | 1:A:99:VAL:HG11 | 5 | 0.05 | 0.09 |
| (1,422) | 1:A:47:LEU:HD12 | 1:A:99:VAL:HG12 | 5 | 0.05 | 0.09 |
| (1,422) | 1:A:47:LEU:HD12 | 1:A:99:VAL:HG13 | 5 | 0.05 | 0.09 |
| (1,422) | 1:A:47:LEU:HD13 | 1:A:99:VAL:HG11 | 5 | 0.05 | 0.09 |
| (1,422) | 1:A:47:LEU:HD13 | 1:A:99:VAL:HG12 | 5 | 0.05 | 0.09 |
| (1,422) | 1:A:47:LEU:HD13 | 1:A:99:VAL:HG13 | 5 | 0.05 | 0.09 |
| (1,419) | 1:A:169:ASN:H | 1:A:171:LEU:HD21 | 5 | 0.06 | 0.11 |
| (1,419) | 1:A:169:ASN:H | 1:A:171:LEU:HD22 | 5 | 0.06 | 0.11 |
| (1,419) | 1:A:169:ASN:H | 1:A:171:LEU:HD23 | 5 | 0.06 | 0.11 |
| (1,410) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:150:LEU:HD21 | 5 | 0.84 | 1.14 |
| (1,410) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:150:LEU:HD22 | 5 | 0.84 | 1.14 |
| (1,410) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:150:LEU:HD23 | 5 | 0.84 | 1.14 |
| (1,410) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:150:LEU:HD21 | 5 | 0.84 | 1.14 |
| (1,410) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:150:LEU:HD22 | 5 | 0.84 | 1.14 |
| (1,410) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:150:LEU:HD23 | 5 | 0.84 | 1.14 |
| (1,410) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:150:LEU:HD21 | 5 | 0.84 | 1.14 |
| (1,410) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:150:LEU:HD22 | 5 | 0.84 | 1.14 |
| (1,410) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:150:LEU:HD23 | 5 | 0.84 | 1.14 |
| (1,391) | 1:A:58:ASP:H | 1:A:64:LEU:HD21 | 5 | 0.03 | 0.09 |
| (1,391) | 1:A:58:ASP:H | 1:A:64:LEU:HD22 | 5 | 0.03 | 0.09 |
| (1,391) | 1:A:58:ASP:H | 1:A:64:LEU:HD23 | 5 | 0.03 | 0.09 |
| (1,361) | 1:A:72:GLN:H | 1:A:78:ILE:HD11 | 5 | 0.09 | 0.18 |
| (1,361) | 1:A:72:GLN:H | 1:A:78:ILE:HD12 | 5 | 0.09 | 0.18 |
| (1,361) | 1:A:72:GLN:H | 1:A:78:ILE:HD13 | 5 | 0.09 | 0.18 |
| (1,249) | 1:A:81:VAL:HG11 | 1:A:84:ASN:H | 5 | 0.34 | 0.43 |
| (1,249) | 1:A:81:VAL:HG12 | 1:A:84:ASN:H | 5 | 0.34 | 0.43 |
| (1,249) | 1:A:81:VAL:HG13 | 1:A:84:ASN:H | 5 | 0.34 | 0.43 |
| (1,242) | 1:A:133:ALA:H | 1:A:147:LEU:HD21 | 5 | 0.09 | 0.21 |
| (1,242) | 1:A:133:ALA:H | 1:A:147:LEU:HD22 | 5 | 0.09 | 0.21 |
| (1,242) | 1:A:133:ALA:H | 1:A:147:LEU:HD23 | 5 | 0.09 | 0.21 |
| (1,221) | 1:A:160:LEU:HD21 | 1:A:165:TRP:HE1 | 5 | 0.05 | 0.09 |
| (1,221) | 1:A:160:LEU:HD22 | 1:A:165:TRP:HE1 | 5 | 0.05 | 0.09 |
| (1,221) | 1:A:160:LEU:HD23 | 1:A:165:TRP:HE1 | 5 | 0.05 | 0.09 |
| (1,211) | 1:A:85:LEU:H | 1:A:88:PHE:H | 5 | 0.07 | 0.16 |
| (1,159) | 1:A:160:LEU:HD21 | 1:A:163:LEU:H | 5 | 0.03 | 0.08 |
| (1,159) | 1:A:160:LEU:HD22 | 1:A:163:LEU:H | 5 | 0.03 | 0.08 |
| (1,159) | 1:A:160:LEU:HD23 | 1:A:163:LEU:H | 5 | 0.03 | 0.08 |
| (1,155) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:57:VAL:H | 5 | 0.05 | 0.07 |
| (1,155) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:57:VAL:H | 5 | 0.05 | 0.07 |
| (1,155) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:57:VAL:H | 5 | 0.05 | 0.07 |
| (1,1121) | 1:A:169:ASN:H | 1:A:189:GLN:O | 5 | 0.05 | 0.07 |
| (1,1117) | 1:A:167:ILE:H | 1:A:191:LEU:O | 5 | 0.06 | 0.09 |



Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models | Mean (Å) | Max (Å) |
|---------|------------------|------------------|--------|----------|---------|
| (1,101) | 1:A:135:GLU:H | 1:A:138:GLN:H | 5 | 0.09 | 0.15 |
| (1,997) | 1:A:81:VAL:H | 1:A:58:ASP:H | 4 | 0.06 | 0.1 |
| (1,986) | 1:A:138:GLN:H | 1:A:147:LEU:HD11 | 4 | 0.19 | 0.23 |
| (1,986) | 1:A:138:GLN:H | 1:A:147:LEU:HD12 | 4 | 0.19 | 0.23 |
| (1,986) | 1:A:138:GLN:H | 1:A:147:LEU:HD13 | 4 | 0.19 | 0.23 |
| (1,971) | 1:A:160:LEU:HD11 | 1:A:163:LEU:H | 4 | 0.05 | 0.15 |
| (1,971) | 1:A:160:LEU:HD12 | 1:A:163:LEU:H | 4 | 0.05 | 0.15 |
| (1,971) | 1:A:160:LEU:HD13 | 1:A:163:LEU:H | 4 | 0.05 | 0.15 |
| (1,955) | 1:A:173:ARG:H | 1:A:187:LEU:HD21 | 4 | 0.03 | 0.05 |
| (1,955) | 1:A:173:ARG:H | 1:A:187:LEU:HD22 | 4 | 0.03 | 0.05 |
| (1,955) | 1:A:173:ARG:H | 1:A:187:LEU:HD23 | 4 | 0.03 | 0.05 |
| (1,931) | 1:A:73:GLU:H | 1:A:76:VAL:HG21 | 4 | 0.04 | 0.06 |
| (1,931) | 1:A:73:GLU:H | 1:A:76:VAL:HG22 | 4 | 0.04 | 0.06 |
| (1,931) | 1:A:73:GLU:H | 1:A:76:VAL:HG23 | 4 | 0.04 | 0.06 |
| (1,921) | 1:A:164:ASN:H | 1:A:195:LEU:HD11 | 4 | 0.04 | 0.06 |
| (1,921) | 1:A:164:ASN:H | 1:A:195:LEU:HD12 | 4 | 0.04 | 0.06 |
| (1,921) | 1:A:164:ASN:H | 1:A:195:LEU:HD13 | 4 | 0.04 | 0.06 |
| (1,840) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:121:LEU:H | 4 | 0.08 | 0.12 |
| (1,840) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:121:LEU:H | 4 | 0.08 | 0.12 |
| (1,840) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:121:LEU:H | 4 | 0.08 | 0.12 |
| (1,824) | 1:A:24:VAL:HG21 | 1:A:26:ASN:H | 4 | 0.03 | 0.05 |
| (1,824) | 1:A:24:VAL:HG22 | 1:A:26:ASN:H | 4 | 0.03 | 0.05 |
| (1,824) | 1:A:24:VAL:HG23 | 1:A:26:ASN:H | 4 | 0.03 | 0.05 |
| (1,820) | 1:A:75:GLY:H | 1:A:76:VAL:HG11 | 4 | 0.03 | 0.04 |
| (1,820) | 1:A:75:GLY:H | 1:A:76:VAL:HG12 | 4 | 0.03 | 0.04 |
| (1,820) | 1:A:75:GLY:H | 1:A:76:VAL:HG13 | 4 | 0.03 | 0.04 |
| (1,791) | 1:A:121:LEU:HD21 | 1:A:127:PHE:H | 4 | 0.04 | 0.09 |
| (1,791) | 1:A:121:LEU:HD22 | 1:A:127:PHE:H | 4 | 0.04 | 0.09 |
| (1,791) | 1:A:121:LEU:HD23 | 1:A:127:PHE:H | 4 | 0.04 | 0.09 |
| (1,790) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:85:LEU:HD21 | 4 | 0.09 | 0.15 |
| (1,790) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:85:LEU:HD22 | 4 | 0.09 | 0.15 |
| (1,790) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:85:LEU:HD23 | 4 | 0.09 | 0.15 |
| (1,788) | 1:A:37:ALA:H | 1:A:85:LEU:HD21 | 4 | 0.03 | 0.05 |
| (1,788) | 1:A:37:ALA:H | 1:A:85:LEU:HD22 | 4 | 0.03 | 0.05 |
| (1,788) | 1:A:37:ALA:H | 1:A:85:LEU:HD23 | 4 | 0.03 | 0.05 |
| (1,77) | 1:A:173:ARG:H | 1:A:185:ALA:H | 4 | 0.05 | 0.11 |
| (1,758) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:150:LEU:HD11 | 4 | 0.28 | 0.39 |
| (1,758) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:150:LEU:HD12 | 4 | 0.28 | 0.39 |
| (1,758) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:150:LEU:HD13 | 4 | 0.28 | 0.39 |
| (1,758) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:150:LEU:HD11 | 4 | 0.28 | 0.39 |
| (1,758) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:150:LEU:HD12 | 4 | 0.28 | 0.39 |
| (1,100) | | | | | |



Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models | Mean (Å) | Max (Å) |
|---------|------------------|------------------|--------|----------|---------|
| (1,758) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:150:LEU:HD11 | 4 | 0.28 | 0.39 |
| (1,758) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:150:LEU:HD12 | 4 | 0.28 | 0.39 |
| (1,758) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:150:LEU:HD13 | 4 | 0.28 | 0.39 |
| (1,632) | 1:A:146:ASP:H | 1:A:150:LEU:H | 4 | 0.09 | 0.12 |
| (1,603) | 1:A:58:ASP:H | 1:A:81:VAL:H | 4 | 0.05 | 0.09 |
| (1,478) | 1:A:81:VAL:HG21 | 1:A:82:GLN:H | 4 | 0.04 | 0.07 |
| (1,478) | 1:A:81:VAL:HG22 | 1:A:82:GLN:H | 4 | 0.04 | 0.07 |
| (1,478) | 1:A:81:VAL:HG23 | 1:A:82:GLN:H | 4 | 0.04 | 0.07 |
| (1,424) | 1:A:128:ILE:HD11 | 1:A:191:LEU:HD21 | 4 | 0.05 | 0.08 |
| (1,424) | 1:A:128:ILE:HD11 | 1:A:191:LEU:HD22 | 4 | 0.05 | 0.08 |
| (1,424) | 1:A:128:ILE:HD11 | 1:A:191:LEU:HD23 | 4 | 0.05 | 0.08 |
| (1,424) | 1:A:128:ILE:HD12 | 1:A:191:LEU:HD21 | 4 | 0.05 | 0.08 |
| (1,424) | 1:A:128:ILE:HD12 | 1:A:191:LEU:HD22 | 4 | 0.05 | 0.08 |
| (1,424) | 1:A:128:ILE:HD12 | 1:A:191:LEU:HD23 | 4 | 0.05 | 0.08 |
| (1,424) | 1:A:128:ILE:HD13 | 1:A:191:LEU:HD21 | 4 | 0.05 | 0.08 |
| (1,424) | 1:A:128:ILE:HD13 | 1:A:191:LEU:HD22 | 4 | 0.05 | 0.08 |
| (1,424) | 1:A:128:ILE:HD13 | 1:A:191:LEU:HD23 | 4 | 0.05 | 0.08 |
| (1,398) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:36:LEU:HD21 | 4 | 0.09 | 0.21 |
| (1,398) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:36:LEU:HD22 | 4 | 0.09 | 0.21 |
| (1,398) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:36:LEU:HD23 | 4 | 0.09 | 0.21 |
| (1,398) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:36:LEU:HD21 | 4 | 0.09 | 0.21 |
| (1,398) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:36:LEU:HD22 | 4 | 0.09 | 0.21 |
| (1,398) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:36:LEU:HD23 | 4 | 0.09 | 0.21 |
| (1,398) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:36:LEU:HD21 | 4 | 0.09 | 0.21 |
| (1,398) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:36:LEU:HD22 | 4 | 0.09 | 0.21 |
| (1,398) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:36:LEU:HD23 | 4 | 0.09 | 0.21 |
| (1,326) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:80:THR:H | 4 | 0.05 | 0.07 |
| (1,326) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:80:THR:H | 4 | 0.05 | 0.07 |
| (1,326) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:80:THR:H | 4 | 0.05 | 0.07 |
| (1,303) | 1:A:91:VAL:H | 1:A:93:ASP:H | 4 | 0.18 | 0.3 |
| (1,286) | 1:A:125:GLY:H | 1:A:194:LYS:H | 4 | 0.04 | 0.07 |
| (1,269) | 1:A:145:LYS:H | 1:A:149:LEU:HD11 | 4 | 0.2 | 0.31 |
| (1,269) | 1:A:145:LYS:H | 1:A:149:LEU:HD12 | 4 | 0.2 | 0.31 |
| (1,269) | 1:A:145:LYS:H | 1:A:149:LEU:HD13 | 4 | 0.2 | 0.31 |
| (1,265) | 1:A:72:GLN:H | 1:A:76:VAL:HG21 | 4 | 0.03 | 0.07 |
| (1,265) | 1:A:72:GLN:H | 1:A:76:VAL:HG22 | 4 | 0.03 | 0.07 |
| (1,265) | 1:A:72:GLN:H | 1:A:76:VAL:HG23 | 4 | 0.03 | 0.07 |
| (1,262) | 1:A:91:VAL:HG11 | 1:A:94:ALA:H | 4 | 0.03 | 0.04 |
| (1,262) | 1:A:91:VAL:HG12 | 1:A:94:ALA:H | 4 | 0.03 | 0.04 |
| (1,262) | 1:A:91:VAL:HG13 | 1:A:94:ALA:H | 4 | 0.03 | 0.04 |
| (1,208) | 1:A:60:SER:H | 1:A:64:LEU:HD21 | 4 | 0.02 | 0.03 |
| (1,208) | 1:A:60:SER:H | 1:A:64:LEU:HD22 | 4 | 0.02 | 0.03 |



Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models | Mean (Å) | Max (Å) |
|----------|------------------|------------------|--------|----------|---------|
| (1,208) | 1:A:60:SER:H | 1:A:64:LEU:HD23 | 4 | 0.02 | 0.03 |
| (1,187) | 1:A:62:VAL:HG11 | 1:A:64:LEU:H | 4 | 0.03 | 0.04 |
| (1,187) | 1:A:62:VAL:HG12 | 1:A:64:LEU:H | 4 | 0.03 | 0.04 |
| (1,187) | 1:A:62:VAL:HG13 | 1:A:64:LEU:H | 4 | 0.03 | 0.04 |
| (1,175) | 1:A:163:LEU:HD11 | 1:A:166:LEU:H | 4 | 0.1 | 0.17 |
| (1,175) | 1:A:163:LEU:HD12 | 1:A:166:LEU:H | 4 | 0.1 | 0.17 |
| (1,175) | 1:A:163:LEU:HD13 | 1:A:166:LEU:H | 4 | 0.1 | 0.17 |
| (1,168) | 1:A:137:LEU:H | 1:A:150:LEU:HD21 | 4 | 0.16 | 0.29 |
| (1,168) | 1:A:137:LEU:H | 1:A:150:LEU:HD22 | 4 | 0.16 | 0.29 |
| (1,168) | 1:A:137:LEU:H | 1:A:150:LEU:HD23 | 4 | 0.16 | 0.29 |
| (1,122) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:191:LEU:HD21 | 4 | 0.06 | 0.12 |
| (1,122) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:191:LEU:HD22 | 4 | 0.06 | 0.12 |
| (1,122) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:191:LEU:HD23 | 4 | 0.06 | 0.12 |
| (1,1097) | 1:A:32:LYS:O | 1:A:96:GLU:H | 4 | 0.07 | 0.1 |
| (1,967) | 1:A:146:ASP:H | 1:A:149:LEU:HD11 | 3 | 0.14 | 0.23 |
| (1,967) | 1:A:146:ASP:H | 1:A:149:LEU:HD12 | 3 | 0.14 | 0.23 |
| (1,967) | 1:A:146:ASP:H | 1:A:149:LEU:HD13 | 3 | 0.14 | 0.23 |
| (1,963) | 1:A:117:VAL:HG11 | 1:A:120:GLY:H | 3 | 0.06 | 0.06 |
| (1,963) | 1:A:117:VAL:HG12 | 1:A:120:GLY:H | 3 | 0.06 | 0.06 |
| (1,963) | 1:A:117:VAL:HG13 | 1:A:120:GLY:H | 3 | 0.06 | 0.06 |
| (1,934) | 1:A:137:LEU:HD11 | 1:A:145:LYS:H | 3 | 0.14 | 0.25 |
| (1,934) | 1:A:137:LEU:HD12 | 1:A:145:LYS:H | 3 | 0.14 | 0.25 |
| (1,934) | 1:A:137:LEU:HD13 | 1:A:145:LYS:H | 3 | 0.14 | 0.25 |
| (1,780) | 1:A:167:ILE:H | 1:A:191:LEU:HD11 | 3 | 0.02 | 0.03 |
| (1,780) | 1:A:167:ILE:H | 1:A:191:LEU:HD12 | 3 | 0.02 | 0.03 |
| (1,780) | 1:A:167:ILE:H | 1:A:191:LEU:HD13 | 3 | 0.02 | 0.03 |
| (1,674) | 1:A:57:VAL:HG11 | 1:A:81:VAL:HG11 | 3 | 0.02 | 0.03 |
| (1,674) | 1:A:57:VAL:HG11 | 1:A:81:VAL:HG12 | 3 | 0.02 | 0.03 |
| (1,674) | 1:A:57:VAL:HG11 | 1:A:81:VAL:HG13 | 3 | 0.02 | 0.03 |
| (1,674) | 1:A:57:VAL:HG12 | 1:A:81:VAL:HG11 | 3 | 0.02 | 0.03 |
| (1,674) | 1:A:57:VAL:HG12 | 1:A:81:VAL:HG12 | 3 | 0.02 | 0.03 |
| (1,674) | 1:A:57:VAL:HG12 | 1:A:81:VAL:HG13 | 3 | 0.02 | 0.03 |
| (1,674) | 1:A:57:VAL:HG13 | 1:A:81:VAL:HG11 | 3 | 0.02 | 0.03 |
| (1,674) | 1:A:57:VAL:HG13 | 1:A:81:VAL:HG12 | 3 | 0.02 | 0.03 |
| (1,674) | 1:A:57:VAL:HG13 | 1:A:81:VAL:HG13 | 3 | 0.02 | 0.03 |
| (1,532) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:113:LEU:HD11 | 3 | 0.04 | 0.06 |
| (1,532) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:113:LEU:HD12 | 3 | 0.04 | 0.06 |
| (1,532) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:113:LEU:HD13 | 3 | 0.04 | 0.06 |
| (1,532) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:113:LEU:HD11 | 3 | 0.04 | 0.06 |
| (1,532) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:113:LEU:HD12 | 3 | 0.04 | 0.06 |
| (1,532) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:113:LEU:HD13 | 3 | 0.04 | 0.06 |
| () / | · . | | | | |



Continued from previous page...

| (1,532) 1: (1,497) 1: (1,497) 1: (1,497) 1: (1,497) 1: (1,497) 1: | :A:105:LEU:HD13 :A:105:LEU:HD13 :A:129:LEU:HD21 :A:129:LEU:HD21 :A:129:LEU:HD21 :A:129:LEU:HD21 | 1:A:113:LEU:HD12 1:A:113:LEU:HD13 1:A:156:LEU:HD21 1:A:156:LEU:HD22 1:A:156:LEU:HD23 | 3 3 3 | 0.04 0.04 0.07 | 0.06 |
|--|--|--|-------------|----------------------|------|
| (1,497) 1: (1,497) 1: (1,497) 1: (1,497) 1: (1,497) 1: | :A:129:LEU:HD21 :A:129:LEU:HD21 :A:129:LEU:HD21 :A:129:LEU:HD22 | 1:A:156:LEU:HD21 1:A:156:LEU:HD22 | 3 | | |
| (1,497) 1: (1,497) 1: (1,497) 1: (1,497) 1: | :A:129:LEU:HD21 :A:129:LEU:HD21 :A:129:LEU:HD22 | 1:A:156:LEU:HD22 | | 0.07 | 0.14 |
| (1,497) 1: (1,497) 1: (1,497) 1: | :A:129:LEU:HD21 :A:129:LEU:HD22 | | 3 | i . | 0.14 |
| (1,497) 1: $(1,497)$ 1: | :A:129:LEU:HD22 | 1:A:156:LEU:HD23 | _ | 0.07 | 0.14 |
| (1,497) 1: | | | 3 | 0.07 | 0.14 |
| (/ / | | 1:A:156:LEU:HD21 | 3 | 0.07 | 0.14 |
| (1.407) 1 | :A:129:LEU:HD22 | 1:A:156:LEU:HD22 | 3 | 0.07 | 0.14 |
| (1,497) 1: | :A:129:LEU:HD22 | 1:A:156:LEU:HD23 | 3 | 0.07 | 0.14 |
| (1,497) 1: | :A:129:LEU:HD23 | 1:A:156:LEU:HD21 | 3 | 0.07 | 0.14 |
| (1,497) 1: | :A:129:LEU:HD23 | 1:A:156:LEU:HD22 | 3 | 0.07 | 0.14 |
| (1,497) 1: | :A:129:LEU:HD23 | 1:A:156:LEU:HD23 | 3 | 0.07 | 0.14 |
| (1,491) | 1:A:37:ALA:H | 1:A:85:LEU:HD11 | 3 | 0.1 | 0.12 |
| (1,491) | 1:A:37:ALA:H | 1:A:85:LEU:HD12 | 3 | 0.1 | 0.12 |
| (1,491) | 1:A:37:ALA:H | 1:A:85:LEU:HD13 | 3 | 0.1 | 0.12 |
| (1,443) 1: | :A:153:LEU:HD21 | 1:A:190:LEU:HD21 | 3 | 0.04 | 0.07 |
| (1,443) 1: | :A:153:LEU:HD21 | 1:A:190:LEU:HD22 | 3 | 0.04 | 0.07 |
| ` ′ | :A:153:LEU:HD21 | 1:A:190:LEU:HD23 | 3 | 0.04 | 0.07 |
| · · / | :A:153:LEU:HD22 | 1:A:190:LEU:HD21 | 3 | 0.04 | 0.07 |
| ` ' | :A:153:LEU:HD22 | 1:A:190:LEU:HD22 | 3 | 0.04 | 0.07 |
| (1,443) 1: | :A:153:LEU:HD22 | 1:A:190:LEU:HD23 | 3 | 0.04 | 0.07 |
| (1,443) 1: | :A:153:LEU:HD23 | 1:A:190:LEU:HD21 | 3 | 0.04 | 0.07 |
| (1,443) 1: | :A:153:LEU:HD23 | 1:A:190:LEU:HD22 | 3 | 0.04 | 0.07 |
| (1,443) 1: | :A:153:LEU:HD23 | 1:A:190:LEU:HD23 | 3 | 0.04 | 0.07 |
| ` ' | :A:47:LEU:HD21 | 1:A:50:LEU:HD11 | 3 | 0.03 | 0.05 |
| (1,405) 1 | :A:47:LEU:HD21 | 1:A:50:LEU:HD12 | 3 | 0.03 | 0.05 |
| (1,405) 1 | :A:47:LEU:HD21 | 1:A:50:LEU:HD13 | 3 | 0.03 | 0.05 |
| (1,405) 1 | :A:47:LEU:HD22 | 1:A:50:LEU:HD11 | 3 | 0.03 | 0.05 |
| (1,405) 1 | :A:47:LEU:HD22 | 1:A:50:LEU:HD12 | 3 | 0.03 | 0.05 |
| (1,405) 1 | :A:47:LEU:HD22 | 1:A:50:LEU:HD13 | 3 | 0.03 | 0.05 |
| (1,405) 1 | :A:47:LEU:HD23 | 1:A:50:LEU:HD11 | 3 | 0.03 | 0.05 |
| (1,405) 1 | :A:47:LEU:HD23 | 1:A:50:LEU:HD12 | 3 | 0.03 | 0.05 |
| (1,405) 1 | :A:47:LEU:HD23 | 1:A:50:LEU:HD13 | 3 | 0.03 | 0.05 |
| · · · / | 1:A:33:ILE:HD11 | 1:A:47:LEU:HD21 | 3 | 0.07 | 0.08 |
| | 1:A:33:ILE:HD11 | 1:A:47:LEU:HD22 | 3 | 0.07 | 0.08 |
| · · / | 1:A:33:ILE:HD11 | 1:A:47:LEU:HD23 | 3 | 0.07 | 0.08 |
| | 1:A:33:ILE:HD12 | 1:A:47:LEU:HD21 | 3 | 0.07 | 0.08 |
| | 1:A:33:ILE:HD12 | 1:A:47:LEU:HD22 | 3 | 0.07 | 0.08 |
| | 1:A:33:ILE:HD12 | 1:A:47:LEU:HD23 | 3 | 0.07 | 0.08 |
| | 1:A:33:ILE:HD13 | 1:A:47:LEU:HD21 | 3 | 0.07 | 0.08 |
| , , , | 1:A:33:ILE:HD13 | 1:A:47:LEU:HD22 | 3 | 0.07 | 0.08 |
| (' / | 1:A:33:ILE:HD13 | 1:A:47:LEU:HD23 | 3 | 0.07 | 0.08 |
| ` / | 1:A:33:ILE:HD11 | 1:A:50:LEU:HD11 | 3 | 0.04 | 0.06 |



Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models | Mean (Å) | Max (Å) |
|---------|------------------|------------------|--------|----------|---------|
| (1,376) | 1:A:33:ILE:HD11 | 1:A:50:LEU:HD12 | 3 | 0.04 | 0.06 |
| (1,376) | 1:A:33:ILE:HD11 | 1:A:50:LEU:HD13 | 3 | 0.04 | 0.06 |
| (1,376) | 1:A:33:ILE:HD12 | 1:A:50:LEU:HD11 | 3 | 0.04 | 0.06 |
| (1,376) | 1:A:33:ILE:HD12 | 1:A:50:LEU:HD12 | 3 | 0.04 | 0.06 |
| (1,376) | 1:A:33:ILE:HD12 | 1:A:50:LEU:HD13 | 3 | 0.04 | 0.06 |
| (1,376) | 1:A:33:ILE:HD13 | 1:A:50:LEU:HD11 | 3 | 0.04 | 0.06 |
| (1,376) | 1:A:33:ILE:HD13 | 1:A:50:LEU:HD12 | 3 | 0.04 | 0.06 |
| (1,376) | 1:A:33:ILE:HD13 | 1:A:50:LEU:HD13 | 3 | 0.04 | 0.06 |
| (1,37) | 1:A:91:VAL:H | 1:A:92:ALA:H | 3 | 0.14 | 0.14 |
| (1,367) | 1:A:21:LEU:HD11 | 1:A:128:ILE:HD11 | 3 | 0.07 | 0.12 |
| (1,367) | 1:A:21:LEU:HD11 | 1:A:128:ILE:HD12 | 3 | 0.07 | 0.12 |
| (1,367) | 1:A:21:LEU:HD11 | 1:A:128:ILE:HD13 | 3 | 0.07 | 0.12 |
| (1,367) | 1:A:21:LEU:HD12 | 1:A:128:ILE:HD11 | 3 | 0.07 | 0.12 |
| (1,367) | 1:A:21:LEU:HD12 | 1:A:128:ILE:HD12 | 3 | 0.07 | 0.12 |
| (1,367) | 1:A:21:LEU:HD12 | 1:A:128:ILE:HD13 | 3 | 0.07 | 0.12 |
| (1,367) | 1:A:21:LEU:HD13 | 1:A:128:ILE:HD11 | 3 | 0.07 | 0.12 |
| (1,367) | 1:A:21:LEU:HD13 | 1:A:128:ILE:HD12 | 3 | 0.07 | 0.12 |
| (1,367) | 1:A:21:LEU:HD13 | 1:A:128:ILE:HD13 | 3 | 0.07 | 0.12 |
| (1,359) | 1:A:90:ILE:HD11 | 1:A:117:VAL:HG21 | 3 | 0.01 | 0.01 |
| (1,359) | 1:A:90:ILE:HD11 | 1:A:117:VAL:HG22 | 3 | 0.01 | 0.01 |
| (1,359) | 1:A:90:ILE:HD11 | 1:A:117:VAL:HG23 | 3 | 0.01 | 0.01 |
| (1,359) | 1:A:90:ILE:HD12 | 1:A:117:VAL:HG21 | 3 | 0.01 | 0.01 |
| (1,359) | 1:A:90:ILE:HD12 | 1:A:117:VAL:HG22 | 3 | 0.01 | 0.01 |
| (1,359) | 1:A:90:ILE:HD12 | 1:A:117:VAL:HG23 | 3 | 0.01 | 0.01 |
| (1,359) | 1:A:90:ILE:HD13 | 1:A:117:VAL:HG21 | 3 | 0.01 | 0.01 |
| (1,359) | 1:A:90:ILE:HD13 | 1:A:117:VAL:HG22 | 3 | 0.01 | 0.01 |
| (1,359) | 1:A:90:ILE:HD13 | 1:A:117:VAL:HG23 | 3 | 0.01 | 0.01 |
| (1,343) | 1:A:137:LEU:HD11 | 1:A:146:ASP:H | 3 | 0.22 | 0.24 |
| (1,343) | 1:A:137:LEU:HD12 | 1:A:146:ASP:H | 3 | 0.22 | 0.24 |
| (1,343) | 1:A:137:LEU:HD13 | 1:A:146:ASP:H | 3 | 0.22 | 0.24 |
| (1,333) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:139:TYR:H | 3 | 0.05 | 0.08 |
| (1,333) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:139:TYR:H | 3 | 0.05 | 0.08 |
| (1,333) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:139:TYR:H | 3 | 0.05 | 0.08 |
| (1,308) | 1:A:159:GLU:H | 1:A:165:TRP:HE1 | 3 | 0.09 | 0.18 |
| (1,304) | 1:A:91:VAL:HG11 | 1:A:93:ASP:H | 3 | 0.05 | 0.11 |
| (1,304) | 1:A:91:VAL:HG12 | 1:A:93:ASP:H | 3 | 0.05 | 0.11 |
| (1,304) | 1:A:91:VAL:HG13 | 1:A:93:ASP:H | 3 | 0.05 | 0.11 |
| (1,301) | 1:A:104:HIS:H | 1:A:105:LEU:HD21 | 3 | 0.18 | 0.37 |
| (1,301) | 1:A:104:HIS:H | 1:A:105:LEU:HD22 | 3 | 0.18 | 0.37 |
| (1,301) | 1:A:104:HIS:H | 1:A:105:LEU:HD23 | 3 | 0.18 | 0.37 |
| (1,270) | 1:A:121:LEU:HD11 | 1:A:124:GLY:H | 3 | 0.13 | 0.13 |
| (1,270) | 1:A:121:LEU:HD12 | 1:A:124:GLY:H | 3 | 0.13 | 0.13 |



Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models | Mean (Å) | Max (Å) |
|----------|------------------|------------------|--------|----------|---------|
| (1,270) | 1:A:121:LEU:HD13 | 1:A:124:GLY:H | 3 | 0.13 | 0.13 |
| (1,243) | 1:A:133:ALA:H | 1:A:150:LEU:HD11 | 3 | 0.08 | 0.13 |
| (1,243) | 1:A:133:ALA:H | 1:A:150:LEU:HD12 | 3 | 0.08 | 0.13 |
| (1,243) | 1:A:133:ALA:H | 1:A:150:LEU:HD13 | 3 | 0.08 | 0.13 |
| (1,203) | 1:A:149:LEU:H | 1:A:150:LEU:HD21 | 3 | 0.12 | 0.29 |
| (1,203) | 1:A:149:LEU:H | 1:A:150:LEU:HD22 | 3 | 0.12 | 0.29 |
| (1,203) | 1:A:149:LEU:H | 1:A:150:LEU:HD23 | 3 | 0.12 | 0.29 |
| (1,1074) | 1:A:110:ARG:O | 1:A:114:TYR:H | 3 | 0.07 | 0.08 |
| (1,1050) | 1:A:62:VAL:O | 1:A:66:LYS:H | 3 | 0.05 | 0.09 |
| (1,1042) | 1:A:44:ALA:O | 1:A:48:ALA:H | 3 | 0.05 | 0.07 |
| (1,1035) | 1:A:23:SER:O | 1:A:27:GLN:N | 3 | 0.05 | 0.11 |
| (1,1021) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:90:ILE:HD11 | 3 | 0.01 | 0.01 |
| (1,1021) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:90:ILE:HD12 | 3 | 0.01 | 0.01 |
| (1,1021) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:90:ILE:HD13 | 3 | 0.01 | 0.01 |
| (1,1021) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:90:ILE:HD11 | 3 | 0.01 | 0.01 |
| (1,1021) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:90:ILE:HD12 | 3 | 0.01 | 0.01 |
| (1,1021) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:90:ILE:HD13 | 3 | 0.01 | 0.01 |
| (1,1021) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:90:ILE:HD11 | 3 | 0.01 | 0.01 |
| (1,1021) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:90:ILE:HD12 | 3 | 0.01 | 0.01 |
| (1,1021) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:90:ILE:HD13 | 3 | 0.01 | 0.01 |
| (1,985) | 1:A:129:LEU:HD21 | 1:A:130:GLU:H | 2 | 0.1 | 0.17 |
| (1,985) | 1:A:129:LEU:HD22 | 1:A:130:GLU:H | 2 | 0.1 | 0.17 |
| (1,985) | 1:A:129:LEU:HD23 | 1:A:130:GLU:H | 2 | 0.1 | 0.17 |
| (1,974) | 1:A:128:ILE:H | 1:A:129:LEU:HD21 | 2 | 0.05 | 0.07 |
| (1,974) | 1:A:128:ILE:H | 1:A:129:LEU:HD22 | 2 | 0.05 | 0.07 |
| (1,974) | 1:A:128:ILE:H | 1:A:129:LEU:HD23 | 2 | 0.05 | 0.07 |
| (1,943) | 1:A:68:LYS:H | 1:A:78:ILE:HD11 | 2 | 0.03 | 0.04 |
| (1,943) | 1:A:68:LYS:H | 1:A:78:ILE:HD12 | 2 | 0.03 | 0.04 |
| (1,943) | 1:A:68:LYS:H | 1:A:78:ILE:HD13 | 2 | 0.03 | 0.04 |
| (1,927) | 1:A:76:VAL:HG21 | 1:A:77:LYS:H | 2 | 0.04 | 0.05 |
| (1,927) | 1:A:76:VAL:HG22 | 1:A:77:LYS:H | 2 | 0.04 | 0.05 |
| (1,927) | 1:A:76:VAL:HG23 | 1:A:77:LYS:H | 2 | 0.04 | 0.05 |
| (1,881) | 1:A:78:ILE:HD11 | 1:A:79:THR:H | 2 | 0.04 | 0.06 |
| (1,881) | 1:A:78:ILE:HD12 | 1:A:79:THR:H | 2 | 0.04 | 0.06 |
| (1,881) | 1:A:78:ILE:HD13 | 1:A:79:THR:H | 2 | 0.04 | 0.06 |
| (1,880) | 1:A:109:LEU:HD21 | 1:A:113:LEU:H | 2 | 0.01 | 0.02 |
| (1,880) | 1:A:109:LEU:HD22 | 1:A:113:LEU:H | 2 | 0.01 | 0.02 |
| (1,880) | 1:A:109:LEU:HD23 | 1:A:113:LEU:H | 2 | 0.01 | 0.02 |
| (1,836) | 1:A:81:VAL:HG11 | 1:A:83:SER:H | 2 | 0.06 | 0.08 |
| (1,836) | 1:A:81:VAL:HG12 | 1:A:83:SER:H | 2 | 0.06 | 0.08 |
| (1,836) | 1:A:81:VAL:HG13 | 1:A:83:SER:H | 2 | 0.06 | 0.08 |
| (1,794) | 1:A:148:ASP:H | 1:A:149:LEU:HD21 | 2 | 0.03 | 0.05 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models | Mean (Å) | Max (Å) |
|---------|------------------|------------------|--------|----------|---------|
| (1,794) | 1:A:148:ASP:H | 1:A:149:LEU:HD22 | 2 | 0.03 | 0.05 |
| (1,794) | 1:A:148:ASP:H | 1:A:149:LEU:HD23 | 2 | 0.03 | 0.05 |
| (1,779) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:191:LEU:HD11 | 2 | 0.04 | 0.04 |
| (1,779) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:191:LEU:HD12 | 2 | 0.04 | 0.04 |
| (1,779) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:191:LEU:HD13 | 2 | 0.04 | 0.04 |
| (1,777) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:83:SER:H | 2 | 0.04 | 0.06 |
| (1,777) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:83:SER:H | 2 | 0.04 | 0.06 |
| (1,777) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:83:SER:H | 2 | 0.04 | 0.06 |
| (1,757) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:50:LEU:HD11 | 2 | 0.07 | 0.09 |
| (1,757) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:50:LEU:HD12 | 2 | 0.07 | 0.09 |
| (1,757) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:50:LEU:HD13 | 2 | 0.07 | 0.09 |
| (1,757) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:50:LEU:HD11 | 2 | 0.07 | 0.09 |
| (1,757) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:50:LEU:HD12 | 2 | 0.07 | 0.09 |
| (1,757) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:50:LEU:HD13 | 2 | 0.07 | 0.09 |
| (1,757) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:50:LEU:HD11 | 2 | 0.07 | 0.09 |
| (1,757) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:50:LEU:HD12 | 2 | 0.07 | 0.09 |
| (1,757) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:50:LEU:HD13 | 2 | 0.07 | 0.09 |
| (1,736) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:85:LEU:HD21 | 2 | 0.02 | 0.02 |
| (1,736) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:85:LEU:HD22 | 2 | 0.02 | 0.02 |
| (1,736) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:85:LEU:HD23 | 2 | 0.02 | 0.02 |
| (1,736) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:85:LEU:HD21 | 2 | 0.02 | 0.02 |
| (1,736) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:85:LEU:HD22 | 2 | 0.02 | 0.02 |
| (1,736) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:85:LEU:HD23 | 2 | 0.02 | 0.02 |
| (1,736) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:85:LEU:HD21 | 2 | 0.02 | 0.02 |
| (1,736) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:85:LEU:HD22 | 2 | 0.02 | 0.02 |
| (1,736) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:85:LEU:HD23 | 2 | 0.02 | 0.02 |
| (1,718) | 1:A:166:LEU:HD21 | 1:A:191:LEU:HD11 | 2 | 0.03 | 0.04 |
| (1,718) | 1:A:166:LEU:HD21 | 1:A:191:LEU:HD12 | 2 | 0.03 | 0.04 |
| (1,718) | 1:A:166:LEU:HD21 | 1:A:191:LEU:HD13 | 2 | 0.03 | 0.04 |
| (1,718) | 1:A:166:LEU:HD22 | 1:A:191:LEU:HD11 | 2 | 0.03 | 0.04 |
| (1,718) | 1:A:166:LEU:HD22 | 1:A:191:LEU:HD12 | 2 | 0.03 | 0.04 |
| (1,718) | 1:A:166:LEU:HD22 | 1:A:191:LEU:HD13 | 2 | 0.03 | 0.04 |
| (1,718) | 1:A:166:LEU:HD23 | 1:A:191:LEU:HD11 | 2 | 0.03 | 0.04 |
| (1,718) | 1:A:166:LEU:HD23 | 1:A:191:LEU:HD12 | 2 | 0.03 | 0.04 |
| (1,718) | 1:A:166:LEU:HD23 | 1:A:191:LEU:HD13 | 2 | 0.03 | 0.04 |
| (1,702) | 1:A:137:LEU:HD11 | 1:A:147:LEU:HD11 | 2 | 0.02 | 0.03 |
| (1,702) | 1:A:137:LEU:HD11 | 1:A:147:LEU:HD12 | 2 | 0.02 | 0.03 |
| (1,702) | 1:A:137:LEU:HD11 | 1:A:147:LEU:HD13 | 2 | 0.02 | 0.03 |
| (1,702) | 1:A:137:LEU:HD12 | 1:A:147:LEU:HD11 | 2 | 0.02 | 0.03 |
| (1,702) | 1:A:137:LEU:HD12 | 1:A:147:LEU:HD12 | 2 | 0.02 | 0.03 |
| (1,702) | 1:A:137:LEU:HD12 | 1:A:147:LEU:HD13 | 2 | 0.02 | 0.03 |
| (1,702) | 1:A:137:LEU:HD13 | 1:A:147:LEU:HD11 | 2 | 0.02 | 0.03 |



Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models | Mean (Å) | Max (Å) |
|---------|------------------|------------------|--------|----------|---------|
| (1,702) | 1:A:137:LEU:HD13 | 1:A:147:LEU:HD12 | 2 | 0.02 | 0.03 |
| (1,702) | 1:A:137:LEU:HD13 | 1:A:147:LEU:HD13 | 2 | 0.02 | 0.03 |
| (1,694) | 1:A:99:VAL:HG11 | 1:A:101:ILE:HD11 | 2 | 0.1 | 0.12 |
| (1,694) | 1:A:99:VAL:HG11 | 1:A:101:ILE:HD12 | 2 | 0.1 | 0.12 |
| (1,694) | 1:A:99:VAL:HG11 | 1:A:101:ILE:HD13 | 2 | 0.1 | 0.12 |
| (1,694) | 1:A:99:VAL:HG12 | 1:A:101:ILE:HD11 | 2 | 0.1 | 0.12 |
| (1,694) | 1:A:99:VAL:HG12 | 1:A:101:ILE:HD12 | 2 | 0.1 | 0.12 |
| (1,694) | 1:A:99:VAL:HG12 | 1:A:101:ILE:HD13 | 2 | 0.1 | 0.12 |
| (1,694) | 1:A:99:VAL:HG13 | 1:A:101:ILE:HD11 | 2 | 0.1 | 0.12 |
| (1,694) | 1:A:99:VAL:HG13 | 1:A:101:ILE:HD12 | 2 | 0.1 | 0.12 |
| (1,694) | 1:A:99:VAL:HG13 | 1:A:101:ILE:HD13 | 2 | 0.1 | 0.12 |
| (1,693) | 1:A:91:VAL:HG21 | 1:A:98:ILE:HD11 | 2 | 0.18 | 0.22 |
| (1,693) | 1:A:91:VAL:HG21 | 1:A:98:ILE:HD12 | 2 | 0.18 | 0.22 |
| (1,693) | 1:A:91:VAL:HG21 | 1:A:98:ILE:HD13 | 2 | 0.18 | 0.22 |
| (1,693) | 1:A:91:VAL:HG22 | 1:A:98:ILE:HD11 | 2 | 0.18 | 0.22 |
| (1,693) | 1:A:91:VAL:HG22 | 1:A:98:ILE:HD12 | 2 | 0.18 | 0.22 |
| (1,693) | 1:A:91:VAL:HG22 | 1:A:98:ILE:HD13 | 2 | 0.18 | 0.22 |
| (1,693) | 1:A:91:VAL:HG23 | 1:A:98:ILE:HD11 | 2 | 0.18 | 0.22 |
| (1,693) | 1:A:91:VAL:HG23 | 1:A:98:ILE:HD12 | 2 | 0.18 | 0.22 |
| (1,693) | 1:A:91:VAL:HG23 | 1:A:98:ILE:HD13 | 2 | 0.18 | 0.22 |
| (1,660) | 1:A:162:SER:H | 1:A:165:TRP:HE1 | 2 | 0.06 | 0.08 |
| (1,625) | 1:A:135:GLU:H | 1:A:137:LEU:H | 2 | 0.04 | 0.06 |
| (1,624) | 1:A:133:ALA:H | 1:A:135:GLU:H | 2 | 0.17 | 0.27 |
| (1,623) | 1:A:133:ALA:H | 1:A:136:GLN:H | 2 | 0.17 | 0.26 |
| (1,592) | 1:A:124:GLY:H | 1:A:195:LEU:H | 2 | 0.03 | 0.03 |
| (1,502) | 1:A:160:LEU:HD11 | 1:A:163:LEU:HD21 | 2 | 0.08 | 0.08 |
| (1,502) | 1:A:160:LEU:HD11 | 1:A:163:LEU:HD22 | 2 | 0.08 | 0.08 |
| (1,502) | 1:A:160:LEU:HD11 | 1:A:163:LEU:HD23 | 2 | 0.08 | 0.08 |
| (1,502) | 1:A:160:LEU:HD12 | 1:A:163:LEU:HD21 | 2 | 0.08 | 0.08 |
| (1,502) | 1:A:160:LEU:HD12 | 1:A:163:LEU:HD22 | 2 | 0.08 | 0.08 |
| (1,502) | 1:A:160:LEU:HD12 | 1:A:163:LEU:HD23 | 2 | 0.08 | 0.08 |
| (1,502) | 1:A:160:LEU:HD13 | 1:A:163:LEU:HD21 | 2 | 0.08 | 0.08 |
| (1,502) | 1:A:160:LEU:HD13 | 1:A:163:LEU:HD22 | 2 | 0.08 | 0.08 |
| (1,502) | 1:A:160:LEU:HD13 | 1:A:163:LEU:HD23 | 2 | 0.08 | 0.08 |
| (1,450) | 1:A:21:LEU:HD11 | 1:A:47:LEU:HD21 | 2 | 0.02 | 0.03 |
| (1,450) | 1:A:21:LEU:HD11 | 1:A:47:LEU:HD22 | 2 | 0.02 | 0.03 |
| (1,450) | 1:A:21:LEU:HD11 | 1:A:47:LEU:HD23 | 2 | 0.02 | 0.03 |
| (1,450) | 1:A:21:LEU:HD12 | 1:A:47:LEU:HD21 | 2 | 0.02 | 0.03 |
| (1,450) | 1:A:21:LEU:HD12 | 1:A:47:LEU:HD22 | 2 | 0.02 | 0.03 |
| (1,450) | 1:A:21:LEU:HD12 | 1:A:47:LEU:HD23 | 2 | 0.02 | 0.03 |
| (1,450) | 1:A:21:LEU:HD13 | 1:A:47:LEU:HD21 | 2 | 0.02 | 0.03 |
| (1,450) | 1:A:21:LEU:HD13 | 1:A:47:LEU:HD22 | 2 | 0.02 | 0.03 |



Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models | Mean (Å) | Max (Å) |
|---------|-----------------|------------------|--------|----------|---------|
| (1,450) | 1:A:21:LEU:HD13 | 1:A:47:LEU:HD23 | 2 | 0.02 | 0.03 |
| (1,389) | 1:A:48:ALA:H | 1:A:50:LEU:HD21 | 2 | 0.02 | 0.02 |
| (1,389) | 1:A:48:ALA:H | 1:A:50:LEU:HD22 | 2 | 0.02 | 0.02 |
| (1,389) | 1:A:48:ALA:H | 1:A:50:LEU:HD23 | 2 | 0.02 | 0.02 |
| (1,386) | 1:A:50:LEU:H | 1:A:76:VAL:HG21 | 2 | 0.06 | 0.08 |
| (1,386) | 1:A:50:LEU:H | 1:A:76:VAL:HG22 | 2 | 0.06 | 0.08 |
| (1,386) | 1:A:50:LEU:H | 1:A:76:VAL:HG23 | 2 | 0.06 | 0.08 |
| (1,380) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:98:ILE:HD11 | 2 | 0.07 | 0.1 |
| (1,380) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:98:ILE:HD12 | 2 | 0.07 | 0.1 |
| (1,380) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:98:ILE:HD13 | 2 | 0.07 | 0.1 |
| (1,380) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:98:ILE:HD11 | 2 | 0.07 | 0.1 |
| (1,380) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:98:ILE:HD12 | 2 | 0.07 | 0.1 |
| (1,380) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:98:ILE:HD13 | 2 | 0.07 | 0.1 |
| (1,380) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:98:ILE:HD11 | 2 | 0.07 | 0.1 |
| (1,380) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:98:ILE:HD12 | 2 | 0.07 | 0.1 |
| (1,380) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:98:ILE:HD13 | 2 | 0.07 | 0.1 |
| (1,35) | 1:A:87:ASP:H | 1:A:88:PHE:H | 2 | 0.01 | 0.02 |
| (1,328) | 1:A:77:LYS:H | 1:A:78:ILE:HD11 | 2 | 0.05 | 0.05 |
| (1,328) | 1:A:77:LYS:H | 1:A:78:ILE:HD12 | 2 | 0.05 | 0.05 |
| (1,328) | 1:A:77:LYS:H | 1:A:78:ILE:HD13 | 2 | 0.05 | 0.05 |
| (1,324) | 1:A:148:ASP:H | 1:A:150:LEU:HD11 | 2 | 0.07 | 0.1 |
| (1,324) | 1:A:148:ASP:H | 1:A:150:LEU:HD12 | 2 | 0.07 | 0.1 |
| (1,324) | 1:A:148:ASP:H | 1:A:150:LEU:HD13 | 2 | 0.07 | 0.1 |
| (1,264) | 1:A:30:GLN:H | 1:A:33:ILE:HD11 | 2 | 0.07 | 0.07 |
| (1,264) | 1:A:30:GLN:H | 1:A:33:ILE:HD12 | 2 | 0.07 | 0.07 |
| (1,264) | 1:A:30:GLN:H | 1:A:33:ILE:HD13 | 2 | 0.07 | 0.07 |
| (1,261) | 1:A:135:GLU:H | 1:A:147:LEU:HD21 | 2 | 0.12 | 0.17 |
| (1,261) | 1:A:135:GLU:H | 1:A:147:LEU:HD22 | 2 | 0.12 | 0.17 |
| (1,261) | 1:A:135:GLU:H | 1:A:147:LEU:HD23 | 2 | 0.12 | 0.17 |
| (1,247) | 1:A:35:CYS:H | 1:A:81:VAL:HG21 | 2 | 0.08 | 0.13 |
| (1,247) | 1:A:35:CYS:H | 1:A:81:VAL:HG22 | 2 | 0.08 | 0.13 |
| (1,247) | 1:A:35:CYS:H | 1:A:81:VAL:HG23 | 2 | 0.08 | 0.13 |
| (1,246) | 1:A:156:LEU:H | 1:A:190:LEU:HD21 | 2 | 0.07 | 0.08 |
| (1,246) | 1:A:156:LEU:H | 1:A:190:LEU:HD22 | 2 | 0.07 | 0.08 |
| (1,246) | 1:A:156:LEU:H | 1:A:190:LEU:HD23 | 2 | 0.07 | 0.08 |
| (1,239) | 1:A:25:ALA:H | 1:A:28:ILE:HD11 | 2 | 0.04 | 0.04 |
| (1,239) | 1:A:25:ALA:H | 1:A:28:ILE:HD12 | 2 | 0.04 | 0.04 |
| (1,239) | 1:A:25:ALA:H | 1:A:28:ILE:HD13 | 2 | 0.04 | 0.04 |
| (1,228) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:147:LEU:HD11 | 2 | 0.16 | 0.21 |
| (1,228) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:147:LEU:HD12 | 2 | 0.16 | 0.21 |
| (1,228) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:147:LEU:HD13 | 2 | 0.16 | 0.21 |
| (1,2) | 1:A:60:SER:H | 1:A:62:VAL:H | 2 | 0.04 | 0.06 |



Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models | Mean (Å) | Max (Å) |
|----------|------------------|------------------|--------|----------|---------|
| (1,192) | 1:A:153:LEU:H | 1:A:157:GLN:H | 2 | 0.03 | 0.04 |
| (1,188) | 1:A:62:VAL:HG21 | 1:A:64:LEU:H | 2 | 0.02 | 0.03 |
| (1,188) | 1:A:62:VAL:HG22 | 1:A:64:LEU:H | 2 | 0.02 | 0.03 |
| (1,188) | 1:A:62:VAL:HG23 | 1:A:64:LEU:H | 2 | 0.02 | 0.03 |
| (1,169) | 1:A:137:LEU:H | 1:A:147:LEU:HD21 | 2 | 0.03 | 0.05 |
| (1,169) | 1:A:137:LEU:H | 1:A:147:LEU:HD22 | 2 | 0.03 | 0.05 |
| (1,169) | 1:A:137:LEU:H | 1:A:147:LEU:HD23 | 2 | 0.03 | 0.05 |
| (1,164) | 1:A:57:VAL:HG11 | 1:A:81:VAL:H | 2 | 0.03 | 0.04 |
| (1,164) | 1:A:57:VAL:HG12 | 1:A:81:VAL:H | 2 | 0.03 | 0.04 |
| (1,164) | 1:A:57:VAL:HG13 | 1:A:81:VAL:H | 2 | 0.03 | 0.04 |
| (1,16) | 1:A:145:LYS:H | 1:A:146:ASP:H | 2 | 0.04 | 0.05 |
| (1,145) | 1:A:175:LEU:H | 1:A:184:LYS:H | 2 | 0.06 | 0.09 |
| (1,114) | 1:A:94:ALA:H | 1:A:95:TRP:HE1 | 2 | 0.03 | 0.04 |
| (1,1109) | 1:A:129:LEU:H | 1:A:190:LEU:O | 2 | 0.06 | 0.11 |
| (1,109) | 1:A:149:LEU:H | 1:A:150:LEU:H | 2 | 0.13 | 0.16 |
| (1,1036) | 1:A:24:VAL:O | 1:A:28:ILE:H | 2 | 0.07 | 0.07 |
| (1,1025) | 1:A:88:PHE:HE1 | 1:A:34:LEU:HD21 | 2 | 0.04 | 0.04 |
| (1,1025) | 1:A:88:PHE:HE1 | 1:A:34:LEU:HD22 | 2 | 0.04 | 0.04 |
| (1,1025) | 1:A:88:PHE:HE1 | 1:A:34:LEU:HD23 | 2 | 0.04 | 0.04 |
| (1,1025) | 1:A:88:PHE:HE2 | 1:A:34:LEU:HD21 | 2 | 0.04 | 0.04 |
| (1,1025) | 1:A:88:PHE:HE2 | 1:A:34:LEU:HD22 | 2 | 0.04 | 0.04 |
| (1,1025) | 1:A:88:PHE:HE2 | 1:A:34:LEU:HD23 | 2 | 0.04 | 0.04 |
| (1,1013) | 1:A:126:VAL:HA | 1:A:193:GLN:HA | 2 | 0.09 | 0.13 |
| (1,1002) | 1:A:57:VAL:H | 1:A:37:ALA:H | 2 | 0.04 | 0.04 |
| (1,1000) | 1:A:55:THR:H | 1:A:35:CYS:H | 2 | 0.07 | 0.08 |
| (1,991) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:112:GLN:H | 1 | 0.04 | 0.04 |
| (1,991) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:112:GLN:H | 1 | 0.04 | 0.04 |
| (1,991) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:112:GLN:H | 1 | 0.04 | 0.04 |
| (1,984) | 1:A:132:PHE:H | 1:A:150:LEU:HD21 | 1 | 0.07 | 0.07 |
| (1,984) | 1:A:132:PHE:H | 1:A:150:LEU:HD22 | 1 | 0.07 | 0.07 |
| (1,984) | 1:A:132:PHE:H | 1:A:150:LEU:HD23 | 1 | 0.07 | 0.07 |
| (1,965) | 1:A:109:LEU:HD21 | 1:A:112:GLN:H | 1 | 0.05 | 0.05 |
| (1,965) | 1:A:109:LEU:HD22 | 1:A:112:GLN:H | 1 | 0.05 | 0.05 |
| (1,965) | 1:A:109:LEU:HD23 | 1:A:112:GLN:H | 1 | 0.05 | 0.05 |
| (1,960) | 1:A:160:LEU:HD21 | 1:A:162:SER:H | 1 | 0.06 | 0.06 |
| (1,960) | 1:A:160:LEU:HD22 | 1:A:162:SER:H | 1 | 0.06 | 0.06 |
| (1,960) | 1:A:160:LEU:HD23 | 1:A:162:SER:H | 1 | 0.06 | 0.06 |
| (1,957) | 1:A:136:GLN:H | 1:A:150:LEU:HD11 | 1 | 0.11 | 0.11 |
| (1,957) | 1:A:136:GLN:H | 1:A:150:LEU:HD12 | 1 | 0.11 | 0.11 |
| (1,957) | 1:A:136:GLN:H | 1:A:150:LEU:HD13 | 1 | 0.11 | 0.11 |
| (1,94) | 1:A:140:ASN:H | 1:A:142:GLY:H | 1 | 0.04 | 0.04 |
| (1,930) | 1:A:105:LEU:HD21 | 1:A:110:ARG:H | 1 | 0.01 | 0.01 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models | Mean (Å) | Max (Å) |
|---------|------------------|------------------|--------|----------|---------|
| (1,930) | 1:A:105:LEU:HD22 | 1:A:110:ARG:H | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,930) | 1:A:105:LEU:HD23 | 1:A:110:ARG:H | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,928) | 1:A:195:LEU:HD21 | 1:A:196:GLU:H | 1 | 0.04 | 0.04 |
| (1,928) | 1:A:195:LEU:HD22 | 1:A:196:GLU:H | 1 | 0.04 | 0.04 |
| (1,928) | 1:A:195:LEU:HD23 | 1:A:196:GLU:H | 1 | 0.04 | 0.04 |
| (1,922) | 1:A:164:ASN:H | 1:A:195:LEU:HD21 | 1 | 0.05 | 0.05 |
| (1,922) | 1:A:164:ASN:H | 1:A:195:LEU:HD22 | 1 | 0.05 | 0.05 |
| (1,922) | 1:A:164:ASN:H | 1:A:195:LEU:HD23 | 1 | 0.05 | 0.05 |
| (1,904) | 1:A:100:SER:H | 1:A:101:ILE:HD11 | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,904) | 1:A:100:SER:H | 1:A:101:ILE:HD12 | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,904) | 1:A:100:SER:H | 1:A:101:ILE:HD13 | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,893) | 1:A:129:LEU:H | 1:A:129:LEU:HD21 | 1 | 0.06 | 0.06 |
| (1,893) | 1:A:129:LEU:H | 1:A:129:LEU:HD22 | 1 | 0.06 | 0.06 |
| (1,893) | 1:A:129:LEU:H | 1:A:129:LEU:HD23 | 1 | 0.06 | 0.06 |
| (1,875) | 1:A:105:LEU:HD21 | 1:A:109:LEU:H | 1 | 0.11 | 0.11 |
| (1,875) | 1:A:105:LEU:HD22 | 1:A:109:LEU:H | 1 | 0.11 | 0.11 |
| (1,875) | 1:A:105:LEU:HD23 | 1:A:109:LEU:H | 1 | 0.11 | 0.11 |
| (1,86) | 1:A:155:THR:H | 1:A:158:SER:H | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,855) | 1:A:131:GLY:H | 1:A:190:LEU:HD11 | 1 | 0.23 | 0.23 |
| (1,855) | 1:A:131:GLY:H | 1:A:190:LEU:HD12 | 1 | 0.23 | 0.23 |
| (1,855) | 1:A:131:GLY:H | 1:A:190:LEU:HD13 | 1 | 0.23 | 0.23 |
| (1,847) | 1:A:37:ALA:H | 1:A:57:VAL:HG11 | 1 | 0.15 | 0.15 |
| (1,847) | 1:A:37:ALA:H | 1:A:57:VAL:HG12 | 1 | 0.15 | 0.15 |
| (1,847) | 1:A:37:ALA:H | 1:A:57:VAL:HG13 | 1 | 0.15 | 0.15 |
| (1,817) | 1:A:171:LEU:HD11 | 1:A:189:GLN:H | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,817) | 1:A:171:LEU:HD12 | 1:A:189:GLN:H | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,817) | 1:A:171:LEU:HD13 | 1:A:189:GLN:H | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,793) | 1:A:149:LEU:H | 1:A:149:LEU:HD11 | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,793) | 1:A:149:LEU:H | 1:A:149:LEU:HD12 | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,793) | 1:A:149:LEU:H | 1:A:149:LEU:HD13 | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,772) | 1:A:85:LEU:HD11 | 1:A:109:LEU:HD21 | 1 | 0.05 | 0.05 |
| (1,772) | 1:A:85:LEU:HD11 | 1:A:109:LEU:HD22 | 1 | 0.05 | 0.05 |
| (1,772) | 1:A:85:LEU:HD11 | 1:A:109:LEU:HD23 | 1 | 0.05 | 0.05 |
| (1,772) | 1:A:85:LEU:HD12 | 1:A:109:LEU:HD21 | 1 | 0.05 | 0.05 |
| (1,772) | 1:A:85:LEU:HD12 | 1:A:109:LEU:HD22 | 1 | 0.05 | 0.05 |
| (1,772) | 1:A:85:LEU:HD12 | 1:A:109:LEU:HD23 | 1 | 0.05 | 0.05 |
| (1,772) | 1:A:85:LEU:HD13 | 1:A:109:LEU:HD21 | 1 | 0.05 | 0.05 |
| (1,772) | 1:A:85:LEU:HD13 | 1:A:109:LEU:HD22 | 1 | 0.05 | 0.05 |
| (1,772) | 1:A:85:LEU:HD13 | 1:A:109:LEU:HD23 | 1 | 0.05 | 0.05 |
| (1,770) | 1:A:81:VAL:HG11 | 1:A:85:LEU:HD21 | 1 | 0.03 | 0.03 |
| (1,770) | 1:A:81:VAL:HG11 | 1:A:85:LEU:HD22 | 1 | 0.03 | 0.03 |
| (1,770) | 1:A:81:VAL:HG11 | 1:A:85:LEU:HD23 | 1 | 0.03 | 0.03 |



Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models | Mean (Å) | Max (Å) |
|---------|------------------|------------------|--------|----------|---------|
| (1,770) | 1:A:81:VAL:HG12 | 1:A:85:LEU:HD21 | 1 | 0.03 | 0.03 |
| (1,770) | 1:A:81:VAL:HG12 | 1:A:85:LEU:HD22 | 1 | 0.03 | 0.03 |
| (1,770) | 1:A:81:VAL:HG12 | 1:A:85:LEU:HD23 | 1 | 0.03 | 0.03 |
| (1,770) | 1:A:81:VAL:HG13 | 1:A:85:LEU:HD21 | 1 | 0.03 | 0.03 |
| (1,770) | 1:A:81:VAL:HG13 | 1:A:85:LEU:HD22 | 1 | 0.03 | 0.03 |
| (1,770) | 1:A:81:VAL:HG13 | 1:A:85:LEU:HD23 | 1 | 0.03 | 0.03 |
| (1,756) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:47:LEU:HD11 | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,756) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:47:LEU:HD12 | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,756) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:47:LEU:HD13 | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,756) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:47:LEU:HD11 | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,756) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:47:LEU:HD12 | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,756) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:47:LEU:HD13 | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,756) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:47:LEU:HD11 | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,756) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:47:LEU:HD12 | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,756) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:47:LEU:HD13 | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,746) | 1:A:160:LEU:HD11 | 1:A:163:LEU:HD11 | 1 | 0.11 | 0.11 |
| (1,746) | 1:A:160:LEU:HD11 | 1:A:163:LEU:HD12 | 1 | 0.11 | 0.11 |
| (1,746) | 1:A:160:LEU:HD11 | 1:A:163:LEU:HD13 | 1 | 0.11 | 0.11 |
| (1,746) | 1:A:160:LEU:HD12 | 1:A:163:LEU:HD11 | 1 | 0.11 | 0.11 |
| (1,746) | 1:A:160:LEU:HD12 | 1:A:163:LEU:HD12 | 1 | 0.11 | 0.11 |
| (1,746) | 1:A:160:LEU:HD12 | 1:A:163:LEU:HD13 | 1 | 0.11 | 0.11 |
| (1,746) | 1:A:160:LEU:HD13 | 1:A:163:LEU:HD11 | 1 | 0.11 | 0.11 |
| (1,746) | 1:A:160:LEU:HD13 | 1:A:163:LEU:HD12 | 1 | 0.11 | 0.11 |
| (1,746) | 1:A:160:LEU:HD13 | 1:A:163:LEU:HD13 | 1 | 0.11 | 0.11 |
| (1,733) | 1:A:129:LEU:HD21 | 1:A:156:LEU:HD11 | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,733) | 1:A:129:LEU:HD21 | 1:A:156:LEU:HD12 | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,733) | 1:A:129:LEU:HD21 | 1:A:156:LEU:HD13 | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,733) | 1:A:129:LEU:HD22 | 1:A:156:LEU:HD11 | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,733) | 1:A:129:LEU:HD22 | 1:A:156:LEU:HD12 | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,733) | 1:A:129:LEU:HD22 | 1:A:156:LEU:HD13 | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,733) | 1:A:129:LEU:HD23 | 1:A:156:LEU:HD11 | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,733) | 1:A:129:LEU:HD23 | 1:A:156:LEU:HD12 | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,733) | 1:A:129:LEU:HD23 | 1:A:156:LEU:HD13 | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,721) | 1:A:175:LEU:HD21 | 1:A:187:LEU:HD11 | 1 | 0.04 | 0.04 |
| (1,721) | 1:A:175:LEU:HD21 | 1:A:187:LEU:HD12 | 1 | 0.04 | 0.04 |
| (1,721) | 1:A:175:LEU:HD21 | 1:A:187:LEU:HD13 | 1 | 0.04 | 0.04 |
| (1,721) | 1:A:175:LEU:HD22 | 1:A:187:LEU:HD11 | 1 | 0.04 | 0.04 |
| (1,721) | 1:A:175:LEU:HD22 | 1:A:187:LEU:HD12 | 1 | 0.04 | 0.04 |
| (1,721) | 1:A:175:LEU:HD22 | 1:A:187:LEU:HD13 | 1 | 0.04 | 0.04 |
| (1,721) | 1:A:175:LEU:HD23 | 1:A:187:LEU:HD11 | 1 | 0.04 | 0.04 |
| (1,721) | 1:A:175:LEU:HD23 | 1:A:187:LEU:HD12 | 1 | 0.04 | 0.04 |
| (1,721) | 1:A:175:LEU:HD23 | 1:A:187:LEU:HD13 | 1 | 0.04 | 0.04 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models | Mean (Å) | Max (Å) |
|---------|------------------|------------------|--------|----------|---------|
| (1,713) | 1:A:137:LEU:HD11 | 1:A:150:LEU:HD21 | 1 | 0.07 | 0.07 |
| (1,713) | 1:A:137:LEU:HD11 | 1:A:150:LEU:HD22 | 1 | 0.07 | 0.07 |
| (1,713) | 1:A:137:LEU:HD11 | 1:A:150:LEU:HD23 | 1 | 0.07 | 0.07 |
| (1,713) | 1:A:137:LEU:HD12 | 1:A:150:LEU:HD21 | 1 | 0.07 | 0.07 |
| (1,713) | 1:A:137:LEU:HD12 | 1:A:150:LEU:HD22 | 1 | 0.07 | 0.07 |
| (1,713) | 1:A:137:LEU:HD12 | 1:A:150:LEU:HD23 | 1 | 0.07 | 0.07 |
| (1,713) | 1:A:137:LEU:HD13 | 1:A:150:LEU:HD21 | 1 | 0.07 | 0.07 |
| (1,713) | 1:A:137:LEU:HD13 | 1:A:150:LEU:HD22 | 1 | 0.07 | 0.07 |
| (1,713) | 1:A:137:LEU:HD13 | 1:A:150:LEU:HD23 | 1 | 0.07 | 0.07 |
| (1,712) | 1:A:156:LEU:HD11 | 1:A:188:ILE:HD11 | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,712) | 1:A:156:LEU:HD11 | 1:A:188:ILE:HD12 | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,712) | 1:A:156:LEU:HD11 | 1:A:188:ILE:HD13 | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,712) | 1:A:156:LEU:HD12 | 1:A:188:ILE:HD11 | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,712) | 1:A:156:LEU:HD12 | 1:A:188:ILE:HD12 | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,712) | 1:A:156:LEU:HD12 | 1:A:188:ILE:HD13 | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,712) | 1:A:156:LEU:HD13 | 1:A:188:ILE:HD11 | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,712) | 1:A:156:LEU:HD13 | 1:A:188:ILE:HD12 | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,712) | 1:A:156:LEU:HD13 | 1:A:188:ILE:HD13 | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,704) | 1:A:105:LEU:HD21 | 1:A:109:LEU:HD21 | 1 | 0.23 | 0.23 |
| (1,704) | 1:A:105:LEU:HD21 | 1:A:109:LEU:HD22 | 1 | 0.23 | 0.23 |
| (1,704) | 1:A:105:LEU:HD21 | 1:A:109:LEU:HD23 | 1 | 0.23 | 0.23 |
| (1,704) | 1:A:105:LEU:HD22 | 1:A:109:LEU:HD21 | 1 | 0.23 | 0.23 |
| (1,704) | 1:A:105:LEU:HD22 | 1:A:109:LEU:HD22 | 1 | 0.23 | 0.23 |
| (1,704) | 1:A:105:LEU:HD22 | 1:A:109:LEU:HD23 | 1 | 0.23 | 0.23 |
| (1,704) | 1:A:105:LEU:HD23 | 1:A:109:LEU:HD21 | 1 | 0.23 | 0.23 |
| (1,704) | 1:A:105:LEU:HD23 | 1:A:109:LEU:HD22 | 1 | 0.23 | 0.23 |
| (1,704) | 1:A:105:LEU:HD23 | 1:A:109:LEU:HD23 | 1 | 0.23 | 0.23 |
| (1,690) | 1:A:36:LEU:HD11 | 1:A:105:LEU:HD21 | 1 | 0.06 | 0.06 |
| (1,690) | 1:A:36:LEU:HD11 | 1:A:105:LEU:HD22 | 1 | 0.06 | 0.06 |
| (1,690) | 1:A:36:LEU:HD11 | 1:A:105:LEU:HD23 | 1 | 0.06 | 0.06 |
| (1,690) | 1:A:36:LEU:HD12 | 1:A:105:LEU:HD21 | 1 | 0.06 | 0.06 |
| (1,690) | 1:A:36:LEU:HD12 | 1:A:105:LEU:HD22 | 1 | 0.06 | 0.06 |
| (1,690) | 1:A:36:LEU:HD12 | 1:A:105:LEU:HD23 | 1 | 0.06 | 0.06 |
| (1,690) | 1:A:36:LEU:HD13 | 1:A:105:LEU:HD21 | 1 | 0.06 | 0.06 |
| (1,690) | 1:A:36:LEU:HD13 | 1:A:105:LEU:HD22 | 1 | 0.06 | 0.06 |
| (1,690) | 1:A:36:LEU:HD13 | 1:A:105:LEU:HD23 | 1 | 0.06 | 0.06 |
| (1,69) | 1:A:156:LEU:H | 1:A:159:GLU:H | 1 | 0.09 | 0.09 |
| (1,689) | 1:A:85:LEU:HD11 | 1:A:105:LEU:HD21 | 1 | 0.05 | 0.05 |
| (1,689) | 1:A:85:LEU:HD11 | 1:A:105:LEU:HD22 | 1 | 0.05 | 0.05 |
| (1,689) | 1:A:85:LEU:HD11 | 1:A:105:LEU:HD23 | 1 | 0.05 | 0.05 |
| (1,689) | 1:A:85:LEU:HD12 | 1:A:105:LEU:HD21 | 1 | 0.05 | 0.05 |
| (1,689) | 1:A:85:LEU:HD12 | 1:A:105:LEU:HD22 | 1 | 0.05 | 0.05 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models | Mean (Å) | Max (Å) |
|---------|------------------|------------------|--------|----------|---------|
| (1,689) | 1:A:85:LEU:HD12 | 1:A:105:LEU:HD23 | 1 | 0.05 | 0.05 |
| (1,689) | 1:A:85:LEU:HD13 | 1:A:105:LEU:HD21 | 1 | 0.05 | 0.05 |
| (1,689) | 1:A:85:LEU:HD13 | 1:A:105:LEU:HD22 | 1 | 0.05 | 0.05 |
| (1,689) | 1:A:85:LEU:HD13 | 1:A:105:LEU:HD23 | 1 | 0.05 | 0.05 |
| (1,673) | 1:A:36:LEU:HD21 | 1:A:90:ILE:HD11 | 1 | 0.06 | 0.06 |
| (1,673) | 1:A:36:LEU:HD21 | 1:A:90:ILE:HD12 | 1 | 0.06 | 0.06 |
| (1,673) | 1:A:36:LEU:HD21 | 1:A:90:ILE:HD13 | 1 | 0.06 | 0.06 |
| (1,673) | 1:A:36:LEU:HD22 | 1:A:90:ILE:HD11 | 1 | 0.06 | 0.06 |
| (1,673) | 1:A:36:LEU:HD22 | 1:A:90:ILE:HD12 | 1 | 0.06 | 0.06 |
| (1,673) | 1:A:36:LEU:HD22 | 1:A:90:ILE:HD13 | 1 | 0.06 | 0.06 |
| (1,673) | 1:A:36:LEU:HD23 | 1:A:90:ILE:HD11 | 1 | 0.06 | 0.06 |
| (1,673) | 1:A:36:LEU:HD23 | 1:A:90:ILE:HD12 | 1 | 0.06 | 0.06 |
| (1,673) | 1:A:36:LEU:HD23 | 1:A:90:ILE:HD13 | 1 | 0.06 | 0.06 |
| (1,669) | 1:A:109:LEU:HD21 | 1:A:113:LEU:HD11 | 1 | 0.03 | 0.03 |
| (1,669) | 1:A:109:LEU:HD21 | 1:A:113:LEU:HD12 | 1 | 0.03 | 0.03 |
| (1,669) | 1:A:109:LEU:HD21 | 1:A:113:LEU:HD13 | 1 | 0.03 | 0.03 |
| (1,669) | 1:A:109:LEU:HD22 | 1:A:113:LEU:HD11 | 1 | 0.03 | 0.03 |
| (1,669) | 1:A:109:LEU:HD22 | 1:A:113:LEU:HD12 | 1 | 0.03 | 0.03 |
| (1,669) | 1:A:109:LEU:HD22 | 1:A:113:LEU:HD13 | 1 | 0.03 | 0.03 |
| (1,669) | 1:A:109:LEU:HD23 | 1:A:113:LEU:HD11 | 1 | 0.03 | 0.03 |
| (1,669) | 1:A:109:LEU:HD23 | 1:A:113:LEU:HD12 | 1 | 0.03 | 0.03 |
| (1,669) | 1:A:109:LEU:HD23 | 1:A:113:LEU:HD13 | 1 | 0.03 | 0.03 |
| (1,658) | 1:A:133:ALA:H | 1:A:186:ALA:H | 1 | 0.03 | 0.03 |
| (1,641) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:53:GLU:H | 1 | 0.14 | 0.14 |
| (1,605) | 1:A:73:GLU:H | 1:A:76:VAL:H | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,601) | 1:A:111:GLN:H | 1:A:114:TYR:H | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,594) | 1:A:152:LYS:H | 1:A:156:LEU:H | 1 | 0.03 | 0.03 |
| (1,593) | 1:A:152:LYS:H | 1:A:155:THR:H | 1 | 0.06 | 0.06 |
| (1,591) | 1:A:171:LEU:H | 1:A:188:ILE:H | 1 | 0.07 | 0.07 |
| (1,590) | 1:A:171:LEU:H | 1:A:187:LEU:H | 1 | 0.11 | 0.11 |
| (1,586) | 1:A:171:LEU:H | 1:A:189:GLN:H | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,556) | 1:A:185:ALA:H | 1:A:187:LEU:HD21 | 1 | 0.03 | 0.03 |
| (1,556) | 1:A:185:ALA:H | 1:A:187:LEU:HD22 | 1 | 0.03 | 0.03 |
| (1,556) | 1:A:185:ALA:H | 1:A:187:LEU:HD23 | 1 | 0.03 | 0.03 |
| (1,554) | 1:A:47:LEU:HD11 | 1:A:54:VAL:HG11 | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,554) | 1:A:47:LEU:HD11 | 1:A:54:VAL:HG12 | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,554) | 1:A:47:LEU:HD11 | 1:A:54:VAL:HG13 | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,554) | 1:A:47:LEU:HD12 | 1:A:54:VAL:HG11 | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,554) | 1:A:47:LEU:HD12 | 1:A:54:VAL:HG12 | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,554) | 1:A:47:LEU:HD12 | 1:A:54:VAL:HG13 | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,554) | 1:A:47:LEU:HD13 | 1:A:54:VAL:HG11 | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,554) | 1:A:47:LEU:HD13 | 1:A:54:VAL:HG12 | 1 | 0.01 | 0.01 |



Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models | Mean (Å) | Max (Å) |
|---------|------------------|------------------|--------|----------|---------|
| (1,554) | 1:A:47:LEU:HD13 | 1:A:54:VAL:HG13 | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,552) | 1:A:24:VAL:HG11 | 1:A:126:VAL:HG11 | 1 | 0.07 | 0.07 |
| (1,552) | 1:A:24:VAL:HG11 | 1:A:126:VAL:HG12 | 1 | 0.07 | 0.07 |
| (1,552) | 1:A:24:VAL:HG11 | 1:A:126:VAL:HG13 | 1 | 0.07 | 0.07 |
| (1,552) | 1:A:24:VAL:HG12 | 1:A:126:VAL:HG11 | 1 | 0.07 | 0.07 |
| (1,552) | 1:A:24:VAL:HG12 | 1:A:126:VAL:HG12 | 1 | 0.07 | 0.07 |
| (1,552) | 1:A:24:VAL:HG12 | 1:A:126:VAL:HG13 | 1 | 0.07 | 0.07 |
| (1,552) | 1:A:24:VAL:HG13 | 1:A:126:VAL:HG11 | 1 | 0.07 | 0.07 |
| (1,552) | 1:A:24:VAL:HG13 | 1:A:126:VAL:HG12 | 1 | 0.07 | 0.07 |
| (1,552) | 1:A:24:VAL:HG13 | 1:A:126:VAL:HG13 | 1 | 0.07 | 0.07 |
| (1,523) | 1:A:138:GLN:H | 1:A:150:LEU:HD11 | 1 | 0.05 | 0.05 |
| (1,523) | 1:A:138:GLN:H | 1:A:150:LEU:HD12 | 1 | 0.05 | 0.05 |
| (1,523) | 1:A:138:GLN:H | 1:A:150:LEU:HD13 | 1 | 0.05 | 0.05 |
| (1,521) | 1:A:33:ILE:HD11 | 1:A:54:VAL:HG11 | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,521) | 1:A:33:ILE:HD11 | 1:A:54:VAL:HG12 | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,521) | 1:A:33:ILE:HD11 | 1:A:54:VAL:HG13 | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,521) | 1:A:33:ILE:HD12 | 1:A:54:VAL:HG11 | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,521) | 1:A:33:ILE:HD12 | 1:A:54:VAL:HG12 | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,521) | 1:A:33:ILE:HD12 | 1:A:54:VAL:HG13 | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,521) | 1:A:33:ILE:HD13 | 1:A:54:VAL:HG11 | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,521) | 1:A:33:ILE:HD13 | 1:A:54:VAL:HG12 | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,521) | 1:A:33:ILE:HD13 | 1:A:54:VAL:HG13 | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,519) | 1:A:21:LEU:HD11 | 1:A:99:VAL:HG21 | 1 | 0.07 | 0.07 |
| (1,519) | 1:A:21:LEU:HD11 | 1:A:99:VAL:HG22 | 1 | 0.07 | 0.07 |
| (1,519) | 1:A:21:LEU:HD11 | 1:A:99:VAL:HG23 | 1 | 0.07 | 0.07 |
| (1,519) | 1:A:21:LEU:HD12 | 1:A:99:VAL:HG21 | 1 | 0.07 | 0.07 |
| (1,519) | 1:A:21:LEU:HD12 | 1:A:99:VAL:HG22 | 1 | 0.07 | 0.07 |
| (1,519) | 1:A:21:LEU:HD12 | 1:A:99:VAL:HG23 | 1 | 0.07 | 0.07 |
| (1,519) | 1:A:21:LEU:HD13 | 1:A:99:VAL:HG21 | 1 | 0.07 | 0.07 |
| (1,519) | 1:A:21:LEU:HD13 | 1:A:99:VAL:HG22 | 1 | 0.07 | 0.07 |
| (1,519) | 1:A:21:LEU:HD13 | 1:A:99:VAL:HG23 | 1 | 0.07 | 0.07 |
| (1,506) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:82:GLN:H | 1 | 0.1 | 0.1 |
| (1,506) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:82:GLN:H | 1 | 0.1 | 0.1 |
| (1,506) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:82:GLN:H | 1 | 0.1 | 0.1 |
| (1,489) | 1:A:147:LEU:HD21 | 1:A:150:LEU:HD11 | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,489) | 1:A:147:LEU:HD21 | 1:A:150:LEU:HD12 | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,489) | 1:A:147:LEU:HD21 | 1:A:150:LEU:HD13 | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,489) | 1:A:147:LEU:HD22 | 1:A:150:LEU:HD11 | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,489) | 1:A:147:LEU:HD22 | 1:A:150:LEU:HD12 | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,489) | 1:A:147:LEU:HD22 | 1:A:150:LEU:HD13 | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,489) | 1:A:147:LEU:HD23 | 1:A:150:LEU:HD11 | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,489) | 1:A:147:LEU:HD23 | 1:A:150:LEU:HD12 | 1 | 0.01 | 0.01 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models | Mean (Å) | Max (Å) |
|---------|------------------|------------------|--------|----------|---------|
| (1,489) | 1:A:147:LEU:HD23 | 1:A:150:LEU:HD13 | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,477) | 1:A:81:VAL:HG21 | 1:A:95:TRP:HE1 | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,477) | 1:A:81:VAL:HG22 | 1:A:95:TRP:HE1 | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,477) | 1:A:81:VAL:HG23 | 1:A:95:TRP:HE1 | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,447) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:57:VAL:HG21 | 1 | 0.03 | 0.03 |
| (1,447) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:57:VAL:HG22 | 1 | 0.03 | 0.03 |
| (1,447) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:57:VAL:HG23 | 1 | 0.03 | 0.03 |
| (1,447) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:57:VAL:HG21 | 1 | 0.03 | 0.03 |
| (1,447) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:57:VAL:HG22 | 1 | 0.03 | 0.03 |
| (1,447) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:57:VAL:HG23 | 1 | 0.03 | 0.03 |
| (1,447) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:57:VAL:HG21 | 1 | 0.03 | 0.03 |
| (1,447) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:57:VAL:HG22 | 1 | 0.03 | 0.03 |
| (1,447) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:57:VAL:HG23 | 1 | 0.03 | 0.03 |
| (1,433) | 1:A:54:VAL:HG11 | 1:A:99:VAL:HG11 | 1 | 0.07 | 0.07 |
| (1,433) | 1:A:54:VAL:HG11 | 1:A:99:VAL:HG12 | 1 | 0.07 | 0.07 |
| (1,433) | 1:A:54:VAL:HG11 | 1:A:99:VAL:HG13 | 1 | 0.07 | 0.07 |
| (1,433) | 1:A:54:VAL:HG12 | 1:A:99:VAL:HG11 | 1 | 0.07 | 0.07 |
| (1,433) | 1:A:54:VAL:HG12 | 1:A:99:VAL:HG12 | 1 | 0.07 | 0.07 |
| (1,433) | 1:A:54:VAL:HG12 | 1:A:99:VAL:HG13 | 1 | 0.07 | 0.07 |
| (1,433) | 1:A:54:VAL:HG13 | 1:A:99:VAL:HG11 | 1 | 0.07 | 0.07 |
| (1,433) | 1:A:54:VAL:HG13 | 1:A:99:VAL:HG12 | 1 | 0.07 | 0.07 |
| (1,433) | 1:A:54:VAL:HG13 | 1:A:99:VAL:HG13 | 1 | 0.07 | 0.07 |
| (1,416) | 1:A:175:LEU:HD11 | 1:A:186:ALA:H | 1 | 0.04 | 0.04 |
| (1,416) | 1:A:175:LEU:HD12 | 1:A:186:ALA:H | 1 | 0.04 | 0.04 |
| (1,416) | 1:A:175:LEU:HD13 | 1:A:186:ALA:H | 1 | 0.04 | 0.04 |
| (1,404) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:47:LEU:HD21 | 1 | 0.04 | 0.04 |
| (1,404) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:47:LEU:HD22 | 1 | 0.04 | 0.04 |
| (1,404) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:47:LEU:HD23 | 1 | 0.04 | 0.04 |
| (1,404) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:47:LEU:HD21 | 1 | 0.04 | 0.04 |
| (1,404) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:47:LEU:HD22 | 1 | 0.04 | 0.04 |
| (1,404) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:47:LEU:HD23 | 1 | 0.04 | 0.04 |
| (1,404) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:47:LEU:HD21 | 1 | 0.04 | 0.04 |
| (1,404) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:47:LEU:HD22 | 1 | 0.04 | 0.04 |
| (1,404) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:47:LEU:HD23 | 1 | 0.04 | 0.04 |
| (1,375) | 1:A:33:ILE:HD11 | 1:A:47:LEU:HD11 | 1 | 0.11 | 0.11 |
| (1,375) | 1:A:33:ILE:HD11 | 1:A:47:LEU:HD12 | 1 | 0.11 | 0.11 |
| (1,375) | 1:A:33:ILE:HD11 | 1:A:47:LEU:HD13 | 1 | 0.11 | 0.11 |
| (1,375) | 1:A:33:ILE:HD12 | 1:A:47:LEU:HD11 | 1 | 0.11 | 0.11 |
| (1,375) | 1:A:33:ILE:HD12 | 1:A:47:LEU:HD12 | 1 | 0.11 | 0.11 |
| (1,375) | 1:A:33:ILE:HD12 | 1:A:47:LEU:HD13 | 1 | 0.11 | 0.11 |
| (1,375) | 1:A:33:ILE:HD13 | 1:A:47:LEU:HD11 | 1 | 0.11 | 0.11 |
| (1,375) | 1:A:33:ILE:HD13 | 1:A:47:LEU:HD12 | 1 | 0.11 | 0.11 |



Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models | Mean (Å) | Max (Å) |
|---------|------------------|------------------|--------|----------|---------|
| (1,375) | 1:A:33:ILE:HD13 | 1:A:47:LEU:HD13 | 1 | 0.11 | 0.11 |
| (1,371) | 1:A:28:ILE:HD11 | 1:A:47:LEU:HD11 | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,371) | 1:A:28:ILE:HD11 | 1:A:47:LEU:HD12 | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,371) | 1:A:28:ILE:HD11 | 1:A:47:LEU:HD13 | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,371) | 1:A:28:ILE:HD12 | 1:A:47:LEU:HD11 | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,371) | 1:A:28:ILE:HD12 | 1:A:47:LEU:HD12 | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,371) | 1:A:28:ILE:HD12 | 1:A:47:LEU:HD13 | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,371) | 1:A:28:ILE:HD13 | 1:A:47:LEU:HD11 | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,371) | 1:A:28:ILE:HD13 | 1:A:47:LEU:HD12 | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,371) | 1:A:28:ILE:HD13 | 1:A:47:LEU:HD13 | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,370) | 1:A:21:LEU:HD11 | 1:A:28:ILE:HD11 | 1 | 0.1 | 0.1 |
| (1,370) | 1:A:21:LEU:HD11 | 1:A:28:ILE:HD12 | 1 | 0.1 | 0.1 |
| (1,370) | 1:A:21:LEU:HD11 | 1:A:28:ILE:HD13 | 1 | 0.1 | 0.1 |
| (1,370) | 1:A:21:LEU:HD12 | 1:A:28:ILE:HD11 | 1 | 0.1 | 0.1 |
| (1,370) | 1:A:21:LEU:HD12 | 1:A:28:ILE:HD12 | 1 | 0.1 | 0.1 |
| (1,370) | 1:A:21:LEU:HD12 | 1:A:28:ILE:HD13 | 1 | 0.1 | 0.1 |
| (1,370) | 1:A:21:LEU:HD13 | 1:A:28:ILE:HD11 | 1 | 0.1 | 0.1 |
| (1,370) | 1:A:21:LEU:HD13 | 1:A:28:ILE:HD12 | 1 | 0.1 | 0.1 |
| (1,370) | 1:A:21:LEU:HD13 | 1:A:28:ILE:HD13 | 1 | 0.1 | 0.1 |
| (1,365) | 1:A:25:ALA:H | 1:A:128:ILE:HD11 | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,365) | 1:A:25:ALA:H | 1:A:128:ILE:HD12 | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,365) | 1:A:25:ALA:H | 1:A:128:ILE:HD13 | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,36) | 1:A:88:PHE:H | 1:A:89:ASP:H | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,345) | 1:A:34:LEU:H | 1:A:54:VAL:HG11 | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,345) | 1:A:34:LEU:H | 1:A:54:VAL:HG12 | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,345) | 1:A:34:LEU:H | 1:A:54:VAL:HG13 | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,306) | 1:A:131:GLY:H | 1:A:156:LEU:HD11 | 1 | 0.05 | 0.05 |
| (1,306) | 1:A:131:GLY:H | 1:A:156:LEU:HD12 | 1 | 0.05 | 0.05 |
| (1,306) | 1:A:131:GLY:H | 1:A:156:LEU:HD13 | 1 | 0.05 | 0.05 |
| (1,284) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:113:LEU:H | 1 | 0.06 | 0.06 |
| (1,284) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:113:LEU:H | 1 | 0.06 | 0.06 |
| (1,284) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:113:LEU:H | 1 | 0.06 | 0.06 |
| (1,281) | 1:A:187:LEU:HD21 | 1:A:188:ILE:H | 1 | 0.13 | 0.13 |
| (1,281) | 1:A:187:LEU:HD22 | 1:A:188:ILE:H | 1 | 0.13 | 0.13 |
| (1,281) | 1:A:187:LEU:HD23 | 1:A:188:ILE:H | 1 | 0.13 | 0.13 |
| (1,275) | 1:A:90:ILE:H | 1:A:95:TRP:HE1 | 1 | 0.06 | 0.06 |
| (1,274) | 1:A:91:VAL:H | 1:A:95:TRP:HE1 | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,267) | 1:A:118:TYR:H | 1:A:160:LEU:HD21 | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,267) | 1:A:118:TYR:H | 1:A:160:LEU:HD22 | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,267) | 1:A:118:TYR:H | 1:A:160:LEU:HD23 | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,231) | 1:A:137:LEU:HD11 | 1:A:147:LEU:H | 1 | 0.12 | 0.12 |
| (1,231) | 1:A:137:LEU:HD12 | 1:A:147:LEU:H | 1 | 0.12 | 0.12 |



Continued from previous page...

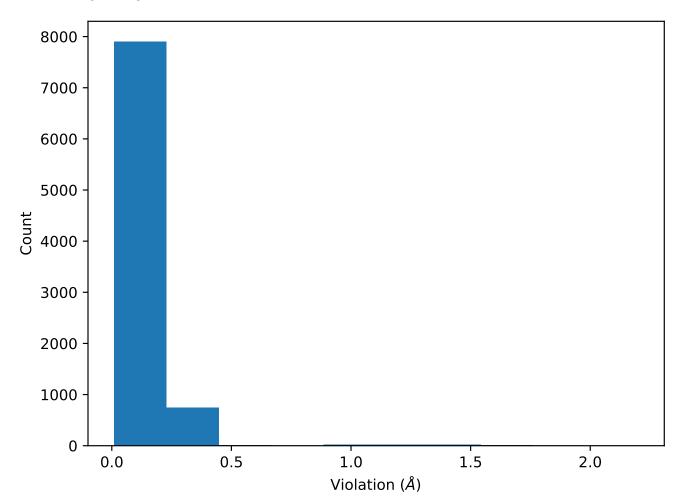
| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models | Mean (Å) | Max (Å) |
|----------|------------------|------------------|--------|----------|---------|
| (1,231) | 1:A:137:LEU:HD13 | 1:A:147:LEU:H | 1 | 0.12 | 0.12 |
| (1,227) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:95:TRP:HE1 | 1 | 0.04 | 0.04 |
| (1,227) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:95:TRP:HE1 | 1 | 0.04 | 0.04 |
| (1,227) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:95:TRP:HE1 | 1 | 0.04 | 0.04 |
| (1,224) | 1:A:56:ALA:H | 1:A:81:VAL:H | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,166) | 1:A:137:LEU:H | 1:A:137:LEU:HD21 | 1 | 0.06 | 0.06 |
| (1,166) | 1:A:137:LEU:H | 1:A:137:LEU:HD22 | 1 | 0.06 | 0.06 |
| (1,166) | 1:A:137:LEU:H | 1:A:137:LEU:HD23 | 1 | 0.06 | 0.06 |
| (1,146) | 1:A:175:LEU:H | 1:A:185:ALA:H | 1 | 0.13 | 0.13 |
| (1,1116) | 1:A:167:ILE:N | 1:A:191:LEU:O | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,1101) | 1:A:100:SER:H | 1:A:126:VAL:O | 1 | 0.03 | 0.03 |
| (1,1086) | 1:A:155:THR:O | 1:A:159:GLU:H | 1 | 0.03 | 0.03 |
| (1,107) | 1:A:146:ASP:H | 1:A:148:ASP:H | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,1038) | 1:A:42:ARG:O | 1:A:46:PHE:H | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,1033) | 1:A:22:VAL:O | 1:A:26:ASN:N | 1 | 0.1 | 0.1 |
| (1,1029) | 1:A:114:TYR:HE1 | 1:A:127:PHE:HZ | 1 | 0.05 | 0.05 |
| (1,1029) | 1:A:114:TYR:HE2 | 1:A:127:PHE:HZ | 1 | 0.05 | 0.05 |
| (1,1027) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:90:ILE:HG21 | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,1027) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:90:ILE:HG22 | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,1027) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:90:ILE:HG23 | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,1027) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:90:ILE:HG21 | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,1027) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:90:ILE:HG22 | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,1027) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:90:ILE:HG23 | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,1027) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:90:ILE:HG21 | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,1027) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:90:ILE:HG22 | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,1027) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:90:ILE:HG23 | 1 | 0.02 | 0.02 |
| (1,1024) | 1:A:88:PHE:HE1 | 1:A:34:LEU:HD11 | 1 | 0.04 | 0.04 |
| (1,1024) | 1:A:88:PHE:HE1 | 1:A:34:LEU:HD12 | 1 | 0.04 | 0.04 |
| (1,1024) | 1:A:88:PHE:HE1 | 1:A:34:LEU:HD13 | 1 | 0.04 | 0.04 |
| (1,1024) | 1:A:88:PHE:HE2 | 1:A:34:LEU:HD11 | 1 | 0.04 | 0.04 |
| (1,1024) | 1:A:88:PHE:HE2 | 1:A:34:LEU:HD12 | 1 | 0.04 | 0.04 |
| (1,1024) | 1:A:88:PHE:HE2 | 1:A:34:LEU:HD13 | 1 | 0.04 | 0.04 |
| (1,1022) | 1:A:113:LEU:HD11 | 1:A:85:LEU:HD21 | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,1022) | 1:A:113:LEU:HD11 | 1:A:85:LEU:HD22 | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,1022) | 1:A:113:LEU:HD11 | 1:A:85:LEU:HD23 | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,1022) | 1:A:113:LEU:HD12 | 1:A:85:LEU:HD21 | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,1022) | 1:A:113:LEU:HD12 | 1:A:85:LEU:HD22 | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,1022) | 1:A:113:LEU:HD12 | 1:A:85:LEU:HD23 | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,1022) | 1:A:113:LEU:HD13 | 1:A:85:LEU:HD21 | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,1022) | 1:A:113:LEU:HD13 | 1:A:85:LEU:HD22 | 1 | 0.01 | 0.01 |
| (1,1022) | 1:A:113:LEU:HD13 | 1:A:85:LEU:HD23 | 1 | 0.01 | 0.01 |



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) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,202) | 1:A:138:GLN:H | 1:A:147:LEU:HD21 | 8 | 2.2 |
| (1,202) | 1:A:138:GLN:H | 1:A:147:LEU:HD22 | 8 | 2.2 |
| (1,202) | 1:A:138:GLN:H | 1:A:147:LEU:HD23 | 8 | 2.2 |
| (1,232) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:H | 9 | 1.78 |
| (1,232) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:H | 9 | 1.78 |
| (1,232) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:H | 9 | 1.78 |
| (1,202) | 1:A:138:GLN:H | 1:A:147:LEU:HD21 | 17 | 1.75 |



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

| | 1.75 1.69 1.69 1.69 1.65 1.65 1.65 1.64 |
|---|--|
| (1,232) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:H 14 (1,232) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:H 14 (1,232) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:H 14 (1,232) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:H 2 (1,232) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:H 2 (1,232) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:H 2 (1,232) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:H 1 | 1.69 1.69 1.65 1.65 1.65 1.64 |
| (1,232) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:H 14 (1,232) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:H 14 (1,232) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:H 2 (1,232) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:H 2 (1,232) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:H 2 (1,232) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:H 1 | 1.69 1.69 1.65 1.65 1.65 1.64 |
| (1,232) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:H 14 (1,232) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:H 2 (1,232) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:H 2 (1,232) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:H 2 (1,232) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:H 1 | 1.69 1.65 1.65 1.65 1.64 |
| (1,232) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:H 2 (1,232) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:H 2 (1,232) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:H 2 (1,232) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:H 1 | 1.65 1.65 1.65 1.64 |
| (1,232) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:H 2 (1,232) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:H 2 (1,232) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:H 1 | 1.65 1.65 1.64 |
| (1,232) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:H 2 (1,232) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:H 1 | 1.65 1.64 |
| (1,232) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:H 1 | 1.64 |
| | |
| (1,232) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:H 1 | 1.64 |
| | |
| (1,232) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:H 1 | 1.64 |
| (1,232) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:H 11 | 1.59 |
| (1,232) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:H 11 | 1.59 |
| (1,232) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:H 11 | 1.59 |
| (1,232) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:H 19 | 1.54 |
| (1,232) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:H 19 | 1.54 |
| (1,232) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:H 19 | 1.54 |
| (1,232) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:H 3 | 1.52 |
| (1,232) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:H 3 | 1.52 |
| (1,232) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:H 3 | 1.52 |
| (1,232) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:H 15 | 1.51 |
| (1,232) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:H 15 | 1.51 |
| (1,232) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:H 15 | 1.51 |
| (1,232) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:H 4 | 1.48 |
| (1,232) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:H 4 | 1.48 |
| (1,232) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:H 4 | 1.48 |
| (1,202) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD21 18 | 1.41 |
| (1,202) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD22 18 | 1.41 |
| (1,202) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD23 18 | 1.41 |
| (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD21 19 | 1.39 |
| (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD22 19 | 1.39 |
| (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD23 19 | 1.39 |
| (1,202) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD21 6 | 1.36 |
| (1,202) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD22 6 | 1.36 |
| (1,202) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD23 6 | 1.36 |
| (1,232) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:H 10 | 1.35 |
| (1,232) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:H 10 | 1.35 |
| (1,232) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:H 10 | 1.35 |
| (1,232) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:H 5 | 1.28 |
| (1,232) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:H 5 | 1.28 |
| (1,232) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:H 5 | 1.28 |
| (1,232) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:H 12 | 1.27 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,232) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:H | 12 | 1.27 |
| (1,232) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:H | 12 | 1.27 |
| (1,232) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:H | 13 | 1.26 |
| (1,232) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:H | 13 | 1.26 |
| (1,232) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:H | 13 | 1.26 |
| (1,410) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:150:LEU:HD21 | 17 | 1.14 |
| (1,410) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:150:LEU:HD22 | 17 | 1.14 |
| (1,410) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:150:LEU:HD23 | 17 | 1.14 |
| (1,410) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:150:LEU:HD21 | 17 | 1.14 |
| (1,410) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:150:LEU:HD22 | 17 | 1.14 |
| (1,410) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:150:LEU:HD23 | 17 | 1.14 |
| (1,410) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:150:LEU:HD21 | 17 | 1.14 |
| (1,410) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:150:LEU:HD22 | 17 | 1.14 |
| (1,410) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:150:LEU:HD23 | 17 | 1.14 |
| (1,410) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:150:LEU:HD21 | 6 | 1.11 |
| (1,410) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:150:LEU:HD22 | 6 | 1.11 |
| (1,410) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:150:LEU:HD23 | 6 | 1.11 |
| (1,410) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:150:LEU:HD21 | 6 | 1.11 |
| (1,410) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:150:LEU:HD22 | 6 | 1.11 |
| (1,410) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:150:LEU:HD23 | 6 | 1.11 |
| (1,410) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:150:LEU:HD21 | 6 | 1.11 |
| (1,410) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:150:LEU:HD22 | 6 | 1.11 |
| (1,410) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:150:LEU:HD23 | 6 | 1.11 |
| (1,410) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:150:LEU:HD21 | 18 | 1.0 |
| (1,410) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:150:LEU:HD22 | 18 | 1.0 |
| (1,410) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:150:LEU:HD23 | 18 | 1.0 |
| (1,410) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:150:LEU:HD21 | 18 | 1.0 |
| (1,410) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:150:LEU:HD22 | 18 | 1.0 |
| (1,410) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:150:LEU:HD23 | 18 | 1.0 |
| (1,410) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:150:LEU:HD21 | 18 | 1.0 |
| (1,410) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:150:LEU:HD22 | 18 | 1.0 |
| (1,410) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:150:LEU:HD23 | 18 | 1.0 |
| (1,410) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:150:LEU:HD21 | 8 | 0.92 |
| (1,410) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:150:LEU:HD22 | 8 | 0.92 |
| (1,410) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:150:LEU:HD23 | 8 | 0.92 |
| (1,410) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:150:LEU:HD21 | 8 | 0.92 |
| (1,410) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:150:LEU:HD22 | 8 | 0.92 |
| (1,410) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:150:LEU:HD23 | 8 | 0.92 |
| (1,410) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:150:LEU:HD21 | 8 | 0.92 |
| (1,410) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:150:LEU:HD22 | 8 | 0.92 |
| (1,410) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:150:LEU:HD23 | 8 | 0.92 |
| (1,913) | 1:A:137:LEU:HD11 | 1:A:148:ASP:H | 16 | 0.82 |



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

| () / | 1:A:137:LEU:HD12 | 1:A:148:ASP:H | 4.0 | |
|----------|------------------------|------------------|-----|------|
| (' / | 4 A 405 T TITL TITL 40 | 1.A.140.ASI .II | 16 | 0.82 |
| (1,229) | 1:A:137:LEU:HD13 | 1:A:148:ASP:H | 16 | 0.82 |
| | 1:A:147:LEU:H | 1:A:147:LEU:HD21 | 17 | 0.61 |
| (1,229) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:147:LEU:HD22 | 17 | 0.61 |
| (1,229) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:147:LEU:HD23 | 17 | 0.61 |
| (1,914) | 1:A:147:LEU:HD11 | 1:A:148:ASP:H | 2 | 0.49 |
| (1,914) | 1:A:147:LEU:HD12 | 1:A:148:ASP:H | 2 | 0.49 |
| (1,914) | 1:A:147:LEU:HD13 | 1:A:148:ASP:H | 2 | 0.49 |
| (1,229) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:147:LEU:HD21 | 18 | 0.46 |
| (1,229) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:147:LEU:HD22 | 18 | 0.46 |
| (1,229) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:147:LEU:HD23 | 18 | 0.46 |
| (1,913) | 1:A:137:LEU:HD11 | 1:A:148:ASP:H | 12 | 0.45 |
| (1,913) | 1:A:137:LEU:HD12 | 1:A:148:ASP:H | 12 | 0.45 |
| (1,913) | 1:A:137:LEU:HD13 | 1:A:148:ASP:H | 12 | 0.45 |
| (1,225) | 1:A:163:LEU:HD11 | 1:A:165:TRP:H | 14 | 0.45 |
| (1,225) | 1:A:163:LEU:HD12 | 1:A:165:TRP:H | 14 | 0.45 |
| (1,225) | 1:A:163:LEU:HD13 | 1:A:165:TRP:H | 14 | 0.45 |
| (1,913) | 1:A:137:LEU:HD11 | 1:A:148:ASP:H | 13 | 0.44 |
| (1,913) | 1:A:137:LEU:HD12 | 1:A:148:ASP:H | 13 | 0.44 |
| (1,913) | 1:A:137:LEU:HD13 | 1:A:148:ASP:H | 13 | 0.44 |
| (1,1003) | 1:A:59:GLN:H | 1:A:37:ALA:H | 9 | 0.44 |
| (1,914) | 1:A:147:LEU:HD11 | 1:A:148:ASP:H | 9 | 0.43 |
| (1,914) | 1:A:147:LEU:HD12 | 1:A:148:ASP:H | 9 | 0.43 |
| (1,914) | 1:A:147:LEU:HD13 | 1:A:148:ASP:H | 9 | 0.43 |
| (1,913) | 1:A:137:LEU:HD11 | 1:A:148:ASP:H | 11 | 0.43 |
| (1,913) | 1:A:137:LEU:HD12 | 1:A:148:ASP:H | 11 | 0.43 |
| (1,913) | 1:A:137:LEU:HD13 | 1:A:148:ASP:H | 11 | 0.43 |
| (1,913) | 1:A:137:LEU:HD11 | 1:A:148:ASP:H | 15 | 0.43 |
| (1,913) | 1:A:137:LEU:HD12 | 1:A:148:ASP:H | 15 | 0.43 |
| (1,913) | 1:A:137:LEU:HD13 | 1:A:148:ASP:H | 15 | 0.43 |
| (1,249) | 1:A:81:VAL:HG11 | 1:A:84:ASN:H | 10 | 0.43 |
| (1,249) | 1:A:81:VAL:HG12 | 1:A:84:ASN:H | 10 | 0.43 |
| (1,249) | 1:A:81:VAL:HG13 | 1:A:84:ASN:H | 10 | 0.43 |
| (1,232) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:H | 20 | 0.43 |
| ` ' | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:H | 20 | 0.43 |
| (1,232) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:H | 20 | 0.43 |
| (1,225) | 1:A:163:LEU:HD11 | 1:A:165:TRP:H | 16 | 0.43 |
| (1,225) | 1:A:163:LEU:HD12 | 1:A:165:TRP:H | 16 | 0.43 |
| (1,225) | 1:A:163:LEU:HD13 | 1:A:165:TRP:H | 16 | 0.43 |
| | 1:A:147:LEU:HD11 | 1:A:148:ASP:H | 14 | 0.42 |
| (1,914) | 1:A:147:LEU:HD12 | 1:A:148:ASP:H | 14 | 0.42 |
| (1,914) | 1:A:147:LEU:HD13 | 1:A:148:ASP:H | 14 | 0.42 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,914) | 1:A:147:LEU:HD11 | 1:A:148:ASP:H | 20 | 0.42 |
| (1,914) | 1:A:147:LEU:HD12 | 1:A:148:ASP:H | 20 | 0.42 |
| (1,914) | 1:A:147:LEU:HD13 | 1:A:148:ASP:H | 20 | 0.42 |
| (1,913) | 1:A:137:LEU:HD11 | 1:A:148:ASP:H | 1 | 0.42 |
| (1,913) | 1:A:137:LEU:HD12 | 1:A:148:ASP:H | 1 | 0.42 |
| (1,913) | 1:A:137:LEU:HD13 | 1:A:148:ASP:H | 1 | 0.42 |
| (1,913) | 1:A:137:LEU:HD11 | 1:A:148:ASP:H | 4 | 0.42 |
| (1,913) | 1:A:137:LEU:HD12 | 1:A:148:ASP:H | 4 | 0.42 |
| (1,913) | 1:A:137:LEU:HD13 | 1:A:148:ASP:H | 4 | 0.42 |
| (1,913) | 1:A:137:LEU:HD11 | 1:A:148:ASP:H | 5 | 0.42 |
| (1,913) | 1:A:137:LEU:HD12 | 1:A:148:ASP:H | 5 | 0.42 |
| (1,913) | 1:A:137:LEU:HD13 | 1:A:148:ASP:H | 5 | 0.42 |
| (1,225) | 1:A:163:LEU:HD11 | 1:A:165:TRP:H | 1 | 0.42 |
| (1,225) | 1:A:163:LEU:HD12 | 1:A:165:TRP:H | 1 | 0.42 |
| (1,225) | 1:A:163:LEU:HD13 | 1:A:165:TRP:H | 1 | 0.42 |
| (1,225) | 1:A:163:LEU:HD11 | 1:A:165:TRP:H | 6 | 0.42 |
| (1,225) | 1:A:163:LEU:HD12 | 1:A:165:TRP:H | 6 | 0.42 |
| (1,225) | 1:A:163:LEU:HD13 | 1:A:165:TRP:H | 6 | 0.42 |
| (1,225) | 1:A:163:LEU:HD11 | 1:A:165:TRP:H | 12 | 0.42 |
| (1,225) | 1:A:163:LEU:HD12 | 1:A:165:TRP:H | 12 | 0.42 |
| (1,225) | 1:A:163:LEU:HD13 | 1:A:165:TRP:H | 12 | 0.42 |
| (1,914) | 1:A:147:LEU:HD11 | 1:A:148:ASP:H | 3 | 0.41 |
| (1,914) | 1:A:147:LEU:HD12 | 1:A:148:ASP:H | 3 | 0.41 |
| (1,914) | 1:A:147:LEU:HD13 | 1:A:148:ASP:H | 3 | 0.41 |
| (1,914) | 1:A:147:LEU:HD11 | 1:A:148:ASP:H | 16 | 0.41 |
| (1,914) | 1:A:147:LEU:HD12 | 1:A:148:ASP:H | 16 | 0.41 |
| (1,914) | 1:A:147:LEU:HD13 | 1:A:148:ASP:H | 16 | 0.41 |
| (1,913) | 1:A:137:LEU:HD11 | 1:A:148:ASP:H | 2 | 0.41 |
| (1,913) | 1:A:137:LEU:HD12 | 1:A:148:ASP:H | 2 | 0.41 |
| (1,913) | 1:A:137:LEU:HD13 | 1:A:148:ASP:H | 2 | 0.41 |
| (1,510) | 1:A:137:LEU:HD11 | 1:A:150:LEU:H | 8 | 0.41 |
| (1,510) | 1:A:137:LEU:HD12 | 1:A:150:LEU:H | 8 | 0.41 |
| (1,510) | 1:A:137:LEU:HD13 | 1:A:150:LEU:H | 8 | 0.41 |
| (1,229) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:147:LEU:HD21 | 6 | 0.41 |
| (1,229) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:147:LEU:HD22 | 6 | 0.41 |
| (1,229) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:147:LEU:HD23 | 6 | 0.41 |
| (1,225) | 1:A:163:LEU:HD11 | 1:A:165:TRP:H | 5 | 0.41 |
| (1,225) | 1:A:163:LEU:HD12 | 1:A:165:TRP:H | 5 | 0.41 |
| (1,225) | 1:A:163:LEU:HD13 | 1:A:165:TRP:H | 5 | 0.41 |
| (1,913) | 1:A:137:LEU:HD11 | 1:A:148:ASP:H | 7 | 0.4 |
| (1,913) | 1:A:137:LEU:HD12 | 1:A:148:ASP:H | 7 | 0.4 |
| (1,913) | 1:A:137:LEU:HD13 | 1:A:148:ASP:H | 7 | 0.4 |



Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,225) | 1:A:163:LEU:HD11 | 1:A:165:TRP:H | 17 | 0.4 |
| (1,225) | 1:A:163:LEU:HD12 | 1:A:165:TRP:H | 17 | 0.4 |
| (1,225) | 1:A:163:LEU:HD13 | 1:A:165:TRP:H | 17 | 0.4 |
| (1,913) | 1:A:137:LEU:HD11 | 1:A:148:ASP:H | 10 | 0.39 |
| (1,913) | 1:A:137:LEU:HD12 | 1:A:148:ASP:H | 10 | 0.39 |
| (1,913) | 1:A:137:LEU:HD13 | 1:A:148:ASP:H | 10 | 0.39 |
| (1,758) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:150:LEU:HD11 | 6 | 0.39 |
| (1,758) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:150:LEU:HD12 | 6 | 0.39 |
| (1,758) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:150:LEU:HD13 | 6 | 0.39 |
| (1,758) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:150:LEU:HD11 | 6 | 0.39 |
| (1,758) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:150:LEU:HD12 | 6 | 0.39 |
| (1,758) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:150:LEU:HD13 | 6 | 0.39 |
| (1,758) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:150:LEU:HD11 | 6 | 0.39 |
| (1,758) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:150:LEU:HD12 | 6 | 0.39 |
| (1,758) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:150:LEU:HD13 | 6 | 0.39 |
| (1,225) | 1:A:163:LEU:HD11 | 1:A:165:TRP:H | 18 | 0.39 |
| (1,225) | 1:A:163:LEU:HD12 | 1:A:165:TRP:H | 18 | 0.39 |
| (1,225) | 1:A:163:LEU:HD13 | 1:A:165:TRP:H | 18 | 0.39 |
| (1,914) | 1:A:147:LEU:HD11 | 1:A:148:ASP:H | 8 | 0.38 |
| (1,914) | 1:A:147:LEU:HD12 | 1:A:148:ASP:H | 8 | 0.38 |
| (1,914) | 1:A:147:LEU:HD13 | 1:A:148:ASP:H | 8 | 0.38 |
| (1,296) | 1:A:137:LEU:HD11 | 1:A:149:LEU:H | 7 | 0.38 |
| (1,296) | 1:A:137:LEU:HD12 | 1:A:149:LEU:H | 7 | 0.38 |
| (1,296) | 1:A:137:LEU:HD13 | 1:A:149:LEU:H | 7 | 0.38 |
| (1,249) | 1:A:81:VAL:HG11 | 1:A:84:ASN:H | 1 | 0.38 |
| (1,249) | 1:A:81:VAL:HG12 | 1:A:84:ASN:H | 1 | 0.38 |
| (1,249) | 1:A:81:VAL:HG13 | 1:A:84:ASN:H | 1 | 0.38 |
| (1,225) | 1:A:163:LEU:HD11 | 1:A:165:TRP:H | 9 | 0.38 |
| (1,225) | 1:A:163:LEU:HD12 | 1:A:165:TRP:H | 9 | 0.38 |
| (1,225) | 1:A:163:LEU:HD13 | 1:A:165:TRP:H | 9 | 0.38 |
| (1,225) | 1:A:163:LEU:HD11 | 1:A:165:TRP:H | 10 | 0.38 |
| (1,225) | 1:A:163:LEU:HD12 | 1:A:165:TRP:H | 10 | 0.38 |
| (1,225) | 1:A:163:LEU:HD13 | 1:A:165:TRP:H | 10 | 0.38 |
| (1,225) | 1:A:163:LEU:HD11 | 1:A:165:TRP:H | 11 | 0.38 |
| (1,225) | 1:A:163:LEU:HD12 | 1:A:165:TRP:H | 11 | 0.38 |
| (1,225) | 1:A:163:LEU:HD13 | 1:A:165:TRP:H | 11 | 0.38 |
| (1,913) | 1:A:137:LEU:HD11 | 1:A:148:ASP:H | 3 | 0.37 |
| (1,913) | 1:A:137:LEU:HD12 | 1:A:148:ASP:H | 3 | 0.37 |
| (1,913) | 1:A:137:LEU:HD13 | 1:A:148:ASP:H | 3 | 0.37 |
| (1,507) | 1:A:37:ALA:H | 1:A:57:VAL:HG21 | 19 | 0.37 |
| (1,507) | 1:A:37:ALA:H | 1:A:57:VAL:HG22 | 19 | 0.37 |
| (1,507) | 1:A:37:ALA:H | 1:A:57:VAL:HG23 | 19 | 0.37 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,301) | 1:A:104:HIS:H | 1:A:105:LEU:HD21 | 16 | 0.37 |
| (1,301) | 1:A:104:HIS:H | 1:A:105:LEU:HD22 | 16 | 0.37 |
| (1,301) | 1:A:104:HIS:H | 1:A:105:LEU:HD23 | 16 | 0.37 |
| (1,296) | 1:A:137:LEU:HD11 | 1:A:149:LEU:H | 13 | 0.37 |
| (1,296) | 1:A:137:LEU:HD12 | 1:A:149:LEU:H | 13 | 0.37 |
| (1,296) | 1:A:137:LEU:HD13 | 1:A:149:LEU:H | 13 | 0.37 |
| (1,266) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:118:TYR:H | 15 | 0.37 |
| (1,266) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:118:TYR:H | 15 | 0.37 |
| (1,266) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:118:TYR:H | 15 | 0.37 |
| (1,225) | 1:A:163:LEU:HD11 | 1:A:165:TRP:H | 8 | 0.37 |
| (1,225) | 1:A:163:LEU:HD12 | 1:A:165:TRP:H | 8 | 0.37 |
| (1,225) | 1:A:163:LEU:HD13 | 1:A:165:TRP:H | 8 | 0.37 |
| (1,914) | 1:A:147:LEU:HD11 | 1:A:148:ASP:H | 4 | 0.36 |
| (1,914) | 1:A:147:LEU:HD12 | 1:A:148:ASP:H | 4 | 0.36 |
| (1,914) | 1:A:147:LEU:HD13 | 1:A:148:ASP:H | 4 | 0.36 |
| (1,913) | 1:A:137:LEU:HD11 | 1:A:148:ASP:H | 9 | 0.36 |
| (1,913) | 1:A:137:LEU:HD12 | 1:A:148:ASP:H | 9 | 0.36 |
| (1,913) | 1:A:137:LEU:HD13 | 1:A:148:ASP:H | 9 | 0.36 |
| (1,913) | 1:A:137:LEU:HD11 | 1:A:148:ASP:H | 14 | 0.36 |
| (1,913) | 1:A:137:LEU:HD12 | 1:A:148:ASP:H | 14 | 0.36 |
| (1,913) | 1:A:137:LEU:HD13 | 1:A:148:ASP:H | 14 | 0.36 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:117:VAL:HG11 | 16 | 0.36 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:117:VAL:HG12 | 16 | 0.36 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:117:VAL:HG13 | 16 | 0.36 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:117:VAL:HG11 | 16 | 0.36 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:117:VAL:HG12 | 16 | 0.36 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:117:VAL:HG13 | 16 | 0.36 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:117:VAL:HG11 | 16 | 0.36 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:117:VAL:HG12 | 16 | 0.36 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:117:VAL:HG13 | 16 | 0.36 |
| (1,510) | 1:A:137:LEU:HD11 | 1:A:150:LEU:H | 18 | 0.36 |
| (1,510) | 1:A:137:LEU:HD12 | 1:A:150:LEU:H | 18 | 0.36 |
| (1,510) | 1:A:137:LEU:HD13 | 1:A:150:LEU:H | 18 | 0.36 |
| (1,229) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:147:LEU:HD21 | 8 | 0.36 |
| (1,229) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:147:LEU:HD22 | 8 | 0.36 |
| (1,229) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:147:LEU:HD23 | 8 | 0.36 |
| (1,225) | 1:A:163:LEU:HD11 | 1:A:165:TRP:H | 3 | 0.36 |
| (1,225) | 1:A:163:LEU:HD12 | 1:A:165:TRP:H | 3 | 0.36 |
| (1,225) | 1:A:163:LEU:HD13 | 1:A:165:TRP:H | 3 | 0.36 |
| (1,225) | 1:A:163:LEU:HD11 | 1:A:165:TRP:H | 7 | 0.36 |
| (1,225) | 1:A:163:LEU:HD12 | 1:A:165:TRP:H | 7 | 0.36 |
| (1,225) | 1:A:163:LEU:HD13 | 1:A:165:TRP:H | 7 | 0.36 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,914) | 1:A:147:LEU:HD11 | 1:A:148:ASP:H | 13 | 0.35 |
| (1,914) | 1:A:147:LEU:HD12 | 1:A:148:ASP:H | 13 | 0.35 |
| (1,914) | 1:A:147:LEU:HD13 | 1:A:148:ASP:H | 13 | 0.35 |
| (1,518) | 1:A:117:VAL:HG11 | 1:A:121:LEU:HD11 | 6 | 0.35 |
| (1,518) | 1:A:117:VAL:HG11 | 1:A:121:LEU:HD12 | 6 | 0.35 |
| (1,518) | 1:A:117:VAL:HG11 | 1:A:121:LEU:HD13 | 6 | 0.35 |
| (1,518) | 1:A:117:VAL:HG12 | 1:A:121:LEU:HD11 | 6 | 0.35 |
| (1,518) | 1:A:117:VAL:HG12 | 1:A:121:LEU:HD12 | 6 | 0.35 |
| (1,518) | 1:A:117:VAL:HG12 | 1:A:121:LEU:HD13 | 6 | 0.35 |
| (1,518) | 1:A:117:VAL:HG13 | 1:A:121:LEU:HD11 | 6 | 0.35 |
| (1,518) | 1:A:117:VAL:HG13 | 1:A:121:LEU:HD12 | 6 | 0.35 |
| (1,518) | 1:A:117:VAL:HG13 | 1:A:121:LEU:HD13 | 6 | 0.35 |
| (1,225) | 1:A:163:LEU:HD11 | 1:A:165:TRP:H | 2 | 0.35 |
| (1,225) | 1:A:163:LEU:HD12 | 1:A:165:TRP:H | 2 | 0.35 |
| (1,225) | 1:A:163:LEU:HD13 | 1:A:165:TRP:H | 2 | 0.35 |
| (1,1099) | 1:A:124:GLY:O | 1:A:98:ILE:H | 6 | 0.35 |
| (1,914) | 1:A:147:LEU:HD11 | 1:A:148:ASP:H | 7 | 0.34 |
| (1,914) | 1:A:147:LEU:HD12 | 1:A:148:ASP:H | 7 | 0.34 |
| (1,914) | 1:A:147:LEU:HD13 | 1:A:148:ASP:H | 7 | 0.34 |
| (1,453) | 1:A:118:TYR:H | 1:A:121:LEU:HD21 | 6 | 0.34 |
| (1,453) | 1:A:118:TYR:H | 1:A:121:LEU:HD22 | 6 | 0.34 |
| (1,453) | 1:A:118:TYR:H | 1:A:121:LEU:HD23 | 6 | 0.34 |
| (1,225) | 1:A:163:LEU:HD11 | 1:A:165:TRP:H | 15 | 0.34 |
| (1,225) | 1:A:163:LEU:HD12 | 1:A:165:TRP:H | 15 | 0.34 |
| (1,225) | 1:A:163:LEU:HD13 | 1:A:165:TRP:H | 15 | 0.34 |
| (1,1003) | 1:A:59:GLN:H | 1:A:37:ALA:H | 20 | 0.34 |
| (1,994) | 1:A:79:THR:H | 1:A:54:VAL:H | 1 | 0.33 |
| (1,914) | 1:A:147:LEU:HD11 | 1:A:148:ASP:H | 5 | 0.33 |
| (1,914) | 1:A:147:LEU:HD12 | 1:A:148:ASP:H | 5 | 0.33 |
| (1,914) | 1:A:147:LEU:HD13 | 1:A:148:ASP:H | 5 | 0.33 |
| (1,914) | 1:A:147:LEU:HD11 | 1:A:148:ASP:H | 6 | 0.33 |
| (1,914) | 1:A:147:LEU:HD12 | 1:A:148:ASP:H | 6 | 0.33 |
| (1,914) | 1:A:147:LEU:HD13 | 1:A:148:ASP:H | 6 | 0.33 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:117:VAL:HG11 | 1 | 0.33 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:117:VAL:HG12 | 1 | 0.33 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:117:VAL:HG13 | 1 | 0.33 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:117:VAL:HG11 | 1 | 0.33 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:117:VAL:HG12 | 1 | 0.33 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:117:VAL:HG13 | 1 | 0.33 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:117:VAL:HG11 | 1 | 0.33 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:117:VAL:HG12 | 1 | 0.33 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:117:VAL:HG13 | 1 | 0.33 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:117:VAL:HG11 | 3 | 0.33 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:117:VAL:HG12 | 3 | 0.33 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:117:VAL:HG13 | 3 | 0.33 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:117:VAL:HG11 | 3 | 0.33 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:117:VAL:HG12 | 3 | 0.33 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:117:VAL:HG13 | 3 | 0.33 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:117:VAL:HG11 | 3 | 0.33 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:117:VAL:HG12 | 3 | 0.33 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:117:VAL:HG13 | 3 | 0.33 |
| (1,346) | 1:A:175:LEU:HD21 | 1:A:184:LYS:H | 11 | 0.33 |
| (1,346) | 1:A:175:LEU:HD22 | 1:A:184:LYS:H | 11 | 0.33 |
| (1,346) | 1:A:175:LEU:HD23 | 1:A:184:LYS:H | 11 | 0.33 |
| (1,225) | 1:A:163:LEU:HD11 | 1:A:165:TRP:H | 4 | 0.33 |
| (1,225) | 1:A:163:LEU:HD12 | 1:A:165:TRP:H | 4 | 0.33 |
| (1,225) | 1:A:163:LEU:HD13 | 1:A:165:TRP:H | 4 | 0.33 |
| (1,225) | 1:A:163:LEU:HD11 | 1:A:165:TRP:H | 19 | 0.33 |
| (1,225) | 1:A:163:LEU:HD12 | 1:A:165:TRP:H | 19 | 0.33 |
| (1,225) | 1:A:163:LEU:HD13 | 1:A:165:TRP:H | 19 | 0.33 |
| (1,914) | 1:A:147:LEU:HD11 | 1:A:148:ASP:H | 1 | 0.32 |
| (1,914) | 1:A:147:LEU:HD12 | 1:A:148:ASP:H | 1 | 0.32 |
| (1,914) | 1:A:147:LEU:HD13 | 1:A:148:ASP:H | 1 | 0.32 |
| (1,914) | 1:A:147:LEU:HD11 | 1:A:148:ASP:H | 15 | 0.32 |
| (1,914) | 1:A:147:LEU:HD12 | 1:A:148:ASP:H | 15 | 0.32 |
| (1,914) | 1:A:147:LEU:HD13 | 1:A:148:ASP:H | 15 | 0.32 |
| (1,914) | 1:A:147:LEU:HD11 | 1:A:148:ASP:H | 19 | 0.32 |
| (1,914) | 1:A:147:LEU:HD12 | 1:A:148:ASP:H | 19 | 0.32 |
| (1,914) | 1:A:147:LEU:HD13 | 1:A:148:ASP:H | 19 | 0.32 |
| (1,841) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:146:ASP:H | 11 | 0.32 |
| (1,841) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:146:ASP:H | 11 | 0.32 |
| (1,841) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:146:ASP:H | 11 | 0.32 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:117:VAL:HG11 | 19 | 0.32 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:117:VAL:HG12 | 19 | 0.32 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:117:VAL:HG13 | 19 | 0.32 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:117:VAL:HG11 | 19 | 0.32 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:117:VAL:HG12 | 19 | 0.32 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:117:VAL:HG13 | 19 | 0.32 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:117:VAL:HG11 | 19 | 0.32 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:117:VAL:HG12 | 19 | 0.32 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:117:VAL:HG13 | 19 | 0.32 |
| (1,507) | 1:A:37:ALA:H | 1:A:57:VAL:HG21 | 13 | 0.32 |
| (1,507) | 1:A:37:ALA:H | 1:A:57:VAL:HG22 | 13 | 0.32 |
| (1,507) | 1:A:37:ALA:H | 1:A:57:VAL:HG23 | 13 | 0.32 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,249) | 1:A:81:VAL:HG11 | 1:A:84:ASN:H | 8 | 0.32 |
| (1,249) | 1:A:81:VAL:HG12 | 1:A:84:ASN:H | 8 | 0.32 |
| (1,249) | 1:A:81:VAL:HG13 | 1:A:84:ASN:H | 8 | 0.32 |
| (1,225) | 1:A:163:LEU:HD11 | 1:A:165:TRP:H | 13 | 0.32 |
| (1,225) | 1:A:163:LEU:HD12 | 1:A:165:TRP:H | 13 | 0.32 |
| (1,225) | 1:A:163:LEU:HD13 | 1:A:165:TRP:H | 13 | 0.32 |
| (1,225) | 1:A:163:LEU:HD11 | 1:A:165:TRP:H | 20 | 0.32 |
| (1,225) | 1:A:163:LEU:HD12 | 1:A:165:TRP:H | 20 | 0.32 |
| (1,225) | 1:A:163:LEU:HD13 | 1:A:165:TRP:H | 20 | 0.32 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:117:VAL:HG11 | 7 | 0.31 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:117:VAL:HG12 | 7 | 0.31 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:117:VAL:HG13 | 7 | 0.31 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:117:VAL:HG11 | 7 | 0.31 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:117:VAL:HG12 | 7 | 0.31 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:117:VAL:HG13 | 7 | 0.31 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:117:VAL:HG11 | 7 | 0.31 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:117:VAL:HG12 | 7 | 0.31 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:117:VAL:HG13 | 7 | 0.31 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:117:VAL:HG11 | 8 | 0.31 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:117:VAL:HG12 | 8 | 0.31 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:117:VAL:HG13 | 8 | 0.31 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:117:VAL:HG11 | 8 | 0.31 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:117:VAL:HG12 | 8 | 0.31 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:117:VAL:HG13 | 8 | 0.31 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:117:VAL:HG11 | 8 | 0.31 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:117:VAL:HG12 | 8 | 0.31 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:117:VAL:HG13 | 8 | 0.31 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:117:VAL:HG11 | 12 | 0.31 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:117:VAL:HG12 | 12 | 0.31 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:117:VAL:HG13 | 12 | 0.31 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:117:VAL:HG11 | 12 | 0.31 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:117:VAL:HG12 | 12 | 0.31 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:117:VAL:HG13 | 12 | 0.31 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:117:VAL:HG11 | 12 | 0.31 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:117:VAL:HG12 | 12 | 0.31 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:117:VAL:HG13 | 12 | 0.31 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD21 | 1:A:160:LEU:HD11 | 5 | 0.31 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD21 | 1:A:160:LEU:HD12 | 5 | 0.31 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD21 | 1:A:160:LEU:HD13 | 5 | 0.31 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD22 | 1:A:160:LEU:HD11 | 5 | 0.31 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD22 | 1:A:160:LEU:HD12 | 5 | 0.31 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD22 | 1:A:160:LEU:HD13 | 5 | 0.31 |



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

| (1,498) 1:A:156:LEU:HD23 1:A:160:LEU:HD11 5 0.31 (1,498) 1:A:156:LEU:HD23 1:A:160:LEU:HD13 5 0.31 (1,498) 1:A:156:LEU:HD23 1:A:160:LEU:HD13 5 0.31 (1,498) 1:A:145:LYS:H 1:A:149:LEU:HD11 17 0.31 (1,269) 1:A:145:LYS:H 1:A:149:LEU:HD12 17 0.31 (1,269) 1:A:145:LYS:H 1:A:149:LEU:HD13 17 0.31 (1,915) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:148:ASP:H 9 0.3 (1,915) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:148:ASP:H 9 0.3 (1,915) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD11 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD12 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD13 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD13 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD11 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 | Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|--|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,498) 1:A:145:LYS:H 1:A:149:LEU:HD13 5 0.31 (1,269) 1:A:145:LYS:H 1:A:149:LEU:HD11 17 0.31 (1,269) 1:A:145:LYS:H 1:A:149:LEU:HD12 17 0.31 (1,269) 1:A:145:LYS:H 1:A:149:LEU:HD13 17 0.31 (1,915) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:148:ASP:H 9 0.3 (1,915) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD11 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD11 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD13 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD11 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD13 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD13 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD11 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD12 2 0.3 (1,701) 1:A:133:LEU:HD23 | (1,498) | 1:A:156:LEU:HD23 | 1:A:160:LEU:HD11 | 5 | 0.31 |
| (1,269) 1:A:145:LYS:H 1:A:149:LEU:HD11 17 0.31 (1,269) 1:A:145:LYS:H 1:A:149:LEU:HD12 17 0.31 (1,269) 1:A:145:LYS:H 1:A:149:LEU:HD13 17 0.31 (1,915) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:148:ASP:H 9 0.3 (1,915) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:148:ASP:H 9 0.3 (1,915) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:148:ASP:H 9 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD11 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD11 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD12 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD12 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD12 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD13 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD11 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD11 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD12 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD13 2 0.3 (1,501) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD13 2 0.3 (1,501) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:147:LEU:HD13 2 0.3 (1,500) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:147:LEU:HD14 6 0.3 (1,500) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:150:LEU:H 6 0.3 (1,500) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:147:LEU:HD14 6 0.3 (1,500) 1:A:137:LEU:HD14 1:A:150:LEU:H 6 0.3 (1,500) 1:A:137:LEU:HD14 1:A:150:LEU:H 6 0.3 (1,500) 1:A:137:LEU:HD15 1:A:137:LEU:HD16 0.3 (1,500) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:150:LEU:H 6 0.3 (1,500) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:150:LEU:H 6 0.3 (1,500) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:149:LEU:H 16 0.3 (1,206) 1:A:137:LEU:HD14 1:A:149:LEU:H 16 0.3 (1,206) 1:A:137:LEU:HD14 1:A:149:LEU:H 16 0.3 (1,206) 1:A:137:LEU:HD14 1:A:149:LEU:H 16 0.3 (1,206) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:149:LEU:H 16 0.3 (1,206) 1:A:137:LEU:HD14 1:A:149:LEU:H 16 0.3 (1,206) 1:A:137:LEU:HD15 1:A:149:LEU:H 16 0.3 (1,206) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:149:LEU:H 18 0.29 (1,206) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:148:ASP:H 18 | (1,498) | 1:A:156:LEU:HD23 | 1:A:160:LEU:HD12 | 5 | 0.31 |
| (1,269) 1:A:145:LYS:H 1:A:149:LEU:HD12 17 0.31 (1,269) 1:A:145:LYS:H 1:A:149:LEU:HD13 17 0.31 (1,915) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:148:ASP:H 9 0.3 (1,915) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:148:ASP:H 9 0.3 (1,915) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:148:ASP:H 9 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD11 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD12 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD13 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD12 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD13 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD12 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD12 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD13 2 0.3 (1,506) 1:A:1437:LEU:HD23 <t< td=""><td>(1,498)</td><td>1:A:156:LEU:HD23</td><td>1:A:160:LEU:HD13</td><td>5</td><td>0.31</td></t<> | (1,498) | 1:A:156:LEU:HD23 | 1:A:160:LEU:HD13 | 5 | 0.31 |
| (1,269) 1:A:145:LYS:H 1:A:149:LEU:HD13 17 0.31 (1,915) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:148:ASP:H 9 0.3 (1,915) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:148:ASP:H 9 0.3 (1,915) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:148:ASP:H 9 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD11 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD13 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD13 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD12 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD13 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD13 2 0.3 (1,502) 1:A:1449:LEU:H | (1,269) | 1:A:145:LYS:H | 1:A:149:LEU:HD11 | 17 | 0.31 |
| (1,915) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:148:ASP:H 9 0.3 (1,915) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:148:ASP:H 9 0.3 (1,915) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:148:ASP:H 9 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD11 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD13 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD13 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD12 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD13 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD12 2 0.3 (1,501) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:147:LEU:HD14 7 0.3 (1,506) 1:A:147:LEU:HD13 < | (1,269) | 1:A:145:LYS:H | 1:A:149:LEU:HD12 | 17 | 0.31 |
| (1,915) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:148:ASP:H 9 0.3 (1,915) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:148:ASP:H 9 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD11 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD12 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD11 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD12 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD13 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD13 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD11 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD12 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD12 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD12 2 0.3 (1,501) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD13 2 0.3 (1,502) 1:A:137:LEU:HD13 | (1,269) | 1:A:145:LYS:H | 1:A:149:LEU:HD13 | 17 | 0.31 |
| (1,915) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:148:ASP:H 9 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD11 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD12 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD13 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD12 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD13 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD13 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD14 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD12 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD13 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD13 2 0.3 (1,506) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD13 2 0.3 (1,506) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:150:LEU:H 6 0.3 (1,510) 1:A:137:LEU:HD13 | (1,915) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:148:ASP:H | 9 | 0.3 |
| (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD11 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD12 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD13 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD11 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD13 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD11 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD11 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD12 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD13 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD13 2 0.3 (1,501) 1:A:133:ALA:H 1:A:137:LEU:HD13 2 0.3 (1,502) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:150:LEU:H 6 0.3 (1,510) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:150:LEU:H 6 0.3 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1 | (1,915) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:148:ASP:H | 9 | 0.3 |
| (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD12 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD13 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD11 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD12 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD13 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD12 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD12 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD12 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD13 2 0.3 (1,502) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD13 2 0.3 (1,596) 1:A:164:ASN:H 1:A:195:LEU:H 6 0.3 (1,510) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:150:LEU:H 6 0.3 (1,510) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:150:LEU:H 6 0.3 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A: | (1,915) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:148:ASP:H | 9 | 0.3 |
| (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD13 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD11 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD12 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD13 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD12 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD12 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD13 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD13 2 0.3 (1,502) 1:A:133:ALA:H 1:A:137:LEU:H 6 0.3 (1,596) 1:A:16:ASN:H 1:A:195:LEU:H 7 0.3 (1,510) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:150:LEU:H 6 0.3 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG21 3 0.3 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG22 3 0.3 (1,303) 1:A:91:VAL:H 1:A:49:LEU:H | (1,701) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD11 | 2 | 0.3 |
| (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD11 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD12 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD13 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD11 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD12 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD13 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD13 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD13 2 0.3 (1,502) 1:A:133:ALA:H 1:A:137:LEU:H 6 0.3 (1,596) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:150:LEU:H 6 0.3 (1,510) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:150:LEU:H 6 0.3 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG21 3 0.3 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG23 3 0.3 (1,296) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:149:LE | (1,701) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD12 | 2 | 0.3 |
| (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD12 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD13 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD11 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD12 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD13 2 0.3 (1,701) 1:A:133:ALA:H 1:A:137:LEU:HD13 2 0.3 (1,502) 1:A:133:ALA:H 1:A:137:LEU:H 6 0.3 (1,596) 1:A:164:ASN:H 1:A:195:LEU:H 7 0.3 (1,510) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:150:LEU:H 6 0.3 (1,510) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:150:LEU:H 6 0.3 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG21 3 0.3 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG22 3 0.3 (1,507) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:149:LEU:H 16 0.3 (1,296) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:149:LEU:H | (1,701) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD13 | 2 | 0.3 |
| (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD13 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD11 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD12 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD13 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD13 2 0.3 (1,501) 1:A:133:ALA:H 1:A:137:LEU:H 6 0.3 (1,596) 1:A:146:ASN:H 1:A:155:LEU:H 7 0.3 (1,510) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:150:LEU:H 6 0.3 (1,510) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:150:LEU:H 6 0.3 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG21 3 0.3 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG23 3 0.3 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:39:ASP:H 20 0.3 (1,296) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:149:LEU:H 16 0.3 (1,296) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:149:LEU:H | (1,701) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD11 | 2 | 0.3 |
| (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD13 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD11 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD12 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD13 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD13 2 0.3 (1,501) 1:A:133:ALA:H 1:A:137:LEU:H 6 0.3 (1,596) 1:A:164:ASN:H 1:A:195:LEU:H 7 0.3 (1,510) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:150:LEU:H 6 0.3 (1,510) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:150:LEU:H 6 0.3 (1,510) 1:A:37:LEU:HD13 1:A:150:LEU:H 6 0.3 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG21 3 0.3 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG22 3 0.3 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:93:ASP:H 20 0.3 (1,296) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:149:LEU:H | (' / | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD12 | 2 | 0.3 |
| (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD13 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD13 2 0.3 (1,622) 1:A:133:ALA:H 1:A:137:LEU:H 6 0.3 (1,596) 1:A:164:ASN:H 1:A:195:LEU:H 7 0.3 (1,510) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:150:LEU:H 6 0.3 (1,510) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:150:LEU:H 6 0.3 (1,510) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:150:LEU:H 6 0.3 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG21 3 0.3 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG22 3 0.3 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG23 3 0.3 (1,296) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:149:LEU:H 16 0.3 (1,296) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:149:LEU:H 16 0.3 (1,296) 1:A:117:VAL:HG21 1:A:118:TYR:H 9 0.3 (1,266) 1:A:117:VAL:HG22 1:A:118:TYR:H | | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD13 | 2 | 0.3 |
| (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD13 2 0.3 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD13 2 0.3 (1,622) 1:A:133:ALA:H 1:A:137:LEU:H 6 0.3 (1,596) 1:A:164:ASN:H 1:A:195:LEU:H 7 0.3 (1,510) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:150:LEU:H 6 0.3 (1,510) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:150:LEU:H 6 0.3 (1,510) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:150:LEU:H 6 0.3 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG21 3 0.3 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG22 3 0.3 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG23 3 0.3 (1,296) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:149:LEU:H 16 0.3 (1,296) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:149:LEU:H 16 0.3 (1,296) 1:A:117:VAL:HG21 1:A:118:TYR:H 9 0.3 (1,266) 1:A:117:VAL:HG22 1:A:118:TYR:H | (1,701) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD11 | 2 | 0.3 |
| (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD13 2 0.3 (1,622) 1:A:133:ALA:H 1:A:137:LEU:H 6 0.3 (1,596) 1:A:164:ASN:H 1:A:195:LEU:H 7 0.3 (1,510) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:150:LEU:H 6 0.3 (1,510) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:150:LEU:H 6 0.3 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG21 3 0.3 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG22 3 0.3 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG23 3 0.3 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG23 3 0.3 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG23 3 0.3 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:457:VAL:HG23 3 0.3 (1,296) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:149:LEU:H 16 0.3 (1,296) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:149:LEU:H 16 0.3 (1,296) 1:A:117:VAL:HG21 1:A:118:TYR:H 9 | (' / | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD12 | | |
| (1,622) 1:A:133:ALA:H 1:A:137:LEU:H 6 0.3 (1,596) 1:A:164:ASN:H 1:A:195:LEU:H 7 0.3 (1,510) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:150:LEU:H 6 0.3 (1,510) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:150:LEU:H 6 0.3 (1,510) 1:A:37:LEU:HD13 1:A:150:LEU:H 6 0.3 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG21 3 0.3 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG23 3 0.3 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG23 3 0.3 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG23 3 0.3 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:493:ASP:H 20 0.3 (1,507) 1:A:37:LEU:HD11 1:A:149:LEU:H 16 0.3 (1,296) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:149:LEU:H 16 0.3 (1,296) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:149:LEU:H 16 0.3 (1,266) 1:A:117:VAL:HG21 1:A:118:TYR:H 9 | | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD13 | | |
| (1,596) 1:A:164:ASN:H 1:A:195:LEU:H 7 0.3 (1,510) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:150:LEU:H 6 0.3 (1,510) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:150:LEU:H 6 0.3 (1,510) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:150:LEU:H 6 0.3 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG21 3 0.3 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG22 3 0.3 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG23 3 0.3 (1,303) 1:A:91:VAL:H 1:A:93:ASP:H 20 0.3 (1,296) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:149:LEU:H 16 0.3 (1,296) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:149:LEU:H 16 0.3 (1,266) 1:A:117:VAL:HG21 1:A:118:TYR:H 9 0.3 (1,266) 1:A:117:VAL:HG22 1:A:118:TYR:H 9 0.3 (1,266) 1:A:117:VAL:HG23 1:A:118:TYR:H 9 0.3 (1,914) 1:A:147:LEU:HD11 1:A:148:ASP:H 18 | _ ` | 1:A:133:ALA:H | 1:A:137:LEU:H | 6 | 0.3 |
| (1,510) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:150:LEU:H 6 0.3 (1,510) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:150:LEU:H 6 0.3 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG21 3 0.3 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG22 3 0.3 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG23 3 0.3 (1,303) 1:A:91:VAL:H 1:A:93:ASP:H 20 0.3 (1,296) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:149:LEU:H 16 0.3 (1,296) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:149:LEU:H 16 0.3 (1,296) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:149:LEU:H 16 0.3 (1,296) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:118:TYR:H 9 0.3 (1,266) 1:A:117:VAL:HG21 1:A:118:TYR:H 9 0.3 (1,266) 1:A:117:VAL:HG23 1:A:118:TYR:H 9 0.3 (1,300) 1:A:108:SER:O 1:A:112:GLN:H 19 0.3 (1,310) 1:A:147:LEU:HD11 1:A:148:ASP:H 18 <td>(' /</td> <td>1:A:164:ASN:H</td> <td>1:A:195:LEU:H</td> <td>7</td> <td>0.3</td> | (' / | 1:A:164:ASN:H | 1:A:195:LEU:H | 7 | 0.3 |
| (1,510) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:150:LEU:H 6 0.3 (1,510) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:150:LEU:H 6 0.3 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG21 3 0.3 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG22 3 0.3 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG23 3 0.3 (1,303) 1:A:91:VAL:H 1:A:93:ASP:H 20 0.3 (1,296) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:149:LEU:H 16 0.3 (1,296) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:149:LEU:H 16 0.3 (1,296) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:149:LEU:H 16 0.3 (1,266) 1:A:117:VAL:HG21 1:A:118:TYR:H 9 0.3 (1,266) 1:A:117:VAL:HG22 1:A:118:TYR:H 9 0.3 (1,266) 1:A:117:VAL:HG23 1:A:118:TYR:H 9 0.3 (1,914) 1:A:108:SER:O 1:A:112:GLN:H 19 0.3 (1,914) 1:A:147:LEU:HD11 1:A:148:ASP:H 18 <td>(1,510)</td> <td>1:A:137:LEU:HD11</td> <td>1:A:150:LEU:H</td> <td>6</td> <td>0.3</td> | (1,510) | 1:A:137:LEU:HD11 | 1:A:150:LEU:H | 6 | 0.3 |
| (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG21 3 0.3 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG22 3 0.3 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG23 3 0.3 (1,303) 1:A:91:VAL:H 1:A:93:ASP:H 20 0.3 (1,296) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:149:LEU:H 16 0.3 (1,296) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:149:LEU:H 16 0.3 (1,296) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:149:LEU:H 16 0.3 (1,266) 1:A:117:VAL:HG21 1:A:118:TYR:H 9 0.3 (1,266) 1:A:117:VAL:HG22 1:A:118:TYR:H 9 0.3 (1,266) 1:A:117:VAL:HG23 1:A:118:TYR:H 9 0.3 (1,266) 1:A:1417:VAL:HG23 1:A:118:TYR:H 9 0.3 (1,914) 1:A:108:SER:O 1:A:112:GLN:H 19 0.3 (1,914) 1:A:147:LEU:HD11 1:A:148:ASP:H 18 0.29 (1,914) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:148:ASP:H 18 | (1,510) | 1:A:137:LEU:HD12 | 1:A:150:LEU:H | 6 | 0.3 |
| (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG22 3 0.3 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG23 3 0.3 (1,303) 1:A:91:VAL:H 1:A:93:ASP:H 20 0.3 (1,296) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:149:LEU:H 16 0.3 (1,296) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:149:LEU:H 16 0.3 (1,296) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:149:LEU:H 16 0.3 (1,296) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:149:LEU:H 16 0.3 (1,266) 1:A:117:VAL:HG21 1:A:118:TYR:H 9 0.3 (1,266) 1:A:117:VAL:HG22 1:A:118:TYR:H 9 0.3 (1,266) 1:A:117:VAL:HG23 1:A:118:TYR:H 9 0.3 (1,1070) 1:A:108:SER:O 1:A:112:GLN:H 19 0.3 (1,914) 1:A:147:LEU:HD11 1:A:148:ASP:H 18 0.29 (1,914) 1:A:147:LEU:HD12 1:A:148:ASP:H 18 0.29 (1,570) 1:A:133:ALA:H 1:A:145:LYS:H | (1,510) | 1:A:137:LEU:HD13 | 1:A:150:LEU:H | 6 | 0.3 |
| (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG23 3 0.3 (1,303) 1:A:91:VAL:H 1:A:93:ASP:H 20 0.3 (1,296) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:149:LEU:H 16 0.3 (1,296) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:149:LEU:H 16 0.3 (1,296) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:149:LEU:H 16 0.3 (1,266) 1:A:117:VAL:HG21 1:A:118:TYR:H 9 0.3 (1,266) 1:A:117:VAL:HG22 1:A:118:TYR:H 9 0.3 (1,266) 1:A:117:VAL:HG23 1:A:118:TYR:H 9 0.3 (1,266) 1:A:117:VAL:HG23 1:A:118:TYR:H 9 0.3 (1,266) 1:A:117:VAL:HG23 1:A:118:TYR:H 9 0.3 (1,266) 1:A:147:LEU:HG23 1:A:148:ASP:H 19 0.3 (1,914) 1:A:147:LEU:HD11 1:A:148:ASP:H 18 0.29 (1,914) 1:A:147:LEU:HD12 1:A:148:ASP:H 18 0.29 (1,914) 1:A:133:ALA:H 1:A:145:LYS:H < | (1,507) | 1:A:37:ALA:H | 1:A:57:VAL:HG21 | 3 | 0.3 |
| (1,303) 1:A:91:VAL:H 1:A:93:ASP:H 20 0.3 (1,296) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:149:LEU:H 16 0.3 (1,296) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:149:LEU:H 16 0.3 (1,296) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:149:LEU:H 16 0.3 (1,266) 1:A:117:VAL:HG21 1:A:118:TYR:H 9 0.3 (1,266) 1:A:117:VAL:HG22 1:A:118:TYR:H 9 0.3 (1,266) 1:A:117:VAL:HG23 1:A:118:TYR:H 9 0.3 (1,266) 1:A:117:VAL:HG23 1:A:118:TYR:H 9 0.3 (1,266) 1:A:117:VAL:HG23 1:A:118:TYR:H 9 0.3 (1,266) 1:A:147:LEU:HG23 1:A:148:ASP:H 19 0.3 (1,914) 1:A:147:LEU:HD11 1:A:148:ASP:H 18 0.29 (1,914) 1:A:147:LEU:HD12 1:A:148:ASP:H 18 0.29 (1,914) 1:A:133:ALA:H 1:A:145:LYS:H 18 0.29 (1,570) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:145:LYS:H | (1,507) | 1:A:37:ALA:H | 1:A:57:VAL:HG22 | 3 | 0.3 |
| (1,296) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:149:LEU:H 16 0.3 (1,296) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:149:LEU:H 16 0.3 (1,296) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:149:LEU:H 16 0.3 (1,266) 1:A:117:VAL:HG21 1:A:118:TYR:H 9 0.3 (1,266) 1:A:117:VAL:HG22 1:A:118:TYR:H 9 0.3 (1,266) 1:A:117:VAL:HG23 1:A:118:TYR:H 9 0.3 (1,266) 1:A:147:LEU:HG23 1:A:148:ASP:H 19 0.3 (1,914) 1:A:147:LEU:HD11 1:A:148:ASP:H 18 0.29 (1,914) 1:A:147:LEU:HD12 1:A:148:ASP:H 18 0.29 (1,622) 1:A:133:ALA:H 1:A:145:LYS:H 18 0.29 (1,570) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:145:LYS:H | (1,507) | 1:A:37:ALA:H | 1:A:57:VAL:HG23 | 3 | 0.3 |
| (1,296) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:149:LEU:H 16 0.3 (1,296) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:149:LEU:H 16 0.3 (1,266) 1:A:117:VAL:HG21 1:A:118:TYR:H 9 0.3 (1,266) 1:A:117:VAL:HG22 1:A:118:TYR:H 9 0.3 (1,266) 1:A:117:VAL:HG23 1:A:118:TYR:H 9 0.3 (1,266) 1:A:108:SER:O 1:A:112:GLN:H 19 0.3 (1,970) 1:A:108:SER:O 1:A:112:GLN:H 19 0.3 (1,914) 1:A:147:LEU:HD11 1:A:148:ASP:H 18 0.29 (1,914) 1:A:147:LEU:HD12 1:A:148:ASP:H 18 0.29 (1,914) 1:A:133:ALA:H 1:A:137:LEU:H 18 0.29 (1,570) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:145:LYS:H 18 0.29 (1,570) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:145:LYS:H 18 0.29 (1,570) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:145:LYS:H 18 0.29 | (1,303) | 1:A:91:VAL:H | 1:A:93:ASP:H | 20 | 0.3 |
| (1,296) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:149:LEU:H 16 0.3 (1,266) 1:A:117:VAL:HG21 1:A:118:TYR:H 9 0.3 (1,266) 1:A:117:VAL:HG22 1:A:118:TYR:H 9 0.3 (1,266) 1:A:117:VAL:HG23 1:A:118:TYR:H 9 0.3 (1,1070) 1:A:108:SER:O 1:A:112:GLN:H 19 0.3 (1,914) 1:A:147:LEU:HD11 1:A:148:ASP:H 18 0.29 (1,914) 1:A:147:LEU:HD12 1:A:148:ASP:H 18 0.29 (1,914) 1:A:147:LEU:HD13 1:A:148:ASP:H 18 0.29 (1,570) 1:A:133:ALA:H 1:A:137:LEU:H 18 0.29 (1,570) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:145:LYS:H 18 0.29 (1,570) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:145:LYS:H 18 0.29 | (1,296) | 1:A:137:LEU:HD11 | 1:A:149:LEU:H | 16 | 0.3 |
| (1,266) 1:A:117:VAL:HG21 1:A:118:TYR:H 9 0.3 (1,266) 1:A:117:VAL:HG22 1:A:118:TYR:H 9 0.3 (1,266) 1:A:117:VAL:HG23 1:A:118:TYR:H 9 0.3 (1,1070) 1:A:108:SER:O 1:A:112:GLN:H 19 0.3 (1,914) 1:A:147:LEU:HD11 1:A:148:ASP:H 18 0.29 (1,914) 1:A:147:LEU:HD12 1:A:148:ASP:H 18 0.29 (1,914) 1:A:133:ALA:H 1:A:148:ASP:H 18 0.29 (1,622) 1:A:133:ALA:H 1:A:137:LEU:H 18 0.29 (1,570) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:145:LYS:H 18 0.29 (1,570) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:145:LYS:H 18 0.29 (1,570) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:145:LYS:H 18 0.29 | (1,296) | 1:A:137:LEU:HD12 | 1:A:149:LEU:H | 16 | 0.3 |
| (1,266) 1:A:117:VAL:HG22 1:A:118:TYR:H 9 0.3 (1,266) 1:A:117:VAL:HG23 1:A:118:TYR:H 9 0.3 (1,1070) 1:A:108:SER:O 1:A:112:GLN:H 19 0.3 (1,914) 1:A:147:LEU:HD11 1:A:148:ASP:H 18 0.29 (1,914) 1:A:147:LEU:HD12 1:A:148:ASP:H 18 0.29 (1,914) 1:A:147:LEU:HD13 1:A:148:ASP:H 18 0.29 (1,622) 1:A:133:ALA:H 1:A:137:LEU:H 18 0.29 (1,570) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:145:LYS:H 18 0.29 (1,570) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:145:LYS:H 18 0.29 (1,570) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:145:LYS:H 18 0.29 | (1,296) | 1:A:137:LEU:HD13 | 1:A:149:LEU:H | 16 | 0.3 |
| (1,266) 1:A:117:VAL:HG23 1:A:118:TYR:H 9 0.3 (1,1070) 1:A:108:SER:O 1:A:112:GLN:H 19 0.3 (1,914) 1:A:147:LEU:HD11 1:A:148:ASP:H 18 0.29 (1,914) 1:A:147:LEU:HD12 1:A:148:ASP:H 18 0.29 (1,914) 1:A:147:LEU:HD13 1:A:148:ASP:H 18 0.29 (1,622) 1:A:133:ALA:H 1:A:137:LEU:H 18 0.29 (1,570) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:145:LYS:H 18 0.29 (1,570) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:145:LYS:H 18 0.29 (1,570) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:145:LYS:H 18 0.29 | (1,266) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:118:TYR:H | 9 | 0.3 |
| (1,1070) 1:A:108:SER:O 1:A:112:GLN:H 19 0.3 (1,914) 1:A:147:LEU:HD11 1:A:148:ASP:H 18 0.29 (1,914) 1:A:147:LEU:HD12 1:A:148:ASP:H 18 0.29 (1,914) 1:A:147:LEU:HD13 1:A:148:ASP:H 18 0.29 (1,622) 1:A:133:ALA:H 1:A:137:LEU:H 18 0.29 (1,570) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:145:LYS:H 18 0.29 (1,570) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:145:LYS:H 18 0.29 (1,570) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:145:LYS:H 18 0.29 | (1,266) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:118:TYR:H | 9 | 0.3 |
| (1,914) 1:A:147:LEU:HD11 1:A:148:ASP:H 18 0.29 (1,914) 1:A:147:LEU:HD12 1:A:148:ASP:H 18 0.29 (1,914) 1:A:147:LEU:HD13 1:A:148:ASP:H 18 0.29 (1,622) 1:A:133:ALA:H 1:A:137:LEU:H 18 0.29 (1,570) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:145:LYS:H 18 0.29 (1,570) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:145:LYS:H 18 0.29 (1,570) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:145:LYS:H 18 0.29 | (1,266) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:118:TYR:H | 9 | 0.3 |
| (1,914) 1:A:147:LEU:HD11 1:A:148:ASP:H 18 0.29 (1,914) 1:A:147:LEU:HD12 1:A:148:ASP:H 18 0.29 (1,914) 1:A:147:LEU:HD13 1:A:148:ASP:H 18 0.29 (1,622) 1:A:133:ALA:H 1:A:137:LEU:H 18 0.29 (1,570) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:145:LYS:H 18 0.29 (1,570) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:145:LYS:H 18 0.29 (1,570) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:145:LYS:H 18 0.29 | · · / | 1:A:108:SER:O | 1:A:112:GLN:H | 19 | 0.3 |
| (1,914) 1:A:147:LEU:HD13 1:A:148:ASP:H 18 0.29 (1,622) 1:A:133:ALA:H 1:A:137:LEU:H 18 0.29 (1,570) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:145:LYS:H 18 0.29 (1,570) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:145:LYS:H 18 0.29 (1,570) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:145:LYS:H 18 0.29 | · · / | 1:A:147:LEU:HD11 | 1:A:148:ASP:H | 18 | 0.29 |
| (1,914) 1:A:147:LEU:HD13 1:A:148:ASP:H 18 0.29 (1,622) 1:A:133:ALA:H 1:A:137:LEU:H 18 0.29 (1,570) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:145:LYS:H 18 0.29 (1,570) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:145:LYS:H 18 0.29 (1,570) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:145:LYS:H 18 0.29 | (1,914) | 1:A:147:LEU:HD12 | 1:A:148:ASP:H | 18 | 0.29 |
| (1,622) 1:A:133:ALA:H 1:A:137:LEU:H 18 0.29 (1,570) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:145:LYS:H 18 0.29 (1,570) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:145:LYS:H 18 0.29 (1,570) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:145:LYS:H 18 0.29 | | 1:A:147:LEU:HD13 | 1:A:148:ASP:H | 18 | 0.29 |
| (1,570) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:145:LYS:H 18 0.29 (1,570) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:145:LYS:H 18 0.29 (1,570) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:145:LYS:H 18 0.29 | (1,622) | 1:A:133:ALA:H | 1:A:137:LEU:H | 18 | 0.29 |
| (1,570) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:145:LYS:H 18 0.29 (1,570) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:145:LYS:H 18 0.29 | | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:145:LYS:H | 18 | 0.29 |
| (1,570) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:145:LYS:H 18 0.29 | | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:145:LYS:H | 18 | 0.29 |
| | · · / | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:145:LYS:H | 18 | 0.29 |
| | | | 1:A:150:LEU:H | 16 | 0.29 |



Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,510) | 1:A:137:LEU:HD12 | 1:A:150:LEU:H | 16 | 0.29 |
| (1,510) | 1:A:137:LEU:HD13 | 1:A:150:LEU:H | 16 | 0.29 |
| (1,382) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:167:ILE:HD11 | 5 | 0.29 |
| (1,382) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:167:ILE:HD12 | 5 | 0.29 |
| (1,382) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:167:ILE:HD13 | 5 | 0.29 |
| (1,249) | 1:A:81:VAL:HG11 | 1:A:84:ASN:H | 20 | 0.29 |
| (1,249) | 1:A:81:VAL:HG12 | 1:A:84:ASN:H | 20 | 0.29 |
| (1,249) | 1:A:81:VAL:HG13 | 1:A:84:ASN:H | 20 | 0.29 |
| (1,203) | 1:A:149:LEU:H | 1:A:150:LEU:HD21 | 6 | 0.29 |
| (1,203) | 1:A:149:LEU:H | 1:A:150:LEU:HD22 | 6 | 0.29 |
| (1,203) | 1:A:149:LEU:H | 1:A:150:LEU:HD23 | 6 | 0.29 |
| (1,168) | 1:A:137:LEU:H | 1:A:150:LEU:HD21 | 8 | 0.29 |
| (1,168) | 1:A:137:LEU:H | 1:A:150:LEU:HD22 | 8 | 0.29 |
| (1,168) | 1:A:137:LEU:H | 1:A:150:LEU:HD23 | 8 | 0.29 |
| (1,1034) | 1:A:23:SER:O | 1:A:27:GLN:H | 3 | 0.29 |
| (1,988) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:H | 2 | 0.28 |
| (1,988) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:H | 2 | 0.28 |
| (1,988) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:H | 2 | 0.28 |
| (1,914) | 1:A:147:LEU:HD11 | 1:A:148:ASP:H | 10 | 0.28 |
| (1,914) | 1:A:147:LEU:HD12 | 1:A:148:ASP:H | 10 | 0.28 |
| (1,914) | 1:A:147:LEU:HD13 | 1:A:148:ASP:H | 10 | 0.28 |
| (1,758) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:150:LEU:HD11 | 17 | 0.28 |
| (1,758) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:150:LEU:HD12 | 17 | 0.28 |
| (1,758) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:150:LEU:HD13 | 17 | 0.28 |
| (1,758) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:150:LEU:HD11 | 17 | 0.28 |
| (1,758) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:150:LEU:HD12 | 17 | 0.28 |
| (1,758) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:150:LEU:HD13 | 17 | 0.28 |
| (1,758) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:150:LEU:HD11 | 17 | 0.28 |
| (1,758) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:150:LEU:HD12 | 17 | 0.28 |
| (1,758) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:150:LEU:HD13 | 17 | 0.28 |
| (1,654) | 1:A:60:SER:H | 1:A:83:SER:H | 17 | 0.28 |
| (1,596) | 1:A:164:ASN:H | 1:A:195:LEU:H | 1 | 0.28 |
| (1,510) | 1:A:137:LEU:HD11 | 1:A:150:LEU:H | 7 | 0.28 |
| (1,510) | 1:A:137:LEU:HD12 | 1:A:150:LEU:H | 7 | 0.28 |
| (1,510) | 1:A:137:LEU:HD13 | 1:A:150:LEU:H | 7 | 0.28 |
| (1,507) | 1:A:37:ALA:H | 1:A:57:VAL:HG21 | 9 | 0.28 |
| (1,507) | 1:A:37:ALA:H | 1:A:57:VAL:HG22 | 9 | 0.28 |
| (1,507) | 1:A:37:ALA:H | 1:A:57:VAL:HG23 | 9 | 0.28 |
| (1,334) | 1:A:90:ILE:H | 1:A:91:VAL:HG21 | 20 | 0.28 |
| (1,334) | 1:A:90:ILE:H | 1:A:91:VAL:HG22 | 20 | 0.28 |
| (1,334) | 1:A:90:ILE:H | 1:A:91:VAL:HG23 | 20 | 0.28 |
| (1,303) | 1:A:91:VAL:H | 1:A:93:ASP:H | 19 | 0.28 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,296) | 1:A:137:LEU:HD11 | 1:A:149:LEU:H | 18 | 0.28 |
| (1,296) | 1:A:137:LEU:HD12 | 1:A:149:LEU:H | 18 | 0.28 |
| (1,296) | 1:A:137:LEU:HD13 | 1:A:149:LEU:H | 18 | 0.28 |
| (1,266) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:118:TYR:H | 3 | 0.28 |
| (1,266) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:118:TYR:H | 3 | 0.28 |
| (1,266) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:118:TYR:H | 3 | 0.28 |
| (1,266) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:118:TYR:H | 18 | 0.28 |
| (1,266) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:118:TYR:H | 18 | 0.28 |
| (1,266) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:118:TYR:H | 18 | 0.28 |
| (1,254) | 1:A:57:VAL:HG11 | 1:A:83:SER:H | 14 | 0.28 |
| (1,254) | 1:A:57:VAL:HG12 | 1:A:83:SER:H | 14 | 0.28 |
| (1,254) | 1:A:57:VAL:HG13 | 1:A:83:SER:H | 14 | 0.28 |
| (1,249) | 1:A:81:VAL:HG11 | 1:A:84:ASN:H | 9 | 0.28 |
| (1,249) | 1:A:81:VAL:HG12 | 1:A:84:ASN:H | 9 | 0.28 |
| (1,249) | 1:A:81:VAL:HG13 | 1:A:84:ASN:H | 9 | 0.28 |
| (1,1099) | 1:A:124:GLY:O | 1:A:98:ILE:H | 7 | 0.28 |
| (1,915) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:148:ASP:H | 14 | 0.27 |
| (1,915) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:148:ASP:H | 14 | 0.27 |
| (1,915) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:148:ASP:H | 14 | 0.27 |
| (1,814) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:150:LEU:HD11 | 6 | 0.27 |
| (1,814) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:150:LEU:HD12 | 6 | 0.27 |
| (1,814) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:150:LEU:HD13 | 6 | 0.27 |
| (1,811) | 1:A:146:ASP:H | 1:A:147:LEU:HD11 | 16 | 0.27 |
| (1,811) | 1:A:146:ASP:H | 1:A:147:LEU:HD12 | 16 | 0.27 |
| (1,811) | 1:A:146:ASP:H | 1:A:147:LEU:HD13 | 16 | 0.27 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD21 | 1:A:150:LEU:HD21 | 20 | 0.27 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD21 | 1:A:150:LEU:HD22 | 20 | 0.27 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD21 | 1:A:150:LEU:HD23 | 20 | 0.27 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD22 | 1:A:150:LEU:HD21 | 20 | 0.27 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD22 | 1:A:150:LEU:HD22 | 20 | 0.27 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD22 | 1:A:150:LEU:HD23 | 20 | 0.27 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD23 | 1:A:150:LEU:HD21 | 20 | 0.27 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD23 | 1:A:150:LEU:HD22 | 20 | 0.27 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD23 | 1:A:150:LEU:HD23 | 20 | 0.27 |
| (1,624) | 1:A:133:ALA:H | 1:A:135:GLU:H | 19 | 0.27 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD21 | 20 | 0.27 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD22 | 20 | 0.27 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD23 | 20 | 0.27 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD21 | 20 | 0.27 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD22 | 20 | 0.27 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD23 | 20 | 0.27 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD21 | 20 | 0.27 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD22 | 20 | 0.27 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD23 | 20 | 0.27 |
| (1,382) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:167:ILE:HD11 | 11 | 0.27 |
| (1,382) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:167:ILE:HD12 | 11 | 0.27 |
| (1,382) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:167:ILE:HD13 | 11 | 0.27 |
| (1,269) | 1:A:145:LYS:H | 1:A:149:LEU:HD11 | 18 | 0.27 |
| (1,269) | 1:A:145:LYS:H | 1:A:149:LEU:HD12 | 18 | 0.27 |
| (1,269) | 1:A:145:LYS:H | 1:A:149:LEU:HD13 | 18 | 0.27 |
| (1,266) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:118:TYR:H | 6 | 0.27 |
| (1,266) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:118:TYR:H | 6 | 0.27 |
| (1,266) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:118:TYR:H | 6 | 0.27 |
| (1,266) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:118:TYR:H | 13 | 0.27 |
| (1,266) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:118:TYR:H | 13 | 0.27 |
| (1,266) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:118:TYR:H | 13 | 0.27 |
| (1,250) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:84:ASN:H | 5 | 0.27 |
| (1,250) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:84:ASN:H | 5 | 0.27 |
| (1,250) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:84:ASN:H | 5 | 0.27 |
| (1,250) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:84:ASN:H | 20 | 0.27 |
| (1,250) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:84:ASN:H | 20 | 0.27 |
| (1,250) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:84:ASN:H | 20 | 0.27 |
| (1,226) | 1:A:57:VAL:HG11 | 1:A:82:GLN:H | 20 | 0.27 |
| (1,226) | 1:A:57:VAL:HG12 | 1:A:82:GLN:H | 20 | 0.27 |
| (1,226) | 1:A:57:VAL:HG13 | 1:A:82:GLN:H | 20 | 0.27 |
| (1,1105) | 1:A:102:PHE:H | 1:A:128:ILE:O | 18 | 0.27 |
| (1,1105) | 1:A:102:PHE:H | 1:A:128:ILE:O | 19 | 0.27 |
| (1,108) | 1:A:145:LYS:H | 1:A:148:ASP:H | 19 | 0.27 |
| (1,936) | 1:A:153:LEU:HD21 | 1:A:157:GLN:H | 17 | 0.26 |
| (1,936) | 1:A:153:LEU:HD22 | 1:A:157:GLN:H | 17 | 0.26 |
| (1,936) | 1:A:153:LEU:HD23 | 1:A:157:GLN:H | 17 | 0.26 |
| (1,914) | 1:A:147:LEU:HD11 | 1:A:148:ASP:H | 11 | 0.26 |
| (1,914) | 1:A:147:LEU:HD12 | 1:A:148:ASP:H | 11 | 0.26 |
| (1,914) | 1:A:147:LEU:HD13 | 1:A:148:ASP:H | 11 | 0.26 |
| (1,914) | 1:A:147:LEU:HD11 | 1:A:148:ASP:H | 17 | 0.26 |
| (1,914) | 1:A:147:LEU:HD12 | 1:A:148:ASP:H | 17 | 0.26 |
| (1,914) | 1:A:147:LEU:HD13 | 1:A:148:ASP:H | 17 | 0.26 |
| (1,841) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:146:ASP:H | 15 | 0.26 |
| (1,841) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:146:ASP:H | 15 | 0.26 |
| (1,841) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:146:ASP:H | 15 | 0.26 |
| (1,811) | 1:A:146:ASP:H | 1:A:147:LEU:HD11 | 13 | 0.26 |
| (1,811) | 1:A:146:ASP:H | 1:A:147:LEU:HD12 | 13 | 0.26 |
| (1,811) | 1:A:146:ASP:H | 1:A:147:LEU:HD13 | 13 | 0.26 |
| (1,758) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:150:LEU:HD11 | 18 | 0.26 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,758) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:150:LEU:HD12 | 18 | 0.26 |
| (1,758) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:150:LEU:HD13 | 18 | 0.26 |
| (1,758) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:150:LEU:HD11 | 18 | 0.26 |
| (1,758) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:150:LEU:HD12 | 18 | 0.26 |
| (1,758) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:150:LEU:HD13 | 18 | 0.26 |
| (1,758) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:150:LEU:HD11 | 18 | 0.26 |
| (1,758) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:150:LEU:HD12 | 18 | 0.26 |
| (1,758) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:150:LEU:HD13 | 18 | 0.26 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:117:VAL:HG11 | 2 | 0.26 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:117:VAL:HG12 | 2 | 0.26 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:117:VAL:HG13 | 2 | 0.26 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:117:VAL:HG11 | 2 | 0.26 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:117:VAL:HG12 | 2 | 0.26 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:117:VAL:HG13 | 2 | 0.26 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:117:VAL:HG11 | 2 | 0.26 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:117:VAL:HG12 | 2 | 0.26 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:117:VAL:HG13 | 2 | 0.26 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:117:VAL:HG11 | 14 | 0.26 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:117:VAL:HG12 | 14 | 0.26 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:117:VAL:HG13 | 14 | 0.26 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:117:VAL:HG11 | 14 | 0.26 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:117:VAL:HG12 | 14 | 0.26 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:117:VAL:HG13 | 14 | 0.26 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:117:VAL:HG11 | 14 | 0.26 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:117:VAL:HG12 | 14 | 0.26 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:117:VAL:HG13 | 14 | 0.26 |
| (1,623) | 1:A:133:ALA:H | 1:A:136:GLN:H | 18 | 0.26 |
| (1,510) | 1:A:137:LEU:HD11 | 1:A:150:LEU:H | 17 | 0.26 |
| (1,510) | 1:A:137:LEU:HD12 | 1:A:150:LEU:H | 17 | 0.26 |
| (1,510) | 1:A:137:LEU:HD13 | 1:A:150:LEU:H | 17 | 0.26 |
| (1,507) | 1:A:37:ALA:H | 1:A:57:VAL:HG21 | 7 | 0.26 |
| (1,507) | 1:A:37:ALA:H | 1:A:57:VAL:HG22 | 7 | 0.26 |
| (1,507) | 1:A:37:ALA:H | 1:A:57:VAL:HG23 | 7 | 0.26 |
| (1,296) | 1:A:137:LEU:HD11 | 1:A:149:LEU:H | 5 | 0.26 |
| (1,296) | 1:A:137:LEU:HD12 | 1:A:149:LEU:H | 5 | 0.26 |
| (1,296) | 1:A:137:LEU:HD13 | 1:A:149:LEU:H | 5 | 0.26 |
| (1,296) | 1:A:137:LEU:HD11 | 1:A:149:LEU:H | 12 | 0.26 |
| (1,296) | 1:A:137:LEU:HD12 | 1:A:149:LEU:H | 12 | 0.26 |
| (1,296) | 1:A:137:LEU:HD13 | 1:A:149:LEU:H | 12 | 0.26 |
| (1,266) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:118:TYR:H | 11 | 0.26 |
| (1,266) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:118:TYR:H | 11 | 0.26 |
| (1,266) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:118:TYR:H | 11 | 0.26 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|-------------|------------------|------------------|-------|-----------------|
| (1,250) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:84:ASN:H | 9 | 0.26 |
| (1,250) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:84:ASN:H | 9 | 0.26 |
| (1,250) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:84:ASN:H | 9 | 0.26 |
| (1,1084) | 1:A:154:GLU:O | 1:A:158:SER:H | 14 | 0.26 |
| (1,936) | 1:A:153:LEU:HD21 | 1:A:157:GLN:H | 5 | 0.25 |
| (1,936) | 1:A:153:LEU:HD22 | 1:A:157:GLN:H | 5 | 0.25 |
| (1,936) | 1:A:153:LEU:HD23 | 1:A:157:GLN:H | 5 | 0.25 |
| (1,934) | 1:A:137:LEU:HD11 | 1:A:145:LYS:H | 6 | 0.25 |
| (1,934) | 1:A:137:LEU:HD12 | 1:A:145:LYS:H | 6 | 0.25 |
| (1,934) | 1:A:137:LEU:HD13 | 1:A:145:LYS:H | 6 | 0.25 |
| (1,848) | 1:A:91:VAL:HG21 | 1:A:95:TRP:HE1 | 15 | 0.25 |
| (1,848) | 1:A:91:VAL:HG22 | 1:A:95:TRP:HE1 | 15 | 0.25 |
| (1,848) | 1:A:91:VAL:HG23 | 1:A:95:TRP:HE1 | 15 | 0.25 |
| (1,841) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:146:ASP:H | 1 | 0.25 |
| (1,841) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:146:ASP:H | 1 | 0.25 |
| (1,841) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:146:ASP:H | 1 | 0.25 |
| (1,822) | 1:A:90:ILE:HD11 | 1:A:116:LYS:H | 4 | 0.25 |
| (1,822) | 1:A:90:ILE:HD12 | 1:A:116:LYS:H | 4 | 0.25 |
| (1,822) | 1:A:90:ILE:HD13 | 1:A:116:LYS:H | 4 | 0.25 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:117:VAL:HG11 | 4 | 0.25 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:117:VAL:HG12 | 4 | 0.25 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:117:VAL:HG13 | 4 | 0.25 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:117:VAL:HG11 | 4 | 0.25 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:117:VAL:HG12 | 4 | 0.25 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:117:VAL:HG13 | 4 | 0.25 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:117:VAL:HG11 | 4 | 0.25 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:117:VAL:HG12 | 4 | 0.25 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:117:VAL:HG13 | 4 | 0.25 |
| (1,596) | 1:A:164:ASN:H | 1:A:195:LEU:H | 2 | 0.25 |
| (1,572) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:28:ILE:HD11 | 13 | 0.25 |
| (1,572) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:28:ILE:HD12 | 13 | 0.25 |
| (1,572) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:28:ILE:HD13 | 13 | 0.25 |
| (1,572) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:28:ILE:HD11 | 13 | 0.25 |
| (1,572) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:28:ILE:HD12 | 13 | 0.25 |
| (1,572) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:28:ILE:HD13 | 13 | 0.25 |
| (1,572) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:28:ILE:HD11 | 13 | 0.25 |
| (1,572) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:28:ILE:HD12 | 13 | 0.25 |
| (1,572) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:28:ILE:HD13 | 13 | 0.25 |
| (1,572) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:28:ILE:HD11 | 16 | 0.25 |
| (1,572) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:28:ILE:HD12 | 16 | 0.25 |
| (1,572) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:28:ILE:HD13 | 16 | 0.25 |
| (1,572) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:28:ILE:HD11 | 16 | 0.25 |
| \ , - · - / | - | · · * | | od on next nage |



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

| (1,572) 1:A:21:LEU:HD22 1:A:28:ILE:HD13 16 0.25 (1,572) 1:A:21:LEU:HD23 1:A:28:ILE:HD11 16 0.25 (1,572) 1:A:21:LEU:HD23 1:A:28:ILE:HD11 16 0.25 (1,572) 1:A:21:LEU:HD23 1:A:28:ILE:HD13 16 0.25 (1,572) 1:A:21:LEU:HD23 1:A:28:ILE:HD13 16 0.25 (1,569) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD22 14 0.25 (1,569) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD22 14 0.25 (1,569) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD23 14 0.25 (1,569) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD23 14 0.25 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD23 14 0.25 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD23 14 0.25 (1,569) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD23 14 0.25 (1,569) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD23 14 0.25 (1,569) 1:A:14 | Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|--|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,572) 1:A:21:LEU:HD23 1:A:28:ILE:HD11 16 0.25 (1,572) 1:A:21:LEU:HD23 1:A:28:ILE:HD12 16 0.25 (1,569) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD21 14 0.25 (1,569) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD22 14 0.25 (1,569) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD23 14 0.25 (1,569) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD21 14 0.25 (1,569) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD22 14 0.25 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD22 14 0.25 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD22 14 0.25 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD22 14 0.25 (1,569) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD22 14 0.25 (1,569) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD22 14 0.25 (1,569) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD22 14 0.25 (1,569) | (1,572) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:28:ILE:HD12 | 16 | 0.25 |
| (1,572) 1:A:21:LEU:HD23 1:A:28:ILE:HD12 16 0.25 (1,572) 1:A:21:LEU:HD23 1:A:28:ILE:HD13 16 0.25 (1,569) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD21 14 0.25 (1,569) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD22 14 0.25 (1,569) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD23 14 0.25 (1,569) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD23 14 0.25 (1,569) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD22 14 0.25 (1,569) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD22 14 0.25 (1,569) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD22 14 0.25 (1,569) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD23 14 0.25 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD23 14 0.25 (1,535) 1:A:74:LYS:H 1:A:76:VAL:HG11 19 0.25 (1,535) 1:A:74:LYS:H 1:A:76:VAL:HG11 19 0.25 (1,535) 1:A:74:LYS:H 1:A:76:VAL:HG11 19 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD11 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD13 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD13 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD13 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD12 1 0.25 (1,518) 1:A:118:TYR:H 1:A:121:LEU:HD13 1 0.25 (1,518) 1:A:118:TYR:H 1:A:121:LEU:HD13 1 0.25 (1,518) 1:A:118:TYR:H 1:A:121:LEU:HD13 1 0.25 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG23 4 0.25 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG23 4 0.25 (1,453) 1:A:118:TYR:H 1:A:121:LEU:HD13 1 0.25 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG23 4 0.25 (1,453) 1:A:138:TYR:H 1:A:121:LEU:HD13 10 0.25 (1,453) 1:A:138:TYR:H 1:A:121:LEU:HD13 10 0.25 (1,453) 1:A:138:TYR:H 1:A:121:LEU:HD13 10 0.25 (1,453) 1:A:138:TYR:H | (1,572) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:28:ILE:HD13 | 16 | 0.25 |
| (1,572) 1:A:21:LEU:HD23 1:A:28:ILE:HD13 16 0.25 (1,569) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD21 14 0.25 (1,569) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD22 14 0.25 (1,569) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD22 14 0.25 (1,569) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD23 14 0.25 (1,569) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD21 14 0.25 (1,569) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD22 14 0.25 (1,569) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD23 14 0.25 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD23 14 0.25 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD23 14 0.25 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD21 14 0.25 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD23 14 0.25 (1,569) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD23 14 0.25 (1,569) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD23 14 0.25 (1,569) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD23 14 0.25 (1,569) 1:A:147:LYS:H 1:A:76:VAL:HG11 19 0.25 (1,535) 1:A:74:LYS:H 1:A:76:VAL:HG12 19 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD13 19 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD11 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD11 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD13 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD13 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD13 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD13 1 0.25 (1,518) 1:A:118:TYR:H 1:A:157:VAL:HG24 4 0.25 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG24 4 0.25 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG23 4 0.25 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG23 4 0.25 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG23 4 0.25 (1,453) 1:A:118:TYR:H 1:A:121:LEU:HD13 1 0.25 (1,453) 1:A:118:TYR:H 1:A:121:LEU:HD13 1 0.25 (1,453) 1:A:118:TYR:H 1:A:167:ILE:HD11 18 0.25 (1,453) 1:A:118:TYR:H 1:A:167:ILE:HD11 18 0.25 (1,453) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:149:LEU:HD22 10 0.25 (1,346) 1:A:175:LEU:HD21 1:A:149:LEU:H 17 0.25 (1,366) 1:A: | (1,572) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:28:ILE:HD11 | 16 | 0.25 |
| (1,569) 1:A:137;LEU:HD21 1:A:147;LEU:HD21 14 0.25 (1,569) 1:A:137;LEU:HD21 1:A:147;LEU:HD22 14 0.25 (1,569) 1:A:137;LEU:HD21 1:A:147;LEU:HD23 14 0.25 (1,569) 1:A:137;LEU:HD22 1:A:147;LEU:HD21 14 0.25 (1,569) 1:A:137;LEU:HD22 1:A:147;LEU:HD23 14 0.25 (1,569) 1:A:137;LEU:HD23 1:A:147;LEU:HD21 14 0.25 (1,569) 1:A:137;LEU:HD23 1:A:147;LEU:HD23 14 0.25 (1,569) 1:A:147;YS:H 1:A:76:VAL:HG11 19 0.25 (1,535) 1:A:147;YS:H 1:A:76:VAL:HG11 19 0.25 (1,535) 1:A:147;VAL:HG11 1:A:121;LEU:HD11 1 0.25 (1,518) 1:A:117 | (1,572) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:28:ILE:HD12 | 16 | 0.25 |
| (1,569) 1:A:137;LEU:HD21 1:A:147;LEU:HD22 14 0.25 (1,569) 1:A:137;LEU:HD21 1:A:147;LEU:HD23 14 0.25 (1,569) 1:A:137;LEU:HD22 1:A:147;LEU:HD21 14 0.25 (1,569) 1:A:137;LEU:HD22 1:A:147;LEU:HD22 14 0.25 (1,569) 1:A:137;LEU:HD23 1:A:147;LEU:HD21 14 0.25 (1,569) 1:A:137;LEU:HD23 1:A:147;LEU:HD22 14 0.25 (1,569) 1:A:137;LEU:HD23 1:A:147;LEU:HD23 14 0.25 (1,569) 1:A:137;LEU:HD23 1:A:147;LEU:HD23 14 0.25 (1,535) 1:A:74;LYS:H 1:A:76;VAL:HG11 19 0.25 (1,535) 1:A:74;LYS:H 1:A:76;VAL:HG12 19 0.25 (1,518) 1:A:117;VAL:HG11 1:A:121;LEU:HD11 1 0.25 (1,518) 1:A:117;VAL:HG11 1:A:121;LEU:HD12 1 0.25 (1,518) 1:A:117;VAL:HG12 1:A:121;LEU:HD13 1 0.25 (1,518) 1:A:147;L | (1,572) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:28:ILE:HD13 | 16 | 0.25 |
| (1,569) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD23 14 0.25 (1,569) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD22 14 0.25 (1,569) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD23 14 0.25 (1,569) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD23 14 0.25 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD21 14 0.25 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD22 14 0.25 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD22 14 0.25 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD22 14 0.25 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD23 14 0.25 (1,569) 1:A:147:LEU:HD23 14 0.25 (1,569) 1:A:74:LYS:H 1:A:76:VAL:HG11 19 0.25 (1,535) 1:A:74:LYS:H 1:A:76:VAL:HG11 19 0.25 (1,535) 1:A:74:LYS:H 1:A:76:VAL:HG12 19 0.25 (1,535) 1:A:74:LYS:H 1:A:76:VAL:HG13 19 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD11 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD11 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD12 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD13 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD13 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD11 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD11 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD12 1 0.25 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG22 4 0.25 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG23 4 0.25 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG22 10 0.25 (1,453) 1:A:118:TYR:H 1:A:121:LEU:HD22 10 0.25 (1,453) 1:A:118:TYR:H 1:A:121:LEU:HD23 10 0.25 (1,453) 1:A:118:TYR:H 1:A:121:LEU:HD22 10 0.25 (1,453) 1:A:118:TYR:H 1:A:121:LEU:HD23 10 0.25 (1,453) 1:A:118:TYR:H 1:A:121:LEU:HD23 10 0.25 (1,382) 1:A:24:VAL:H 1:A:167:ILE:HD11 18 0.25 (1,382) 1:A:24:VAL:H 1:A:167:ILE:HD13 18 0.25 (1,346) 1:A:175:LEU:HD21 1:A:149:LEU:H 17 0.25 (1,346) 1:A:175:LEU:HD21 1:A:149:LEU:H 17 0.25 (1,346) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:149:LEU:H 17 0.2 | (1,569) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD21 | 14 | 0.25 |
| (1,569) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD21 14 0.25 (1,569) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD22 14 0.25 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD23 14 0.25 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD21 14 0.25 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD22 14 0.25 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD22 14 0.25 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD23 14 0.25 (1,535) 1:A:74:LYS:H 1:A:76:VAL:HG11 19 0.25 (1,535) 1:A:74:LYS:H 1:A:76:VAL:HG12 19 0.25 (1,535) 1:A:74:LYS:H 1:A:76:VAL:HG13 19 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD11 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD11 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD12 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD13 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD11 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD11 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD13 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD11 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD11 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD13 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD11 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD11 1 0.25 (1,518) 1:A:118:TYR:H 1:A:121:LEU:HD12 1 0.25 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG21 4 0.25 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG22 4 0.25 (1,453) 1:A:118:TYR:H 1:A:121:LEU:HD21 10 0.25 (1,466) 1:A:175:LEU:HD21 1:A:149:LEU:H 17 0.25 (1,366) 1:A:175:LEU:HD21 1:A:149:LEU:H 17 0.25 (1,296) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:149:LEU:H 17 0.25 (1,296) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:149:LEU:H 17 0.25 | (1,569) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD22 | 14 | 0.25 |
| (1,569) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD22 14 0.25 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD21 14 0.25 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD21 14 0.25 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD22 14 0.25 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD22 14 0.25 (1,535) 1:A:74:LYS:H 1:A:76:VAL:HG11 19 0.25 (1,535) 1:A:74:LYS:H 1:A:76:VAL:HG12 19 0.25 (1,535) 1:A:74:LYS:H 1:A:76:VAL:HG13 19 0.25 (1,535) 1:A:17:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD11 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD12 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD12 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD13 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD11 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD11 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD12 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD11 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD12 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD13 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD11 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD11 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD12 1 0.25 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG21 4 0.25 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG22 4 0.25 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG22 4 0.25 (1,453) 1:A:118:TYR:H 1:A:121:LEU:HD21 10 0.25 (1,453) 1:A:138:TYR:H 1:A:167:ILE:HD11 18 0.25 (1,360) 1:A:175:LEU:HD21 1:A:148:LYS:H 20 0.25 (1,361) 1:A:175:LEU:HD22 1:A:148:LYS:H 20 0.25 (1,366) 1:A:175:LEU:HD21 1:A:149:LEU:H 17 0.25 (1,296) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:149:LEU:H 17 0.25 (1,296) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:149:LEU:H 17 0.25 | (1,569) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD23 | 14 | 0.25 |
| (1,569) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD23 14 0.25 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD22 14 0.25 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD23 14 0.25 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD23 14 0.25 (1,535) 1:A:74:LYS:H 1:A:76:VAL:HG11 19 0.25 (1,535) 1:A:74:LYS:H 1:A:76:VAL:HG13 19 0.25 (1,535) 1:A:17:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD11 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD11 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD13 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD12 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD13 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD13 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD13 1 0.25 (1,518) 1:A:1317:VAL:H | (1,569) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD21 | 14 | 0.25 |
| (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD21 14 0.25 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD22 14 0.25 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD23 14 0.25 (1,535) 1:A:74:LYS:H 1:A:76:VAL:HG11 19 0.25 (1,535) 1:A:74:LYS:H 1:A:76:VAL:HG12 19 0.25 (1,535) 1:A:74:LYS:H 1:A:76:VAL:HG12 19 0.25 (1,535) 1:A:74:LYS:H 1:A:76:VAL:HG12 19 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD11 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD11 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD12 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD13 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD11 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD12 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD13 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD13 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD13 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD13 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD11 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD12 1 0.25 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG22 4 0.25 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG23 4 0.25 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG23 4 0.25 (1,453) 1:A:118:TYR:H 1:A:121:LEU:HD21 10 0.25 (1,453) 1:A:118:TYR:H 1:A:121:LEU:HD22 10 0.25 (1,453) 1:A:118:TYR:H 1:A:121:LEU:HD23 10 0.25 (1,382) 1:A:24:VAL:H 1:A:167:LE:HD11 18 0.25 (1,382) 1:A:24:VAL:H 1:A:167:LE:HD11 18 0.25 (1,382) 1:A:24:VAL:H 1:A:167:LE:HD11 18 0.25 (1,346) 1:A:175:LEU:HD21 1:A:184:LYS:H 20 0.25 (1,346) 1:A:175:LEU:HD21 1:A:184:LYS:H 20 0.25 (1,346) 1:A:175:LEU:HD21 1:A:184:LYS:H 20 0.25 (1,346) 1:A:175:LEU:HD21 1:A:184:LYS:H 20 0.25 (1,296) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:149:LEU:H 17 0.25 (1,296) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:149:LEU:H 17 0.25 | (1,569) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD22 | 14 | 0.25 |
| (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD23 14 0.25 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD23 14 0.25 (1,535) 1:A:74:LYS:H 1:A:76:VAL:HG11 19 0.25 (1,535) 1:A:74:LYS:H 1:A:76:VAL:HG12 19 0.25 (1,535) 1:A:74:LYS:H 1:A:76:VAL:HG13 19 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD11 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD12 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD13 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD11 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD13 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD13 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD11 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD12 1 0.25 (1,518) 1:A:177:VAL:HG13 <td>(1,569)</td> <td>1:A:137:LEU:HD22</td> <td>1:A:147:LEU:HD23</td> <td>14</td> <td>0.25</td> | (1,569) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD23 | 14 | 0.25 |
| (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD23 14 0.25 (1,535) 1:A:74:LYS:H 1:A:76:VAL:HG11 19 0.25 (1,535) 1:A:74:LYS:H 1:A:76:VAL:HG12 19 0.25 (1,535) 1:A:74:LYS:H 1:A:76:VAL:HG13 19 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:12:LEU:HD11 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:12:LEU:HD12 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:12:LEU:HD13 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:12:LEU:HD12 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:12:LEU:HD12 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:12:LEU:HD13 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:12:LEU:HD11 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:12:LEU:HD13 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:12:LEU:HD13 1 0.25 (1,518) 1:A:147:TVAL:HG13 | (1,569) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD21 | 14 | 0.25 |
| (1,535) 1:A:74:LYS:H 1:A:76:VAL:HG11 19 0.25 (1,535) 1:A:74:LYS:H 1:A:76:VAL:HG12 19 0.25 (1,535) 1:A:74:LYS:H 1:A:76:VAL:HG13 19 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD11 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD12 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD13 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD11 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD12 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD13 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD11 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD12 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD13 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD13 1 0.25 (1,518) 1:A:137:LEU:HG13 | (1,569) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD22 | 14 | 0.25 |
| (1,535) 1:A:74:LYS:H 1:A:76:VAL:HG12 19 0.25 (1,535) 1:A:74:LYS:H 1:A:76:VAL:HG13 19 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD11 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD12 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD13 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD11 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD13 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD13 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD12 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD13 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD13 1 0.25 (1,518) 1:A:17:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD13 1 0.25 (1,518) 1:A:17:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD13 1 0.25 (1,518) 1:A:137:LEU:HG13 <td>(1,569)</td> <td>1:A:137:LEU:HD23</td> <td>1:A:147:LEU:HD23</td> <td>14</td> <td>0.25</td> | (1,569) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD23 | 14 | 0.25 |
| (1,535) 1:A:74:LYS:H 1:A:76:VAL:HG13 19 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD11 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD12 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD13 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD11 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD13 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD11 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD11 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD12 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD12 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD13 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD13 1 0.25 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG21 4 0.25 (1,507) 1:A:37:ALA:H | (1,535) | 1:A:74:LYS:H | 1:A:76:VAL:HG11 | 19 | 0.25 |
| (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD11 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD12 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD13 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD11 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD13 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD11 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD12 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD12 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD12 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD13 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD13 1 0.25 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG21 4 0.25 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG23 4 0.25 (1,453) 1:A:118:TYR:H | , , | 1:A:74:LYS:H | 1:A:76:VAL:HG12 | 19 | 0.25 |
| (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD12 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD13 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD11 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD12 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD13 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD12 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD12 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD13 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD13 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD13 1 0.25 (1,518) 1:A:17:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD13 1 0.25 (1,518) 1:A:137:LEU:HD14 1:A:12:LEU:HD12 0.25 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG22 4 0.25 (1,453) 1:A:138:TYR:H 1:A: | (1,535) | 1:A:74:LYS:H | 1:A:76:VAL:HG13 | 19 | 0.25 |
| (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD13 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD11 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD12 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD13 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD12 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD12 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD13 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD13 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD13 1 0.25 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG21 4 0.25 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG23 4 0.25 (1,453) 1:A:18:TYR:H 1:A:121:LEU:HD21 10 0.25 (1,453) 1:A:118:TYR:H 1:A:121:LEU:HD22 10 0.25 (1,453) 1:A:124:VAL:H | (1,518) | 1:A:117:VAL:HG11 | 1:A:121:LEU:HD11 | 1 | 0.25 |
| (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD13 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD11 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD12 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD13 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD12 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD12 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD13 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD13 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD13 1 0.25 (1,518) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG21 4 0.25 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG23 4 0.25 (1,453) 1:A:18:TYR:H 1:A:121:LEU:HD21 10 0.25 (1,453) 1:A:118:TYR:H 1:A:121:LEU:HD23 10 0.25 (1,453) 1:A:124:VAL:H | (1,518) | 1:A:117:VAL:HG11 | 1:A:121:LEU:HD12 | 1 | 0.25 |
| (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD11 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD13 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD13 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD11 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD12 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD13 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD13 1 0.25 (1,510) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG21 4 0.25 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG22 4 0.25 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG23 4 0.25 (1,453) 1:A:118:TYR:H 1:A:121:LEU:HD21 10 0.25 (1,453) 1:A:118:TYR:H 1:A:121:LEU:HD22 10 0.25 (1,453) 1:A:18:TYR:H 1:A:167:ILE:HD13 10 0.25 (1,453) 1:A:18:TYR:H 1 | (1,518) | 1:A:117:VAL:HG11 | 1:A:121:LEU:HD13 | 1 | 0.25 |
| (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD13 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD11 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD12 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD13 1 0.25 (1,518) 1:A:17:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD13 1 0.25 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG21 4 0.25 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG22 4 0.25 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG23 4 0.25 (1,453) 1:A:18:TYR:H 1:A:121:LEU:HD21 10 0.25 (1,453) 1:A:118:TYR:H 1:A:121:LEU:HD22 10 0.25 (1,453) 1:A:118:TYR:H 1:A:121:LEU:HD23 10 0.25 (1,453) 1:A:118:TYR:H 1:A:121:LEU:HD23 10 0.25 (1,453) 1:A:18:TYR:H 1:A:167:ILE:HD11 18 0.25 (1,382) 1:A:24:VAL:H 1:A:167 | , , | 1:A:117:VAL:HG12 | 1:A:121:LEU:HD11 | 1 | 0.25 |
| (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD11 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD12 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD13 1 0.25 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG21 4 0.25 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG22 4 0.25 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG23 4 0.25 (1,453) 1:A:118:TYR:H 1:A:121:LEU:HD21 10 0.25 (1,453) 1:A:118:TYR:H 1:A:121:LEU:HD22 10 0.25 (1,453) 1:A:118:TYR:H 1:A:121:LEU:HD23 10 0.25 (1,453) 1:A:18:TYR:H 1:A:121:LEU:HD23 10 0.25 (1,382) 1:A:24:VAL:H 1:A:167:ILE:HD11 18 0.25 (1,382) 1:A:24:VAL:H 1:A:167:ILE:HD13 18 0.25 (1,382) 1:A:24:VAL:H 1:A:167:ILE:HD13 18 0.25 (1,346) 1:A:175:LEU:HD21 1:A:184: | (1,518) | 1:A:117:VAL:HG12 | 1:A:121:LEU:HD12 | 1 | 0.25 |
| (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD12 1 0.25 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD13 1 0.25 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG21 4 0.25 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG22 4 0.25 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG23 4 0.25 (1,453) 1:A:118:TYR:H 1:A:121:LEU:HD21 10 0.25 (1,453) 1:A:118:TYR:H 1:A:121:LEU:HD22 10 0.25 (1,453) 1:A:118:TYR:H 1:A:121:LEU:HD23 10 0.25 (1,453) 1:A:148:TYR:H 1:A:167:ILE:HD13 18 0.25 (1,382) 1:A:24:VAL:H 1:A:167:ILE:HD11 18 0.25 (1,382) 1:A:24:VAL:H 1:A:167:ILE:HD13 18 0.25 (1,382) 1:A:24:VAL:H 1:A:184:LYS:H 20 0.25 (1,346) 1:A:175:LEU:HD21 1:A:184:LYS:H 20 0.25 (1,346) 1:A:175:LEU:HD23 1:A:184:LYS: | (1,518) | 1:A:117:VAL:HG12 | 1:A:121:LEU:HD13 | 1 | 0.25 |
| (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD13 1 0.25 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG21 4 0.25 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG22 4 0.25 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG23 4 0.25 (1,453) 1:A:118:TYR:H 1:A:121:LEU:HD21 10 0.25 (1,453) 1:A:118:TYR:H 1:A:121:LEU:HD22 10 0.25 (1,453) 1:A:118:TYR:H 1:A:121:LEU:HD23 10 0.25 (1,453) 1:A:118:TYR:H 1:A:121:LEU:HD23 10 0.25 (1,453) 1:A:124:VAL:H 1:A:167:ILE:HD13 18 0.25 (1,382) 1:A:24:VAL:H 1:A:167:ILE:HD11 18 0.25 (1,382) 1:A:24:VAL:H 1:A:167:ILE:HD13 18 0.25 (1,382) 1:A:175:LEU:HD21 1:A:184:LYS:H 20 0.25 (1,346) 1:A:175:LEU:HD22 1:A:184:LYS:H 20 0.25 (1,346) 1:A:175:LEU:HD23 1:A:184:LY | (1,518) | 1:A:117:VAL:HG13 | 1:A:121:LEU:HD11 | 1 | 0.25 |
| (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG21 4 0.25 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG22 4 0.25 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG23 4 0.25 (1,453) 1:A:118:TYR:H 1:A:121:LEU:HD21 10 0.25 (1,453) 1:A:118:TYR:H 1:A:121:LEU:HD22 10 0.25 (1,453) 1:A:118:TYR:H 1:A:121:LEU:HD23 10 0.25 (1,453) 1:A:118:TYR:H 1:A:167:ILE:HD13 10 0.25 (1,382) 1:A:24:VAL:H 1:A:167:ILE:HD11 18 0.25 (1,382) 1:A:24:VAL:H 1:A:167:ILE:HD13 18 0.25 (1,382) 1:A:24:VAL:H 1:A:167:ILE:HD13 18 0.25 (1,382) 1:A:175:LEU:HD21 1:A:184:LYS:H 20 0.25 (1,346) 1:A:175:LEU:HD22 1:A:184:LYS:H 20 0.25 (1,346) 1:A:175:LEU:HD23 1:A:184:LYS:H 20 0.25 (1,296) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:149:LEU:H | (1,518) | 1:A:117:VAL:HG13 | 1:A:121:LEU:HD12 | 1 | 0.25 |
| (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG22 4 0.25 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG23 4 0.25 (1,453) 1:A:118:TYR:H 1:A:121:LEU:HD21 10 0.25 (1,453) 1:A:118:TYR:H 1:A:121:LEU:HD22 10 0.25 (1,453) 1:A:118:TYR:H 1:A:121:LEU:HD23 10 0.25 (1,453) 1:A:24:VAL:H 1:A:167:ILE:HD11 18 0.25 (1,382) 1:A:24:VAL:H 1:A:167:ILE:HD12 18 0.25 (1,382) 1:A:24:VAL:H 1:A:167:ILE:HD13 18 0.25 (1,382) 1:A:24:VAL:H 1:A:167:ILE:HD13 18 0.25 (1,346) 1:A:175:LEU:HD21 1:A:184:LYS:H 20 0.25 (1,346) 1:A:175:LEU:HD22 1:A:184:LYS:H 20 0.25 (1,346) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:149:LEU:H 17 0.25 (1,296) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:149:LEU:H 17 0.25 (1,296) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:149:LEU | (1,518) | 1:A:117:VAL:HG13 | 1:A:121:LEU:HD13 | 1 | 0.25 |
| (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG23 4 0.25 (1,453) 1:A:118:TYR:H 1:A:121:LEU:HD21 10 0.25 (1,453) 1:A:118:TYR:H 1:A:121:LEU:HD22 10 0.25 (1,453) 1:A:118:TYR:H 1:A:121:LEU:HD23 10 0.25 (1,382) 1:A:24:VAL:H 1:A:167:ILE:HD11 18 0.25 (1,382) 1:A:24:VAL:H 1:A:167:ILE:HD12 18 0.25 (1,382) 1:A:24:VAL:H 1:A:167:ILE:HD13 18 0.25 (1,346) 1:A:175:LEU:HD21 1:A:184:LYS:H 20 0.25 (1,346) 1:A:175:LEU:HD22 1:A:184:LYS:H 20 0.25 (1,346) 1:A:175:LEU:HD23 1:A:184:LYS:H 20 0.25 (1,296) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:149:LEU:H 17 0.25 (1,296) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:149:LEU:H 17 0.25 (1,296) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:149:LEU:H 17 0.25 | (1,507) | 1:A:37:ALA:H | 1:A:57:VAL:HG21 | 4 | 0.25 |
| (1,453) 1:A:118:TYR:H 1:A:121:LEU:HD21 10 0.25 (1,453) 1:A:118:TYR:H 1:A:121:LEU:HD22 10 0.25 (1,453) 1:A:118:TYR:H 1:A:121:LEU:HD23 10 0.25 (1,382) 1:A:24:VAL:H 1:A:167:ILE:HD11 18 0.25 (1,382) 1:A:24:VAL:H 1:A:167:ILE:HD12 18 0.25 (1,382) 1:A:24:VAL:H 1:A:167:ILE:HD13 18 0.25 (1,346) 1:A:175:LEU:HD21 1:A:184:LYS:H 20 0.25 (1,346) 1:A:175:LEU:HD22 1:A:184:LYS:H 20 0.25 (1,346) 1:A:175:LEU:HD23 1:A:184:LYS:H 20 0.25 (1,346) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:184:LYS:H 20 0.25 (1,296) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:149:LEU:H 17 0.25 (1,296) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:149:LEU:H 17 0.25 (1,296) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:149:LEU:H 17 0.25 | (1,507) | 1:A:37:ALA:H | 1:A:57:VAL:HG22 | 4 | 0.25 |
| (1,453) 1:A:118:TYR:H 1:A:121:LEU:HD22 10 0.25 (1,453) 1:A:118:TYR:H 1:A:121:LEU:HD23 10 0.25 (1,382) 1:A:24:VAL:H 1:A:167:ILE:HD11 18 0.25 (1,382) 1:A:24:VAL:H 1:A:167:ILE:HD12 18 0.25 (1,382) 1:A:24:VAL:H 1:A:167:ILE:HD13 18 0.25 (1,346) 1:A:175:LEU:HD21 1:A:184:LYS:H 20 0.25 (1,346) 1:A:175:LEU:HD22 1:A:184:LYS:H 20 0.25 (1,346) 1:A:175:LEU:HD23 1:A:184:LYS:H 20 0.25 (1,296) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:149:LEU:H 17 0.25 (1,296) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:149:LEU:H 17 0.25 (1,296) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:149:LEU:H 17 0.25 | (1,507) | 1:A:37:ALA:H | 1:A:57:VAL:HG23 | 4 | 0.25 |
| (1,453) 1:A:118:TYR:H 1:A:121:LEU:HD23 10 0.25 (1,382) 1:A:24:VAL:H 1:A:167:ILE:HD11 18 0.25 (1,382) 1:A:24:VAL:H 1:A:167:ILE:HD12 18 0.25 (1,382) 1:A:24:VAL:H 1:A:167:ILE:HD13 18 0.25 (1,346) 1:A:175:LEU:HD21 1:A:184:LYS:H 20 0.25 (1,346) 1:A:175:LEU:HD22 1:A:184:LYS:H 20 0.25 (1,346) 1:A:175:LEU:HD23 1:A:184:LYS:H 20 0.25 (1,296) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:149:LEU:H 17 0.25 (1,296) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:149:LEU:H 17 0.25 (1,296) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:149:LEU:H 17 0.25 | (1,453) | 1:A:118:TYR:H | 1:A:121:LEU:HD21 | 10 | 0.25 |
| (1,382) 1:A:24:VAL:H 1:A:167:ILE:HD11 18 0.25 (1,382) 1:A:24:VAL:H 1:A:167:ILE:HD12 18 0.25 (1,382) 1:A:24:VAL:H 1:A:167:ILE:HD13 18 0.25 (1,346) 1:A:175:LEU:HD21 1:A:184:LYS:H 20 0.25 (1,346) 1:A:175:LEU:HD22 1:A:184:LYS:H 20 0.25 (1,346) 1:A:175:LEU:HD23 1:A:184:LYS:H 20 0.25 (1,346) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:149:LEU:H 17 0.25 (1,296) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:149:LEU:H 17 0.25 (1,296) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:149:LEU:H 17 0.25 (1,296) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:149:LEU:H 17 0.25 | (1,453) | 1:A:118:TYR:H | 1:A:121:LEU:HD22 | 10 | 0.25 |
| (1,382) 1:A:24:VAL:H 1:A:167:ILE:HD12 18 0.25 (1,382) 1:A:24:VAL:H 1:A:167:ILE:HD13 18 0.25 (1,346) 1:A:175:LEU:HD21 1:A:184:LYS:H 20 0.25 (1,346) 1:A:175:LEU:HD22 1:A:184:LYS:H 20 0.25 (1,346) 1:A:175:LEU:HD23 1:A:184:LYS:H 20 0.25 (1,296) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:149:LEU:H 17 0.25 (1,296) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:149:LEU:H 17 0.25 (1,296) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:149:LEU:H 17 0.25 | (1,453) | 1:A:118:TYR:H | 1:A:121:LEU:HD23 | 10 | 0.25 |
| (1,382) 1:A:24:VAL:H 1:A:167:ILE:HD13 18 0.25 (1,346) 1:A:175:LEU:HD21 1:A:184:LYS:H 20 0.25 (1,346) 1:A:175:LEU:HD22 1:A:184:LYS:H 20 0.25 (1,346) 1:A:175:LEU:HD23 1:A:184:LYS:H 20 0.25 (1,296) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:149:LEU:H 17 0.25 (1,296) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:149:LEU:H 17 0.25 (1,296) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:149:LEU:H 17 0.25 | , , | 1:A:24:VAL:H | 1:A:167:ILE:HD11 | 18 | 0.25 |
| (1,382) 1:A:24:VAL:H 1:A:167:ILE:HD13 18 0.25 (1,346) 1:A:175:LEU:HD21 1:A:184:LYS:H 20 0.25 (1,346) 1:A:175:LEU:HD22 1:A:184:LYS:H 20 0.25 (1,346) 1:A:175:LEU:HD23 1:A:184:LYS:H 20 0.25 (1,296) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:149:LEU:H 17 0.25 (1,296) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:149:LEU:H 17 0.25 (1,296) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:149:LEU:H 17 0.25 | · · / | 1:A:24:VAL:H | 1:A:167:ILE:HD12 | 18 | 0.25 |
| (1,346) 1:A:175:LEU:HD21 1:A:184:LYS:H 20 0.25 (1,346) 1:A:175:LEU:HD22 1:A:184:LYS:H 20 0.25 (1,346) 1:A:175:LEU:HD23 1:A:184:LYS:H 20 0.25 (1,296) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:149:LEU:H 17 0.25 (1,296) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:149:LEU:H 17 0.25 (1,296) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:149:LEU:H 17 0.25 | | 1:A:24:VAL:H | 1:A:167:ILE:HD13 | 18 | 0.25 |
| (1,346) 1:A:175:LEU:HD22 1:A:184:LYS:H 20 0.25 (1,346) 1:A:175:LEU:HD23 1:A:184:LYS:H 20 0.25 (1,296) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:149:LEU:H 17 0.25 (1,296) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:149:LEU:H 17 0.25 (1,296) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:149:LEU:H 17 0.25 | | 1:A:175:LEU:HD21 | 1:A:184:LYS:H | 20 | 0.25 |
| (1,346) 1:A:175:LEU:HD23 1:A:184:LYS:H 20 0.25 (1,296) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:149:LEU:H 17 0.25 (1,296) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:149:LEU:H 17 0.25 (1,296) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:149:LEU:H 17 0.25 | / | 1:A:175:LEU:HD22 | 1:A:184:LYS:H | 20 | 0.25 |
| (1,296) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:149:LEU:H 17 0.25 (1,296) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:149:LEU:H 17 0.25 (1,296) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:149:LEU:H 17 0.25 | , , | 1:A:175:LEU:HD23 | 1:A:184:LYS:H | 20 | 0.25 |
| (1,296) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:149:LEU:H 17 0.25 (1,296) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:149:LEU:H 17 0.25 | · · / | 1:A:137:LEU:HD11 | 1:A:149:LEU:H | 17 | 0.25 |
| (1,296) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:149:LEU:H 17 0.25 | | 1:A:137:LEU:HD12 | 1:A:149:LEU:H | 17 | 0.25 |
| | · · / | 1:A:137:LEU:HD13 | 1:A:149:LEU:H | 17 | 0.25 |
| | / | | | 10 | |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,266) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:118:TYR:H | 10 | 0.25 |
| (1,266) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:118:TYR:H | 10 | 0.25 |
| (1,1084) | 1:A:154:GLU:O | 1:A:158:SER:H | 2 | 0.25 |
| (1,994) | 1:A:79:THR:H | 1:A:54:VAL:H | 2 | 0.24 |
| (1,924) | 1:A:27:GLN:H | 1:A:126:VAL:HG21 | 11 | 0.24 |
| (1,924) | 1:A:27:GLN:H | 1:A:126:VAL:HG22 | 11 | 0.24 |
| (1,924) | 1:A:27:GLN:H | 1:A:126:VAL:HG23 | 11 | 0.24 |
| (1,910) | 1:A:81:VAL:HG11 | 1:A:82:GLN:H | 8 | 0.24 |
| (1,910) | 1:A:81:VAL:HG12 | 1:A:82:GLN:H | 8 | 0.24 |
| (1,910) | 1:A:81:VAL:HG13 | 1:A:82:GLN:H | 8 | 0.24 |
| (1,897) | 1:A:163:LEU:HD21 | 1:A:193:GLN:H | 6 | 0.24 |
| (1,897) | 1:A:163:LEU:HD22 | 1:A:193:GLN:H | 6 | 0.24 |
| (1,897) | 1:A:163:LEU:HD23 | 1:A:193:GLN:H | 6 | 0.24 |
| (1,827) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:36:LEU:H | 1 | 0.24 |
| (1,827) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:36:LEU:H | 1 | 0.24 |
| (1,827) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:36:LEU:H | 1 | 0.24 |
| (1,811) | 1:A:146:ASP:H | 1:A:147:LEU:HD11 | 7 | 0.24 |
| (1,811) | 1:A:146:ASP:H | 1:A:147:LEU:HD12 | 7 | 0.24 |
| (1,811) | 1:A:146:ASP:H | 1:A:147:LEU:HD13 | 7 | 0.24 |
| (1,535) | 1:A:74:LYS:H | 1:A:76:VAL:HG11 | 20 | 0.24 |
| (1,535) | 1:A:74:LYS:H | 1:A:76:VAL:HG12 | 20 | 0.24 |
| (1,535) | 1:A:74:LYS:H | 1:A:76:VAL:HG13 | 20 | 0.24 |
| (1,453) | 1:A:118:TYR:H | 1:A:121:LEU:HD21 | 15 | 0.24 |
| (1,453) | 1:A:118:TYR:H | 1:A:121:LEU:HD22 | 15 | 0.24 |
| (1,453) | 1:A:118:TYR:H | 1:A:121:LEU:HD23 | 15 | 0.24 |
| (1,343) | 1:A:137:LEU:HD11 | 1:A:146:ASP:H | 17 | 0.24 |
| (1,343) | 1:A:137:LEU:HD12 | 1:A:146:ASP:H | 17 | 0.24 |
| (1,343) | 1:A:137:LEU:HD13 | 1:A:146:ASP:H | 17 | 0.24 |
| (1,334) | 1:A:90:ILE:H | 1:A:91:VAL:HG21 | 10 | 0.24 |
| (1,334) | 1:A:90:ILE:H | 1:A:91:VAL:HG22 | 10 | 0.24 |
| (1,334) | 1:A:90:ILE:H | 1:A:91:VAL:HG23 | 10 | 0.24 |
| (1,334) | 1:A:90:ILE:H | 1:A:91:VAL:HG21 | 19 | 0.24 |
| (1,334) | 1:A:90:ILE:H | 1:A:91:VAL:HG22 | 19 | 0.24 |
| (1,334) | 1:A:90:ILE:H | 1:A:91:VAL:HG23 | 19 | 0.24 |
| (1,266) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:118:TYR:H | 5 | 0.24 |
| (1,266) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:118:TYR:H | 5 | 0.24 |
| (1,266) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:118:TYR:H | 5 | 0.24 |
| (1,226) | 1:A:57:VAL:HG11 | 1:A:82:GLN:H | 10 | 0.24 |
| (1,226) | 1:A:57:VAL:HG12 | 1:A:82:GLN:H | 10 | 0.24 |
| (1,226) | 1:A:57:VAL:HG13 | 1:A:82:GLN:H | 10 | 0.24 |
| (1,1084) | 1:A:154:GLU:O | 1:A:158:SER:H | 11 | 0.24 |
| (1,1084) | 1:A:154:GLU:O | 1:A:158:SER:H | 15 | 0.24 |



Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,108) | 1:A:145:LYS:H | 1:A:148:ASP:H | 5 | 0.24 |
| (1,1070) | 1:A:108:SER:O | 1:A:112:GLN:H | 3 | 0.24 |
| (1,986) | 1:A:138:GLN:H | 1:A:147:LEU:HD11 | 17 | 0.23 |
| (1,986) | 1:A:138:GLN:H | 1:A:147:LEU:HD12 | 17 | 0.23 |
| (1,986) | 1:A:138:GLN:H | 1:A:147:LEU:HD13 | 17 | 0.23 |
| (1,967) | 1:A:146:ASP:H | 1:A:149:LEU:HD11 | 18 | 0.23 |
| (1,967) | 1:A:146:ASP:H | 1:A:149:LEU:HD12 | 18 | 0.23 |
| (1,967) | 1:A:146:ASP:H | 1:A:149:LEU:HD13 | 18 | 0.23 |
| (1,936) | 1:A:153:LEU:HD21 | 1:A:157:GLN:H | 12 | 0.23 |
| (1,936) | 1:A:153:LEU:HD22 | 1:A:157:GLN:H | 12 | 0.23 |
| (1,936) | 1:A:153:LEU:HD23 | 1:A:157:GLN:H | 12 | 0.23 |
| (1,914) | 1:A:147:LEU:HD11 | 1:A:148:ASP:H | 12 | 0.23 |
| (1,914) | 1:A:147:LEU:HD12 | 1:A:148:ASP:H | 12 | 0.23 |
| (1,914) | 1:A:147:LEU:HD13 | 1:A:148:ASP:H | 12 | 0.23 |
| (1,910) | 1:A:81:VAL:HG11 | 1:A:82:GLN:H | 9 | 0.23 |
| (1,910) | 1:A:81:VAL:HG12 | 1:A:82:GLN:H | 9 | 0.23 |
| (1,910) | 1:A:81:VAL:HG13 | 1:A:82:GLN:H | 9 | 0.23 |
| (1,855) | 1:A:131:GLY:H | 1:A:190:LEU:HD11 | 19 | 0.23 |
| (1,855) | 1:A:131:GLY:H | 1:A:190:LEU:HD12 | 19 | 0.23 |
| (1,855) | 1:A:131:GLY:H | 1:A:190:LEU:HD13 | 19 | 0.23 |
| (1,841) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:146:ASP:H | 19 | 0.23 |
| (1,841) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:146:ASP:H | 19 | 0.23 |
| (1,841) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:146:ASP:H | 19 | 0.23 |
| (1,814) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:150:LEU:HD11 | 17 | 0.23 |
| (1,814) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:150:LEU:HD12 | 17 | 0.23 |
| (1,814) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:150:LEU:HD13 | 17 | 0.23 |
| (1,811) | 1:A:146:ASP:H | 1:A:147:LEU:HD11 | 5 | 0.23 |
| (1,811) | 1:A:146:ASP:H | 1:A:147:LEU:HD12 | 5 | 0.23 |
| (1,811) | 1:A:146:ASP:H | 1:A:147:LEU:HD13 | 5 | 0.23 |
| (1,810) | 1:A:136:GLN:H | 1:A:147:LEU:HD11 | 10 | 0.23 |
| (1,810) | 1:A:136:GLN:H | 1:A:147:LEU:HD12 | 10 | 0.23 |
| (1,810) | 1:A:136:GLN:H | 1:A:147:LEU:HD13 | 10 | 0.23 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD11 | 1:A:78:ILE:HD11 | 19 | 0.23 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD11 | 1:A:78:ILE:HD12 | 19 | 0.23 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD11 | 1:A:78:ILE:HD13 | 19 | 0.23 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD12 | 1:A:78:ILE:HD11 | 19 | 0.23 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD12 | 1:A:78:ILE:HD12 | 19 | 0.23 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD12 | 1:A:78:ILE:HD13 | 19 | 0.23 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD13 | 1:A:78:ILE:HD11 | 19 | 0.23 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD13 | 1:A:78:ILE:HD12 | 19 | 0.23 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD13 | 1:A:78:ILE:HD13 | 19 | 0.23 |
| (1,704) | 1:A:105:LEU:HD21 | 1:A:109:LEU:HD21 | 16 | 0.23 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,704) | 1:A:105:LEU:HD21 | 1:A:109:LEU:HD22 | 16 | 0.23 |
| (1,704) | 1:A:105:LEU:HD21 | 1:A:109:LEU:HD23 | 16 | 0.23 |
| (1,704) | 1:A:105:LEU:HD22 | 1:A:109:LEU:HD21 | 16 | 0.23 |
| (1,704) | 1:A:105:LEU:HD22 | 1:A:109:LEU:HD22 | 16 | 0.23 |
| (1,704) | 1:A:105:LEU:HD22 | 1:A:109:LEU:HD23 | 16 | 0.23 |
| (1,704) | 1:A:105:LEU:HD23 | 1:A:109:LEU:HD21 | 16 | 0.23 |
| (1,704) | 1:A:105:LEU:HD23 | 1:A:109:LEU:HD22 | 16 | 0.23 |
| (1,704) | 1:A:105:LEU:HD23 | 1:A:109:LEU:HD23 | 16 | 0.23 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:117:VAL:HG11 | 20 | 0.23 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:117:VAL:HG12 | 20 | 0.23 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:117:VAL:HG13 | 20 | 0.23 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:117:VAL:HG11 | 20 | 0.23 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:117:VAL:HG12 | 20 | 0.23 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:117:VAL:HG13 | 20 | 0.23 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:117:VAL:HG11 | 20 | 0.23 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:117:VAL:HG12 | 20 | 0.23 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:117:VAL:HG13 | 20 | 0.23 |
| (1,572) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:28:ILE:HD11 | 1 | 0.23 |
| (1,572) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:28:ILE:HD12 | 1 | 0.23 |
| (1,572) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:28:ILE:HD13 | 1 | 0.23 |
| (1,572) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:28:ILE:HD11 | 1 | 0.23 |
| (1,572) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:28:ILE:HD12 | 1 | 0.23 |
| (1,572) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:28:ILE:HD13 | 1 | 0.23 |
| (1,572) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:28:ILE:HD11 | 1 | 0.23 |
| (1,572) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:28:ILE:HD12 | 1 | 0.23 |
| (1,572) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:28:ILE:HD13 | 1 | 0.23 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD21 | 8 | 0.23 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD22 | 8 | 0.23 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD23 | 8 | 0.23 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD21 | 8 | 0.23 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD22 | 8 | 0.23 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD23 | 8 | 0.23 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD21 | 8 | 0.23 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD22 | 8 | 0.23 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD23 | 8 | 0.23 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD21 | 11 | 0.23 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD22 | 11 | 0.23 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD23 | 11 | 0.23 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD21 | 11 | 0.23 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD22 | 11 | 0.23 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD23 | 11 | 0.23 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD21 | 11 | 0.23 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD22 | 11 | 0.23 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD23 | 11 | 0.23 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD11 | 1:A:54:VAL:HG21 | 10 | 0.23 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD11 | 1:A:54:VAL:HG22 | 10 | 0.23 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD11 | 1:A:54:VAL:HG23 | 10 | 0.23 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD12 | 1:A:54:VAL:HG21 | 10 | 0.23 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD12 | 1:A:54:VAL:HG22 | 10 | 0.23 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD12 | 1:A:54:VAL:HG23 | 10 | 0.23 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD13 | 1:A:54:VAL:HG21 | 10 | 0.23 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD13 | 1:A:54:VAL:HG22 | 10 | 0.23 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD13 | 1:A:54:VAL:HG23 | 10 | 0.23 |
| (1,518) | 1:A:117:VAL:HG11 | 1:A:121:LEU:HD11 | 3 | 0.23 |
| (1,518) | 1:A:117:VAL:HG11 | 1:A:121:LEU:HD12 | 3 | 0.23 |
| (1,518) | 1:A:117:VAL:HG11 | 1:A:121:LEU:HD13 | 3 | 0.23 |
| (1,518) | 1:A:117:VAL:HG12 | 1:A:121:LEU:HD11 | 3 | 0.23 |
| (1,518) | 1:A:117:VAL:HG12 | 1:A:121:LEU:HD12 | 3 | 0.23 |
| (1,518) | 1:A:117:VAL:HG12 | 1:A:121:LEU:HD13 | 3 | 0.23 |
| (1,518) | 1:A:117:VAL:HG13 | 1:A:121:LEU:HD11 | 3 | 0.23 |
| (1,518) | 1:A:117:VAL:HG13 | 1:A:121:LEU:HD12 | 3 | 0.23 |
| (1,518) | 1:A:117:VAL:HG13 | 1:A:121:LEU:HD13 | 3 | 0.23 |
| (1,507) | 1:A:37:ALA:H | 1:A:57:VAL:HG21 | 20 | 0.23 |
| (1,507) | 1:A:37:ALA:H | 1:A:57:VAL:HG22 | 20 | 0.23 |
| (1,507) | 1:A:37:ALA:H | 1:A:57:VAL:HG23 | 20 | 0.23 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD21 | 1:A:195:LEU:HD21 | 20 | 0.23 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD21 | 1:A:195:LEU:HD22 | 20 | 0.23 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD21 | 1:A:195:LEU:HD23 | 20 | 0.23 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD22 | 1:A:195:LEU:HD21 | 20 | 0.23 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD22 | 1:A:195:LEU:HD22 | 20 | 0.23 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD22 | 1:A:195:LEU:HD23 | 20 | 0.23 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD23 | 1:A:195:LEU:HD21 | 20 | 0.23 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD23 | 1:A:195:LEU:HD22 | 20 | 0.23 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD23 | 1:A:195:LEU:HD23 | 20 | 0.23 |
| (1,346) | 1:A:175:LEU:HD21 | 1:A:184:LYS:H | 13 | 0.23 |
| (1,346) | 1:A:175:LEU:HD22 | 1:A:184:LYS:H | 13 | 0.23 |
| (1,346) | 1:A:175:LEU:HD23 | 1:A:184:LYS:H | 13 | 0.23 |
| (1,343) | 1:A:137:LEU:HD11 | 1:A:146:ASP:H | 18 | 0.23 |
| (1,343) | 1:A:137:LEU:HD12 | 1:A:146:ASP:H | 18 | 0.23 |
| (1,343) | 1:A:137:LEU:HD13 | 1:A:146:ASP:H | 18 | 0.23 |
| (1,266) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:118:TYR:H | 2 | 0.23 |
| (1,266) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:118:TYR:H | 2 | 0.23 |
| (1,266) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:118:TYR:H | 2 | 0.23 |
| (1,266) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:118:TYR:H | 17 | 0.23 |



Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,266) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:118:TYR:H | 17 | 0.23 |
| (1,266) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:118:TYR:H | 17 | 0.23 |
| (1,250) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:84:ASN:H | 8 | 0.23 |
| (1,250) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:84:ASN:H | 8 | 0.23 |
| (1,250) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:84:ASN:H | 8 | 0.23 |
| (1,230) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:150:LEU:HD21 | 19 | 0.23 |
| (1,230) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:150:LEU:HD22 | 19 | 0.23 |
| (1,230) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:150:LEU:HD23 | 19 | 0.23 |
| (1,1105) | 1:A:102:PHE:H | 1:A:128:ILE:O | 9 | 0.23 |
| (1,986) | 1:A:138:GLN:H | 1:A:147:LEU:HD11 | 8 | 0.22 |
| (1,986) | 1:A:138:GLN:H | 1:A:147:LEU:HD12 | 8 | 0.22 |
| (1,986) | 1:A:138:GLN:H | 1:A:147:LEU:HD13 | 8 | 0.22 |
| (1,910) | 1:A:81:VAL:HG11 | 1:A:82:GLN:H | 1 | 0.22 |
| (1,910) | 1:A:81:VAL:HG12 | 1:A:82:GLN:H | 1 | 0.22 |
| (1,910) | 1:A:81:VAL:HG13 | 1:A:82:GLN:H | 1 | 0.22 |
| (1,910) | 1:A:81:VAL:HG11 | 1:A:82:GLN:H | 10 | 0.22 |
| (1,910) | 1:A:81:VAL:HG12 | 1:A:82:GLN:H | 10 | 0.22 |
| (1,910) | 1:A:81:VAL:HG13 | 1:A:82:GLN:H | 10 | 0.22 |
| (1,910) | 1:A:81:VAL:HG11 | 1:A:82:GLN:H | 20 | 0.22 |
| (1,910) | 1:A:81:VAL:HG12 | 1:A:82:GLN:H | 20 | 0.22 |
| (1,910) | 1:A:81:VAL:HG13 | 1:A:82:GLN:H | 20 | 0.22 |
| (1,902) | 1:A:153:LEU:HD11 | 1:A:169:ASN:H | 7 | 0.22 |
| (1,902) | 1:A:153:LEU:HD12 | 1:A:169:ASN:H | 7 | 0.22 |
| (1,902) | 1:A:153:LEU:HD13 | 1:A:169:ASN:H | 7 | 0.22 |
| (1,897) | 1:A:163:LEU:HD21 | 1:A:193:GLN:H | 3 | 0.22 |
| (1,897) | 1:A:163:LEU:HD22 | 1:A:193:GLN:H | 3 | 0.22 |
| (1,897) | 1:A:163:LEU:HD23 | 1:A:193:GLN:H | 3 | 0.22 |
| (1,841) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:146:ASP:H | 2 | 0.22 |
| (1,841) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:146:ASP:H | 2 | 0.22 |
| (1,841) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:146:ASP:H | 2 | 0.22 |
| (1,841) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:146:ASP:H | 14 | 0.22 |
| (1,841) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:146:ASP:H | 14 | 0.22 |
| (1,841) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:146:ASP:H | 14 | 0.22 |
| (1,827) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:36:LEU:H | 11 | 0.22 |
| (1,827) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:36:LEU:H | 11 | 0.22 |
| (1,827) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:36:LEU:H | 11 | 0.22 |
| (1,827) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:36:LEU:H | 18 | 0.22 |
| (1,827) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:36:LEU:H | 18 | 0.22 |
| (1,827) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:36:LEU:H | 18 | 0.22 |
| (1,814) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:150:LEU:HD11 | 18 | 0.22 |
| (1,814) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:150:LEU:HD12 | 18 | 0.22 |
| (1,814) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:150:LEU:HD13 | 18 | 0.22 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,810) | 1:A:136:GLN:H | 1:A:147:LEU:HD11 | 7 | 0.22 |
| (1,810) | 1:A:136:GLN:H | 1:A:147:LEU:HD12 | 7 | 0.22 |
| (1,810) | 1:A:136:GLN:H | 1:A:147:LEU:HD13 | 7 | 0.22 |
| (1,781) | 1:A:126:VAL:HG11 | 1:A:194:LYS:H | 19 | 0.22 |
| (1,781) | 1:A:126:VAL:HG12 | 1:A:194:LYS:H | 19 | 0.22 |
| (1,781) | 1:A:126:VAL:HG13 | 1:A:194:LYS:H | 19 | 0.22 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD11 | 1:A:78:ILE:HD11 | 3 | 0.22 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD11 | 1:A:78:ILE:HD12 | 3 | 0.22 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD11 | 1:A:78:ILE:HD13 | 3 | 0.22 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD12 | 1:A:78:ILE:HD11 | 3 | 0.22 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD12 | 1:A:78:ILE:HD12 | 3 | 0.22 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD12 | 1:A:78:ILE:HD13 | 3 | 0.22 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD13 | 1:A:78:ILE:HD11 | 3 | 0.22 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD13 | 1:A:78:ILE:HD12 | 3 | 0.22 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD13 | 1:A:78:ILE:HD13 | 3 | 0.22 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD11 | 3 | 0.22 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD12 | 3 | 0.22 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD13 | 3 | 0.22 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD11 | 3 | 0.22 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD12 | 3 | 0.22 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD13 | 3 | 0.22 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD11 | 3 | 0.22 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD12 | 3 | 0.22 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD13 | 3 | 0.22 |
| (1,693) | 1:A:91:VAL:HG21 | 1:A:98:ILE:HD11 | 15 | 0.22 |
| (1,693) | 1:A:91:VAL:HG21 | 1:A:98:ILE:HD12 | 15 | 0.22 |
| (1,693) | 1:A:91:VAL:HG21 | 1:A:98:ILE:HD13 | 15 | 0.22 |
| (1,693) | 1:A:91:VAL:HG22 | 1:A:98:ILE:HD11 | 15 | 0.22 |
| (1,693) | 1:A:91:VAL:HG22 | 1:A:98:ILE:HD12 | 15 | 0.22 |
| (1,693) | 1:A:91:VAL:HG22 | 1:A:98:ILE:HD13 | 15 | 0.22 |
| (1,693) | 1:A:91:VAL:HG23 | 1:A:98:ILE:HD11 | 15 | 0.22 |
| (1,693) | 1:A:91:VAL:HG23 | 1:A:98:ILE:HD12 | 15 | 0.22 |
| (1,693) | 1:A:91:VAL:HG23 | 1:A:98:ILE:HD13 | 15 | 0.22 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:117:VAL:HG11 | 17 | 0.22 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:117:VAL:HG12 | 17 | 0.22 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:117:VAL:HG13 | 17 | 0.22 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:117:VAL:HG11 | 17 | 0.22 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:117:VAL:HG12 | 17 | 0.22 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:117:VAL:HG13 | 17 | 0.22 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:117:VAL:HG11 | 17 | 0.22 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:117:VAL:HG12 | 17 | 0.22 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:117:VAL:HG13 | 17 | 0.22 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,572) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:28:ILE:HD11 | 12 | 0.22 |
| (1,572) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:28:ILE:HD12 | 12 | 0.22 |
| (1,572) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:28:ILE:HD13 | 12 | 0.22 |
| (1,572) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:28:ILE:HD11 | 12 | 0.22 |
| (1,572) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:28:ILE:HD12 | 12 | 0.22 |
| (1,572) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:28:ILE:HD13 | 12 | 0.22 |
| (1,572) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:28:ILE:HD11 | 12 | 0.22 |
| (1,572) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:28:ILE:HD12 | 12 | 0.22 |
| (1,572) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:28:ILE:HD13 | 12 | 0.22 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD21 | 3 | 0.22 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD22 | 3 | 0.22 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD23 | 3 | 0.22 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD21 | 3 | 0.22 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD22 | 3 | 0.22 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD23 | 3 | 0.22 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD21 | 3 | 0.22 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD22 | 3 | 0.22 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD23 | 3 | 0.22 |
| (1,346) | 1:A:175:LEU:HD21 | 1:A:184:LYS:H | 15 | 0.22 |
| (1,346) | 1:A:175:LEU:HD22 | 1:A:184:LYS:H | 15 | 0.22 |
| (1,346) | 1:A:175:LEU:HD23 | 1:A:184:LYS:H | 15 | 0.22 |
| (1,232) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:H | 7 | 0.22 |
| (1,232) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:H | 7 | 0.22 |
| (1,232) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:H | 7 | 0.22 |
| (1,232) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:H | 16 | 0.22 |
| (1,232) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:H | 16 | 0.22 |
| (1,232) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:H | 16 | 0.22 |
| (1,226) | 1:A:57:VAL:HG11 | 1:A:82:GLN:H | 9 | 0.22 |
| (1,226) | 1:A:57:VAL:HG12 | 1:A:82:GLN:H | 9 | 0.22 |
| (1,226) | 1:A:57:VAL:HG13 | 1:A:82:GLN:H | 9 | 0.22 |
| (1,158) | 1:A:163:LEU:H | 1:A:195:LEU:HD21 | 6 | 0.22 |
| (1,158) | 1:A:163:LEU:H | 1:A:195:LEU:HD22 | 6 | 0.22 |
| (1,158) | 1:A:163:LEU:H | 1:A:195:LEU:HD23 | 6 | 0.22 |
| (1,1099) | 1:A:124:GLY:O | 1:A:98:ILE:H | 16 | 0.22 |
| (1,1084) | 1:A:154:GLU:O | 1:A:158:SER:H | 13 | 0.22 |
| (1,1034) | 1:A:23:SER:O | 1:A:27:GLN:H | 4 | 0.22 |
| (1,1034) | 1:A:23:SER:O | 1:A:27:GLN:H | 20 | 0.22 |
| (1,1003) | 1:A:59:GLN:H | 1:A:37:ALA:H | 2 | 0.22 |
| (1,994) | 1:A:79:THR:H | 1:A:54:VAL:H | 16 | 0.21 |
| (1,988) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:H | 5 | 0.21 |
| (1,988) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:H | 5 | 0.21 |
| (1,988) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:H | 5 | 0.21 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,988) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:H | 8 | 0.21 |
| (1,988) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:H | 8 | 0.21 |
| (1,988) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:H | 8 | 0.21 |
| (1,936) | 1:A:153:LEU:HD21 | 1:A:157:GLN:H | 8 | 0.21 |
| (1,936) | 1:A:153:LEU:HD22 | 1:A:157:GLN:H | 8 | 0.21 |
| (1,936) | 1:A:153:LEU:HD23 | 1:A:157:GLN:H | 8 | 0.21 |
| (1,936) | 1:A:153:LEU:HD21 | 1:A:157:GLN:H | 10 | 0.21 |
| (1,936) | 1:A:153:LEU:HD22 | 1:A:157:GLN:H | 10 | 0.21 |
| (1,936) | 1:A:153:LEU:HD23 | 1:A:157:GLN:H | 10 | 0.21 |
| (1,936) | 1:A:153:LEU:HD21 | 1:A:157:GLN:H | 13 | 0.21 |
| (1,936) | 1:A:153:LEU:HD22 | 1:A:157:GLN:H | 13 | 0.21 |
| (1,936) | 1:A:153:LEU:HD23 | 1:A:157:GLN:H | 13 | 0.21 |
| (1,827) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:36:LEU:H | 14 | 0.21 |
| (1,827) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:36:LEU:H | 14 | 0.21 |
| (1,827) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:36:LEU:H | 14 | 0.21 |
| (1,827) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:36:LEU:H | 15 | 0.21 |
| (1,827) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:36:LEU:H | 15 | 0.21 |
| (1,827) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:36:LEU:H | 15 | 0.21 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD11 | 1:A:78:ILE:HD11 | 1 | 0.21 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD11 | 1:A:78:ILE:HD12 | 1 | 0.21 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD11 | 1:A:78:ILE:HD13 | 1 | 0.21 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD12 | 1:A:78:ILE:HD11 | 1 | 0.21 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD12 | 1:A:78:ILE:HD12 | 1 | 0.21 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD12 | 1:A:78:ILE:HD13 | 1 | 0.21 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD13 | 1:A:78:ILE:HD11 | 1 | 0.21 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD13 | 1:A:78:ILE:HD12 | 1 | 0.21 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD13 | 1:A:78:ILE:HD13 | 1 | 0.21 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD11 | 1:A:78:ILE:HD11 | 9 | 0.21 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD11 | 1:A:78:ILE:HD12 | 9 | 0.21 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD11 | 1:A:78:ILE:HD13 | 9 | 0.21 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD12 | 1:A:78:ILE:HD11 | 9 | 0.21 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD12 | 1:A:78:ILE:HD12 | 9 | 0.21 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD12 | 1:A:78:ILE:HD13 | 9 | 0.21 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD13 | 1:A:78:ILE:HD11 | 9 | 0.21 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD13 | 1:A:78:ILE:HD12 | 9 | 0.21 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD13 | 1:A:78:ILE:HD13 | 9 | 0.21 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD11 | 1 | 0.21 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD12 | 1 | 0.21 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD13 | 1 | 0.21 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD11 | 1 | 0.21 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD12 | 1 | 0.21 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD13 | 1 | 0.21 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD11 | 1 | 0.21 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD12 | 1 | 0.21 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD13 | 1 | 0.21 |
| (1,596) | 1:A:164:ASN:H | 1:A:195:LEU:H | 6 | 0.21 |
| (1,596) | 1:A:164:ASN:H | 1:A:195:LEU:H | 8 | 0.21 |
| (1,596) | 1:A:164:ASN:H | 1:A:195:LEU:H | 15 | 0.21 |
| (1,596) | 1:A:164:ASN:H | 1:A:195:LEU:H | 16 | 0.21 |
| (1,572) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:28:ILE:HD11 | 17 | 0.21 |
| (1,572) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:28:ILE:HD12 | 17 | 0.21 |
| (1,572) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:28:ILE:HD13 | 17 | 0.21 |
| (1,572) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:28:ILE:HD11 | 17 | 0.21 |
| (1,572) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:28:ILE:HD12 | 17 | 0.21 |
| (1,572) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:28:ILE:HD13 | 17 | 0.21 |
| (1,572) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:28:ILE:HD11 | 17 | 0.21 |
| (1,572) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:28:ILE:HD12 | 17 | 0.21 |
| (1,572) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:28:ILE:HD13 | 17 | 0.21 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD21 | 2 | 0.21 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD22 | 2 | 0.21 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD23 | 2 | 0.21 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD21 | 2 | 0.21 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD22 | 2 | 0.21 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD23 | 2 | 0.21 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD21 | 2 | 0.21 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD22 | 2 | 0.21 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD23 | 2 | 0.21 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD21 | 19 | 0.21 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD22 | 19 | 0.21 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD23 | 19 | 0.21 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD21 | 19 | 0.21 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD22 | 19 | 0.21 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD23 | 19 | 0.21 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD21 | 19 | 0.21 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD22 | 19 | 0.21 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD23 | 19 | 0.21 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD11 | 1:A:54:VAL:HG21 | 2 | 0.21 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD11 | 1:A:54:VAL:HG22 | 2 | 0.21 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD11 | 1:A:54:VAL:HG23 | 2 | 0.21 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD12 | 1:A:54:VAL:HG21 | 2 | 0.21 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD12 | 1:A:54:VAL:HG22 | 2 | 0.21 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD12 | 1:A:54:VAL:HG23 | 2 | 0.21 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD13 | 1:A:54:VAL:HG21 | 2 | 0.21 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD13 | 1:A:54:VAL:HG22 | 2 | 0.21 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD13 | 1:A:54:VAL:HG23 | 2 | 0.21 |
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD11 | 1:A:163:LEU:HD21 | 5 | 0.21 |
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD11 | 1:A:163:LEU:HD22 | 5 | 0.21 |
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD11 | 1:A:163:LEU:HD23 | 5 | 0.21 |
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD12 | 1:A:163:LEU:HD21 | 5 | 0.21 |
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD12 | 1:A:163:LEU:HD22 | 5 | 0.21 |
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD12 | 1:A:163:LEU:HD23 | 5 | 0.21 |
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD13 | 1:A:163:LEU:HD21 | 5 | 0.21 |
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD13 | 1:A:163:LEU:HD22 | 5 | 0.21 |
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD13 | 1:A:163:LEU:HD23 | 5 | 0.21 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD21 | 1:A:195:LEU:HD21 | 18 | 0.21 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD21 | 1:A:195:LEU:HD22 | 18 | 0.21 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD21 | 1:A:195:LEU:HD23 | 18 | 0.21 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD22 | 1:A:195:LEU:HD21 | 18 | 0.21 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD22 | 1:A:195:LEU:HD22 | 18 | 0.21 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD22 | 1:A:195:LEU:HD23 | 18 | 0.21 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD23 | 1:A:195:LEU:HD21 | 18 | 0.21 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD23 | 1:A:195:LEU:HD22 | 18 | 0.21 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD23 | 1:A:195:LEU:HD23 | 18 | 0.21 |
| (1,398) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:36:LEU:HD21 | 12 | 0.21 |
| (1,398) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:36:LEU:HD22 | 12 | 0.21 |
| (1,398) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:36:LEU:HD23 | 12 | 0.21 |
| (1,398) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:36:LEU:HD21 | 12 | 0.21 |
| (1,398) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:36:LEU:HD22 | 12 | 0.21 |
| (1,398) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:36:LEU:HD23 | 12 | 0.21 |
| (1,398) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:36:LEU:HD21 | 12 | 0.21 |
| (1,398) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:36:LEU:HD22 | 12 | 0.21 |
| (1,398) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:36:LEU:HD23 | 12 | 0.21 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD11 | 1:A:190:LEU:HD11 | 5 | 0.21 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD11 | 1:A:190:LEU:HD12 | 5 | 0.21 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD11 | 1:A:190:LEU:HD13 | 5 | 0.21 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD12 | 1:A:190:LEU:HD11 | 5 | 0.21 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD12 | 1:A:190:LEU:HD12 | 5 | 0.21 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD12 | 1:A:190:LEU:HD13 | 5 | 0.21 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD13 | 1:A:190:LEU:HD11 | 5 | 0.21 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD13 | 1:A:190:LEU:HD12 | 5 | 0.21 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD13 | 1:A:190:LEU:HD13 | 5 | 0.21 |
| (1,346) | 1:A:175:LEU:HD21 | 1:A:184:LYS:H | 2 | 0.21 |
| (1,346) | 1:A:175:LEU:HD22 | 1:A:184:LYS:H | 2 | 0.21 |
| (1,346) | 1:A:175:LEU:HD23 | 1:A:184:LYS:H | 2 | 0.21 |
| (1,311) | 1:A:51:GLY:H | 1:A:76:VAL:HG11 | 10 | 0.21 |
| (1,311) | 1:A:51:GLY:H | 1:A:76:VAL:HG12 | 10 | 0.21 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,311) | 1:A:51:GLY:H | 1:A:76:VAL:HG13 | 10 | 0.21 |
| (1,310) | 1:A:173:ARG:H | 1:A:187:LEU:HD11 | 7 | 0.21 |
| (1,310) | 1:A:173:ARG:H | 1:A:187:LEU:HD12 | 7 | 0.21 |
| (1,310) | 1:A:173:ARG:H | 1:A:187:LEU:HD13 | 7 | 0.21 |
| (1,266) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:118:TYR:H | 4 | 0.21 |
| (1,266) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:118:TYR:H | 4 | 0.21 |
| (1,266) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:118:TYR:H | 4 | 0.21 |
| (1,266) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:118:TYR:H | 14 | 0.21 |
| (1,266) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:118:TYR:H | 14 | 0.21 |
| (1,266) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:118:TYR:H | 14 | 0.21 |
| (1,259) | 1:A:71:ALA:H | 1:A:78:ILE:HD11 | 18 | 0.21 |
| (1,259) | 1:A:71:ALA:H | 1:A:78:ILE:HD12 | 18 | 0.21 |
| (1,259) | 1:A:71:ALA:H | 1:A:78:ILE:HD13 | 18 | 0.21 |
| (1,250) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:84:ASN:H | 4 | 0.21 |
| (1,250) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:84:ASN:H | 4 | 0.21 |
| (1,250) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:84:ASN:H | 4 | 0.21 |
| (1,250) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:84:ASN:H | 10 | 0.21 |
| (1,250) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:84:ASN:H | 10 | 0.21 |
| (1,250) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:84:ASN:H | 10 | 0.21 |
| (1,242) | 1:A:133:ALA:H | 1:A:147:LEU:HD21 | 7 | 0.21 |
| (1,242) | 1:A:133:ALA:H | 1:A:147:LEU:HD22 | 7 | 0.21 |
| (1,242) | 1:A:133:ALA:H | 1:A:147:LEU:HD23 | 7 | 0.21 |
| (1,228) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:147:LEU:HD11 | 20 | 0.21 |
| (1,228) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:147:LEU:HD12 | 20 | 0.21 |
| (1,228) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:147:LEU:HD13 | 20 | 0.21 |
| (1,226) | 1:A:57:VAL:HG11 | 1:A:82:GLN:H | 8 | 0.21 |
| (1,226) | 1:A:57:VAL:HG12 | 1:A:82:GLN:H | 8 | 0.21 |
| (1,226) | 1:A:57:VAL:HG13 | 1:A:82:GLN:H | 8 | 0.21 |
| (1,1099) | 1:A:124:GLY:O | 1:A:98:ILE:H | 12 | 0.21 |
| (1,1084) | 1:A:154:GLU:O | 1:A:158:SER:H | 3 | 0.21 |
| (1,1084) | 1:A:154:GLU:O | 1:A:158:SER:H | 4 | 0.21 |
| (1,1034) | 1:A:23:SER:O | 1:A:27:GLN:H | 6 | 0.21 |
| (1,1003) | 1:A:59:GLN:H | 1:A:37:ALA:H | 12 | 0.21 |
| (1,986) | 1:A:138:GLN:H | 1:A:147:LEU:HD11 | 18 | 0.2 |
| (1,986) | 1:A:138:GLN:H | 1:A:147:LEU:HD12 | 18 | 0.2 |
| (1,986) | 1:A:138:GLN:H | 1:A:147:LEU:HD13 | 18 | 0.2 |
| (1,913) | 1:A:137:LEU:HD11 | 1:A:148:ASP:H | 19 | 0.2 |
| (1,913) | 1:A:137:LEU:HD12 | 1:A:148:ASP:H | 19 | 0.2 |
| (1,913) | 1:A:137:LEU:HD13 | 1:A:148:ASP:H | 19 | 0.2 |
| (1,896) | 1:A:166:LEU:HD11 | 1:A:193:GLN:H | 17 | 0.2 |
| (1,896) | 1:A:166:LEU:HD12 | 1:A:193:GLN:H | 17 | 0.2 |
| (1,896) | 1:A:166:LEU:HD13 | 1:A:193:GLN:H | 17 | 0.2 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD11 | 1:A:78:ILE:HD11 | 8 | 0.2 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD11 | 1:A:78:ILE:HD12 | 8 | 0.2 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD11 | 1:A:78:ILE:HD13 | 8 | 0.2 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD12 | 1:A:78:ILE:HD11 | 8 | 0.2 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD12 | 1:A:78:ILE:HD12 | 8 | 0.2 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD12 | 1:A:78:ILE:HD13 | 8 | 0.2 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD13 | 1:A:78:ILE:HD11 | 8 | 0.2 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD13 | 1:A:78:ILE:HD12 | 8 | 0.2 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD13 | 1:A:78:ILE:HD13 | 8 | 0.2 |
| (1,750) | 1:A:81:VAL:HG21 | 1:A:85:LEU:HD21 | 1 | 0.2 |
| (1,750) | 1:A:81:VAL:HG21 | 1:A:85:LEU:HD22 | 1 | 0.2 |
| (1,750) | 1:A:81:VAL:HG21 | 1:A:85:LEU:HD23 | 1 | 0.2 |
| (1,750) | 1:A:81:VAL:HG22 | 1:A:85:LEU:HD21 | 1 | 0.2 |
| (1,750) | 1:A:81:VAL:HG22 | 1:A:85:LEU:HD22 | 1 | 0.2 |
| (1,750) | 1:A:81:VAL:HG22 | 1:A:85:LEU:HD23 | 1 | 0.2 |
| (1,750) | 1:A:81:VAL:HG23 | 1:A:85:LEU:HD21 | 1 | 0.2 |
| (1,750) | 1:A:81:VAL:HG23 | 1:A:85:LEU:HD22 | 1 | 0.2 |
| (1,750) | 1:A:81:VAL:HG23 | 1:A:85:LEU:HD23 | 1 | 0.2 |
| (1,750) | 1:A:81:VAL:HG21 | 1:A:85:LEU:HD21 | 8 | 0.2 |
| (1,750) | 1:A:81:VAL:HG21 | 1:A:85:LEU:HD22 | 8 | 0.2 |
| (1,750) | 1:A:81:VAL:HG21 | 1:A:85:LEU:HD23 | 8 | 0.2 |
| (1,750) | 1:A:81:VAL:HG22 | 1:A:85:LEU:HD21 | 8 | 0.2 |
| (1,750) | 1:A:81:VAL:HG22 | 1:A:85:LEU:HD22 | 8 | 0.2 |
| (1,750) | 1:A:81:VAL:HG22 | 1:A:85:LEU:HD23 | 8 | 0.2 |
| (1,750) | 1:A:81:VAL:HG23 | 1:A:85:LEU:HD21 | 8 | 0.2 |
| (1,750) | 1:A:81:VAL:HG23 | 1:A:85:LEU:HD22 | 8 | 0.2 |
| (1,750) | 1:A:81:VAL:HG23 | 1:A:85:LEU:HD23 | 8 | 0.2 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:117:VAL:HG11 | 6 | 0.2 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:117:VAL:HG12 | 6 | 0.2 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:117:VAL:HG13 | 6 | 0.2 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:117:VAL:HG11 | 6 | 0.2 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:117:VAL:HG12 | 6 | 0.2 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:117:VAL:HG13 | 6 | 0.2 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:117:VAL:HG11 | 6 | 0.2 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:117:VAL:HG12 | 6 | 0.2 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:117:VAL:HG13 | 6 | 0.2 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD21 | 15 | 0.2 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD22 | 15 | 0.2 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD23 | 15 | 0.2 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD21 | 15 | 0.2 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD22 | 15 | 0.2 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD23 | 15 | 0.2 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD21 | 15 | 0.2 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD22 | 15 | 0.2 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD23 | 15 | 0.2 |
| (1,518) | 1:A:117:VAL:HG11 | 1:A:121:LEU:HD11 | 4 | 0.2 |
| (1,518) | 1:A:117:VAL:HG11 | 1:A:121:LEU:HD12 | 4 | 0.2 |
| (1,518) | 1:A:117:VAL:HG11 | 1:A:121:LEU:HD13 | 4 | 0.2 |
| (1,518) | 1:A:117:VAL:HG12 | 1:A:121:LEU:HD11 | 4 | 0.2 |
| (1,518) | 1:A:117:VAL:HG12 | 1:A:121:LEU:HD12 | 4 | 0.2 |
| (1,518) | 1:A:117:VAL:HG12 | 1:A:121:LEU:HD13 | 4 | 0.2 |
| (1,518) | 1:A:117:VAL:HG13 | 1:A:121:LEU:HD11 | 4 | 0.2 |
| (1,518) | 1:A:117:VAL:HG13 | 1:A:121:LEU:HD12 | 4 | 0.2 |
| (1,518) | 1:A:117:VAL:HG13 | 1:A:121:LEU:HD13 | 4 | 0.2 |
| (1,399) | 1:A:34:LEU:H | 1:A:99:VAL:HG21 | 16 | 0.2 |
| (1,399) | 1:A:34:LEU:H | 1:A:99:VAL:HG22 | 16 | 0.2 |
| (1,399) | 1:A:34:LEU:H | 1:A:99:VAL:HG23 | 16 | 0.2 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD11 | 1:A:190:LEU:HD11 | 7 | 0.2 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD11 | 1:A:190:LEU:HD12 | 7 | 0.2 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD11 | 1:A:190:LEU:HD13 | 7 | 0.2 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD12 | 1:A:190:LEU:HD11 | 7 | 0.2 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD12 | 1:A:190:LEU:HD12 | 7 | 0.2 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD12 | 1:A:190:LEU:HD13 | 7 | 0.2 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD13 | 1:A:190:LEU:HD11 | 7 | 0.2 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD13 | 1:A:190:LEU:HD12 | 7 | 0.2 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD13 | 1:A:190:LEU:HD13 | 7 | 0.2 |
| (1,295) | 1:A:153:LEU:H | 1:A:190:LEU:HD21 | 8 | 0.2 |
| (1,295) | 1:A:153:LEU:H | 1:A:190:LEU:HD22 | 8 | 0.2 |
| (1,295) | 1:A:153:LEU:H | 1:A:190:LEU:HD23 | 8 | 0.2 |
| (1,250) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:84:ASN:H | 7 | 0.2 |
| (1,250) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:84:ASN:H | 7 | 0.2 |
| (1,250) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:84:ASN:H | 7 | 0.2 |
| (1,201) | 1:A:157:GLN:H | 1:A:190:LEU:HD21 | 19 | 0.2 |
| (1,201) | 1:A:157:GLN:H | 1:A:190:LEU:HD22 | 19 | 0.2 |
| (1,201) | 1:A:157:GLN:H | 1:A:190:LEU:HD23 | 19 | 0.2 |
| (1,1105) | 1:A:102:PHE:H | 1:A:128:ILE:O | 20 | 0.2 |
| (1,1084) | 1:A:154:GLU:O | 1:A:158:SER:H | 1 | 0.2 |
| (1,1034) | 1:A:23:SER:O | 1:A:27:GLN:H | 5 | 0.2 |
| (1,1032) | 1:A:22:VAL:O | 1:A:26:ASN:H | 14 | 0.2 |
| (1,1017) | 1:A:101:ILE:HA | 1:A:128:ILE:H | 20 | 0.2 |
| (1,964) | 1:A:116:LYS:H | 1:A:117:VAL:HG21 | 11 | 0.19 |
| (1,964) | 1:A:116:LYS:H | 1:A:117:VAL:HG22 | 11 | 0.19 |
| (1,964) | 1:A:116:LYS:H | 1:A:117:VAL:HG23 | 11 | 0.19 |
| (1,936) | 1:A:153:LEU:HD21 | 1:A:157:GLN:H | 18 | 0.19 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,936) | 1:A:153:LEU:HD22 | 1:A:157:GLN:H | 18 | 0.19 |
| (1,936) | 1:A:153:LEU:HD23 | 1:A:157:GLN:H | 18 | 0.19 |
| (1,896) | 1:A:166:LEU:HD11 | 1:A:193:GLN:H | 14 | 0.19 |
| (1,896) | 1:A:166:LEU:HD12 | 1:A:193:GLN:H | 14 | 0.19 |
| (1,896) | 1:A:166:LEU:HD13 | 1:A:193:GLN:H | 14 | 0.19 |
| (1,896) | 1:A:166:LEU:HD11 | 1:A:193:GLN:H | 18 | 0.19 |
| (1,896) | 1:A:166:LEU:HD12 | 1:A:193:GLN:H | 18 | 0.19 |
| (1,896) | 1:A:166:LEU:HD13 | 1:A:193:GLN:H | 18 | 0.19 |
| (1,854) | 1:A:131:GLY:H | 1:A:153:LEU:HD21 | 3 | 0.19 |
| (1,854) | 1:A:131:GLY:H | 1:A:153:LEU:HD22 | 3 | 0.19 |
| (1,854) | 1:A:131:GLY:H | 1:A:153:LEU:HD23 | 3 | 0.19 |
| (1,848) | 1:A:91:VAL:HG21 | 1:A:95:TRP:HE1 | 13 | 0.19 |
| (1,848) | 1:A:91:VAL:HG22 | 1:A:95:TRP:HE1 | 13 | 0.19 |
| (1,848) | 1:A:91:VAL:HG23 | 1:A:95:TRP:HE1 | 13 | 0.19 |
| (1,827) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:36:LEU:H | 17 | 0.19 |
| (1,827) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:36:LEU:H | 17 | 0.19 |
| (1,827) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:36:LEU:H | 17 | 0.19 |
| (1,811) | 1:A:146:ASP:H | 1:A:147:LEU:HD11 | 14 | 0.19 |
| (1,811) | 1:A:146:ASP:H | 1:A:147:LEU:HD12 | 14 | 0.19 |
| (1,811) | 1:A:146:ASP:H | 1:A:147:LEU:HD13 | 14 | 0.19 |
| (1,809) | 1:A:91:VAL:HG11 | 1:A:92:ALA:H | 10 | 0.19 |
| (1,809) | 1:A:91:VAL:HG12 | 1:A:92:ALA:H | 10 | 0.19 |
| (1,809) | 1:A:91:VAL:HG13 | 1:A:92:ALA:H | 10 | 0.19 |
| (1,809) | 1:A:91:VAL:HG11 | 1:A:92:ALA:H | 13 | 0.19 |
| (1,809) | 1:A:91:VAL:HG12 | 1:A:92:ALA:H | 13 | 0.19 |
| (1,809) | 1:A:91:VAL:HG13 | 1:A:92:ALA:H | 13 | 0.19 |
| (1,806) | 1:A:166:LEU:HD21 | 1:A:193:GLN:H | 15 | 0.19 |
| (1,806) | 1:A:166:LEU:HD22 | 1:A:193:GLN:H | 15 | 0.19 |
| (1,806) | 1:A:166:LEU:HD23 | 1:A:193:GLN:H | 15 | 0.19 |
| (1,801) | 1:A:113:LEU:HD11 | 1:A:116:LYS:H | 9 | 0.19 |
| (1,801) | 1:A:113:LEU:HD12 | 1:A:116:LYS:H | 9 | 0.19 |
| (1,801) | 1:A:113:LEU:HD13 | 1:A:116:LYS:H | 9 | 0.19 |
| (1,758) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:150:LEU:HD11 | 8 | 0.19 |
| (1,758) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:150:LEU:HD12 | 8 | 0.19 |
| (1,758) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:150:LEU:HD13 | 8 | 0.19 |
| (1,758) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:150:LEU:HD11 | 8 | 0.19 |
| (1,758) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:150:LEU:HD12 | 8 | 0.19 |
| (1,758) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:150:LEU:HD13 | 8 | 0.19 |
| (1,758) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:150:LEU:HD11 | 8 | 0.19 |
| (1,758) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:150:LEU:HD12 | 8 | 0.19 |
| (1,758) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:150:LEU:HD13 | 8 | 0.19 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD21 | 1:A:150:LEU:HD21 | 11 | 0.19 |



Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD21 | 1:A:150:LEU:HD22 | 11 | 0.19 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD21 | 1:A:150:LEU:HD23 | 11 | 0.19 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD22 | 1:A:150:LEU:HD21 | 11 | 0.19 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD22 | 1:A:150:LEU:HD22 | 11 | 0.19 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD22 | 1:A:150:LEU:HD23 | 11 | 0.19 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD23 | 1:A:150:LEU:HD21 | 11 | 0.19 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD23 | 1:A:150:LEU:HD22 | 11 | 0.19 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD23 | 1:A:150:LEU:HD23 | 11 | 0.19 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:117:VAL:HG11 | 5 | 0.19 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:117:VAL:HG12 | 5 | 0.19 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:117:VAL:HG13 | 5 | 0.19 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:117:VAL:HG11 | 5 | 0.19 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:117:VAL:HG12 | 5 | 0.19 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:117:VAL:HG13 | 5 | 0.19 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:117:VAL:HG11 | 5 | 0.19 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:117:VAL:HG12 | 5 | 0.19 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:117:VAL:HG13 | 5 | 0.19 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:117:VAL:HG11 | 9 | 0.19 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:117:VAL:HG12 | 9 | 0.19 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:117:VAL:HG13 | 9 | 0.19 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:117:VAL:HG11 | 9 | 0.19 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:117:VAL:HG12 | 9 | 0.19 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:117:VAL:HG13 | 9 | 0.19 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:117:VAL:HG11 | 9 | 0.19 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:117:VAL:HG12 | 9 | 0.19 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:117:VAL:HG13 | 9 | 0.19 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:117:VAL:HG11 | 18 | 0.19 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:117:VAL:HG12 | 18 | 0.19 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:117:VAL:HG13 | 18 | 0.19 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:117:VAL:HG11 | 18 | 0.19 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:117:VAL:HG12 | 18 | 0.19 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:117:VAL:HG13 | 18 | 0.19 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:117:VAL:HG11 | 18 | 0.19 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:117:VAL:HG12 | 18 | 0.19 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:117:VAL:HG13 | 18 | 0.19 |
| (1,570) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:145:LYS:H | 3 | 0.19 |
| (1,570) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:145:LYS:H | 3 | 0.19 |
| (1,570) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:145:LYS:H | 3 | 0.19 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD21 | 1 | 0.19 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD22 | 1 | 0.19 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD23 | 1 | 0.19 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD21 | 1 | 0.19 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD22 | 1 | 0.19 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD23 | 1 | 0.19 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD21 | 1 | 0.19 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD22 | 1 | 0.19 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD23 | 1 | 0.19 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD11 | 1:A:54:VAL:HG21 | 15 | 0.19 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD11 | 1:A:54:VAL:HG22 | 15 | 0.19 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD11 | 1:A:54:VAL:HG23 | 15 | 0.19 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD12 | 1:A:54:VAL:HG21 | 15 | 0.19 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD12 | 1:A:54:VAL:HG22 | 15 | 0.19 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD12 | 1:A:54:VAL:HG23 | 15 | 0.19 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD13 | 1:A:54:VAL:HG21 | 15 | 0.19 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD13 | 1:A:54:VAL:HG22 | 15 | 0.19 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD13 | 1:A:54:VAL:HG23 | 15 | 0.19 |
| (1,507) | 1:A:37:ALA:H | 1:A:57:VAL:HG21 | 14 | 0.19 |
| (1,507) | 1:A:37:ALA:H | 1:A:57:VAL:HG22 | 14 | 0.19 |
| (1,507) | 1:A:37:ALA:H | 1:A:57:VAL:HG23 | 14 | 0.19 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD21 | 1:A:195:LEU:HD21 | 17 | 0.19 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD21 | 1:A:195:LEU:HD22 | 17 | 0.19 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD21 | 1:A:195:LEU:HD23 | 17 | 0.19 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD22 | 1:A:195:LEU:HD21 | 17 | 0.19 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD22 | 1:A:195:LEU:HD22 | 17 | 0.19 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD22 | 1:A:195:LEU:HD23 | 17 | 0.19 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD23 | 1:A:195:LEU:HD21 | 17 | 0.19 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD23 | 1:A:195:LEU:HD22 | 17 | 0.19 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD23 | 1:A:195:LEU:HD23 | 17 | 0.19 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD11 | 1:A:190:LEU:HD11 | 2 | 0.19 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD11 | 1:A:190:LEU:HD12 | 2 | 0.19 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD11 | 1:A:190:LEU:HD13 | 2 | 0.19 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD12 | 1:A:190:LEU:HD11 | 2 | 0.19 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD12 | 1:A:190:LEU:HD12 | 2 | 0.19 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD12 | 1:A:190:LEU:HD13 | 2 | 0.19 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD13 | 1:A:190:LEU:HD11 | 2 | 0.19 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD13 | 1:A:190:LEU:HD12 | 2 | 0.19 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD13 | 1:A:190:LEU:HD13 | 2 | 0.19 |
| (1,343) | 1:A:137:LEU:HD11 | 1:A:146:ASP:H | 6 | 0.19 |
| (1,343) | 1:A:137:LEU:HD12 | 1:A:146:ASP:H | 6 | 0.19 |
| (1,343) | 1:A:137:LEU:HD13 | 1:A:146:ASP:H | 6 | 0.19 |
| (1,334) | 1:A:90:ILE:H | 1:A:91:VAL:HG21 | 7 | 0.19 |
| (1,334) | 1:A:90:ILE:H | 1:A:91:VAL:HG22 | 7 | 0.19 |
| (1,334) | 1:A:90:ILE:H | 1:A:91:VAL:HG23 | 7 | 0.19 |
| (1,311) | 1:A:51:GLY:H | 1:A:76:VAL:HG11 | 20 | 0.19 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,311) | 1:A:51:GLY:H | 1:A:76:VAL:HG12 | 20 | 0.19 |
| (1,311) | 1:A:51:GLY:H | 1:A:76:VAL:HG13 | 20 | 0.19 |
| (1,296) | 1:A:137:LEU:HD11 | 1:A:149:LEU:H | 15 | 0.19 |
| (1,296) | 1:A:137:LEU:HD12 | 1:A:149:LEU:H | 15 | 0.19 |
| (1,296) | 1:A:137:LEU:HD13 | 1:A:149:LEU:H | 15 | 0.19 |
| (1,295) | 1:A:153:LEU:H | 1:A:190:LEU:HD21 | 10 | 0.19 |
| (1,295) | 1:A:153:LEU:H | 1:A:190:LEU:HD22 | 10 | 0.19 |
| (1,295) | 1:A:153:LEU:H | 1:A:190:LEU:HD23 | 10 | 0.19 |
| (1,272) | 1:A:124:GLY:H | 1:A:163:LEU:HD21 | 18 | 0.19 |
| (1,272) | 1:A:124:GLY:H | 1:A:163:LEU:HD22 | 18 | 0.19 |
| (1,272) | 1:A:124:GLY:H | 1:A:163:LEU:HD23 | 18 | 0.19 |
| (1,266) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:118:TYR:H | 12 | 0.19 |
| (1,266) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:118:TYR:H | 12 | 0.19 |
| (1,266) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:118:TYR:H | 12 | 0.19 |
| (1,250) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:84:ASN:H | 1 | 0.19 |
| (1,250) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:84:ASN:H | 1 | 0.19 |
| (1,250) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:84:ASN:H | 1 | 0.19 |
| (1,217) | 1:A:163:LEU:HD11 | 1:A:195:LEU:H | 2 | 0.19 |
| (1,217) | 1:A:163:LEU:HD12 | 1:A:195:LEU:H | 2 | 0.19 |
| (1,217) | 1:A:163:LEU:HD13 | 1:A:195:LEU:H | 2 | 0.19 |
| (1,217) | 1:A:163:LEU:HD11 | 1:A:195:LEU:H | 4 | 0.19 |
| (1,217) | 1:A:163:LEU:HD12 | 1:A:195:LEU:H | 4 | 0.19 |
| (1,217) | 1:A:163:LEU:HD13 | 1:A:195:LEU:H | 4 | 0.19 |
| (1,217) | 1:A:163:LEU:HD11 | 1:A:195:LEU:H | 5 | 0.19 |
| (1,217) | 1:A:163:LEU:HD12 | 1:A:195:LEU:H | 5 | 0.19 |
| (1,217) | 1:A:163:LEU:HD13 | 1:A:195:LEU:H | 5 | 0.19 |
| (1,1113) | 1:A:127:PHE:H | 1:A:192:GLY:O | 6 | 0.19 |
| (1,1105) | 1:A:102:PHE:H | 1:A:128:ILE:O | 14 | 0.19 |
| (1,1099) | 1:A:124:GLY:O | 1:A:98:ILE:H | 3 | 0.19 |
| (1,1070) | 1:A:108:SER:O | 1:A:112:GLN:H | 1 | 0.19 |
| (1,1070) | 1:A:108:SER:O | 1:A:112:GLN:H | 4 | 0.19 |
| (1,1070) | 1:A:108:SER:O | 1:A:112:GLN:H | 20 | 0.19 |
| (1,936) | 1:A:153:LEU:HD21 | 1:A:157:GLN:H | 9 | 0.18 |
| (1,936) | 1:A:153:LEU:HD22 | 1:A:157:GLN:H | 9 | 0.18 |
| (1,936) | 1:A:153:LEU:HD23 | 1:A:157:GLN:H | 9 | 0.18 |
| (1,936) | 1:A:153:LEU:HD21 | 1:A:157:GLN:H | 15 | 0.18 |
| (1,936) | 1:A:153:LEU:HD22 | 1:A:157:GLN:H | 15 | 0.18 |
| (1,936) | 1:A:153:LEU:HD23 | 1:A:157:GLN:H | 15 | 0.18 |
| (1,936) | 1:A:153:LEU:HD21 | 1:A:157:GLN:H | 16 | 0.18 |
| (1,936) | 1:A:153:LEU:HD22 | 1:A:157:GLN:H | 16 | 0.18 |
| (1,936) | 1:A:153:LEU:HD23 | 1:A:157:GLN:H | 16 | 0.18 |
| (1,917) | 1:A:154:GLU:H | 1:A:190:LEU:HD21 | 11 | 0.18 |



Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,917) | 1:A:154:GLU:H | 1:A:190:LEU:HD22 | 11 | 0.18 |
| (1,917) | 1:A:154:GLU:H | 1:A:190:LEU:HD23 | 11 | 0.18 |
| (1,891) | 1:A:125:GLY:H | 1:A:163:LEU:HD21 | 13 | 0.18 |
| (1,891) | 1:A:125:GLY:H | 1:A:163:LEU:HD22 | 13 | 0.18 |
| (1,891) | 1:A:125:GLY:H | 1:A:163:LEU:HD23 | 13 | 0.18 |
| (1,841) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:146:ASP:H | 5 | 0.18 |
| (1,841) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:146:ASP:H | 5 | 0.18 |
| (1,841) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:146:ASP:H | 5 | 0.18 |
| (1,822) | 1:A:90:ILE:HD11 | 1:A:116:LYS:H | 17 | 0.18 |
| (1,822) | 1:A:90:ILE:HD12 | 1:A:116:LYS:H | 17 | 0.18 |
| (1,822) | 1:A:90:ILE:HD13 | 1:A:116:LYS:H | 17 | 0.18 |
| (1,811) | 1:A:146:ASP:H | 1:A:147:LEU:HD11 | 15 | 0.18 |
| (1,811) | 1:A:146:ASP:H | 1:A:147:LEU:HD12 | 15 | 0.18 |
| (1,811) | 1:A:146:ASP:H | 1:A:147:LEU:HD13 | 15 | 0.18 |
| (1,810) | 1:A:136:GLN:H | 1:A:147:LEU:HD11 | 13 | 0.18 |
| (1,810) | 1:A:136:GLN:H | 1:A:147:LEU:HD12 | 13 | 0.18 |
| (1,810) | 1:A:136:GLN:H | 1:A:147:LEU:HD13 | 13 | 0.18 |
| (1,781) | 1:A:126:VAL:HG11 | 1:A:194:LYS:H | 5 | 0.18 |
| (1,781) | 1:A:126:VAL:HG12 | 1:A:194:LYS:H | 5 | 0.18 |
| (1,781) | 1:A:126:VAL:HG13 | 1:A:194:LYS:H | 5 | 0.18 |
| (1,781) | 1:A:126:VAL:HG11 | 1:A:194:LYS:H | 16 | 0.18 |
| (1,781) | 1:A:126:VAL:HG12 | 1:A:194:LYS:H | 16 | 0.18 |
| (1,781) | 1:A:126:VAL:HG13 | 1:A:194:LYS:H | 16 | 0.18 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD21 | 1:A:150:LEU:HD21 | 14 | 0.18 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD21 | 1:A:150:LEU:HD22 | 14 | 0.18 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD21 | 1:A:150:LEU:HD23 | 14 | 0.18 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD22 | 1:A:150:LEU:HD21 | 14 | 0.18 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD22 | 1:A:150:LEU:HD22 | 14 | 0.18 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD22 | 1:A:150:LEU:HD23 | 14 | 0.18 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD23 | 1:A:150:LEU:HD21 | 14 | 0.18 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD23 | 1:A:150:LEU:HD22 | 14 | 0.18 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD23 | 1:A:150:LEU:HD23 | 14 | 0.18 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD21 | 1:A:150:LEU:HD21 | 16 | 0.18 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD21 | 1:A:150:LEU:HD22 | 16 | 0.18 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD21 | 1:A:150:LEU:HD23 | 16 | 0.18 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD22 | 1:A:150:LEU:HD21 | 16 | 0.18 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD22 | 1:A:150:LEU:HD22 | 16 | 0.18 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD22 | 1:A:150:LEU:HD23 | 16 | 0.18 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD23 | 1:A:150:LEU:HD21 | 16 | 0.18 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD23 | 1:A:150:LEU:HD22 | 16 | 0.18 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD23 | 1:A:150:LEU:HD23 | 16 | 0.18 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD11 | 14 | 0.18 |



Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD12 | 14 | 0.18 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD13 | 14 | 0.18 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD11 | 14 | 0.18 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD12 | 14 | 0.18 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD13 | 14 | 0.18 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD11 | 14 | 0.18 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD12 | 14 | 0.18 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD13 | 14 | 0.18 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD11 | 15 | 0.18 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD12 | 15 | 0.18 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD13 | 15 | 0.18 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD11 | 15 | 0.18 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD12 | 15 | 0.18 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD13 | 15 | 0.18 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD11 | 15 | 0.18 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD12 | 15 | 0.18 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD13 | 15 | 0.18 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:117:VAL:HG11 | 10 | 0.18 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:117:VAL:HG12 | 10 | 0.18 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:117:VAL:HG13 | 10 | 0.18 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:117:VAL:HG11 | 10 | 0.18 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:117:VAL:HG12 | 10 | 0.18 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:117:VAL:HG13 | 10 | 0.18 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:117:VAL:HG11 | 10 | 0.18 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:117:VAL:HG12 | 10 | 0.18 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:117:VAL:HG13 | 10 | 0.18 |
| (1,570) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:145:LYS:H | 17 | 0.18 |
| (1,570) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:145:LYS:H | 17 | 0.18 |
| (1,570) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:145:LYS:H | 17 | 0.18 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD21 | 10 | 0.18 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD22 | 10 | 0.18 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD23 | 10 | 0.18 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD21 | 10 | 0.18 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD22 | 10 | 0.18 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD23 | 10 | 0.18 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD21 | 10 | 0.18 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD22 | 10 | 0.18 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD23 | 10 | 0.18 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD11 | 1:A:54:VAL:HG21 | 5 | 0.18 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD11 | 1:A:54:VAL:HG22 | 5 | 0.18 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD11 | 1:A:54:VAL:HG23 | 5 | 0.18 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD12 | 1:A:54:VAL:HG21 | 5 | 0.18 |



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

| (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG22 5 0.18 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG23 5 0.18 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG21 5 0.18 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG22 5 0.18 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG23 5 0.18 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG21 7 0.18 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG22 7 0.18 (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG22 7 0.18 (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG22 7 0.18 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG23 7 0.18 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG23 7 0.18 (1,563) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG23 7 0.18 (1,563) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG23 7 0.18 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL: | Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|--|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG21 5 0.18 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG22 5 0.18 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG23 5 0.18 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG21 7 0.18 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG22 7 0.18 (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG21 7 0.18 (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG22 7 0.18 (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG22 7 0.18 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG21 7 0.18 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG22 7 0.18 (1,563) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG23 7 0.18 (1,563) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG23 7 0.18 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG23 10 0.18 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG | (1,563) | 1:A:50:LEU:HD12 | 1:A:54:VAL:HG22 | 5 | 0.18 |
| (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG22 5 0.18 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG23 5 0.18 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG21 7 0.18 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG21 7 0.18 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG22 7 0.18 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG23 7 0.18 (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG23 7 0.18 (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG22 7 0.18 (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG22 7 0.18 (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG23 7 0.18 (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG23 7 0.18 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG23 7 0.18 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG23 7 0.18 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG22 7 0.18 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG22 7 0.18 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG22 7 0.18 (1,567) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG22 10 0.18 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG21 10 0.18 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG21 10 0.18 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG21 12 0.18 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG22 12 0.18 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG22 12 0.18 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG22 12 0.18 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG23 12 0.18 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG33 12 0.18 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG | (1,563) | 1:A:50:LEU:HD12 | 1:A:54:VAL:HG23 | 5 | 0.18 |
| (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG23 5 0.18 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG21 7 0.18 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG22 7 0.18 (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG21 7 0.18 (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG21 7 0.18 (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG22 7 0.18 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG23 7 0.18 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG23 7 0.18 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG23 7 0.18 (1,563) 1:A:30:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG23 7 0.18 (1,563) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG23 7 0.18 (1,567) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG23 10 0.18 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG23 10 0.18 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:H | (1,563) | 1:A:50:LEU:HD13 | 1:A:54:VAL:HG21 | 5 | 0.18 |
| (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG21 7 0.18 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG22 7 0.18 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG23 7 0.18 (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG21 7 0.18 (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG22 7 0.18 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG21 7 0.18 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG21 7 0.18 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG22 7 0.18 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG22 7 0.18 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG23 7 0.18 (1,567) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG23 7 0.18 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG21 10 0.18 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG22 12 0.18 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:H | (1,563) | 1:A:50:LEU:HD13 | 1:A:54:VAL:HG22 | 5 | 0.18 |
| (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG22 7 0.18 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG23 7 0.18 (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG21 7 0.18 (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG22 7 0.18 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG21 7 0.18 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG22 7 0.18 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG22 7 0.18 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG22 7 0.18 (1,563) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG21 10 0.18 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG21 10 0.18 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG21 12 0.18 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG21 12 0.18 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG22 12 0.18 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG21 | (1,563) | 1:A:50:LEU:HD13 | 1:A:54:VAL:HG23 | 5 | 0.18 |
| (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG23 7 0.18 (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG21 7 0.18 (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG22 7 0.18 (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG23 7 0.18 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG21 7 0.18 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG22 7 0.18 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG22 7 0.18 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG22 7 0.18 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG23 7 0.18 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG23 7 0.18 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG23 10 0.18 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG22 10 0.18 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG23 10 0.18 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG23 10 0.18 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG23 12 0.18 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG23 12 0.18 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG23 12 0.18 (1,453) 1:A:118:TYR:H 1:A:121:LEU:HD21 18 0.18 (1,453) 1:A:118:TYR:H 1:A:121:LEU:HD21 18 0.18 (1,453) 1:A:118:TYR:H 1:A:121:LEU:HD22 18 0.18 (1,453) 1:A:118:TYR:H 1:A:121:LEU:HD23 18 0.18 (1,453) 1:A:118:TYR:H 1:A:121:LEU:HD23 18 0.18 (1,361) 1:A:72:GLN:H 1:A:78:ILE:HD13 15 0.18 (1,361) 1:A:72:GLN:H 1:A:78:ILE:HD13 15 0.18 (1,361) 1:A:72:GLN:H 1:A:78:ILE:HD13 15 0.18 (1,361) 1:A:72:GLN:H 1:A:76:VAL:HG11 7 0.18 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG13 7 0.18 (1,308) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:165:TR:HE1 9 0.18 (1,296) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:149:LEU:H 3 0.18 (1,296) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:149:LEU:H 10 0.18 (1,296) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:149:LEU:H 10 0.18 (1,296) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:149:LEU:H 10 0.18 (1,296) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:149:LEU:H 10 0.18 (1,296) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:149:LEU:H 10 0.18 (1,296) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:149:LEU:H 10 0.18 (1,259) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:149:LEU:H 10 0.18 (1,259) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:149:LEU:H 10 0.18 (1,259) 1 | (1,563) | 1:A:50:LEU:HD11 | 1:A:54:VAL:HG21 | 7 | 0.18 |
| (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG21 7 0.18 (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG22 7 0.18 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG21 7 0.18 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG21 7 0.18 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG22 7 0.18 (1,563) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG22 10 0.18 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG23 10 0.18 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG21 12 0.18 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG22 12 0.18 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG21 12 0.18 (1,507) 1:A:13:HT2:TYR:H 1:A:121:LEU | (1,563) | 1:A:50:LEU:HD11 | 1:A:54:VAL:HG22 | 7 | 0.18 |
| (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG22 7 0.18 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG23 7 0.18 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG21 7 0.18 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG22 7 0.18 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG22 7 0.18 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG23 7 0.18 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG21 10 0.18 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG22 10 0.18 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG23 10 0.18 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG23 10 0.18 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG23 10 0.18 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG23 12 0.18 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG22 12 0.18 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG23 12 0.18 (1,453) 1:A:118:TYR:H 1:A:121:LEU:HD21 18 0.18 (1,453) 1:A:118:TYR:H 1:A:121:LEU:HD22 18 0.18 (1,453) 1:A:118:TYR:H 1:A:121:LEU:HD22 18 0.18 (1,453) 1:A:118:TYR:H 1:A:121:LEU:HD23 18 0.18 (1,361) 1:A:72:GLN:H 1:A:78:ILE:HD11 15 0.18 (1,361) 1:A:72:GLN:H 1:A:78:ILE:HD11 15 0.18 (1,361) 1:A:72:GLN:H 1:A:78:ILE:HD13 15 0.18 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG11 7 0.18 (1,308) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:149:LEU:H 3 0.18 (1,296) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:149:LEU:H 3 0.18 (1,296) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:149:LEU:H 3 0.18 (1,296) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:149:LEU:H 3 0.18 (1,296) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:149:LEU:H 10 0.18 (1,296) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:149:LEU:H 10 0.18 (1,296) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:149:LEU:H 10 0.18 (1,296) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:149:LEU:H 10 0.18 (1,296) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:149:LEU:H 10 0.18 (1,296) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:149:LEU:H 10 0.18 (1,259) 1:A:71:ALA:H 1:A:78:ILE:HD12 4 0.18 (1,259) 1:A:71:ALA:H 1:A:78:ILE:HD11 4 0.18 (1,259) 1:A:71:ALA:H 1:A:78:ILE:HD11 4 0.18 (1,259) 1:A:17:ALA:H 1:A:78:ILE:HD12 4 0.18 (1,259) 1:A:17:ALA:H 1:A:78:ILE:HD13 4 0.18 (1,217) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:195:LEU:H 9 0.18 | (1,563) | 1:A:50:LEU:HD11 | 1:A:54:VAL:HG23 | 7 | 0.18 |
| (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG23 7 0.18 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG21 7 0.18 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG22 7 0.18 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG22 7 0.18 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG23 7 0.18 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG21 10 0.18 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG22 10 0.18 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG22 10 0.18 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG23 10 0.18 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG21 12 0.18 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG22 12 0.18 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG22 12 0.18 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG23 12 0.18 (1,453) 1:A:118:TYR:H 1:A:121:LEU:HD21 18 0.18 (1,453) 1:A:118:TYR:H 1:A:121:LEU:HD21 18 0.18 (1,453) 1:A:118:TYR:H 1:A:121:LEU:HD22 18 0.18 (1,453) 1:A:118:TYR:H 1:A:121:LEU:HD23 18 0.18 (1,361) 1:A:72:GLN:H 1:A:78:ILE:HD11 15 0.18 (1,361) 1:A:72:GLN:H 1:A:78:ILE:HD11 15 0.18 (1,361) 1:A:72:GLN:H 1:A:78:ILE:HD11 15 0.18 (1,361) 1:A:72:GLN:H 1:A:78:ILE:HD12 15 0.18 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG12 7 0.18 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG12 7 0.18 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG13 7 0.18 (1,308) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:149:LEU:H 3 0.18 (1,296) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:149:LEU:H 3 0.18 (1,296) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:149:LEU:H 3 0.18 (1,296) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:149:LEU:H 10 0.18 (1,296) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:149:LEU:H 10 0.18 (1,296) 1:A:13 | (1,563) | 1:A:50:LEU:HD12 | 1:A:54:VAL:HG21 | 7 | 0.18 |
| (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG21 7 0.18 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG22 7 0.18 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG23 7 0.18 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG21 10 0.18 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG21 10 0.18 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG22 10 0.18 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG23 10 0.18 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG23 10 0.18 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG21 12 0.18 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG22 12 0.18 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG23 12 0.18 (1,453) 1:A:118:TYR:H 1:A:121:LEU:HD21 18 0.18 (1,453) 1:A:118:TYR:H 1:A:121:LEU:HD21 18 0.18 (1,453) 1:A:118:TYR:H 1:A:121:LEU:HD22 18 0.18 (1,453) 1:A:118:TYR:H 1:A:121:LEU:HD23 18 0.18 (1,361) 1:A:72:GLN:H 1:A:78:ILE:HD11 15 0.18 (1,361) 1:A:72:GLN:H 1:A:78:ILE:HD11 15 0.18 (1,361) 1:A:72:GLN:H 1:A:78:ILE:HD11 15 0.18 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG11 7 0.18 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG11 7 0.18 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG13 7 0.18 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG13 7 0.18 (1,308) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:149:LEU:H 3 0.18 (1,296) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:149:LEU:H 3 0.18 (1,296) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:149:LEU:H 3 0.18 (1,296) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:149:LEU:H 3 0.18 (1,296) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:149:LEU:H 10 0.18 (1,296) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:149:LEU:H 10 0.18 (1,296) 1:A:137:LEU: | (1,563) | 1:A:50:LEU:HD12 | 1:A:54:VAL:HG22 | 7 | 0.18 |
| (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG22 7 0.18 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG23 7 0.18 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG21 10 0.18 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG22 10 0.18 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG23 10 0.18 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG21 12 0.18 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG22 12 0.18 (1,453) 1:A:18:TYR:H 1:A:121:LEU:HD21 18 0.18 (1,453) 1:A:18:TYR:H 1:A:121:LEU:HD22 18 0.18 (1,361) 1:A:72:GLN:H 1:A:78:LE:HD11 | (1,563) | 1:A:50:LEU:HD12 | 1:A:54:VAL:HG23 | 7 | 0.18 |
| (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG23 7 0.18 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG21 10 0.18 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG22 10 0.18 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG23 10 0.18 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG21 12 0.18 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG22 12 0.18 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG23 12 0.18 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG23 12 0.18 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG23 12 0.18 (1,453) 1:A:118:TYR:H 1:A:121:LEU:HD21 18 0.18 (1,453) 1:A:118:TYR:H 1:A:121:LEU:HD22 18 0.18 (1,453) 1:A:138:TYR:H 1:A:72:GLV:H 1:A:78:ILE:HD11 15 0.18 (1,453) 1:A:137:ZEU:H 1:A:76:VAL:HG11 7 0.18 0.18 (1,361) 1: | (1,563) | 1:A:50:LEU:HD13 | 1:A:54:VAL:HG21 | 7 | 0.18 |
| (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG23 7 0.18 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG21 10 0.18 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG22 10 0.18 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG23 10 0.18 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG21 12 0.18 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG22 12 0.18 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG23 12 0.18 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG23 12 0.18 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG23 12 0.18 (1,453) 1:A:18:TYR:H 1:A:121:LEU:HD21 18 0.18 (1,453) 1:A:118:TYR:H 1:A:121:LEU:HD22 18 0.18 (1,453) 1:A:13:18:TYR:H 1:A:121:LEU:HD23 18 0.18 (1,453) 1:A:13:18:TYR:H 1:A:78:ILE:HD11 15 0.18 (1,361) 1:A:72:GLN:H 1:A:78:ILE:HD13 <td>(1,563)</td> <td>1:A:50:LEU:HD13</td> <td>1:A:54:VAL:HG22</td> <td>7</td> <td>0.18</td> | (1,563) | 1:A:50:LEU:HD13 | 1:A:54:VAL:HG22 | 7 | 0.18 |
| (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG21 10 0.18 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG22 10 0.18 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG23 10 0.18 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG21 12 0.18 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG22 12 0.18 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG23 12 0.18 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG23 12 0.18 (1,453) 1:A:118:TYR:H 1:A:121:LEU:HD21 18 0.18 (1,453) 1:A:118:TYR:H 1:A:121:LEU:HD22 18 0.18 (1,453) 1:A:118:TYR:H 1:A:121:LEU:HD23 18 0.18 (1,453) 1:A:118:TYR:H 1:A:121:LEU:HD23 18 0.18 (1,453) 1:A:118:TYR:H 1:A:121:LEU:HD23 18 0.18 (1,453) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:137:LEU:HD13 15 0.18 (1,361) 1:A:149:LEU:H 15 | | 1:A:50:LEU:HD13 | 1:A:54:VAL:HG23 | 7 | 0.18 |
| (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG23 10 0.18 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG21 12 0.18 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG22 12 0.18 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG23 12 0.18 (1,453) 1:A:118:TYR:H 1:A:121:LEU:HD21 18 0.18 (1,453) 1:A:118:TYR:H 1:A:121:LEU:HD22 18 0.18 (1,453) 1:A:118:TYR:H 1:A:121:LEU:HD23 18 0.18 (1,453) 1:A:118:TYR:H 1:A:72:I:LEU:HD23 18 0.18 (1,453) 1:A:118:TYR:H 1:A:72:I:LEU:HD23 18 0.18 (1,361) 1:A:72:GLN:H 1:A:78:II:LE:HD11 15 0.18 (1,361) 1:A:72:GLN:H 1:A:76:VAL:HG11 7 0.18 (1,361) 1:A:72:GLN:H 1:A:76:VAL:HG11 7 0.18 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG12 7 0.18 (1,311) 1:A:159:GLY:H 1:A:165:TRP:HE1 <td></td> <td>1:A:37:ALA:H</td> <td>1:A:57:VAL:HG21</td> <td>10</td> <td>0.18</td> | | 1:A:37:ALA:H | 1:A:57:VAL:HG21 | 10 | 0.18 |
| (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG23 10 0.18 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG21 12 0.18 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG22 12 0.18 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG23 12 0.18 (1,453) 1:A:118:TYR:H 1:A:121:LEU:HD21 18 0.18 (1,453) 1:A:118:TYR:H 1:A:121:LEU:HD22 18 0.18 (1,453) 1:A:118:TYR:H 1:A:121:LEU:HD23 18 0.18 (1,453) 1:A:118:TYR:H 1:A:121:LEU:HD23 18 0.18 (1,453) 1:A:118:TYR:H 1:A:121:LEU:HD23 18 0.18 (1,361) 1:A:72:GLN:H 1:A:78:ILE:HD11 15 0.18 (1,361) 1:A:72:GLN:H 1:A:76:VAL:HG11 7 0.18 (1,361) 1:A:72:GLN:H 1:A:76:VAL:HG11 7 0.18 (1,361) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG11 7 0.18 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG12 | | 1:A:37:ALA:H | 1:A:57:VAL:HG22 | 10 | 0.18 |
| (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG21 12 0.18 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG22 12 0.18 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG23 12 0.18 (1,453) 1:A:118:TYR:H 1:A:121:LEU:HD21 18 0.18 (1,453) 1:A:118:TYR:H 1:A:121:LEU:HD22 18 0.18 (1,453) 1:A:718:TYR:H 1:A:121:LEU:HD23 18 0.18 (1,453) 1:A:72:GLN:H 1:A:78:ILE:HD13 15 0.18 (1,361) 1:A:72:GLN:H 1:A:78:ILE:HD12 15 0.18 (1,361) 1:A:72:GLN:H 1:A:76:VAL:HG11 7 0.18 (1,361) 1:A:72:GLN:H 1:A:76:VAL:HG11 7 0.18 (1,361) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG12 7 0.18 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG12 7 0.18 (1,311) 1:A:159:GLU:H 1:A:165:TRP:HE1 9 0.18 (1,296) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:149:LEU:H | / | 1:A:37:ALA:H | 1:A:57:VAL:HG23 | 10 | 0.18 |
| (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG22 12 0.18 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG23 12 0.18 (1,453) 1:A:118:TYR:H 1:A:121:LEU:HD21 18 0.18 (1,453) 1:A:118:TYR:H 1:A:121:LEU:HD22 18 0.18 (1,453) 1:A:118:TYR:H 1:A:121:LEU:HD23 18 0.18 (1,453) 1:A:18:TYR:H 1:A:72:ILE:HD12 18 0.18 (1,453) 1:A:18:TYR:H 1:A:72:ILE:HD12 18 0.18 (1,453) 1:A:18:TYR:H 1:A:72:ILE:HD13 18 0.18 (1,361) 1:A:72:GLN:H 1:A:78:ILE:HD12 15 0.18 (1,361) 1:A:72:GLN:H 1:A:78:ILE:HD13 15 0.18 (1,361) 1:A:72:GLN:H 1:A:76:VAL:HG11 7 0.18 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG11 7 0.18 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG13 7 0.18 (1,308) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:149:LEU:H | · · / | 1:A:37:ALA:H | 1:A:57:VAL:HG21 | 12 | 0.18 |
| (1,453) 1:A:118:TYR:H 1:A:121:LEU:HD21 18 0.18 (1,453) 1:A:118:TYR:H 1:A:121:LEU:HD22 18 0.18 (1,453) 1:A:118:TYR:H 1:A:121:LEU:HD23 18 0.18 (1,361) 1:A:72:GLN:H 1:A:78:ILE:HD11 15 0.18 (1,361) 1:A:72:GLN:H 1:A:78:ILE:HD12 15 0.18 (1,361) 1:A:72:GLN:H 1:A:78:ILE:HD13 15 0.18 (1,361) 1:A:72:GLN:H 1:A:76:VAL:HG11 7 0.18 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG12 7 0.18 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG13 7 0.18 (1,308) 1:A:159:GLU:H 1:A:165:TRP:HE1 9 0.18 (1,296) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:149:LEU:H 3 0.18 (1,296) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:149:LEU:H 3 0.18 (1,296) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:149:LEU:H 10 0.18 (1,296) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:149:LEU:H | , | 1:A:37:ALA:H | 1:A:57:VAL:HG22 | 12 | 0.18 |
| (1,453) 1:A:118:TYR:H 1:A:121:LEU:HD21 18 0.18 (1,453) 1:A:118:TYR:H 1:A:121:LEU:HD22 18 0.18 (1,453) 1:A:118:TYR:H 1:A:121:LEU:HD23 18 0.18 (1,361) 1:A:72:GLN:H 1:A:78:ILE:HD11 15 0.18 (1,361) 1:A:72:GLN:H 1:A:78:ILE:HD12 15 0.18 (1,361) 1:A:72:GLN:H 1:A:78:ILE:HD13 15 0.18 (1,361) 1:A:72:GLN:H 1:A:76:VAL:HG11 7 0.18 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG12 7 0.18 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG13 7 0.18 (1,311) 1:A:159:GLY:H 1:A:165:TRP:HE1 9 0.18 (1,308) 1:A:159:GLU:H 1:A:149:LEU:H 3 0.18 (1,296) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:149:LEU:H 3 0.18 (1,296) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:149:LEU:H 3 0.18 (1,296) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:149:LEU:H | (1,507) | 1:A:37:ALA:H | 1:A:57:VAL:HG23 | 12 | 0.18 |
| (1,453) 1:A:118:TYR:H 1:A:121:LEU:HD23 18 0.18 (1,361) 1:A:72:GLN:H 1:A:78:ILE:HD11 15 0.18 (1,361) 1:A:72:GLN:H 1:A:78:ILE:HD12 15 0.18 (1,361) 1:A:72:GLN:H 1:A:78:ILE:HD13 15 0.18 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG11 7 0.18 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG12 7 0.18 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG13 7 0.18 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG13 7 0.18 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG13 7 0.18 (1,308) 1:A:159:GLU:H 1:A:165:TRP:HE1 9 0.18 (1,296) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:149:LEU:H 3 0.18 (1,296) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:149:LEU:H 3 0.18 (1,296) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:149:LEU:H 10 0.18 (1,296) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:149:LEU:H | (1,453) | 1:A:118:TYR:H | 1:A:121:LEU:HD21 | 18 | 0.18 |
| (1,361) 1:A:72:GLN:H 1:A:78:ILE:HD11 15 0.18 (1,361) 1:A:72:GLN:H 1:A:78:ILE:HD12 15 0.18 (1,361) 1:A:72:GLN:H 1:A:78:ILE:HD13 15 0.18 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG11 7 0.18 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG12 7 0.18 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG13 7 0.18 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG13 7 0.18 (1,308) 1:A:159:GLU:H 1:A:165:TRP:HE1 9 0.18 (1,296) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:149:LEU:H 3 0.18 (1,296) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:149:LEU:H 3 0.18 (1,296) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:149:LEU:H 10 0.18 (1,296) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:149:LEU:H 10 0.18 (1,296) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:149:LEU:H 10 0.18 (1,296) 1:A:71:ALA:H 1:A:78:ILE:HD11 | (1,453) | 1:A:118:TYR:H | 1:A:121:LEU:HD22 | 18 | 0.18 |
| (1,361) 1:A:72:GLN:H 1:A:78:ILE:HD12 15 0.18 (1,361) 1:A:72:GLN:H 1:A:78:ILE:HD13 15 0.18 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG11 7 0.18 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG12 7 0.18 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG13 7 0.18 (1,308) 1:A:159:GLU:H 1:A:165:TRP:HE1 9 0.18 (1,296) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:149:LEU:H 3 0.18 (1,296) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:149:LEU:H 3 0.18 (1,296) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:149:LEU:H 10 0.18 (1,296) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:149:LEU:H 10 0.18 (1,296) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:149:LEU:H 10 0.18 (1,296) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:149:LEU:H 10 0.18 (1,259) 1:A:71:ALA:H 1:A:78:ILE:HD11 4 0.18 (1,259) 1:A:71:ALA:H 1:A:78:ILE:HD13 4 0.18 (1,217) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:195:L | (1,453) | 1:A:118:TYR:H | 1:A:121:LEU:HD23 | 18 | 0.18 |
| (1,361) 1:A:72:GLN:H 1:A:78:ILE:HD13 15 0.18 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG11 7 0.18 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG12 7 0.18 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG13 7 0.18 (1,308) 1:A:159:GLU:H 1:A:165:TRP:HE1 9 0.18 (1,296) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:149:LEU:H 3 0.18 (1,296) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:149:LEU:H 3 0.18 (1,296) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:149:LEU:H 10 0.18 (1,296) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:149:LEU:H 10 0.18 (1,296) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:149:LEU:H 10 0.18 (1,296) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:78:ILE:HD11 4 0.18 (1,259) 1:A:71:ALA:H 1:A:78:ILE:HD12 4 0.18 (1,259) 1:A:71:ALA:H 1:A:78:ILE:HD13 4 0.18 (1,217) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:195:LEU:H | (1,361) | 1:A:72:GLN:H | 1:A:78:ILE:HD11 | 15 | 0.18 |
| (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG11 7 0.18 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG12 7 0.18 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG13 7 0.18 (1,308) 1:A:159:GLU:H 1:A:165:TRP:HE1 9 0.18 (1,296) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:149:LEU:H 3 0.18 (1,296) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:149:LEU:H 3 0.18 (1,296) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:149:LEU:H 10 0.18 (1,296) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:149:LEU:H 10 0.18 (1,296) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:149:LEU:H 10 0.18 (1,296) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:149:LEU:H 10 0.18 (1,296) 1:A:137:ALA:H 1:A:78:ILE:HD11 4 0.18 (1,259) 1:A:71:ALA:H 1:A:78:ILE:HD12 4 0.18 (1,259) 1:A:71:ALA:H 1:A:78:ILE:HD13 4 0.18 (1,217) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:195:LEU:H | (1,361) | 1:A:72:GLN:H | 1:A:78:ILE:HD12 | 15 | 0.18 |
| (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG12 7 0.18 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG13 7 0.18 (1,308) 1:A:159:GLU:H 1:A:165:TRP:HE1 9 0.18 (1,296) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:149:LEU:H 3 0.18 (1,296) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:149:LEU:H 3 0.18 (1,296) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:149:LEU:H 10 0.18 (1,296) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:149:LEU:H 10 0.18 (1,296) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:149:LEU:H 10 0.18 (1,296) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:149:LEU:H 10 0.18 (1,296) 1:A:17:ALA:H 1:A:78:ILE:HD11 4 0.18 (1,259) 1:A:71:ALA:H 1:A:78:ILE:HD12 4 0.18 (1,259) 1:A:71:ALA:H 1:A:78:ILE:HD13 4 0.18 (1,217) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:195:LEU:H 9 0.18 (1,217) 1:A:163:LEU:HD12 1:A:195:LEU:H 9 0.18 | (1,361) | 1:A:72:GLN:H | 1:A:78:ILE:HD13 | 15 | 0.18 |
| (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG13 7 0.18 (1,308) 1:A:159:GLU:H 1:A:165:TRP:HE1 9 0.18 (1,296) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:149:LEU:H 3 0.18 (1,296) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:149:LEU:H 3 0.18 (1,296) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:149:LEU:H 10 0.18 (1,296) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:149:LEU:H 10 0.18 (1,296) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:149:LEU:H 10 0.18 (1,296) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:149:LEU:H 10 0.18 (1,259) 1:A:71:ALA:H 1:A:78:ILE:HD11 4 0.18 (1,259) 1:A:71:ALA:H 1:A:78:ILE:HD12 4 0.18 (1,259) 1:A:71:ALA:H 1:A:78:ILE:HD13 4 0.18 (1,217) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:195:LEU:H 9 0.18 (1,217) 1:A:163:LEU:HD12 1:A:195:LEU:H 9 0.18 | (1,311) | 1:A:51:GLY:H | 1:A:76:VAL:HG11 | 7 | 0.18 |
| (1,308) 1:A:159:GLU:H 1:A:165:TRP:HE1 9 0.18 (1,296) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:149:LEU:H 3 0.18 (1,296) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:149:LEU:H 3 0.18 (1,296) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:149:LEU:H 10 0.18 (1,296) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:149:LEU:H 10 0.18 (1,296) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:149:LEU:H 10 0.18 (1,296) 1:A:71:ALA:H 1:A:78:ILE:HD11 4 0.18 (1,259) 1:A:71:ALA:H 1:A:78:ILE:HD12 4 0.18 (1,259) 1:A:71:ALA:H 1:A:78:ILE:HD13 4 0.18 (1,259) 1:A:71:ALA:H 1:A:78:ILE:HD13 4 0.18 (1,217) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:195:LEU:H 9 0.18 (1,217) 1:A:163:LEU:HD12 1:A:195:LEU:H 9 0.18 | (1,311) | 1:A:51:GLY:H | 1:A:76:VAL:HG12 | 7 | 0.18 |
| (1,296) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:149:LEU:H 3 0.18 (1,296) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:149:LEU:H 3 0.18 (1,296) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:149:LEU:H 3 0.18 (1,296) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:149:LEU:H 10 0.18 (1,296) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:149:LEU:H 10 0.18 (1,296) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:149:LEU:H 10 0.18 (1,296) 1:A:71:ALA:H 1:A:78:ILE:HD11 4 0.18 (1,259) 1:A:71:ALA:H 1:A:78:ILE:HD12 4 0.18 (1,259) 1:A:71:ALA:H 1:A:78:ILE:HD13 4 0.18 (1,217) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:195:LEU:H 9 0.18 (1,217) 1:A:163:LEU:HD12 1:A:195:LEU:H 9 0.18 | (1,311) | 1:A:51:GLY:H | 1:A:76:VAL:HG13 | 7 | 0.18 |
| (1,296) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:149:LEU:H 3 0.18 (1,296) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:149:LEU:H 3 0.18 (1,296) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:149:LEU:H 10 0.18 (1,296) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:149:LEU:H 10 0.18 (1,296) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:149:LEU:H 10 0.18 (1,296) 1:A:71:ALA:H 1:A:78:ILE:HD11 4 0.18 (1,259) 1:A:71:ALA:H 1:A:78:ILE:HD12 4 0.18 (1,259) 1:A:71:ALA:H 1:A:78:ILE:HD13 4 0.18 (1,217) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:195:LEU:H 9 0.18 (1,217) 1:A:163:LEU:HD12 1:A:195:LEU:H 9 0.18 | (1,308) | 1:A:159:GLU:H | 1:A:165:TRP:HE1 | 9 | 0.18 |
| (1,296) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:149:LEU:H 3 0.18 (1,296) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:149:LEU:H 10 0.18 (1,296) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:149:LEU:H 10 0.18 (1,296) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:149:LEU:H 10 0.18 (1,296) 1:A:71:ALA:H 1:A:78:ILE:HD11 4 0.18 (1,259) 1:A:71:ALA:H 1:A:78:ILE:HD12 4 0.18 (1,259) 1:A:71:ALA:H 1:A:78:ILE:HD13 4 0.18 (1,217) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:195:LEU:H 9 0.18 (1,217) 1:A:163:LEU:HD12 1:A:195:LEU:H 9 0.18 | (1,296) | 1:A:137:LEU:HD11 | 1:A:149:LEU:H | 3 | 0.18 |
| (1,296) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:149:LEU:H 3 0.18 (1,296) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:149:LEU:H 10 0.18 (1,296) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:149:LEU:H 10 0.18 (1,296) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:149:LEU:H 10 0.18 (1,259) 1:A:71:ALA:H 1:A:78:ILE:HD11 4 0.18 (1,259) 1:A:71:ALA:H 1:A:78:ILE:HD12 4 0.18 (1,259) 1:A:71:ALA:H 1:A:78:ILE:HD13 4 0.18 (1,217) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:195:LEU:H 9 0.18 (1,217) 1:A:163:LEU:HD12 1:A:195:LEU:H 9 0.18 | (1,296) | 1:A:137:LEU:HD12 | 1:A:149:LEU:H | 3 | 0.18 |
| (1,296) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:149:LEU:H 10 0.18 (1,296) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:149:LEU:H 10 0.18 (1,296) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:149:LEU:H 10 0.18 (1,259) 1:A:71:ALA:H 1:A:78:ILE:HD11 4 0.18 (1,259) 1:A:71:ALA:H 1:A:78:ILE:HD12 4 0.18 (1,259) 1:A:71:ALA:H 1:A:78:ILE:HD13 4 0.18 (1,217) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:195:LEU:H 9 0.18 (1,217) 1:A:163:LEU:HD12 1:A:195:LEU:H 9 0.18 | , , | 1:A:137:LEU:HD13 | 1:A:149:LEU:H | 3 | 0.18 |
| (1,296) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:149:LEU:H 10 0.18 (1,296) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:149:LEU:H 10 0.18 (1,259) 1:A:71:ALA:H 1:A:78:ILE:HD11 4 0.18 (1,259) 1:A:71:ALA:H 1:A:78:ILE:HD12 4 0.18 (1,259) 1:A:71:ALA:H 1:A:78:ILE:HD13 4 0.18 (1,217) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:195:LEU:H 9 0.18 (1,217) 1:A:163:LEU:HD12 1:A:195:LEU:H 9 0.18 | | 1:A:137:LEU:HD11 | 1:A:149:LEU:H | 10 | 0.18 |
| (1,296) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:149:LEU:H 10 0.18 (1,259) 1:A:71:ALA:H 1:A:78:ILE:HD11 4 0.18 (1,259) 1:A:71:ALA:H 1:A:78:ILE:HD12 4 0.18 (1,259) 1:A:71:ALA:H 1:A:78:ILE:HD13 4 0.18 (1,217) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:195:LEU:H 9 0.18 (1,217) 1:A:163:LEU:HD12 1:A:195:LEU:H 9 0.18 | | 1:A:137:LEU:HD12 | 1:A:149:LEU:H | 10 | 0.18 |
| (1,259) 1:A:71:ALA:H 1:A:78:ILE:HD11 4 0.18 (1,259) 1:A:71:ALA:H 1:A:78:ILE:HD12 4 0.18 (1,259) 1:A:71:ALA:H 1:A:78:ILE:HD13 4 0.18 (1,217) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:195:LEU:H 9 0.18 (1,217) 1:A:163:LEU:HD12 1:A:195:LEU:H 9 0.18 | | 1:A:137:LEU:HD13 | 1:A:149:LEU:H | 10 | 0.18 |
| (1,259) 1:A:71:ALA:H 1:A:78:ILE:HD12 4 0.18 (1,259) 1:A:71:ALA:H 1:A:78:ILE:HD13 4 0.18 (1,217) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:195:LEU:H 9 0.18 (1,217) 1:A:163:LEU:HD12 1:A:195:LEU:H 9 0.18 | | 1:A:71:ALA:H | 1:A:78:ILE:HD11 | 4 | 0.18 |
| (1,259) 1:A:71:ALA:H 1:A:78:ILE:HD13 4 0.18 (1,217) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:195:LEU:H 9 0.18 (1,217) 1:A:163:LEU:HD12 1:A:195:LEU:H 9 0.18 | | 1:A:71:ALA:H | 1:A:78:ILE:HD12 | 4 | 0.18 |
| (1,217) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:195:LEU:H 9 0.18 (1,217) 1:A:163:LEU:HD12 1:A:195:LEU:H 9 0.18 | | 1:A:71:ALA:H | 1:A:78:ILE:HD13 | 4 | 0.18 |
| (1,217) 1:A:163:LEU:HD12 1:A:195:LEU:H 9 0.18 | | 1:A:163:LEU:HD11 | 1:A:195:LEU:H | 9 | 0.18 |
| | , | 1:A:163:LEU:HD12 | 1:A:195:LEU:H | 9 | 0.18 |
| | (1,217) | 1:A:163:LEU:HD13 | 1:A:195:LEU:H | 9 | 0.18 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,217) | 1:A:163:LEU:HD11 | 1:A:195:LEU:H | 14 | 0.18 |
| (1,217) | 1:A:163:LEU:HD12 | 1:A:195:LEU:H | 14 | 0.18 |
| (1,217) | 1:A:163:LEU:HD13 | 1:A:195:LEU:H | 14 | 0.18 |
| (1,1113) | 1:A:127:PHE:H | 1:A:192:GLY:O | 16 | 0.18 |
| (1,1099) | 1:A:124:GLY:O | 1:A:98:ILE:H | 10 | 0.18 |
| (1,1084) | 1:A:154:GLU:O | 1:A:158:SER:H | 12 | 0.18 |
| (1,1084) | 1:A:154:GLU:O | 1:A:158:SER:H | 20 | 0.18 |
| (1,1070) | 1:A:108:SER:O | 1:A:112:GLN:H | 10 | 0.18 |
| (1,1070) | 1:A:108:SER:O | 1:A:112:GLN:H | 17 | 0.18 |
| (1,1026) | 1:A:95:TRP:HE1 | 1:A:91:VAL:H | 12 | 0.18 |
| (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:85:LEU:HD21 | 4 | 0.18 |
| (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:85:LEU:HD22 | 4 | 0.18 |
| (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:85:LEU:HD23 | 4 | 0.18 |
| (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:85:LEU:HD21 | 4 | 0.18 |
| (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:85:LEU:HD22 | 4 | 0.18 |
| (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:85:LEU:HD23 | 4 | 0.18 |
| (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:85:LEU:HD21 | 4 | 0.18 |
| (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:85:LEU:HD22 | 4 | 0.18 |
| (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:85:LEU:HD23 | 4 | 0.18 |
| (1,1003) | 1:A:59:GLN:H | 1:A:37:ALA:H | 6 | 0.18 |
| (1,1003) | 1:A:59:GLN:H | 1:A:37:ALA:H | 7 | 0.18 |
| (1,994) | 1:A:79:THR:H | 1:A:54:VAL:H | 19 | 0.17 |
| (1,988) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:H | 12 | 0.17 |
| (1,988) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:H | 12 | 0.17 |
| (1,988) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:H | 12 | 0.17 |
| (1,985) | 1:A:129:LEU:HD21 | 1:A:130:GLU:H | 16 | 0.17 |
| (1,985) | 1:A:129:LEU:HD22 | 1:A:130:GLU:H | 16 | 0.17 |
| (1,985) | 1:A:129:LEU:HD23 | 1:A:130:GLU:H | 16 | 0.17 |
| (1,936) | 1:A:153:LEU:HD21 | 1:A:157:GLN:H | 20 | 0.17 |
| (1,936) | 1:A:153:LEU:HD22 | 1:A:157:GLN:H | 20 | 0.17 |
| (1,936) | 1:A:153:LEU:HD23 | 1:A:157:GLN:H | 20 | 0.17 |
| (1,896) | 1:A:166:LEU:HD11 | 1:A:193:GLN:H | 6 | 0.17 |
| (1,896) | 1:A:166:LEU:HD12 | 1:A:193:GLN:H | 6 | 0.17 |
| (1,896) | 1:A:166:LEU:HD13 | 1:A:193:GLN:H | 6 | 0.17 |
| (1,885) | 1:A:50:LEU:H | 1:A:54:VAL:HG21 | 1 | 0.17 |
| (1,885) | 1:A:50:LEU:H | 1:A:54:VAL:HG22 | 1 | 0.17 |
| (1,885) | 1:A:50:LEU:H | 1:A:54:VAL:HG23 | 1 | 0.17 |
| (1,854) | 1:A:131:GLY:H | 1:A:153:LEU:HD21 | 18 | 0.17 |
| (1,854) | 1:A:131:GLY:H | 1:A:153:LEU:HD22 | 18 | 0.17 |
| (1,854) | 1:A:131:GLY:H | 1:A:153:LEU:HD23 | 18 | 0.17 |
| (1,848) | 1:A:91:VAL:HG21 | 1:A:95:TRP:HE1 | 11 | 0.17 |
| (1,848) | 1:A:91:VAL:HG22 | 1:A:95:TRP:HE1 | 11 | 0.17 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|----------------|
| (1,848) | 1:A:91:VAL:HG23 | 1:A:95:TRP:HE1 | 11 | 0.17 |
| (1,841) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:146:ASP:H | 3 | 0.17 |
| (1,841) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:146:ASP:H | 3 | 0.17 |
| (1,841) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:146:ASP:H | 3 | 0.17 |
| (1,841) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:146:ASP:H | 9 | 0.17 |
| (1,841) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:146:ASP:H | 9 | 0.17 |
| (1,841) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:146:ASP:H | 9 | 0.17 |
| (1,831) | 1:A:117:VAL:HG11 | 1:A:118:TYR:H | 8 | 0.17 |
| (1,831) | 1:A:117:VAL:HG12 | 1:A:118:TYR:H | 8 | 0.17 |
| (1,831) | 1:A:117:VAL:HG13 | 1:A:118:TYR:H | 8 | 0.17 |
| (1,810) | 1:A:136:GLN:H | 1:A:147:LEU:HD11 | 3 | 0.17 |
| (1,810) | 1:A:136:GLN:H | 1:A:147:LEU:HD12 | 3 | 0.17 |
| (1,810) | 1:A:136:GLN:H | 1:A:147:LEU:HD13 | 3 | 0.17 |
| (1,809) | 1:A:91:VAL:HG11 | 1:A:92:ALA:H | 12 | 0.17 |
| (1,809) | 1:A:91:VAL:HG12 | 1:A:92:ALA:H | 12 | 0.17 |
| (1,809) | 1:A:91:VAL:HG13 | 1:A:92:ALA:H | 12 | 0.17 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD11 | 4 | 0.17 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD12 | 4 | 0.17 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD13 | 4 | 0.17 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD11 | 4 | 0.17 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD12 | 4 | 0.17 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD13 | 4 | 0.17 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD11 | 4 | 0.17 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD12 | 4 | 0.17 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD13 | 4 | 0.17 |
| (1,572) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:28:ILE:HD11 | 18 | 0.17 |
| (1,572) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:28:ILE:HD12 | 18 | 0.17 |
| (1,572) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:28:ILE:HD13 | 18 | 0.17 |
| (1,572) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:28:ILE:HD11 | 18 | 0.17 |
| (1,572) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:28:ILE:HD12 | 18 | 0.17 |
| (1,572) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:28:ILE:HD13 | 18 | 0.17 |
| (1,572) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:28:ILE:HD11 | 18 | 0.17 |
| (1,572) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:28:ILE:HD12 | 18 | 0.17 |
| (1,572) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:28:ILE:HD13 | 18 | 0.17 |
| (1,570) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:145:LYS:H | 6 | 0.17 |
| (1,570) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:145:LYS:H | 6 | 0.17 |
| (1,570) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:145:LYS:H | 6 | 0.17 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD21 | 9 | 0.17 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD22 | 9 | 0.17 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD23 | 9 | 0.17 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD21 | 9 | 0.17 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD22 | 9 | 0.17 |
| (2,500) | | | | d on nort nage |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD23 | 9 | 0.17 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD21 | 9 | 0.17 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD22 | 9 | 0.17 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD23 | 9 | 0.17 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD11 | 1:A:54:VAL:HG21 | 11 | 0.17 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD11 | 1:A:54:VAL:HG22 | 11 | 0.17 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD11 | 1:A:54:VAL:HG23 | 11 | 0.17 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD12 | 1:A:54:VAL:HG21 | 11 | 0.17 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD12 | 1:A:54:VAL:HG22 | 11 | 0.17 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD12 | 1:A:54:VAL:HG23 | 11 | 0.17 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD13 | 1:A:54:VAL:HG21 | 11 | 0.17 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD13 | 1:A:54:VAL:HG22 | 11 | 0.17 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD13 | 1:A:54:VAL:HG23 | 11 | 0.17 |
| (1,453) | 1:A:118:TYR:H | 1:A:121:LEU:HD21 | 3 | 0.17 |
| (1,453) | 1:A:118:TYR:H | 1:A:121:LEU:HD22 | 3 | 0.17 |
| (1,453) | 1:A:118:TYR:H | 1:A:121:LEU:HD23 | 3 | 0.17 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD11 | 1:A:190:LEU:HD11 | 12 | 0.17 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD11 | 1:A:190:LEU:HD12 | 12 | 0.17 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD11 | 1:A:190:LEU:HD13 | 12 | 0.17 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD12 | 1:A:190:LEU:HD11 | 12 | 0.17 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD12 | 1:A:190:LEU:HD12 | 12 | 0.17 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD12 | 1:A:190:LEU:HD13 | 12 | 0.17 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD13 | 1:A:190:LEU:HD11 | 12 | 0.17 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD13 | 1:A:190:LEU:HD12 | 12 | 0.17 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD13 | 1:A:190:LEU:HD13 | 12 | 0.17 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD11 | 1:A:190:LEU:HD11 | 19 | 0.17 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD11 | 1:A:190:LEU:HD12 | 19 | 0.17 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD11 | 1:A:190:LEU:HD13 | 19 | 0.17 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD12 | 1:A:190:LEU:HD11 | 19 | 0.17 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD12 | 1:A:190:LEU:HD12 | 19 | 0.17 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD12 | 1:A:190:LEU:HD13 | 19 | 0.17 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD13 | 1:A:190:LEU:HD11 | 19 | 0.17 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD13 | 1:A:190:LEU:HD12 | 19 | 0.17 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD13 | 1:A:190:LEU:HD13 | 19 | 0.17 |
| (1,334) | 1:A:90:ILE:H | 1:A:91:VAL:HG21 | 17 | 0.17 |
| (1,334) | 1:A:90:ILE:H | 1:A:91:VAL:HG22 | 17 | 0.17 |
| (1,334) | 1:A:90:ILE:H | 1:A:91:VAL:HG23 | 17 | 0.17 |
| (1,296) | 1:A:137:LEU:HD11 | 1:A:149:LEU:H | 1 | 0.17 |
| (1,296) | 1:A:137:LEU:HD12 | 1:A:149:LEU:H | 1 | 0.17 |
| (1,296) | 1:A:137:LEU:HD13 | 1:A:149:LEU:H | 1 | 0.17 |
| (1,296) | 1:A:137:LEU:HD11 | 1:A:149:LEU:H | 6 | 0.17 |
| (1,296) | 1:A:137:LEU:HD12 | 1:A:149:LEU:H | 6 | 0.17 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,296) | 1:A:137:LEU:HD13 | 1:A:149:LEU:H | 6 | 0.17 |
| (1,295) | 1:A:153:LEU:H | 1:A:190:LEU:HD21 | 11 | 0.17 |
| (1,295) | 1:A:153:LEU:H | 1:A:190:LEU:HD22 | 11 | 0.17 |
| (1,295) | 1:A:153:LEU:H | 1:A:190:LEU:HD23 | 11 | 0.17 |
| (1,295) | 1:A:153:LEU:H | 1:A:190:LEU:HD21 | 12 | 0.17 |
| (1,295) | 1:A:153:LEU:H | 1:A:190:LEU:HD22 | 12 | 0.17 |
| (1,295) | 1:A:153:LEU:H | 1:A:190:LEU:HD23 | 12 | 0.17 |
| (1,266) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:118:TYR:H | 19 | 0.17 |
| (1,266) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:118:TYR:H | 19 | 0.17 |
| (1,266) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:118:TYR:H | 19 | 0.17 |
| (1,261) | 1:A:135:GLU:H | 1:A:147:LEU:HD21 | 8 | 0.17 |
| (1,261) | 1:A:135:GLU:H | 1:A:147:LEU:HD22 | 8 | 0.17 |
| (1,261) | 1:A:135:GLU:H | 1:A:147:LEU:HD23 | 8 | 0.17 |
| (1,206) | 1:A:60:SER:H | 1:A:62:VAL:HG21 | 5 | 0.17 |
| (1,206) | 1:A:60:SER:H | 1:A:62:VAL:HG22 | 5 | 0.17 |
| (1,206) | 1:A:60:SER:H | 1:A:62:VAL:HG23 | 5 | 0.17 |
| (1,201) | 1:A:157:GLN:H | 1:A:190:LEU:HD21 | 20 | 0.17 |
| (1,201) | 1:A:157:GLN:H | 1:A:190:LEU:HD22 | 20 | 0.17 |
| (1,201) | 1:A:157:GLN:H | 1:A:190:LEU:HD23 | 20 | 0.17 |
| (1,175) | 1:A:163:LEU:HD11 | 1:A:166:LEU:H | 4 | 0.17 |
| (1,175) | 1:A:163:LEU:HD12 | 1:A:166:LEU:H | 4 | 0.17 |
| (1,175) | 1:A:163:LEU:HD13 | 1:A:166:LEU:H | 4 | 0.17 |
| (1,152) | 1:A:37:ALA:H | 1:A:57:VAL:H | 15 | 0.17 |
| (1,1113) | 1:A:127:PHE:H | 1:A:192:GLY:O | 9 | 0.17 |
| (1,1099) | 1:A:124:GLY:O | 1:A:98:ILE:H | 5 | 0.17 |
| (1,1084) | 1:A:154:GLU:O | 1:A:158:SER:H | 7 | 0.17 |
| (1,1070) | 1:A:108:SER:O | 1:A:112:GLN:H | 11 | 0.17 |
| (1,994) | 1:A:79:THR:H | 1:A:54:VAL:H | 3 | 0.16 |
| (1,994) | 1:A:79:THR:H | 1:A:54:VAL:H | 12 | 0.16 |
| (1,988) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:H | 15 | 0.16 |
| (1,988) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:H | 15 | 0.16 |
| (1,988) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:H | 15 | 0.16 |
| (1,964) | 1:A:116:LYS:H | 1:A:117:VAL:HG21 | 3 | 0.16 |
| (1,964) | 1:A:116:LYS:H | 1:A:117:VAL:HG22 | 3 | 0.16 |
| (1,964) | 1:A:116:LYS:H | 1:A:117:VAL:HG23 | 3 | 0.16 |
| (1,954) | 1:A:70:LEU:H | 1:A:78:ILE:HD11 | 1 | 0.16 |
| (1,954) | 1:A:70:LEU:H | 1:A:78:ILE:HD12 | 1 | 0.16 |
| (1,954) | 1:A:70:LEU:H | 1:A:78:ILE:HD13 | 1 | 0.16 |
| (1,954) | 1:A:70:LEU:H | 1:A:78:ILE:HD11 | 19 | 0.16 |
| (1,954) | 1:A:70:LEU:H | 1:A:78:ILE:HD12 | 19 | 0.16 |
| (1,954) | 1:A:70:LEU:H | 1:A:78:ILE:HD13 | 19 | 0.16 |
| (1,897) | 1:A:163:LEU:HD21 | 1:A:193:GLN:H | 17 | 0.16 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,897) | 1:A:163:LEU:HD22 | 1:A:193:GLN:H | 17 | 0.16 |
| (1,897) | 1:A:163:LEU:HD23 | 1:A:193:GLN:H | 17 | 0.16 |
| (1,897) | 1:A:163:LEU:HD21 | 1:A:193:GLN:H | 19 | 0.16 |
| (1,897) | 1:A:163:LEU:HD22 | 1:A:193:GLN:H | 19 | 0.16 |
| (1,897) | 1:A:163:LEU:HD23 | 1:A:193:GLN:H | 19 | 0.16 |
| (1,891) | 1:A:125:GLY:H | 1:A:163:LEU:HD21 | 4 | 0.16 |
| (1,891) | 1:A:125:GLY:H | 1:A:163:LEU:HD22 | 4 | 0.16 |
| (1,891) | 1:A:125:GLY:H | 1:A:163:LEU:HD23 | 4 | 0.16 |
| (1,848) | 1:A:91:VAL:HG21 | 1:A:95:TRP:HE1 | 7 | 0.16 |
| (1,848) | 1:A:91:VAL:HG22 | 1:A:95:TRP:HE1 | 7 | 0.16 |
| (1,848) | 1:A:91:VAL:HG23 | 1:A:95:TRP:HE1 | 7 | 0.16 |
| (1,812) | 1:A:130:GLU:H | 1:A:156:LEU:HD11 | 4 | 0.16 |
| (1,812) | 1:A:130:GLU:H | 1:A:156:LEU:HD12 | 4 | 0.16 |
| (1,812) | 1:A:130:GLU:H | 1:A:156:LEU:HD13 | 4 | 0.16 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD11 | 1:A:78:ILE:HD11 | 20 | 0.16 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD11 | 1:A:78:ILE:HD12 | 20 | 0.16 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD11 | 1:A:78:ILE:HD13 | 20 | 0.16 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD12 | 1:A:78:ILE:HD11 | 20 | 0.16 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD12 | 1:A:78:ILE:HD12 | 20 | 0.16 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD12 | 1:A:78:ILE:HD13 | 20 | 0.16 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD13 | 1:A:78:ILE:HD11 | 20 | 0.16 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD13 | 1:A:78:ILE:HD12 | 20 | 0.16 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD13 | 1:A:78:ILE:HD13 | 20 | 0.16 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD21 | 1:A:150:LEU:HD21 | 15 | 0.16 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD21 | 1:A:150:LEU:HD22 | 15 | 0.16 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD21 | 1:A:150:LEU:HD23 | 15 | 0.16 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD22 | 1:A:150:LEU:HD21 | 15 | 0.16 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD22 | 1:A:150:LEU:HD22 | 15 | 0.16 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD22 | 1:A:150:LEU:HD23 | 15 | 0.16 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD23 | 1:A:150:LEU:HD21 | 15 | 0.16 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD23 | 1:A:150:LEU:HD22 | 15 | 0.16 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD23 | 1:A:150:LEU:HD23 | 15 | 0.16 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD21 | 1:A:150:LEU:HD21 | 19 | 0.16 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD21 | 1:A:150:LEU:HD22 | 19 | 0.16 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD21 | 1:A:150:LEU:HD23 | 19 | 0.16 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD22 | 1:A:150:LEU:HD21 | 19 | 0.16 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD22 | 1:A:150:LEU:HD22 | 19 | 0.16 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD22 | 1:A:150:LEU:HD23 | 19 | 0.16 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD23 | 1:A:150:LEU:HD21 | 19 | 0.16 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD23 | 1:A:150:LEU:HD22 | 19 | 0.16 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD23 | 1:A:150:LEU:HD23 | 19 | 0.16 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD11 | 5 | 0.16 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD12 | 5 | 0.16 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD13 | 5 | 0.16 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD11 | 5 | 0.16 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD12 | 5 | 0.16 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD13 | 5 | 0.16 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD11 | 5 | 0.16 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD12 | 5 | 0.16 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD13 | 5 | 0.16 |
| (1,596) | 1:A:164:ASN:H | 1:A:195:LEU:H | 9 | 0.16 |
| (1,570) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:145:LYS:H | 11 | 0.16 |
| (1,570) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:145:LYS:H | 11 | 0.16 |
| (1,570) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:145:LYS:H | 11 | 0.16 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD21 | 5 | 0.16 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD22 | 5 | 0.16 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD23 | 5 | 0.16 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD21 | 5 | 0.16 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD22 | 5 | 0.16 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD23 | 5 | 0.16 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD21 | 5 | 0.16 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD22 | 5 | 0.16 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD23 | 5 | 0.16 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD21 | 12 | 0.16 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD22 | 12 | 0.16 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD23 | 12 | 0.16 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD21 | 12 | 0.16 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD22 | 12 | 0.16 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD23 | 12 | 0.16 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD21 | 12 | 0.16 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD22 | 12 | 0.16 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD23 | 12 | 0.16 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD11 | 1:A:54:VAL:HG21 | 4 | 0.16 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD11 | 1:A:54:VAL:HG22 | 4 | 0.16 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD11 | 1:A:54:VAL:HG23 | 4 | 0.16 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD12 | 1:A:54:VAL:HG21 | 4 | 0.16 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD12 | 1:A:54:VAL:HG22 | 4 | 0.16 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD12 | 1:A:54:VAL:HG23 | 4 | 0.16 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD13 | 1:A:54:VAL:HG21 | 4 | 0.16 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD13 | 1:A:54:VAL:HG22 | 4 | 0.16 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD13 | 1:A:54:VAL:HG23 | 4 | 0.16 |
| (1,507) | 1:A:37:ALA:H | 1:A:57:VAL:HG21 | 6 | 0.16 |
| (1,507) | 1:A:37:ALA:H | 1:A:57:VAL:HG22 | 6 | 0.16 |
| (1,507) | 1:A:37:ALA:H | 1:A:57:VAL:HG23 | 6 | 0.16 |



Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD11 | 1:A:190:LEU:HD11 | 18 | 0.16 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD11 | 1:A:190:LEU:HD12 | 18 | 0.16 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD11 | 1:A:190:LEU:HD13 | 18 | 0.16 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD12 | 1:A:190:LEU:HD11 | 18 | 0.16 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD12 | 1:A:190:LEU:HD12 | 18 | 0.16 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD12 | 1:A:190:LEU:HD13 | 18 | 0.16 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD13 | 1:A:190:LEU:HD11 | 18 | 0.16 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD13 | 1:A:190:LEU:HD12 | 18 | 0.16 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD13 | 1:A:190:LEU:HD13 | 18 | 0.16 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG21 | 1:A:128:ILE:HD11 | 18 | 0.16 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG21 | 1:A:128:ILE:HD12 | 18 | 0.16 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG21 | 1:A:128:ILE:HD13 | 18 | 0.16 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG22 | 1:A:128:ILE:HD11 | 18 | 0.16 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG22 | 1:A:128:ILE:HD12 | 18 | 0.16 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG22 | 1:A:128:ILE:HD13 | 18 | 0.16 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG23 | 1:A:128:ILE:HD11 | 18 | 0.16 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG23 | 1:A:128:ILE:HD12 | 18 | 0.16 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG23 | 1:A:128:ILE:HD13 | 18 | 0.16 |
| (1,310) | 1:A:173:ARG:H | 1:A:187:LEU:HD11 | 19 | 0.16 |
| (1,310) | 1:A:173:ARG:H | 1:A:187:LEU:HD12 | 19 | 0.16 |
| (1,310) | 1:A:173:ARG:H | 1:A:187:LEU:HD13 | 19 | 0.16 |
| (1,301) | 1:A:104:HIS:H | 1:A:105:LEU:HD21 | 4 | 0.16 |
| (1,301) | 1:A:104:HIS:H | 1:A:105:LEU:HD22 | 4 | 0.16 |
| (1,301) | 1:A:104:HIS:H | 1:A:105:LEU:HD23 | 4 | 0.16 |
| (1,296) | 1:A:137:LEU:HD11 | 1:A:149:LEU:H | 4 | 0.16 |
| (1,296) | 1:A:137:LEU:HD12 | 1:A:149:LEU:H | 4 | 0.16 |
| (1,296) | 1:A:137:LEU:HD13 | 1:A:149:LEU:H | 4 | 0.16 |
| (1,296) | 1:A:137:LEU:HD11 | 1:A:149:LEU:H | 11 | 0.16 |
| (1,296) | 1:A:137:LEU:HD12 | 1:A:149:LEU:H | 11 | 0.16 |
| (1,296) | 1:A:137:LEU:HD13 | 1:A:149:LEU:H | 11 | 0.16 |
| (1,295) | 1:A:153:LEU:H | 1:A:190:LEU:HD21 | 1 | 0.16 |
| (1,295) | 1:A:153:LEU:H | 1:A:190:LEU:HD22 | 1 | 0.16 |
| (1,295) | 1:A:153:LEU:H | 1:A:190:LEU:HD23 | 1 | 0.16 |
| (1,295) | 1:A:153:LEU:H | 1:A:190:LEU:HD21 | 16 | 0.16 |
| (1,295) | 1:A:153:LEU:H | 1:A:190:LEU:HD22 | 16 | 0.16 |
| (1,295) | 1:A:153:LEU:H | 1:A:190:LEU:HD23 | 16 | 0.16 |
| (1,266) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:118:TYR:H | 20 | 0.16 |
| (1,266) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:118:TYR:H | 20 | 0.16 |
| (1,266) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:118:TYR:H | 20 | 0.16 |
| (1,254) | 1:A:57:VAL:HG11 | 1:A:83:SER:H | 16 | 0.16 |
| (1,254) | 1:A:57:VAL:HG12 | 1:A:83:SER:H | 16 | 0.16 |
| (1,254) | 1:A:57:VAL:HG13 | 1:A:83:SER:H | 16 | 0.16 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,229) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:147:LEU:HD21 | 9 | 0.16 |
| (1,229) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:147:LEU:HD22 | 9 | 0.16 |
| (1,229) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:147:LEU:HD23 | 9 | 0.16 |
| (1,211) | 1:A:85:LEU:H | 1:A:88:PHE:H | 1 | 0.16 |
| (1,168) | 1:A:137:LEU:H | 1:A:150:LEU:HD21 | 17 | 0.16 |
| (1,168) | 1:A:137:LEU:H | 1:A:150:LEU:HD22 | 17 | 0.16 |
| (1,168) | 1:A:137:LEU:H | 1:A:150:LEU:HD23 | 17 | 0.16 |
| (1,152) | 1:A:37:ALA:H | 1:A:57:VAL:H | 16 | 0.16 |
| (1,1113) | 1:A:127:PHE:H | 1:A:192:GLY:O | 8 | 0.16 |
| (1,1113) | 1:A:127:PHE:H | 1:A:192:GLY:O | 18 | 0.16 |
| (1,1099) | 1:A:124:GLY:O | 1:A:98:ILE:H | 13 | 0.16 |
| (1,109) | 1:A:149:LEU:H | 1:A:150:LEU:H | 18 | 0.16 |
| (1,1084) | 1:A:154:GLU:O | 1:A:158:SER:H | 16 | 0.16 |
| (1,1026) | 1:A:95:TRP:HE1 | 1:A:91:VAL:H | 4 | 0.16 |
| (1,1016) | 1:A:165:TRP:HZ3 | 1:A:127:PHE:HZ | 9 | 0.16 |
| (1,1003) | 1:A:59:GLN:H | 1:A:37:ALA:H | 16 | 0.16 |
| (1,994) | 1:A:79:THR:H | 1:A:54:VAL:H | 18 | 0.15 |
| (1,988) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:H | 13 | 0.15 |
| (1,988) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:H | 13 | 0.15 |
| (1,988) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:H | 13 | 0.15 |
| (1,972) | 1:A:85:LEU:HD21 | 1:A:89:ASP:H | 12 | 0.15 |
| (1,972) | 1:A:85:LEU:HD22 | 1:A:89:ASP:H | 12 | 0.15 |
| (1,972) | 1:A:85:LEU:HD23 | 1:A:89:ASP:H | 12 | 0.15 |
| (1,971) | 1:A:160:LEU:HD11 | 1:A:163:LEU:H | 9 | 0.15 |
| (1,971) | 1:A:160:LEU:HD12 | 1:A:163:LEU:H | 9 | 0.15 |
| (1,971) | 1:A:160:LEU:HD13 | 1:A:163:LEU:H | 9 | 0.15 |
| (1,964) | 1:A:116:LYS:H | 1:A:117:VAL:HG21 | 13 | 0.15 |
| (1,964) | 1:A:116:LYS:H | 1:A:117:VAL:HG22 | 13 | 0.15 |
| (1,964) | 1:A:116:LYS:H | 1:A:117:VAL:HG23 | 13 | 0.15 |
| (1,936) | 1:A:153:LEU:HD21 | 1:A:157:GLN:H | 1 | 0.15 |
| (1,936) | 1:A:153:LEU:HD22 | 1:A:157:GLN:H | 1 | 0.15 |
| (1,936) | 1:A:153:LEU:HD23 | 1:A:157:GLN:H | 1 | 0.15 |
| (1,936) | 1:A:153:LEU:HD21 | 1:A:157:GLN:H | 7 | 0.15 |
| (1,936) | 1:A:153:LEU:HD22 | 1:A:157:GLN:H | 7 | 0.15 |
| (1,936) | 1:A:153:LEU:HD23 | 1:A:157:GLN:H | 7 | 0.15 |
| (1,915) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:148:ASP:H | 1 | 0.15 |
| (1,915) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:148:ASP:H | 1 | 0.15 |
| (1,915) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:148:ASP:H | 1 | 0.15 |
| (1,900) | 1:A:153:LEU:H | 1:A:190:LEU:HD11 | 18 | 0.15 |
| (1,900) | 1:A:153:LEU:H | 1:A:190:LEU:HD12 | 18 | 0.15 |
| (1,900) | 1:A:153:LEU:H | 1:A:190:LEU:HD13 | 18 | 0.15 |
| (1,897) | 1:A:163:LEU:HD21 | 1:A:193:GLN:H | 15 | 0.15 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,897) | 1:A:163:LEU:HD22 | 1:A:193:GLN:H | 15 | 0.15 |
| (1,897) | 1:A:163:LEU:HD23 | 1:A:193:GLN:H | 15 | 0.15 |
| (1,897) | 1:A:163:LEU:HD21 | 1:A:193:GLN:H | 20 | 0.15 |
| (1,897) | 1:A:163:LEU:HD22 | 1:A:193:GLN:H | 20 | 0.15 |
| (1,897) | 1:A:163:LEU:HD23 | 1:A:193:GLN:H | 20 | 0.15 |
| (1,891) | 1:A:125:GLY:H | 1:A:163:LEU:HD21 | 10 | 0.15 |
| (1,891) | 1:A:125:GLY:H | 1:A:163:LEU:HD22 | 10 | 0.15 |
| (1,891) | 1:A:125:GLY:H | 1:A:163:LEU:HD23 | 10 | 0.15 |
| (1,885) | 1:A:50:LEU:H | 1:A:54:VAL:HG21 | 13 | 0.15 |
| (1,885) | 1:A:50:LEU:H | 1:A:54:VAL:HG22 | 13 | 0.15 |
| (1,885) | 1:A:50:LEU:H | 1:A:54:VAL:HG23 | 13 | 0.15 |
| (1,848) | 1:A:91:VAL:HG21 | 1:A:95:TRP:HE1 | 8 | 0.15 |
| (1,848) | 1:A:91:VAL:HG22 | 1:A:95:TRP:HE1 | 8 | 0.15 |
| (1,848) | 1:A:91:VAL:HG23 | 1:A:95:TRP:HE1 | 8 | 0.15 |
| (1,848) | 1:A:91:VAL:HG21 | 1:A:95:TRP:HE1 | 18 | 0.15 |
| (1,848) | 1:A:91:VAL:HG22 | 1:A:95:TRP:HE1 | 18 | 0.15 |
| (1,848) | 1:A:91:VAL:HG23 | 1:A:95:TRP:HE1 | 18 | 0.15 |
| (1,847) | 1:A:37:ALA:H | 1:A:57:VAL:HG11 | 20 | 0.15 |
| (1,847) | 1:A:37:ALA:H | 1:A:57:VAL:HG12 | 20 | 0.15 |
| (1,847) | 1:A:37:ALA:H | 1:A:57:VAL:HG13 | 20 | 0.15 |
| (1,827) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:36:LEU:H | 6 | 0.15 |
| (1,827) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:36:LEU:H | 6 | 0.15 |
| (1,827) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:36:LEU:H | 6 | 0.15 |
| (1,827) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:36:LEU:H | 8 | 0.15 |
| (1,827) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:36:LEU:H | 8 | 0.15 |
| (1,827) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:36:LEU:H | 8 | 0.15 |
| (1,827) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:36:LEU:H | 9 | 0.15 |
| (1,827) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:36:LEU:H | 9 | 0.15 |
| (1,827) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:36:LEU:H | 9 | 0.15 |
| (1,809) | 1:A:91:VAL:HG11 | 1:A:92:ALA:H | 5 | 0.15 |
| (1,809) | 1:A:91:VAL:HG12 | 1:A:92:ALA:H | 5 | 0.15 |
| (1,809) | 1:A:91:VAL:HG13 | 1:A:92:ALA:H | 5 | 0.15 |
| (1,809) | 1:A:91:VAL:HG11 | 1:A:92:ALA:H | 9 | 0.15 |
| (1,809) | 1:A:91:VAL:HG12 | 1:A:92:ALA:H | 9 | 0.15 |
| (1,809) | 1:A:91:VAL:HG13 | 1:A:92:ALA:H | 9 | 0.15 |
| (1,801) | 1:A:113:LEU:HD11 | 1:A:116:LYS:H | 17 | 0.15 |
| (1,801) | 1:A:113:LEU:HD12 | 1:A:116:LYS:H | 17 | 0.15 |
| (1,801) | 1:A:113:LEU:HD13 | 1:A:116:LYS:H | 17 | 0.15 |
| (1,790) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:85:LEU:HD21 | 20 | 0.15 |
| (1,790) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:85:LEU:HD22 | 20 | 0.15 |
| (1,790) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:85:LEU:HD23 | 20 | 0.15 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD11 | 1:A:78:ILE:HD11 | 18 | 0.15 |



Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD11 | 1:A:78:ILE:HD12 | 18 | 0.15 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD11 | 1:A:78:ILE:HD13 | 18 | 0.15 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD12 | 1:A:78:ILE:HD11 | 18 | 0.15 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD12 | 1:A:78:ILE:HD12 | 18 | 0.15 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD12 | 1:A:78:ILE:HD13 | 18 | 0.15 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD13 | 1:A:78:ILE:HD11 | 18 | 0.15 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD13 | 1:A:78:ILE:HD12 | 18 | 0.15 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD13 | 1:A:78:ILE:HD13 | 18 | 0.15 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD21 | 1:A:150:LEU:HD21 | 9 | 0.15 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD21 | 1:A:150:LEU:HD22 | 9 | 0.15 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD21 | 1:A:150:LEU:HD23 | 9 | 0.15 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD22 | 1:A:150:LEU:HD21 | 9 | 0.15 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD22 | 1:A:150:LEU:HD22 | 9 | 0.15 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD22 | 1:A:150:LEU:HD23 | 9 | 0.15 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD23 | 1:A:150:LEU:HD21 | 9 | 0.15 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD23 | 1:A:150:LEU:HD22 | 9 | 0.15 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD23 | 1:A:150:LEU:HD23 | 9 | 0.15 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD11 | 19 | 0.15 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD12 | 19 | 0.15 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD13 | 19 | 0.15 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD11 | 19 | 0.15 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD12 | 19 | 0.15 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD13 | 19 | 0.15 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD11 | 19 | 0.15 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD12 | 19 | 0.15 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD13 | 19 | 0.15 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD11 | 20 | 0.15 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD12 | 20 | 0.15 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD13 | 20 | 0.15 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD11 | 20 | 0.15 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD12 | 20 | 0.15 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD13 | 20 | 0.15 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD11 | 20 | 0.15 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD12 | 20 | 0.15 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD13 | 20 | 0.15 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:117:VAL:HG11 | 13 | 0.15 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:117:VAL:HG12 | 13 | 0.15 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:117:VAL:HG13 | 13 | 0.15 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:117:VAL:HG11 | 13 | 0.15 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:117:VAL:HG12 | 13 | 0.15 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:117:VAL:HG13 | 13 | 0.15 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:117:VAL:HG11 | 13 | 0.15 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:117:VAL:HG12 | 13 | 0.15 |
| (1,664) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:117:VAL:HG13 | 13 | 0.15 |
| (1,622) | 1:A:133:ALA:H | 1:A:137:LEU:H | 8 | 0.15 |
| (1,570) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:145:LYS:H | 5 | 0.15 |
| (1,570) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:145:LYS:H | 5 | 0.15 |
| (1,570) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:145:LYS:H | 5 | 0.15 |
| (1,570) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:145:LYS:H | 10 | 0.15 |
| (1,570) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:145:LYS:H | 10 | 0.15 |
| (1,570) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:145:LYS:H | 10 | 0.15 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD21 | 13 | 0.15 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD22 | 13 | 0.15 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD23 | 13 | 0.15 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD21 | 13 | 0.15 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD22 | 13 | 0.15 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD23 | 13 | 0.15 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD21 | 13 | 0.15 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD22 | 13 | 0.15 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD23 | 13 | 0.15 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:85:LEU:HD11 | 2 | 0.15 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:85:LEU:HD12 | 2 | 0.15 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:85:LEU:HD13 | 2 | 0.15 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:85:LEU:HD11 | 2 | 0.15 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:85:LEU:HD12 | 2 | 0.15 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:85:LEU:HD13 | 2 | 0.15 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:85:LEU:HD11 | 2 | 0.15 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:85:LEU:HD12 | 2 | 0.15 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:85:LEU:HD13 | 2 | 0.15 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD11 | 1:A:54:VAL:HG21 | 13 | 0.15 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD11 | 1:A:54:VAL:HG22 | 13 | 0.15 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD11 | 1:A:54:VAL:HG23 | 13 | 0.15 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD12 | 1:A:54:VAL:HG21 | 13 | 0.15 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD12 | 1:A:54:VAL:HG22 | 13 | 0.15 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD12 | 1:A:54:VAL:HG23 | 13 | 0.15 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD13 | 1:A:54:VAL:HG21 | 13 | 0.15 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD13 | 1:A:54:VAL:HG22 | 13 | 0.15 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD13 | 1:A:54:VAL:HG23 | 13 | 0.15 |
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD11 | 1:A:163:LEU:HD21 | 8 | 0.15 |
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD11 | 1:A:163:LEU:HD22 | 8 | 0.15 |
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD11 | 1:A:163:LEU:HD23 | 8 | 0.15 |
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD12 | 1:A:163:LEU:HD21 | 8 | 0.15 |
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD12 | 1:A:163:LEU:HD22 | 8 | 0.15 |
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD12 | 1:A:163:LEU:HD23 | 8 | 0.15 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD13 | 1:A:163:LEU:HD21 | 8 | 0.15 |
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD13 | 1:A:163:LEU:HD22 | 8 | 0.15 |
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD13 | 1:A:163:LEU:HD23 | 8 | 0.15 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD21 | 1:A:195:LEU:HD21 | 15 | 0.15 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD21 | 1:A:195:LEU:HD22 | 15 | 0.15 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD21 | 1:A:195:LEU:HD23 | 15 | 0.15 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD22 | 1:A:195:LEU:HD21 | 15 | 0.15 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD22 | 1:A:195:LEU:HD22 | 15 | 0.15 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD22 | 1:A:195:LEU:HD23 | 15 | 0.15 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD23 | 1:A:195:LEU:HD21 | 15 | 0.15 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD23 | 1:A:195:LEU:HD22 | 15 | 0.15 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD23 | 1:A:195:LEU:HD23 | 15 | 0.15 |
| (1,361) | 1:A:72:GLN:H | 1:A:78:ILE:HD11 | 2 | 0.15 |
| (1,361) | 1:A:72:GLN:H | 1:A:78:ILE:HD12 | 2 | 0.15 |
| (1,361) | 1:A:72:GLN:H | 1:A:78:ILE:HD13 | 2 | 0.15 |
| (1,346) | 1:A:175:LEU:HD21 | 1:A:184:LYS:H | 4 | 0.15 |
| (1,346) | 1:A:175:LEU:HD22 | 1:A:184:LYS:H | 4 | 0.15 |
| (1,346) | 1:A:175:LEU:HD23 | 1:A:184:LYS:H | 4 | 0.15 |
| (1,334) | 1:A:90:ILE:H | 1:A:91:VAL:HG21 | 14 | 0.15 |
| (1,334) | 1:A:90:ILE:H | 1:A:91:VAL:HG22 | 14 | 0.15 |
| (1,334) | 1:A:90:ILE:H | 1:A:91:VAL:HG23 | 14 | 0.15 |
| (1,295) | 1:A:153:LEU:H | 1:A:190:LEU:HD21 | 19 | 0.15 |
| (1,295) | 1:A:153:LEU:H | 1:A:190:LEU:HD22 | 19 | 0.15 |
| (1,295) | 1:A:153:LEU:H | 1:A:190:LEU:HD23 | 19 | 0.15 |
| (1,259) | 1:A:71:ALA:H | 1:A:78:ILE:HD11 | 2 | 0.15 |
| (1,259) | 1:A:71:ALA:H | 1:A:78:ILE:HD12 | 2 | 0.15 |
| (1,259) | 1:A:71:ALA:H | 1:A:78:ILE:HD13 | 2 | 0.15 |
| (1,226) | 1:A:57:VAL:HG11 | 1:A:82:GLN:H | 1 | 0.15 |
| (1,226) | 1:A:57:VAL:HG12 | 1:A:82:GLN:H | 1 | 0.15 |
| (1,226) | 1:A:57:VAL:HG13 | 1:A:82:GLN:H | 1 | 0.15 |
| (1,217) | 1:A:163:LEU:HD11 | 1:A:195:LEU:H | 10 | 0.15 |
| (1,217) | 1:A:163:LEU:HD12 | 1:A:195:LEU:H | 10 | 0.15 |
| (1,217) | 1:A:163:LEU:HD13 | 1:A:195:LEU:H | 10 | 0.15 |
| (1,217) | 1:A:163:LEU:HD11 | 1:A:195:LEU:H | 12 | 0.15 |
| (1,217) | 1:A:163:LEU:HD12 | 1:A:195:LEU:H | 12 | 0.15 |
| (1,217) | 1:A:163:LEU:HD13 | 1:A:195:LEU:H | 12 | 0.15 |
| (1,205) | 1:A:24:VAL:HG11 | 1:A:192:GLY:H | 10 | 0.15 |
| (1,205) | 1:A:24:VAL:HG12 | 1:A:192:GLY:H | 10 | 0.15 |
| (1,205) | 1:A:24:VAL:HG13 | 1:A:192:GLY:H | 10 | 0.15 |
| (1,205) | 1:A:24:VAL:HG11 | 1:A:192:GLY:H | 11 | 0.15 |
| (1,205) | 1:A:24:VAL:HG12 | 1:A:192:GLY:H | 11 | 0.15 |
| (1,205) | 1:A:24:VAL:HG13 | 1:A:192:GLY:H | 11 | 0.15 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,202) | 1:A:138:GLN:H | 1:A:147:LEU:HD21 | 4 | 0.15 |
| (1,202) | 1:A:138:GLN:H | 1:A:147:LEU:HD22 | 4 | 0.15 |
| (1,202) | 1:A:138:GLN:H | 1:A:147:LEU:HD23 | 4 | 0.15 |
| (1,174) | 1:A:61:SER:H | 1:A:62:VAL:HG11 | 4 | 0.15 |
| (1,174) | 1:A:61:SER:H | 1:A:62:VAL:HG12 | 4 | 0.15 |
| (1,174) | 1:A:61:SER:H | 1:A:62:VAL:HG13 | 4 | 0.15 |
| (1,174) | 1:A:61:SER:H | 1:A:62:VAL:HG11 | 20 | 0.15 |
| (1,174) | 1:A:61:SER:H | 1:A:62:VAL:HG12 | 20 | 0.15 |
| (1,174) | 1:A:61:SER:H | 1:A:62:VAL:HG13 | 20 | 0.15 |
| (1,168) | 1:A:137:LEU:H | 1:A:150:LEU:HD21 | 18 | 0.15 |
| (1,168) | 1:A:137:LEU:H | 1:A:150:LEU:HD22 | 18 | 0.15 |
| (1,168) | 1:A:137:LEU:H | 1:A:150:LEU:HD23 | 18 | 0.15 |
| (1,1084) | 1:A:154:GLU:O | 1:A:158:SER:H | 5 | 0.15 |
| (1,1070) | 1:A:108:SER:O | 1:A:112:GLN:H | 9 | 0.15 |
| (1,1070) | 1:A:108:SER:O | 1:A:112:GLN:H | 14 | 0.15 |
| (1,1032) | 1:A:22:VAL:O | 1:A:26:ASN:H | 9 | 0.15 |
| (1,101) | 1:A:135:GLU:H | 1:A:138:GLN:H | 2 | 0.15 |
| (1,1006) | 1:A:100:SER:H | 1:A:126:VAL:H | 2 | 0.15 |
| (1,1006) | 1:A:100:SER:H | 1:A:126:VAL:H | 5 | 0.15 |
| (1,994) | 1:A:79:THR:H | 1:A:54:VAL:H | 13 | 0.14 |
| (1,964) | 1:A:116:LYS:H | 1:A:117:VAL:HG21 | 4 | 0.14 |
| (1,964) | 1:A:116:LYS:H | 1:A:117:VAL:HG22 | 4 | 0.14 |
| (1,964) | 1:A:116:LYS:H | 1:A:117:VAL:HG23 | 4 | 0.14 |
| (1,964) | 1:A:116:LYS:H | 1:A:117:VAL:HG21 | 7 | 0.14 |
| (1,964) | 1:A:116:LYS:H | 1:A:117:VAL:HG22 | 7 | 0.14 |
| (1,964) | 1:A:116:LYS:H | 1:A:117:VAL:HG23 | 7 | 0.14 |
| (1,964) | 1:A:116:LYS:H | 1:A:117:VAL:HG21 | 10 | 0.14 |
| (1,964) | 1:A:116:LYS:H | 1:A:117:VAL:HG22 | 10 | 0.14 |
| (1,964) | 1:A:116:LYS:H | 1:A:117:VAL:HG23 | 10 | 0.14 |
| (1,964) | 1:A:116:LYS:H | 1:A:117:VAL:HG21 | 17 | 0.14 |
| (1,964) | 1:A:116:LYS:H | 1:A:117:VAL:HG22 | 17 | 0.14 |
| (1,964) | 1:A:116:LYS:H | 1:A:117:VAL:HG23 | 17 | 0.14 |
| (1,915) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:148:ASP:H | 19 | 0.14 |
| (1,915) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:148:ASP:H | 19 | 0.14 |
| (1,915) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:148:ASP:H | 19 | 0.14 |
| (1,912) | 1:A:56:ALA:H | 1:A:81:VAL:HG21 | 2 | 0.14 |
| (1,912) | 1:A:56:ALA:H | 1:A:81:VAL:HG22 | 2 | 0.14 |
| (1,912) | 1:A:56:ALA:H | 1:A:81:VAL:HG23 | 2 | 0.14 |
| (1,897) | 1:A:163:LEU:HD21 | 1:A:193:GLN:H | 1 | 0.14 |
| (1,897) | 1:A:163:LEU:HD22 | 1:A:193:GLN:H | 1 | 0.14 |
| (1,897) | 1:A:163:LEU:HD23 | 1:A:193:GLN:H | 1 | 0.14 |
| (1,896) | 1:A:166:LEU:HD11 | 1:A:193:GLN:H | 15 | 0.14 |



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

| (1,896) 1:A:166:LEU:HD12 1:A:193:GLN:H 15 0.14 (1,885) 1:A:50:LEU:H 1:A:54:VAL:HG21 16 0.14 (1,885) 1:A:50:LEU:H 1:A:54:VAL:HG22 16 0.14 (1,885) 1:A:50:LEU:H 1:A:54:VAL:HG22 16 0.14 (1,885) 1:A:50:LEU:H 1:A:146:ASP:H 10 0.14 (1,841) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:146:ASP:H 10 0.14 (1,841) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:146:ASP:H 10 0.14 (1,841) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:146:ASP:H 10 0.14 (1,841) 1:A:147:LEU:H 1:A:150:LEU:HD11 8 0.14 (1,814) 1:A:147:LEU:H 1:A:150:LEU:HD13 8 0.14 (1,785) 1:A:70:LEU:HD11 1:A:78:LE:HD13 8 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD11 1:A:78:LE:HD13 16 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD12 1:A:78:LE:HD13 16 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD13 1:A:78:LE:HD13< | Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|--|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,885) 1:A:50:LEU:H 1:A:54:VAL:HG21 16 0.14 (1,885) 1:A:50:LEU:H 1:A:54:VAL:HG22 16 0.14 (1,841) 1:A:50:LEU:H 1:A:54:VAL:HG23 16 0.14 (1,841) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:146:ASP:H 10 0.14 (1,841) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:146:ASP:H 10 0.14 (1,841) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:146:ASP:H 10 0.14 (1,841) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:146:ASP:H 10 0.14 (1,841) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:146:ASP:H 10 0.14 (1,841) 1:A:147:LEU:H 1:A:150:LEU:HD11 8 0.14 (1,814) 1:A:147:LEU:H 1:A:150:LEU:HD11 8 0.14 (1,814) 1:A:147:LEU:H 1:A:150:LEU:HD12 8 0.14 (1,814) 1:A:147:LEU:H 1:A:150:LEU:HD13 8 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD11 1:A:78:ILE:HD13 16 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD11 1:A:78:ILE:HD13 16 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD11 1:A:78:ILE:HD11 16 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD11 1:A:78:ILE:HD13 16 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD12 1:A:78:ILE:HD13 16 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD12 1:A:78:ILE:HD13 16 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD12 1:A:78:ILE:HD11 16 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD12 1:A:78:ILE:HD13 16 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD12 1:A:78:ILE:HD13 16 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD13 1:A:78:ILE:HD13 16 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD13 1:A:78:ILE:HD13 16 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD13 1:A:78:ILE:HD11 16 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD13 1:A:78:ILE:HD11 16 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD13 1:A:78:ILE:HD11 16 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:78:ILE:HD13 16 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:78:ILE:HD13 16 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:78:ILE:HD13 16 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD13 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD13 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD13 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD13 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD11 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD11 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD13 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD13 10 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG21 1:A:98:ILE:HD11 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG21 1:A:98:ILE:HD13 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG22 1:A:98:ILE:HD11 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG23 1:A:98:ILE:HD11 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG23 1:A:98:ILE:HD11 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG23 1:A:98:IL | (1,896) | 1:A:166:LEU:HD12 | 1:A:193:GLN:H | 15 | 0.14 |
| (1,885) 1:A:50:LEU:H 1:A:54:VAL:HG22 16 0.14 (1,885) 1:A:50:LEU:H 1:A:54:VAL:HG23 16 0.14 (1,841) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:146:ASP:H 10 0.14 (1,841) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:146:ASP:H 10 0.14 (1,841) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:146:ASP:H 10 0.14 (1,814) 1:A:137:LEU:H 1:A:150:LEU:HD11 8 0.14 (1,814) 1:A:147:LEU:H 1:A:150:LEU:HD12 8 0.14 (1,814) 1:A:147:LEU:H 1:A:150:LEU:HD13 8 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD11 1:A:78:LE:HD11 16 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD11 1:A:78:LE:HD13 16 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD12 1:A:78:LE:HD12 16 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD12 1:A:78:LE:HD13 16 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD13 1:A:78:LE:HD13 16 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD13 1:A:78:LE | (1,896) | 1:A:166:LEU:HD13 | 1:A:193:GLN:H | 15 | 0.14 |
| 1;885 | (1,885) | 1:A:50:LEU:H | 1:A:54:VAL:HG21 | 16 | 0.14 |
| (1,841) 1:A:137;LEU;HD21 1:A:146;ASP;H 10 0.14 (1,841) 1:A:137;LEU;HD22 1:A:146;ASP;H 10 0.14 (1,841) 1:A:137;LEU;HD23 1:A:146;ASP;H 10 0.14 (1,814) 1:A:147;LEU;H 1:A:150;LEU;HD11 8 0.14 (1,814) 1:A:147;LEU;H 1:A:150;LEU;HD12 8 0.14 (1,814) 1:A:147;LEU;H 1:A:150;LEU;HD12 8 0.14 (1,814) 1:A:147;LEU;HD11 1:A:150;LEU;HD13 8 0.14 (1,755) 1:A:70;LEU;HD11 1:A:78;ILE;HD12 16 0.14 (1,755) 1:A:70;LEU;HD11 1:A:78;ILE;HD13 16 0.14 (1,755) 1:A:70;LEU;HD12 1:A:78;ILE;HD12 16 0.14 (1,755) 1:A:70;LEU;HD12 1:A:78;ILE;HD13 16 0.14 (1,755) 1:A:70;LEU;HD13 1:A:78;ILE;HD13 16 0.14 (1,755) 1:A:70;LEU;HD13 1:A:78;ILE;HD13 16 0.14 (1,755) 1:A:70;LEU;HD13 < | (1,885) | 1:A:50:LEU:H | 1:A:54:VAL:HG22 | 16 | 0.14 |
| (1,841) 1:A:137;LEU:HD22 1:A:146;ASP;H 10 0.14 (1,841) 1:A:137;LEU:HD23 1:A:146;ASP;H 10 0.14 (1,814) 1:A:147;LEU:H 1:A:150;LEU;HD11 8 0.14 (1,814) 1:A:147;LEU;H 1:A:150;LEU;HD12 8 0.14 (1,814) 1:A:147;LEU;H 1:A:150;LEU;HD13 8 0.14 (1,755) 1:A:70;LEU;HD11 1:A:78;LE;HD11 16 0.14 (1,755) 1:A:70;LEU;HD11 1:A:78;LE;HD12 16 0.14 (1,755) 1:A:70;LEU;HD12 1:A:78;LE;HD13 16 0.14 (1,755) 1:A:70;LEU;HD12 1:A:78;LE;HD12 16 0.14 (1,755) 1:A:70;LEU;HD12 1:A:78;LE;HD12 16 0.14 (1,755) 1:A:70;LEU;HD13 1:A:78;LE;HD13 16 0.14 (1,755) 1:A:70;LEU;HD13 1:A:78;LE;HD12 16 0.14 (1,755) 1:A:70;LEU;HD13 1:A:78;LE;HD13 16 0.14 (1,755) 1:A:70;LEU;HD13 1:A:7 | (1,885) | 1:A:50:LEU:H | 1:A:54:VAL:HG23 | 16 | 0.14 |
| (1,841) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:146:ASP:H 10 0.14 (1,814) 1:A:147:LEU:H 1:A:150:LEU:HD11 8 0.14 (1,814) 1:A:147:LEU:H 1:A:150:LEU:HD12 8 0.14 (1,814) 1:A:147:LEU:H 1:A:150:LEU:HD12 8 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD11 1:A:78:ILE:HD11 16 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD11 1:A:78:ILE:HD12 16 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD11 1:A:78:ILE:HD12 16 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD12 1:A:78:ILE:HD13 16 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD12 1:A:78:ILE:HD13 16 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD12 1:A:78:ILE:HD11 16 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD12 1:A:78:ILE:HD11 16 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD12 1:A:78:ILE:HD12 16 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD12 1:A:78:ILE:HD12 16 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD13 1:A:78:ILE:HD13 16 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD13 1:A:78:ILE:HD13 16 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD13 1:A:78:ILE:HD13 16 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD13 1:A:78:ILE:HD11 16 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD13 1:A:78:ILE:HD12 16 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD13 1:A:78:ILE:HD12 16 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD11 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD11 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD11 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD11 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD11 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD11 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD11 10 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG21 1:A:98:ILE:HD11 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG21 1:A:98:ILE:HD11 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG21 1:A:98:ILE:HD11 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG22 1:A:98:ILE:HD11 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG22 1:A:98:ILE:HD11 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG23 1:A:98:ILE:HD11 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG23 1:A:98:ILE:HD13 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG23 1:A:98:ILE:HD11 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG23 1:A:98:ILE:HD11 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG23 1:A:98:ILE:HD11 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG23 1:A:98:ILE:HD13 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG23 1:A:98:ILE:HD13 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG23 1:A:98:ILE:HD13 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VA | (1,841) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:146:ASP:H | 10 | 0.14 |
| (1,814) 1:A:147:LEU:H 1:A:150:LEU:HD11 8 0.14 (1,814) 1:A:147:LEU:H 1:A:150:LEU:HD12 8 0.14 (1,814) 1:A:147:LEU:H 1:A:150:LEU:HD13 8 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD11 1:A:78:ILE:HD11 16 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD11 1:A:78:ILE:HD12 16 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD12 1:A:78:ILE:HD13 16 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD12 1:A:78:ILE:HD12 16 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD12 1:A:78:ILE:HD13 16 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD13 1:A:78:ILE:HD13 16 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD13 1:A:78:ILE:HD11 16 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD13 1:A:78:ILE:HD13 16 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD13 1:A:78:ILE:HD12 16 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD13 1:A:78:ILE:HD13 16 0.14 (1,755) 1:A:137:LEU:HD13 | (1,841) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:146:ASP:H | 10 | 0.14 |
| (1,814) 1:A:147:LEU:H 1:A:150:LEU:HD12 8 0.14 (1,814) 1:A:147:LEU:H 1:A:150:LEU:HD13 8 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD11 1:A:78:ILE:HD11 16 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD11 1:A:78:ILE:HD13 16 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD12 1:A:78:ILE:HD13 16 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD12 1:A:78:ILE:HD12 16 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD12 1:A:78:ILE:HD12 16 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD13 1:A:78:ILE:HD11 16 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD13 1:A:78:ILE:HD12 16 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD13 1:A:78:ILE:HD12 16 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD13 1:A:78:ILE:HD13 16 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD13 1:A:78:ILE:HD13 16 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:147:LEU:HD13 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 | (1,841) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:146:ASP:H | 10 | 0.14 |
| (1,814) 1:A:147:LEU:H 1:A:150:LEU:HD13 8 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD11 1:A:78:ILE:HD11 16 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD11 1:A:78:ILE:HD12 16 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD12 1:A:78:ILE:HD13 16 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD12 1:A:78:ILE:HD12 16 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD12 1:A:78:ILE:HD13 16 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD13 1:A:78:ILE:HD13 16 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD13 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 | (1,814) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:150:LEU:HD11 | 8 | 0.14 |
| (1,755) 1:A:70:LEU:HD11 1:A:78:ILE:HD11 16 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD11 1:A:78:ILE:HD12 16 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD11 1:A:78:ILE:HD13 16 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD12 1:A:78:ILE:HD11 16 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD12 1:A:78:ILE:HD13 16 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD13 1:A:78:ILE:HD13 16 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD13 1:A:78:ILE:HD11 16 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD13 1:A:78:ILE:HD12 16 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD11 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 <td>(1,814)</td> <td>1:A:147:LEU:H</td> <td>1:A:150:LEU:HD12</td> <td>8</td> <td>0.14</td> | (1,814) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:150:LEU:HD12 | 8 | 0.14 |
| (1,755) 1:A:70:LEU:HD11 1:A:78:ILE:HD12 16 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD11 1:A:78:ILE:HD13 16 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD12 1:A:78:ILE:HD11 16 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD12 1:A:78:ILE:HD12 16 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD12 1:A:78:ILE:HD13 16 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD13 1:A:78:ILE:HD11 16 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD13 1:A:78:ILE:HD12 16 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD13 1:A:78:ILE:HD12 16 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD13 1:A:78:ILE:HD12 16 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD13 1:A:78:ILE:HD13 16 0.14 (1,701) 1:A:13:7:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD11 10 0.14 (1,701) 1:A:13:7:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD13 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD12 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD | (1,814) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:150:LEU:HD13 | 8 | 0.14 |
| (1,755) 1:A:70:LEU:HD11 1:A:78:ILE:HD13 16 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD12 1:A:78:ILE:HD11 16 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD12 1:A:78:ILE:HD12 16 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD13 1:A:78:ILE:HD13 16 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD13 1:A:78:ILE:HD11 16 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD13 1:A:78:ILE:HD12 16 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD13 1:A:78:ILE:HD13 16 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD13 1:A:78:ILE:HD13 16 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD13 1:A:78:ILE:HD13 16 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD11 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD13 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD11 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD13 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD | (1,755) | 1:A:70:LEU:HD11 | 1:A:78:ILE:HD11 | 16 | 0.14 |
| (1,755) 1:A:70:LEU:HD12 1:A:78:ILE:HD11 16 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD12 1:A:78:ILE:HD12 16 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD12 1:A:78:ILE:HD13 16 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD13 1:A:78:ILE:HD11 16 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD13 1:A:78:ILE:HD12 16 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD13 1:A:78:ILE:HD13 16 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD13 1:A:78:ILE:HD13 16 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD11 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD13 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD11 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD13 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD13 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD13 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LE | (1,755) | 1:A:70:LEU:HD11 | 1:A:78:ILE:HD12 | 16 | 0.14 |
| (1,755) 1:A:70:LEU:HD12 1:A:78:ILE:HD12 16 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD12 1:A:78:ILE:HD13 16 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD13 1:A:78:ILE:HD11 16 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD13 1:A:78:ILE:HD12 16 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD13 1:A:78:ILE:HD13 16 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD11 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD12 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD13 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD13 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD13 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD13 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD13 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD11 10 0.14 (1,693) 1:A:91 | (1,755) | 1:A:70:LEU:HD11 | 1:A:78:ILE:HD13 | 16 | 0.14 |
| (1,755) 1:A:70:LEU:HD12 1:A:78:ILE:HD13 16 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD13 1:A:78:ILE:HD11 16 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD13 1:A:78:ILE:HD12 16 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD13 1:A:78:ILE:HD13 16 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD11 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD12 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD13 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD11 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD12 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD13 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD11 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD12 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD12 10 0.14 (1,693) 1:A: | (1,755) | 1:A:70:LEU:HD12 | 1:A:78:ILE:HD11 | 16 | 0.14 |
| (1,755) 1:A:70:LEU:HD13 1:A:78:ILE:HD12 16 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD13 1:A:78:ILE:HD12 16 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD13 1:A:78:ILE:HD13 16 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD11 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD12 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD13 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD11 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD12 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD13 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD13 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD11 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD12 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD12 10 0.14 (1,693) 1: | (1,755) | 1:A:70:LEU:HD12 | 1:A:78:ILE:HD12 | 16 | 0.14 |
| (1,755) 1:A:70:LEU:HD13 1:A:78:ILE:HD12 16 0.14 (1,755) 1:A:70:LEU:HD13 1:A:78:ILE:HD13 16 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD11 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD12 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD13 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD11 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD12 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD13 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD13 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD11 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD12 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD11 10 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG21 1:A:98:ILE:HD12 11 0.14 (1,693) 1: | (1,755) | 1:A:70:LEU:HD12 | 1:A:78:ILE:HD13 | 16 | 0.14 |
| (1,755) 1:A:70:LEU:HD13 1:A:78:ILE:HD13 16 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD11 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD12 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD13 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD11 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD12 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD13 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD11 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD12 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD12 10 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG21 1:A:98:ILE:HD13 10 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG21 1:A:98:ILE:HD13 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG22 1:A:98:ILE:HD13 11 0.14 (1,693) 1:A: | (1,755) | 1:A:70:LEU:HD13 | 1:A:78:ILE:HD11 | 16 | 0.14 |
| (1,755) 1:A:70:LEU:HD13 1:A:78:ILE:HD13 16 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD11 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD12 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD13 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD11 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD12 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD13 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD11 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD12 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD12 10 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG21 1:A:98:ILE:HD13 10 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG21 1:A:98:ILE:HD13 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG22 1:A:98:ILE:HD13 11 0.14 (1,693) 1:A: | (1,755) | 1:A:70:LEU:HD13 | 1:A:78:ILE:HD12 | 16 | 0.14 |
| (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD11 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD12 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD13 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD11 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD12 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD13 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD11 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD12 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD13 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD13 10 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG21 1:A:98:ILE:HD11 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG21 1:A:98:ILE:HD13 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG22 1:A:98:ILE:HD11 11 0.14 (1,693) 1: | (1,755) | 1:A:70:LEU:HD13 | 1:A:78:ILE:HD13 | 16 | 0.14 |
| (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD13 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD11 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD12 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD13 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD11 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD12 10 0.14 (1,693) 1:A:191:VAL:HG21 1:A:98:ILE:HD11 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG21 1:A:98:ILE:HD12 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG22 1:A:98:ILE:HD12 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG23 1:A:98:ILE:HD11 11 0.14 (1,693) 1:A | (1,701) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD11 | 10 | 0.14 |
| (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD13 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD11 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD12 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD13 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD11 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD12 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD13 10 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG21 1:A:98:ILE:HD13 10 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG21 1:A:98:ILE:HD12 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG22 1:A:98:ILE:HD13 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG22 1:A:98:ILE:HD12 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG23 1:A:98:ILE:HD13 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG23 1:A:98:ILE:HD11 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG23 1:A:98:ILE:HD11 11 0.14 (1,693) | (1,701) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD12 | 10 | 0.14 |
| (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD12 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD13 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD11 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD12 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD13 10 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG21 1:A:98:ILE:HD13 10 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG21 1:A:98:ILE:HD12 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG22 1:A:98:ILE:HD13 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG22 1:A:98:ILE:HD12 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG22 1:A:98:ILE:HD13 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG23 1:A:98:ILE:HD13 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG23 1:A:98:ILE:HD11 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG23 1:A:98:ILE:HD12 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:H | | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD13 | 10 | 0.14 |
| (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD13 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD11 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD12 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD13 10 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG21 1:A:98:ILE:HD11 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG21 1:A:98:ILE:HD12 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG21 1:A:98:ILE:HD13 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG22 1:A:98:ILE:HD11 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG22 1:A:98:ILE:HD13 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG23 1:A:98:ILE:HD11 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG23 1:A:98:ILE:HD11 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG23 1:A:98:ILE:HD13 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG23 1:A:98:ILE:HD13 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG23 1:A:98:ILE:HD13 11 0.14 (1,693) | (1,701) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD11 | 10 | 0.14 |
| (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD11 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD12 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD13 10 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG21 1:A:98:ILE:HD11 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG21 1:A:98:ILE:HD12 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG21 1:A:98:ILE:HD13 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG22 1:A:98:ILE:HD11 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG22 1:A:98:ILE:HD12 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG23 1:A:98:ILE:HD13 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG23 1:A:98:ILE:HD11 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG23 1:A:98:ILE:HD12 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG23 1:A:98:ILE:HD13 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG23 1:A:98:ILE:HD13 11 0.14 (1,570) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:145:LYS:H 4 0.14 (1,570) | (1,701) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD12 | 10 | 0.14 |
| (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD12 10 0.14 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD13 10 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG21 1:A:98:ILE:HD11 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG21 1:A:98:ILE:HD12 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG21 1:A:98:ILE:HD13 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG22 1:A:98:ILE:HD11 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG22 1:A:98:ILE:HD12 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG23 1:A:98:ILE:HD13 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG23 1:A:98:ILE:HD11 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG23 1:A:98:ILE:HD12 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG23 1:A:98:ILE:HD13 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG23 1:A:98:ILE:HD13 11 0.14 (1,570) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:145:LYS:H 4 0.14 (1,570) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:145:LYS:H 4 0.14 | (1,701) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD13 | 10 | 0.14 |
| (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD13 10 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG21 1:A:98:ILE:HD11 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG21 1:A:98:ILE:HD12 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG21 1:A:98:ILE:HD13 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG22 1:A:98:ILE:HD11 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG22 1:A:98:ILE:HD12 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG23 1:A:98:ILE:HD13 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG23 1:A:98:ILE:HD12 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG23 1:A:98:ILE:HD12 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG23 1:A:98:ILE:HD13 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG23 1:A:98:ILE:HD13 11 0.14 (1,570) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:145:LYS:H 4 0.14 (1,570) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:145:LYS:H 4 0.14 | (1,701) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD11 | 10 | 0.14 |
| (1,693) 1:A:91:VAL:HG21 1:A:98:ILE:HD11 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG21 1:A:98:ILE:HD12 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG21 1:A:98:ILE:HD13 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG22 1:A:98:ILE:HD11 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG22 1:A:98:ILE:HD12 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG23 1:A:98:ILE:HD13 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG23 1:A:98:ILE:HD12 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG23 1:A:98:ILE:HD12 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG23 1:A:98:ILE:HD13 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG23 1:A:98:ILE:HD13 11 0.14 (1,570) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:145:LYS:H 4 0.14 (1,570) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:145:LYS:H 4 0.14 (1,570) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:145:LYS:H 4 0.14 | (1,701) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD12 | 10 | 0.14 |
| (1,693) 1:A:91:VAL:HG21 1:A:98:ILE:HD12 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG21 1:A:98:ILE:HD13 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG22 1:A:98:ILE:HD11 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG22 1:A:98:ILE:HD12 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG22 1:A:98:ILE:HD13 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG23 1:A:98:ILE:HD11 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG23 1:A:98:ILE:HD12 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG23 1:A:98:ILE:HD13 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG23 1:A:98:ILE:HD13 11 0.14 (1,570) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:145:LYS:H 4 0.14 (1,570) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:145:LYS:H 4 0.14 | (1,701) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD13 | 10 | 0.14 |
| (1,693) 1:A:91:VAL:HG21 1:A:98:ILE:HD13 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG22 1:A:98:ILE:HD11 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG22 1:A:98:ILE:HD12 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG22 1:A:98:ILE:HD13 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG23 1:A:98:ILE:HD11 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG23 1:A:98:ILE:HD12 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG23 1:A:98:ILE:HD13 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG23 1:A:98:ILE:HD13 11 0.14 (1,570) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:145:LYS:H 4 0.14 (1,570) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:145:LYS:H 4 0.14 | (1,693) | 1:A:91:VAL:HG21 | 1:A:98:ILE:HD11 | 11 | 0.14 |
| (1,693) 1:A:91:VAL:HG22 1:A:98:ILE:HD11 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG22 1:A:98:ILE:HD12 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG22 1:A:98:ILE:HD13 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG23 1:A:98:ILE:HD11 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG23 1:A:98:ILE:HD12 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG23 1:A:98:ILE:HD13 11 0.14 (1,641) 1:A:32:LYS:H 1:A:53:GLU:H 9 0.14 (1,570) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:145:LYS:H 4 0.14 (1,570) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:145:LYS:H 4 0.14 | (1,693) | 1:A:91:VAL:HG21 | 1:A:98:ILE:HD12 | 11 | 0.14 |
| (1,693) 1:A:91:VAL:HG22 1:A:98:ILE:HD11 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG22 1:A:98:ILE:HD12 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG22 1:A:98:ILE:HD13 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG23 1:A:98:ILE:HD11 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG23 1:A:98:ILE:HD12 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG23 1:A:98:ILE:HD13 11 0.14 (1,693) 1:A:32:LYS:H 1:A:53:GLU:H 9 0.14 (1,570) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:145:LYS:H 4 0.14 (1,570) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:145:LYS:H 4 0.14 | · · / | 1:A:91:VAL:HG21 | 1:A:98:ILE:HD13 | 11 | 0.14 |
| (1,693) 1:A:91:VAL:HG22 1:A:98:ILE:HD13 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG23 1:A:98:ILE:HD11 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG23 1:A:98:ILE:HD12 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG23 1:A:98:ILE:HD13 11 0.14 (1,641) 1:A:32:LYS:H 1:A:53:GLU:H 9 0.14 (1,570) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:145:LYS:H 4 0.14 (1,570) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:145:LYS:H 4 0.14 | | 1:A:91:VAL:HG22 | 1:A:98:ILE:HD11 | 11 | 0.14 |
| (1,693) 1:A:91:VAL:HG22 1:A:98:ILE:HD13 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG23 1:A:98:ILE:HD11 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG23 1:A:98:ILE:HD12 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG23 1:A:98:ILE:HD13 11 0.14 (1,641) 1:A:32:LYS:H 1:A:53:GLU:H 9 0.14 (1,570) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:145:LYS:H 4 0.14 (1,570) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:145:LYS:H 4 0.14 | · · / | 1:A:91:VAL:HG22 | 1:A:98:ILE:HD12 | 11 | 0.14 |
| (1,693) 1:A:91:VAL:HG23 1:A:98:ILE:HD11 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG23 1:A:98:ILE:HD12 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG23 1:A:98:ILE:HD13 11 0.14 (1,641) 1:A:32:LYS:H 1:A:53:GLU:H 9 0.14 (1,570) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:145:LYS:H 4 0.14 (1,570) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:145:LYS:H 4 0.14 | / | 1:A:91:VAL:HG22 | 1:A:98:ILE:HD13 | 11 | 0.14 |
| (1,693) 1:A:91:VAL:HG23 1:A:98:ILE:HD12 11 0.14 (1,693) 1:A:91:VAL:HG23 1:A:98:ILE:HD13 11 0.14 (1,641) 1:A:32:LYS:H 1:A:53:GLU:H 9 0.14 (1,570) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:145:LYS:H 4 0.14 (1,570) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:145:LYS:H 4 0.14 | ` ' | 1:A:91:VAL:HG23 | 1:A:98:ILE:HD11 | 11 | 0.14 |
| (1,693) 1:A:91:VAL:HG23 1:A:98:ILE:HD13 11 0.14 (1,641) 1:A:32:LYS:H 1:A:53:GLU:H 9 0.14 (1,570) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:145:LYS:H 4 0.14 (1,570) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:145:LYS:H 4 0.14 | , , | 1:A:91:VAL:HG23 | 1:A:98:ILE:HD12 | 11 | 0.14 |
| (1,641) 1:A:32:LYS:H 1:A:53:GLU:H 9 0.14 (1,570) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:145:LYS:H 4 0.14 (1,570) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:145:LYS:H 4 0.14 | | 1:A:91:VAL:HG23 | 1:A:98:ILE:HD13 | 11 | 0.14 |
| (1,570) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:145:LYS:H 4 0.14 (1,570) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:145:LYS:H 4 0.14 | | 1:A:32:LYS:H | 1:A:53:GLU:H | 9 | 0.14 |
| | | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:145:LYS:H | 4 | 0.14 |
| | (1,570) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:145:LYS:H | 4 | 0.14 |
| | (1,570) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:145:LYS:H | 4 | 0.14 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:85:LEU:HD11 | 18 | 0.14 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:85:LEU:HD12 | 18 | 0.14 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:85:LEU:HD13 | 18 | 0.14 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:85:LEU:HD11 | 18 | 0.14 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:85:LEU:HD12 | 18 | 0.14 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:85:LEU:HD13 | 18 | 0.14 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:85:LEU:HD11 | 18 | 0.14 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:85:LEU:HD12 | 18 | 0.14 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:85:LEU:HD13 | 18 | 0.14 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD11 | 1:A:54:VAL:HG21 | 1 | 0.14 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD11 | 1:A:54:VAL:HG22 | 1 | 0.14 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD11 | 1:A:54:VAL:HG23 | 1 | 0.14 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD12 | 1:A:54:VAL:HG21 | 1 | 0.14 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD12 | 1:A:54:VAL:HG22 | 1 | 0.14 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD12 | 1:A:54:VAL:HG23 | 1 | 0.14 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD13 | 1:A:54:VAL:HG21 | 1 | 0.14 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD13 | 1:A:54:VAL:HG22 | 1 | 0.14 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD13 | 1:A:54:VAL:HG23 | 1 | 0.14 |
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD11 | 1:A:163:LEU:HD21 | 1 | 0.14 |
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD11 | 1:A:163:LEU:HD22 | 1 | 0.14 |
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD11 | 1:A:163:LEU:HD23 | 1 | 0.14 |
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD12 | 1:A:163:LEU:HD21 | 1 | 0.14 |
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD12 | 1:A:163:LEU:HD22 | 1 | 0.14 |
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD12 | 1:A:163:LEU:HD23 | 1 | 0.14 |
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD13 | 1:A:163:LEU:HD21 | 1 | 0.14 |
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD13 | 1:A:163:LEU:HD22 | 1 | 0.14 |
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD13 | 1:A:163:LEU:HD23 | 1 | 0.14 |
| (1,497) | 1:A:129:LEU:HD21 | 1:A:156:LEU:HD21 | 15 | 0.14 |
| (1,497) | 1:A:129:LEU:HD21 | 1:A:156:LEU:HD22 | 15 | 0.14 |
| (1,497) | 1:A:129:LEU:HD21 | 1:A:156:LEU:HD23 | 15 | 0.14 |
| (1,497) | 1:A:129:LEU:HD22 | 1:A:156:LEU:HD21 | 15 | 0.14 |
| (1,497) | 1:A:129:LEU:HD22 | 1:A:156:LEU:HD22 | 15 | 0.14 |
| (1,497) | 1:A:129:LEU:HD22 | 1:A:156:LEU:HD23 | 15 | 0.14 |
| (1,497) | 1:A:129:LEU:HD23 | 1:A:156:LEU:HD21 | 15 | 0.14 |
| (1,497) | 1:A:129:LEU:HD23 | 1:A:156:LEU:HD22 | 15 | 0.14 |
| (1,497) | 1:A:129:LEU:HD23 | 1:A:156:LEU:HD23 | 15 | 0.14 |
| (1,467) | 1:A:62:VAL:HG11 | 1:A:63:GLY:H | 8 | 0.14 |
| (1,467) | 1:A:62:VAL:HG12 | 1:A:63:GLY:H | 8 | 0.14 |
| (1,467) | 1:A:62:VAL:HG13 | 1:A:63:GLY:H | 8 | 0.14 |
| (1,455) | 1:A:121:LEU:HD21 | 1:A:160:LEU:HD21 | 12 | 0.14 |
| (1,455) | 1:A:121:LEU:HD21 | 1:A:160:LEU:HD22 | 12 | 0.14 |
| (1,455) | 1:A:121:LEU:HD21 | 1:A:160:LEU:HD23 | 12 | 0.14 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|-----------|------------------|---|-------|---------------|
| (1,455) | 1:A:121:LEU:HD22 | 1:A:160:LEU:HD21 | 12 | 0.14 |
| (1,455) | 1:A:121:LEU:HD22 | 1:A:160:LEU:HD22 | 12 | 0.14 |
| (1,455) | 1:A:121:LEU:HD22 | 1:A:160:LEU:HD23 | 12 | 0.14 |
| (1,455) | 1:A:121:LEU:HD23 | 1:A:160:LEU:HD21 | 12 | 0.14 |
| (1,455) | 1:A:121:LEU:HD23 | 1:A:160:LEU:HD22 | 12 | 0.14 |
| (1,455) | 1:A:121:LEU:HD23 | 1:A:160:LEU:HD23 | 12 | 0.14 |
| (1,399) | 1:A:34:LEU:H | 1:A:99:VAL:HG21 | 5 | 0.14 |
| (1,399) | 1:A:34:LEU:H | 1:A:99:VAL:HG22 | 5 | 0.14 |
| (1,399) | 1:A:34:LEU:H | 1:A:99:VAL:HG23 | 5 | 0.14 |
| (1,382) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:167:ILE:HD11 | 9 | 0.14 |
| (1,382) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:167:ILE:HD12 | 9 | 0.14 |
| (1,382) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:167:ILE:HD13 | 9 | 0.14 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD11 | 1:A:190:LEU:HD11 | 1 | 0.14 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD11 | 1:A:190:LEU:HD12 | 1 | 0.14 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD11 | 1:A:190:LEU:HD13 | 1 | 0.14 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD12 | 1:A:190:LEU:HD11 | 1 | 0.14 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD12 | 1:A:190:LEU:HD12 | 1 | 0.14 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD12 | 1:A:190:LEU:HD13 | 1 | 0.14 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD13 | 1:A:190:LEU:HD11 | 1 | 0.14 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD13 | 1:A:190:LEU:HD12 | 1 | 0.14 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD13 | 1:A:190:LEU:HD13 | 1 | 0.14 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD11 | 1:A:190:LEU:HD11 | 16 | 0.14 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD11 | 1:A:190:LEU:HD12 | 16 | 0.14 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD11 | 1:A:190:LEU:HD13 | 16 | 0.14 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD12 | 1:A:190:LEU:HD11 | 16 | 0.14 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD12 | 1:A:190:LEU:HD12 | 16 | 0.14 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD12 | 1:A:190:LEU:HD13 | 16 | 0.14 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD13 | 1:A:190:LEU:HD11 | 16 | 0.14 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD13 | 1:A:190:LEU:HD12 | 16 | 0.14 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD13 | 1:A:190:LEU:HD13 | 16 | 0.14 |
| (1,37) | 1:A:91:VAL:H | 1:A:92:ALA:H | 17 | 0.14 |
| (1,37) | 1:A:91:VAL:H | 1:A:92:ALA:H | 19 | 0.14 |
| (1,37) | 1:A:91:VAL:H | 1:A:92:ALA:H | 20 | 0.14 |
| (1,334) | 1:A:90:ILE:H | 1:A:91:VAL:HG21 | 9 | 0.14 |
| (1,334) | 1:A:90:ILE:H | 1:A:91:VAL:HG22 | 9 | 0.14 |
| (1,334) | 1:A:90:ILE:H | 1:A:91:VAL:HG23 | 9 | 0.14 |
| (1,296) | 1:A:137:LEU:HD11 | 1:A:149:LEU:H | 14 | 0.14 |
| (1,296) | 1:A:137:LEU:HD12 | 1:A:149:LEU:H | 14 | 0.14 |
| (1,296) | 1:A:137:LEU:HD13 | 1:A:149:LEU:H | 14 | 0.14 |
| (1,295) | 1:A:153:LEU:H | 1:A:190:LEU:HD21 | 3 | 0.14 |
| (1,295) | 1:A:153:LEU:H | 1:A:190:LEU:HD22 | 3 | 0.14 |
| (1,295) | 1:A:153:LEU:H | 1:A:190:LEU:HD23 | 3 | 0.14 |
| () - ~) | | 1 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 3 | | ort i |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,295) | 1:A:153:LEU:H | 1:A:190:LEU:HD21 | 9 | 0.14 |
| (1,295) | 1:A:153:LEU:H | 1:A:190:LEU:HD22 | 9 | 0.14 |
| (1,295) | 1:A:153:LEU:H | 1:A:190:LEU:HD23 | 9 | 0.14 |
| (1,266) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:118:TYR:H | 1 | 0.14 |
| (1,266) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:118:TYR:H | 1 | 0.14 |
| (1,266) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:118:TYR:H | 1 | 0.14 |
| (1,266) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:118:TYR:H | 7 | 0.14 |
| (1,266) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:118:TYR:H | 7 | 0.14 |
| (1,266) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:118:TYR:H | 7 | 0.14 |
| (1,266) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:118:TYR:H | 16 | 0.14 |
| (1,266) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:118:TYR:H | 16 | 0.14 |
| (1,266) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:118:TYR:H | 16 | 0.14 |
| (1,259) | 1:A:71:ALA:H | 1:A:78:ILE:HD11 | 15 | 0.14 |
| (1,259) | 1:A:71:ALA:H | 1:A:78:ILE:HD12 | 15 | 0.14 |
| (1,259) | 1:A:71:ALA:H | 1:A:78:ILE:HD13 | 15 | 0.14 |
| (1,217) | 1:A:163:LEU:HD11 | 1:A:195:LEU:H | 18 | 0.14 |
| (1,217) | 1:A:163:LEU:HD12 | 1:A:195:LEU:H | 18 | 0.14 |
| (1,217) | 1:A:163:LEU:HD13 | 1:A:195:LEU:H | 18 | 0.14 |
| (1,205) | 1:A:24:VAL:HG11 | 1:A:192:GLY:H | 17 | 0.14 |
| (1,205) | 1:A:24:VAL:HG12 | 1:A:192:GLY:H | 17 | 0.14 |
| (1,205) | 1:A:24:VAL:HG13 | 1:A:192:GLY:H | 17 | 0.14 |
| (1,201) | 1:A:157:GLN:H | 1:A:190:LEU:HD21 | 11 | 0.14 |
| (1,201) | 1:A:157:GLN:H | 1:A:190:LEU:HD22 | 11 | 0.14 |
| (1,201) | 1:A:157:GLN:H | 1:A:190:LEU:HD23 | 11 | 0.14 |
| (1,176) | 1:A:186:ALA:H | 1:A:187:LEU:HD21 | 17 | 0.14 |
| (1,176) | 1:A:186:ALA:H | 1:A:187:LEU:HD22 | 17 | 0.14 |
| (1,176) | 1:A:186:ALA:H | 1:A:187:LEU:HD23 | 17 | 0.14 |
| (1,174) | 1:A:61:SER:H | 1:A:62:VAL:HG11 | 6 | 0.14 |
| (1,174) | 1:A:61:SER:H | 1:A:62:VAL:HG12 | 6 | 0.14 |
| (1,174) | 1:A:61:SER:H | 1:A:62:VAL:HG13 | 6 | 0.14 |
| (1,174) | 1:A:61:SER:H | 1:A:62:VAL:HG11 | 17 | 0.14 |
| (1,174) | 1:A:61:SER:H | 1:A:62:VAL:HG12 | 17 | 0.14 |
| (1,174) | 1:A:61:SER:H | 1:A:62:VAL:HG13 | 17 | 0.14 |
| (1,158) | 1:A:163:LEU:H | 1:A:195:LEU:HD21 | 16 | 0.14 |
| (1,158) | 1:A:163:LEU:H | 1:A:195:LEU:HD22 | 16 | 0.14 |
| (1,158) | 1:A:163:LEU:H | 1:A:195:LEU:HD23 | 16 | 0.14 |
| (1,1113) | 1:A:127:PHE:H | 1:A:192:GLY:O | 11 | 0.14 |
| (1,1105) | 1:A:102:PHE:H | 1:A:128:ILE:O | 8 | 0.14 |
| (1,1099) | 1:A:124:GLY:O | 1:A:98:ILE:H | 11 | 0.14 |
| (1,1084) | 1:A:154:GLU:O | 1:A:158:SER:H | 6 | 0.14 |
| (1,1084) | 1:A:154:GLU:O | 1:A:158:SER:H | 9 | 0.14 |
| (1,1084) | 1:A:154:GLU:O | 1:A:158:SER:H | 10 | 0.14 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,1084) | 1:A:154:GLU:O | 1:A:158:SER:H | 18 | 0.14 |
| (1,1070) | 1:A:108:SER:O | 1:A:112:GLN:H | 6 | 0.14 |
| (1,1034) | 1:A:23:SER:O | 1:A:27:GLN:H | 13 | 0.14 |
| (1,1034) | 1:A:23:SER:O | 1:A:27:GLN:H | 18 | 0.14 |
| (1,1032) | 1:A:22:VAL:O | 1:A:26:ASN:H | 4 | 0.14 |
| (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:85:LEU:HD21 | 2 | 0.14 |
| (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:85:LEU:HD22 | 2 | 0.14 |
| (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:85:LEU:HD23 | 2 | 0.14 |
| (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:85:LEU:HD21 | 2 | 0.14 |
| (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:85:LEU:HD22 | 2 | 0.14 |
| (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:85:LEU:HD23 | 2 | 0.14 |
| (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:85:LEU:HD21 | 2 | 0.14 |
| (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:85:LEU:HD22 | 2 | 0.14 |
| (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:85:LEU:HD23 | 2 | 0.14 |
| (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:85:LEU:HD21 | 20 | 0.14 |
| (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:85:LEU:HD22 | 20 | 0.14 |
| (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:85:LEU:HD23 | 20 | 0.14 |
| (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:85:LEU:HD21 | 20 | 0.14 |
| (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:85:LEU:HD22 | 20 | 0.14 |
| (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:85:LEU:HD23 | 20 | 0.14 |
| (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:85:LEU:HD21 | 20 | 0.14 |
| (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:85:LEU:HD22 | 20 | 0.14 |
| (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:85:LEU:HD23 | 20 | 0.14 |
| (1,1003) | 1:A:59:GLN:H | 1:A:37:ALA:H | 3 | 0.14 |
| (1,1003) | 1:A:59:GLN:H | 1:A:37:ALA:H | 8 | 0.14 |
| (1,994) | 1:A:79:THR:H | 1:A:54:VAL:H | 5 | 0.13 |
| (1,972) | 1:A:85:LEU:HD21 | 1:A:89:ASP:H | 17 | 0.13 |
| (1,972) | 1:A:85:LEU:HD22 | 1:A:89:ASP:H | 17 | 0.13 |
| (1,972) | 1:A:85:LEU:HD23 | 1:A:89:ASP:H | 17 | 0.13 |
| (1,964) | 1:A:116:LYS:H | 1:A:117:VAL:HG21 | 15 | 0.13 |
| (1,964) | 1:A:116:LYS:H | 1:A:117:VAL:HG22 | 15 | 0.13 |
| (1,964) | 1:A:116:LYS:H | 1:A:117:VAL:HG23 | 15 | 0.13 |
| (1,964) | 1:A:116:LYS:H | 1:A:117:VAL:HG21 | 18 | 0.13 |
| (1,964) | 1:A:116:LYS:H | 1:A:117:VAL:HG22 | 18 | 0.13 |
| (1,964) | 1:A:116:LYS:H | 1:A:117:VAL:HG23 | 18 | 0.13 |
| (1,936) | 1:A:153:LEU:HD21 | 1:A:157:GLN:H | 2 | 0.13 |
| (1,936) | 1:A:153:LEU:HD22 | 1:A:157:GLN:H | 2 | 0.13 |
| (1,936) | 1:A:153:LEU:HD23 | 1:A:157:GLN:H | 2 | 0.13 |
| (1,936) | 1:A:153:LEU:HD21 | 1:A:157:GLN:H | 4 | 0.13 |
| (1,936) | 1:A:153:LEU:HD22 | 1:A:157:GLN:H | 4 | 0.13 |
| (1,936) | 1:A:153:LEU:HD23 | 1:A:157:GLN:H | 4 | 0.13 |
| (1,936) | 1:A:153:LEU:HD21 | 1:A:157:GLN:H | 6 | 0.13 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,936) | 1:A:153:LEU:HD22 | 1:A:157:GLN:H | 6 | 0.13 |
| (1,936) | 1:A:153:LEU:HD23 | 1:A:157:GLN:H | 6 | 0.13 |
| (1,936) | 1:A:153:LEU:HD21 | 1:A:157:GLN:H | 19 | 0.13 |
| (1,936) | 1:A:153:LEU:HD22 | 1:A:157:GLN:H | 19 | 0.13 |
| (1,936) | 1:A:153:LEU:HD23 | 1:A:157:GLN:H | 19 | 0.13 |
| (1,924) | 1:A:27:GLN:H | 1:A:126:VAL:HG21 | 14 | 0.13 |
| (1,924) | 1:A:27:GLN:H | 1:A:126:VAL:HG22 | 14 | 0.13 |
| (1,924) | 1:A:27:GLN:H | 1:A:126:VAL:HG23 | 14 | 0.13 |
| (1,902) | 1:A:153:LEU:HD11 | 1:A:169:ASN:H | 19 | 0.13 |
| (1,902) | 1:A:153:LEU:HD12 | 1:A:169:ASN:H | 19 | 0.13 |
| (1,902) | 1:A:153:LEU:HD13 | 1:A:169:ASN:H | 19 | 0.13 |
| (1,885) | 1:A:50:LEU:H | 1:A:54:VAL:HG21 | 6 | 0.13 |
| (1,885) | 1:A:50:LEU:H | 1:A:54:VAL:HG22 | 6 | 0.13 |
| (1,885) | 1:A:50:LEU:H | 1:A:54:VAL:HG23 | 6 | 0.13 |
| (1,885) | 1:A:50:LEU:H | 1:A:54:VAL:HG21 | 8 | 0.13 |
| (1,885) | 1:A:50:LEU:H | 1:A:54:VAL:HG22 | 8 | 0.13 |
| (1,885) | 1:A:50:LEU:H | 1:A:54:VAL:HG23 | 8 | 0.13 |
| (1,885) | 1:A:50:LEU:H | 1:A:54:VAL:HG21 | 15 | 0.13 |
| (1,885) | 1:A:50:LEU:H | 1:A:54:VAL:HG22 | 15 | 0.13 |
| (1,885) | 1:A:50:LEU:H | 1:A:54:VAL:HG23 | 15 | 0.13 |
| (1,885) | 1:A:50:LEU:H | 1:A:54:VAL:HG21 | 20 | 0.13 |
| (1,885) | 1:A:50:LEU:H | 1:A:54:VAL:HG22 | 20 | 0.13 |
| (1,885) | 1:A:50:LEU:H | 1:A:54:VAL:HG23 | 20 | 0.13 |
| (1,854) | 1:A:131:GLY:H | 1:A:153:LEU:HD21 | 8 | 0.13 |
| (1,854) | 1:A:131:GLY:H | 1:A:153:LEU:HD22 | 8 | 0.13 |
| (1,854) | 1:A:131:GLY:H | 1:A:153:LEU:HD23 | 8 | 0.13 |
| (1,854) | 1:A:131:GLY:H | 1:A:153:LEU:HD21 | 13 | 0.13 |
| (1,854) | 1:A:131:GLY:H | 1:A:153:LEU:HD22 | 13 | 0.13 |
| (1,854) | 1:A:131:GLY:H | 1:A:153:LEU:HD23 | 13 | 0.13 |
| (1,854) | 1:A:131:GLY:H | 1:A:153:LEU:HD21 | 16 | 0.13 |
| (1,854) | 1:A:131:GLY:H | 1:A:153:LEU:HD22 | 16 | 0.13 |
| (1,854) | 1:A:131:GLY:H | 1:A:153:LEU:HD23 | 16 | 0.13 |
| (1,841) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:146:ASP:H | 12 | 0.13 |
| (1,841) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:146:ASP:H | 12 | 0.13 |
| (1,841) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:146:ASP:H | 12 | 0.13 |
| (1,827) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:36:LEU:H | 12 | 0.13 |
| (1,827) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:36:LEU:H | 12 | 0.13 |
| (1,827) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:36:LEU:H | 12 | 0.13 |
| (1,811) | 1:A:146:ASP:H | 1:A:147:LEU:HD11 | 2 | 0.13 |
| (1,811) | 1:A:146:ASP:H | 1:A:147:LEU:HD12 | 2 | 0.13 |
| (1,811) | 1:A:146:ASP:H | 1:A:147:LEU:HD13 | 2 | 0.13 |
| (1,809) | 1:A:91:VAL:HG11 | 1:A:92:ALA:H | 16 | 0.13 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,809) | 1:A:91:VAL:HG12 | 1:A:92:ALA:H | 16 | 0.13 |
| (1,809) | 1:A:91:VAL:HG13 | 1:A:92:ALA:H | 16 | 0.13 |
| (1,806) | 1:A:166:LEU:HD21 | 1:A:193:GLN:H | 17 | 0.13 |
| (1,806) | 1:A:166:LEU:HD22 | 1:A:193:GLN:H | 17 | 0.13 |
| (1,806) | 1:A:166:LEU:HD23 | 1:A:193:GLN:H | 17 | 0.13 |
| (1,79) | 1:A:175:LEU:HD21 | 1:A:185:ALA:H | 9 | 0.13 |
| (1,79) | 1:A:175:LEU:HD22 | 1:A:185:ALA:H | 9 | 0.13 |
| (1,79) | 1:A:175:LEU:HD23 | 1:A:185:ALA:H | 9 | 0.13 |
| (1,79) | 1:A:175:LEU:HD21 | 1:A:185:ALA:H | 12 | 0.13 |
| (1,79) | 1:A:175:LEU:HD22 | 1:A:185:ALA:H | 12 | 0.13 |
| (1,79) | 1:A:175:LEU:HD23 | 1:A:185:ALA:H | 12 | 0.13 |
| (1,750) | 1:A:81:VAL:HG21 | 1:A:85:LEU:HD21 | 3 | 0.13 |
| (1,750) | 1:A:81:VAL:HG21 | 1:A:85:LEU:HD22 | 3 | 0.13 |
| (1,750) | 1:A:81:VAL:HG21 | 1:A:85:LEU:HD23 | 3 | 0.13 |
| (1,750) | 1:A:81:VAL:HG22 | 1:A:85:LEU:HD21 | 3 | 0.13 |
| (1,750) | 1:A:81:VAL:HG22 | 1:A:85:LEU:HD22 | 3 | 0.13 |
| (1,750) | 1:A:81:VAL:HG22 | 1:A:85:LEU:HD23 | 3 | 0.13 |
| (1,750) | 1:A:81:VAL:HG23 | 1:A:85:LEU:HD21 | 3 | 0.13 |
| (1,750) | 1:A:81:VAL:HG23 | 1:A:85:LEU:HD22 | 3 | 0.13 |
| (1,750) | 1:A:81:VAL:HG23 | 1:A:85:LEU:HD23 | 3 | 0.13 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD21 | 1:A:150:LEU:HD21 | 1 | 0.13 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD21 | 1:A:150:LEU:HD22 | 1 | 0.13 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD21 | 1:A:150:LEU:HD23 | 1 | 0.13 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD22 | 1:A:150:LEU:HD21 | 1 | 0.13 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD22 | 1:A:150:LEU:HD22 | 1 | 0.13 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD22 | 1:A:150:LEU:HD23 | 1 | 0.13 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD23 | 1:A:150:LEU:HD21 | 1 | 0.13 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD23 | 1:A:150:LEU:HD22 | 1 | 0.13 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD23 | 1:A:150:LEU:HD23 | 1 | 0.13 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD21 | 1:A:150:LEU:HD21 | 10 | 0.13 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD21 | 1:A:150:LEU:HD22 | 10 | 0.13 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD21 | 1:A:150:LEU:HD23 | 10 | 0.13 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD22 | 1:A:150:LEU:HD21 | 10 | 0.13 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD22 | 1:A:150:LEU:HD22 | 10 | 0.13 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD22 | 1:A:150:LEU:HD23 | 10 | 0.13 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD23 | 1:A:150:LEU:HD21 | 10 | 0.13 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD23 | 1:A:150:LEU:HD22 | 10 | 0.13 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD23 | 1:A:150:LEU:HD23 | 10 | 0.13 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD11 | 11 | 0.13 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD12 | 11 | 0.13 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD13 | 11 | 0.13 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD11 | 11 | 0.13 |



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

| Key | Atom-1 | $\mathbf{Atom-2}$ | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|-------------------|-------|---------------|
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD12 | 11 | 0.13 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD13 | 11 | 0.13 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD11 | 11 | 0.13 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD12 | 11 | 0.13 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD13 | 11 | 0.13 |
| (1,654) | 1:A:60:SER:H | 1:A:83:SER:H | 20 | 0.13 |
| (1,596) | 1:A:164:ASN:H | 1:A:195:LEU:H | 14 | 0.13 |
| (1,572) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:28:ILE:HD11 | 19 | 0.13 |
| (1,572) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:28:ILE:HD12 | 19 | 0.13 |
| (1,572) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:28:ILE:HD13 | 19 | 0.13 |
| (1,572) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:28:ILE:HD11 | 19 | 0.13 |
| (1,572) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:28:ILE:HD12 | 19 | 0.13 |
| (1,572) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:28:ILE:HD13 | 19 | 0.13 |
| (1,572) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:28:ILE:HD11 | 19 | 0.13 |
| (1,572) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:28:ILE:HD12 | 19 | 0.13 |
| (1,572) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:28:ILE:HD13 | 19 | 0.13 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD21 | 4 | 0.13 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD22 | 4 | 0.13 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD23 | 4 | 0.13 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD21 | 4 | 0.13 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD22 | 4 | 0.13 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD23 | 4 | 0.13 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD21 | 4 | 0.13 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD22 | 4 | 0.13 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD23 | 4 | 0.13 |
| (1,535) | 1:A:74:LYS:H | 1:A:76:VAL:HG11 | 18 | 0.13 |
| (1,535) | 1:A:74:LYS:H | 1:A:76:VAL:HG12 | 18 | 0.13 |
| (1,535) | 1:A:74:LYS:H | 1:A:76:VAL:HG13 | 18 | 0.13 |
| (1,518) | 1:A:117:VAL:HG11 | 1:A:121:LEU:HD11 | 16 | 0.13 |
| (1,518) | 1:A:117:VAL:HG11 | 1:A:121:LEU:HD12 | 16 | 0.13 |
| (1,518) | 1:A:117:VAL:HG11 | 1:A:121:LEU:HD13 | 16 | 0.13 |
| (1,518) | 1:A:117:VAL:HG12 | 1:A:121:LEU:HD11 | 16 | 0.13 |
| (1,518) | 1:A:117:VAL:HG12 | 1:A:121:LEU:HD12 | 16 | 0.13 |
| (1,518) | 1:A:117:VAL:HG12 | 1:A:121:LEU:HD13 | 16 | 0.13 |
| (1,518) | 1:A:117:VAL:HG13 | 1:A:121:LEU:HD11 | 16 | 0.13 |
| (1,518) | 1:A:117:VAL:HG13 | 1:A:121:LEU:HD12 | 16 | 0.13 |
| (1,518) | 1:A:117:VAL:HG13 | 1:A:121:LEU:HD13 | 16 | 0.13 |
| (1,511) | 1:A:145:LYS:H | 1:A:149:LEU:HD21 | 11 | 0.13 |
| (1,511) | 1:A:145:LYS:H | 1:A:149:LEU:HD22 | 11 | 0.13 |
| (1,511) | 1:A:145:LYS:H | 1:A:149:LEU:HD23 | 11 | 0.13 |
| (1,508) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:85:LEU:HD21 | 3 | 0.13 |
| (1,508) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:85:LEU:HD22 | 3 | 0.13 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,508) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:85:LEU:HD23 | 3 | 0.13 |
| (1,508) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:85:LEU:HD21 | 3 | 0.13 |
| (1,508) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:85:LEU:HD22 | 3 | 0.13 |
| (1,508) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:85:LEU:HD23 | 3 | 0.13 |
| (1,508) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:85:LEU:HD21 | 3 | 0.13 |
| (1,508) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:85:LEU:HD22 | 3 | 0.13 |
| (1,508) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:85:LEU:HD23 | 3 | 0.13 |
| (1,508) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:85:LEU:HD21 | 5 | 0.13 |
| (1,508) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:85:LEU:HD22 | 5 | 0.13 |
| (1,508) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:85:LEU:HD23 | 5 | 0.13 |
| (1,508) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:85:LEU:HD21 | 5 | 0.13 |
| (1,508) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:85:LEU:HD22 | 5 | 0.13 |
| (1,508) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:85:LEU:HD23 | 5 | 0.13 |
| (1,508) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:85:LEU:HD21 | 5 | 0.13 |
| (1,508) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:85:LEU:HD22 | 5 | 0.13 |
| (1,508) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:85:LEU:HD23 | 5 | 0.13 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD21 | 1:A:160:LEU:HD11 | 1 | 0.13 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD21 | 1:A:160:LEU:HD12 | 1 | 0.13 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD21 | 1:A:160:LEU:HD13 | 1 | 0.13 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD22 | 1:A:160:LEU:HD11 | 1 | 0.13 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD22 | 1:A:160:LEU:HD12 | 1 | 0.13 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD22 | 1:A:160:LEU:HD13 | 1 | 0.13 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD23 | 1:A:160:LEU:HD11 | 1 | 0.13 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD23 | 1:A:160:LEU:HD12 | 1 | 0.13 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD23 | 1:A:160:LEU:HD13 | 1 | 0.13 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD21 | 1:A:195:LEU:HD21 | 5 | 0.13 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD21 | 1:A:195:LEU:HD22 | 5 | 0.13 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD21 | 1:A:195:LEU:HD23 | 5 | 0.13 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD22 | 1:A:195:LEU:HD21 | 5 | 0.13 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD22 | 1:A:195:LEU:HD22 | 5 | 0.13 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD22 | 1:A:195:LEU:HD23 | 5 | 0.13 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD23 | 1:A:195:LEU:HD21 | 5 | 0.13 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD23 | 1:A:195:LEU:HD22 | 5 | 0.13 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD23 | 1:A:195:LEU:HD23 | 5 | 0.13 |
| (1,407) | 1:A:126:VAL:HG11 | 1:A:163:LEU:HD21 | 19 | 0.13 |
| (1,407) | 1:A:126:VAL:HG11 | 1:A:163:LEU:HD22 | 19 | 0.13 |
| (1,407) | 1:A:126:VAL:HG11 | 1:A:163:LEU:HD23 | 19 | 0.13 |
| (1,407) | 1:A:126:VAL:HG12 | 1:A:163:LEU:HD21 | 19 | 0.13 |
| (1,407) | 1:A:126:VAL:HG12 | 1:A:163:LEU:HD22 | 19 | 0.13 |
| (1,407) | 1:A:126:VAL:HG12 | 1:A:163:LEU:HD23 | 19 | 0.13 |
| (1,407) | 1:A:126:VAL:HG13 | 1:A:163:LEU:HD21 | 19 | 0.13 |
| (1,407) | 1:A:126:VAL:HG13 | 1:A:163:LEU:HD22 | 19 | 0.13 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,407) | 1:A:126:VAL:HG13 | 1:A:163:LEU:HD23 | 19 | 0.13 |
| (1,346) | 1:A:175:LEU:HD21 | 1:A:184:LYS:H | 17 | 0.13 |
| (1,346) | 1:A:175:LEU:HD22 | 1:A:184:LYS:H | 17 | 0.13 |
| (1,346) | 1:A:175:LEU:HD23 | 1:A:184:LYS:H | 17 | 0.13 |
| (1,334) | 1:A:90:ILE:H | 1:A:91:VAL:HG21 | 8 | 0.13 |
| (1,334) | 1:A:90:ILE:H | 1:A:91:VAL:HG22 | 8 | 0.13 |
| (1,334) | 1:A:90:ILE:H | 1:A:91:VAL:HG23 | 8 | 0.13 |
| (1,295) | 1:A:153:LEU:H | 1:A:190:LEU:HD21 | 5 | 0.13 |
| (1,295) | 1:A:153:LEU:H | 1:A:190:LEU:HD22 | 5 | 0.13 |
| (1,295) | 1:A:153:LEU:H | 1:A:190:LEU:HD23 | 5 | 0.13 |
| (1,295) | 1:A:153:LEU:H | 1:A:190:LEU:HD21 | 6 | 0.13 |
| (1,295) | 1:A:153:LEU:H | 1:A:190:LEU:HD22 | 6 | 0.13 |
| (1,295) | 1:A:153:LEU:H | 1:A:190:LEU:HD23 | 6 | 0.13 |
| (1,281) | 1:A:187:LEU:HD21 | 1:A:188:ILE:H | 17 | 0.13 |
| (1,281) | 1:A:187:LEU:HD22 | 1:A:188:ILE:H | 17 | 0.13 |
| (1,281) | 1:A:187:LEU:HD23 | 1:A:188:ILE:H | 17 | 0.13 |
| (1,272) | 1:A:124:GLY:H | 1:A:163:LEU:HD21 | 10 | 0.13 |
| (1,272) | 1:A:124:GLY:H | 1:A:163:LEU:HD22 | 10 | 0.13 |
| (1,272) | 1:A:124:GLY:H | 1:A:163:LEU:HD23 | 10 | 0.13 |
| (1,270) | 1:A:121:LEU:HD11 | 1:A:124:GLY:H | 17 | 0.13 |
| (1,270) | 1:A:121:LEU:HD12 | 1:A:124:GLY:H | 17 | 0.13 |
| (1,270) | 1:A:121:LEU:HD13 | 1:A:124:GLY:H | 17 | 0.13 |
| (1,270) | 1:A:121:LEU:HD11 | 1:A:124:GLY:H | 19 | 0.13 |
| (1,270) | 1:A:121:LEU:HD12 | 1:A:124:GLY:H | 19 | 0.13 |
| (1,270) | 1:A:121:LEU:HD13 | 1:A:124:GLY:H | 19 | 0.13 |
| (1,247) | 1:A:35:CYS:H | 1:A:81:VAL:HG21 | 3 | 0.13 |
| (1,247) | 1:A:35:CYS:H | 1:A:81:VAL:HG22 | 3 | 0.13 |
| (1,247) | 1:A:35:CYS:H | 1:A:81:VAL:HG23 | 3 | 0.13 |
| (1,243) | 1:A:133:ALA:H | 1:A:150:LEU:HD11 | 8 | 0.13 |
| (1,243) | 1:A:133:ALA:H | 1:A:150:LEU:HD12 | 8 | 0.13 |
| (1,243) | 1:A:133:ALA:H | 1:A:150:LEU:HD13 | 8 | 0.13 |
| (1,242) | 1:A:133:ALA:H | 1:A:147:LEU:HD21 | 12 | 0.13 |
| (1,242) | 1:A:133:ALA:H | 1:A:147:LEU:HD22 | 12 | 0.13 |
| (1,242) | 1:A:133:ALA:H | 1:A:147:LEU:HD23 | 12 | 0.13 |
| (1,233) | 1:A:54:VAL:HG11 | 1:A:55:THR:H | 8 | 0.13 |
| (1,233) | 1:A:54:VAL:HG12 | 1:A:55:THR:H | 8 | 0.13 |
| (1,233) | 1:A:54:VAL:HG13 | 1:A:55:THR:H | 8 | 0.13 |
| (1,226) | 1:A:57:VAL:HG11 | 1:A:82:GLN:H | 18 | 0.13 |
| (1,226) | 1:A:57:VAL:HG12 | 1:A:82:GLN:H | 18 | 0.13 |
| (1,226) | 1:A:57:VAL:HG13 | 1:A:82:GLN:H | 18 | 0.13 |
| (1,217) | 1:A:163:LEU:HD11 | 1:A:195:LEU:H | 11 | 0.13 |
| (1,217) | 1:A:163:LEU:HD12 | 1:A:195:LEU:H | 11 | 0.13 |



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

| (1,217) 1:A:163:LEU:HD13 1:A:195:LEU:H 11 0.13 (1,205) 1:A:24:VAL:HG11 1:A:192:GLY:H 4 0.13 (1,205) 1:A:24:VAL:HG12 1:A:192:GLY:H 4 0.13 (1,205) 1:A:24:VAL:HG13 1:A:192:GLY:H 4 0.13 (1,174) 1:A:61:SER:H 1:A:62:VAL:HG11 14 0.13 (1,174) 1:A:61:SER:H 1:A:62:VAL:HG12 14 0.13 (1,174) 1:A:61:SER:H 1:A:62:VAL:HG12 14 0.13 (1,174) 1:A:61:SER:H 1:A:62:VAL:HG13 14 0.13 (1,174) 1:A:61:SER:H 1:A:62:VAL:HG13 14 0.13 (1,174) 1:A:61:SER:H 1:A:62:VAL:HG13 14 0.13 (1,158) 1:A:61:SEE:H 1:A:195:LEU:HD21 11 0.13 (1,158) 1:A:163:LEU:H 1:A:195:LEU:HD22 11 0.13 (1,158) 1:A:163:LEU:H 1:A:195:LEU:HD22 11 0.13 (1,158) 1:A:26:AU:H 1:A:195:LEU:HD12 | (Å) |
|---|-----|
| (1,205) 1:A:24:VAL:HG12 1:A:192:GLY:H 4 0.13 (1,205) 1:A:24:VAL:HG13 1:A:192:GLY:H 4 0.13 (1,174) 1:A:61:SER:H 1:A:62:VAL:HG11 14 0.13 (1,174) 1:A:61:SER:H 1:A:62:VAL:HG12 14 0.13 (1,174) 1:A:61:SER:H 1:A:62:VAL:HG13 14 0.13 (1,174) 1:A:61:SER:H 1:A:62:VAL:HG13 14 0.13 (1,174) 1:A:61:SER:H 1:A:62:VAL:HG13 14 0.13 (1,158) 1:A:163:LEU:H 1:A:195:LEU:HD21 11 0.13 (1,158) 1:A:163:LEU:H 1:A:195:LEU:HD23 11 0.13 (1,158) 1:A:163:LEU:H 1:A:185:ALA:H 11 0.13 (1,158) 1:A:163:LEU:H 1:A:185:ALA:H 11 0.13 (1,158) 1:A:163:LEU:H 1:A:18:1EE:HD23 11 0.13 (1,160) 1:A:163:LEU:H 1:A:18:1EE:HD13 6 0.13 (1,123) 1:A:24:VAL:H 1:A:128:ILE:HD13 | |
| (1,205) 1:A:24:VAL:HG13 1:A:192:GLY:H 4 0.13 (1,174) 1:A:61:SER:H 1:A:62:VAL:HG11 14 0.13 (1,174) 1:A:61:SER:H 1:A:62:VAL:HG12 14 0.13 (1,174) 1:A:61:SER:H 1:A:62:VAL:HG13 14 0.13 (1,158) 1:A:163:LEU:H 1:A:195:LEU:HD21 11 0.13 (1,158) 1:A:163:LEU:H 1:A:195:LEU:HD22 11 0.13 (1,158) 1:A:163:LEU:H 1:A:195:LEU:HD23 11 0.13 (1,158) 1:A:163:LEU:H 1:A:195:LEU:HD23 11 0.13 (1,158) 1:A:163:LEU:H 1:A:195:LEU:HD23 11 0.13 (1,158) 1:A:163:LEU:H 1:A:185:LEU:HD23 11 0.13 (1,160) 1:A:163:LEU:H 1:A:182:LEU:HD23 11 0.13 (1,123) 1:A:24:VAL:H 1:A:128:ILE:HD11 6 0.13 (1,123) 1:A:24:VAL:H 1:A:128:ILE:HD13 6 0.13 (1,113) 1:A:102:PHE:H 1:A:128:ILE:HD13 | |
| (1,174) 1:A:61:SER:H 1:A:62:VAL:HG11 14 0.13 (1,174) 1:A:61:SER:H 1:A:62:VAL:HG12 14 0.13 (1,174) 1:A:61:SER:H 1:A:62:VAL:HG13 14 0.13 (1,158) 1:A:163:LEU:H 1:A:195:LEU:HD21 11 0.13 (1,158) 1:A:163:LEU:H 1:A:195:LEU:HD22 11 0.13 (1,158) 1:A:163:LEU:H 1:A:195:LEU:HD23 11 0.13 (1,146) 1:A:175:LEU:H 1:A:185:ALA:H 11 0.13 (1,123) 1:A:24:VAL:H 1:A:128:ILE:HD11 6 0.13 (1,123) 1:A:24:VAL:H 1:A:128:ILE:HD12 6 0.13 (1,123) 1:A:24:VAL:H 1:A:128:ILE:HD13 6 0.13 (1,113) 1:A:127:PHE:H 1:A:128:ILE:HD13 6 0.13 (1,1105) 1:A:102:PHE:H 1:A:128:ILE:O 15 0.13 (1,1099) 1:A:124:GLY:O 1:A:98:ILE:H 1 0.13 (1,1098) 1:A:124:GLY:O 1:A:98:ILE:N | |
| (1,174) 1:A:61:SER:H 1:A:62:VAL:HG12 14 0.13 (1,174) 1:A:61:SER:H 1:A:62:VAL:HG13 14 0.13 (1,158) 1:A:163:LEU:H 1:A:195:LEU:HD21 11 0.13 (1,158) 1:A:163:LEU:H 1:A:195:LEU:HD22 11 0.13 (1,158) 1:A:163:LEU:H 1:A:195:LEU:HD23 11 0.13 (1,146) 1:A:175:LEU:H 1:A:185:ALA:H 11 0.13 (1,123) 1:A:24:VAL:H 1:A:128:ILE:HD11 6 0.13 (1,123) 1:A:24:VAL:H 1:A:128:ILE:HD12 6 0.13 (1,123) 1:A:24:VAL:H 1:A:128:ILE:HD13 6 0.13 (1,113) 1:A:127:PHE:H 1:A:128:ILE:HD13 6 0.13 (1,1113) 1:A:102:PHE:H 1:A:129:GLY:O 19 0.13 (1,1105) 1:A:102:PHE:H 1:A:128:ILE:O 17 0.13 (1,1099) 1:A:124:GLY:O 1:A:98:ILE:H 1 0.13 (1,1098) 1:A:124:GLY:O 1:A:98:ILE:N | |
| (1,174) 1:A:61:SER:H 1:A:62:VAL:HG13 14 0.13 (1,158) 1:A:163:LEU:H 1:A:195:LEU:HD21 11 0.13 (1,158) 1:A:163:LEU:H 1:A:195:LEU:HD22 11 0.13 (1,158) 1:A:163:LEU:H 1:A:195:LEU:HD23 11 0.13 (1,146) 1:A:175:LEU:H 1:A:185:ALA:H 11 0.13 (1,123) 1:A:24:VAL:H 1:A:128:ILE:HD11 6 0.13 (1,123) 1:A:24:VAL:H 1:A:128:ILE:HD12 6 0.13 (1,123) 1:A:24:VAL:H 1:A:128:ILE:HD13 6 0.13 (1,123) 1:A:24:VAL:H 1:A:128:ILE:HD13 6 0.13 (1,113) 1:A:129:PHE:H 1:A:128:ILE:HD13 6 0.13 (1,1105) 1:A:109:PHE:H 1:A:128:ILE:O 15 0.13 (1,1099) 1:A:124:GLY:O 1:A:298:ILE:H 1 0.13 (1,1099) 1:A:124:GLY:O 1:A:98:ILE:N 7 0.13 (1,1098) 1:A:124:GLY:O 1:A:98:ILE:N | |
| (1,158) 1:A:163:LEU:H 1:A:195:LEU:HD21 11 0.13 (1,158) 1:A:163:LEU:H 1:A:195:LEU:HD22 11 0.13 (1,158) 1:A:163:LEU:H 1:A:195:LEU:HD23 11 0.13 (1,146) 1:A:175:LEU:H 1:A:185:ALA:H 11 0.13 (1,123) 1:A:24:VAL:H 1:A:128:ILE:HD11 6 0.13 (1,123) 1:A:24:VAL:H 1:A:128:ILE:HD12 6 0.13 (1,123) 1:A:24:VAL:H 1:A:128:ILE:HD13 6 0.13 (1,123) 1:A:24:VAL:H 1:A:128:ILE:HD13 6 0.13 (1,113) 1:A:122:VAL:H 1:A:128:ILE:HD13 6 0.13 (1,113) 1:A:129:PHE:H 1:A:129:GLY:O 19 0.13 (1,1105) 1:A:109:PHE:H 1:A:128:ILE:O 17 0.13 (1,1099) 1:A:124:GLY:O 1:A:98:ILE:H 1 0.13 (1,1099) 1:A:124:GLY:O 1:A:98:ILE:H 19 0.13 (1,1098) 1:A:124:GLY:O 1:A:98:ILE:N < | |
| (1,158) 1:A:163:LEU:H 1:A:195:LEU:HD22 11 0.13 (1,158) 1:A:163:LEU:H 1:A:195:LEU:HD23 11 0.13 (1,146) 1:A:175:LEU:H 1:A:185:ALA:H 11 0.13 (1,123) 1:A:24:VAL:H 1:A:128:ILE:HD11 6 0.13 (1,123) 1:A:24:VAL:H 1:A:128:ILE:HD12 6 0.13 (1,123) 1:A:24:VAL:H 1:A:128:ILE:HD13 6 0.13 (1,113) 1:A:127:PHE:H 1:A:192:GLY:O 19 0.13 (1,1105) 1:A:102:PHE:H 1:A:128:ILE:O 15 0.13 (1,105) 1:A:102:PHE:H 1:A:128:ILE:O 17 0.13 (1,1099) 1:A:124:GLY:O 1:A:98:ILE:H 1 0.13 (1,1099) 1:A:124:GLY:O 1:A:98:ILE:H 19 0.13 (1,1098) 1:A:124:GLY:O 1:A:98:ILE:N 7 0.13 (1,1070) 1:A:108:SER:O 1:A:19:SILE:N 7 0.13 (1,1046) 1:A:46:PHE:O 1:A:27:GLN:H 5 <td></td> | |
| (1,158) 1:A:163:LEU:H 1:A:195:LEU:HD23 11 0.13 (1,146) 1:A:175:LEU:H 1:A:185:ALA:H 11 0.13 (1,123) 1:A:24:VAL:H 1:A:128:ILE:HD11 6 0.13 (1,123) 1:A:24:VAL:H 1:A:128:ILE:HD12 6 0.13 (1,123) 1:A:24:VAL:H 1:A:128:ILE:HD13 6 0.13 (1,113) 1:A:127:PHE:H 1:A:192:GLY:O 19 0.13 (1,1105) 1:A:102:PHE:H 1:A:128:ILE:O 15 0.13 (1,1095) 1:A:102:PHE:H 1:A:128:ILE:O 17 0.13 (1,1099) 1:A:124:GLY:O 1:A:98:ILE:H 1 0.13 (1,1099) 1:A:124:GLY:O 1:A:98:ILE:H 19 0.13 (1,1098) 1:A:124:GLY:O 1:A:98:ILE:N 7 0.13 (1,1070) 1:A:108:SER:O 1:A:198:ILE:N 10 0.13 (1,1074) 1:A:23:SER:O 1:A:27:GLN:H 5 0.13 (1,1034) 1:A:23:SER:O 1:A:27:GLN:H 15 | |
| (1,146) 1:A:175:LEU:H 1:A:185:ALA:H 11 0.13 (1,123) 1:A:24:VAL:H 1:A:128:ILE:HD11 6 0.13 (1,123) 1:A:24:VAL:H 1:A:128:ILE:HD12 6 0.13 (1,123) 1:A:24:VAL:H 1:A:128:ILE:HD13 6 0.13 (1,113) 1:A:127:PHE:H 1:A:192:GLY:O 19 0.13 (1,1105) 1:A:102:PHE:H 1:A:128:ILE:O 15 0.13 (1,105) 1:A:102:PHE:H 1:A:128:ILE:O 17 0.13 (1,1099) 1:A:124:GLY:O 1:A:98:ILE:H 1 0.13 (1,1099) 1:A:124:GLY:O 1:A:98:ILE:H 19 0.13 (1,1098) 1:A:124:GLY:O 1:A:98:ILE:N 7 0.13 (1,1098) 1:A:124:GLY:O 1:A:98:ILE:N 7 0.13 (1,1098) 1:A:108:SER:O 1:A:112:GLN:H 5 0.13 (1,1070) 1:A:46:PHE:O 1:A:50:LEU:H 1 0.13 (1,1046) 1:A:46:PHE:O 1:A:27:GLN:H 2 | |
| (1,123) 1:A:24:VAL:H 1:A:128:ILE:HD11 6 0.13 (1,123) 1:A:24:VAL:H 1:A:128:ILE:HD12 6 0.13 (1,123) 1:A:24:VAL:H 1:A:128:ILE:HD13 6 0.13 (1,113) 1:A:127:PHE:H 1:A:192:GLY:O 19 0.13 (1,1105) 1:A:102:PHE:H 1:A:128:ILE:O 15 0.13 (1,109) 1:A:102:PHE:H 1:A:128:ILE:O 17 0.13 (1,1099) 1:A:124:GLY:O 1:A:98:ILE:H 1 0.13 (1,1099) 1:A:124:GLY:O 1:A:98:ILE:H 19 0.13 (1,1098) 1:A:124:GLY:O 1:A:98:ILE:N 7 0.13 (1,1098) 1:A:124:GLY:O 1:A:98:ILE:N 7 0.13 (1,1098) 1:A:124:GLY:O 1:A:98:ILE:N 7 0.13 (1,1070) 1:A:108:SER:O 1:A:112:GLN:H 5 0.13 (1,1046) 1:A:46:PHE:O 1:A:27:GLN:H 1 0.13 (1,1034) 1:A:23:SER:O 1:A:27:GLN:H 2 | |
| (1,123) 1:A:24:VAL:H 1:A:128:ILE:HD12 6 0.13 (1,123) 1:A:24:VAL:H 1:A:128:ILE:HD13 6 0.13 (1,1113) 1:A:127:PHE:H 1:A:192:GLY:O 19 0.13 (1,1105) 1:A:102:PHE:H 1:A:128:ILE:O 15 0.13 (1,105) 1:A:102:PHE:H 1:A:128:ILE:O 17 0.13 (1,1099) 1:A:124:GLY:O 1:A:98:ILE:H 1 0.13 (1,1099) 1:A:124:GLY:O 1:A:98:ILE:H 19 0.13 (1,1098) 1:A:124:GLY:O 1:A:98:ILE:N 7 0.13 (1,1098) 1:A:124:GLY:O 1:A:98:ILE:N 7 0.13 (1,1098) 1:A:108:SER:O 1:A:112:GLN:H 5 0.13 (1,1070) 1:A:108:SER:O 1:A:112:GLN:H 5 0.13 (1,1046) 1:A:46:PHE:O 1:A:50:LEU:H 1 0.13 (1,1034) 1:A:23:SER:O 1:A:27:GLN:H 2 0.13 (1,1032) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD21 8 | |
| (1,123) 1:A:24:VAL:H 1:A:128:ILE:HD13 6 0.13 (1,1113) 1:A:127:PHE:H 1:A:192:GLY:O 19 0.13 (1,1105) 1:A:102:PHE:H 1:A:128:ILE:O 15 0.13 (1,1105) 1:A:102:PHE:H 1:A:128:ILE:O 17 0.13 (1,1099) 1:A:124:GLY:O 1:A:98:ILE:H 1 0.13 (1,1099) 1:A:124:GLY:O 1:A:98:ILE:H 19 0.13 (1,1098) 1:A:124:GLY:O 1:A:98:ILE:N 7 0.13 (1,1098) 1:A:108:SER:O 1:A:98:ILE:N 10 0.13 (1,1070) 1:A:108:SER:O 1:A:112:GLN:H 5 0.13 (1,1046) 1:A:46:PHE:O 1:A:50:LEU:H 1 0.13 (1,1034) 1:A:23:SER:O 1:A:27:GLN:H 2 0.13 (1,1034) 1:A:22:VAL:O 1:A:26:ASN:H 15 0.13 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD21 8 0.13 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD22 8 <td></td> | |
| (1,1113) 1:A:127:PHE:H 1:A:192:GLY:O 19 0.13 (1,1105) 1:A:102:PHE:H 1:A:128:ILE:O 15 0.13 (1,1105) 1:A:102:PHE:H 1:A:128:ILE:O 17 0.13 (1,1099) 1:A:124:GLY:O 1:A:98:ILE:H 1 0.13 (1,1099) 1:A:124:GLY:O 1:A:98:ILE:H 19 0.13 (1,1098) 1:A:124:GLY:O 1:A:98:ILE:N 7 0.13 (1,1098) 1:A:108:SER:O 1:A:98:ILE:N 10 0.13 (1,1070) 1:A:108:SER:O 1:A:112:GLN:H 5 0.13 (1,1046) 1:A:46:PHE:O 1:A:50:LEU:H 1 0.13 (1,1034) 1:A:23:SER:O 1:A:27:GLN:H 2 0.13 (1,1034) 1:A:23:SER:O 1:A:27:GLN:H 15 0.13 (1,1032) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD21 8 0.13 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD22 8 0.13 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD22 | |
| (1,1113) 1:A:127:PHE:H 1:A:192:GLY:O 19 0.13 (1,1105) 1:A:102:PHE:H 1:A:128:ILE:O 15 0.13 (1,1105) 1:A:102:PHE:H 1:A:128:ILE:O 17 0.13 (1,1099) 1:A:124:GLY:O 1:A:98:ILE:H 1 0.13 (1,1099) 1:A:124:GLY:O 1:A:98:ILE:H 19 0.13 (1,1098) 1:A:124:GLY:O 1:A:98:ILE:N 7 0.13 (1,1098) 1:A:108:SER:O 1:A:98:ILE:N 10 0.13 (1,1070) 1:A:108:SER:O 1:A:112:GLN:H 5 0.13 (1,1046) 1:A:46:PHE:O 1:A:50:LEU:H 1 0.13 (1,1034) 1:A:23:SER:O 1:A:27:GLN:H 2 0.13 (1,1034) 1:A:23:SER:O 1:A:27:GLN:H 15 0.13 (1,1032) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD21 8 0.13 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD22 8 0.13 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD21 | |
| (1,1105) 1:A:102:PHE:H 1:A:128:ILE:O 15 0.13 (1,1105) 1:A:102:PHE:H 1:A:128:ILE:O 17 0.13 (1,1099) 1:A:124:GLY:O 1:A:98:ILE:H 1 0.13 (1,1099) 1:A:124:GLY:O 1:A:98:ILE:H 19 0.13 (1,1098) 1:A:124:GLY:O 1:A:98:ILE:N 7 0.13 (1,1098) 1:A:124:GLY:O 1:A:98:ILE:N 10 0.13 (1,1070) 1:A:108:SER:O 1:A:112:GLN:H 5 0.13 (1,1046) 1:A:46:PHE:O 1:A:25:GLEU:H 2 0.13 (1,1034) 1:A:23:SER:O 1:A:27:GLN:H 15 0.13 (1,1032) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD21 8 | |
| (1,1099) 1:A:124:GLY:O 1:A:98:ILE:H 1 0.13 (1,1099) 1:A:124:GLY:O 1:A:98:ILE:H 19 0.13 (1,1098) 1:A:124:GLY:O 1:A:98:ILE:N 7 0.13 (1,1098) 1:A:124:GLY:O 1:A:98:ILE:N 10 0.13 (1,1070) 1:A:108:SER:O 1:A:112:GLN:H 5 0.13 (1,1046) 1:A:46:PHE:O 1:A:50:LEU:H 1 0.13 (1,1034) 1:A:23:SER:O 1:A:27:GLN:H 2 0.13 (1,1034) 1:A:23:SER:O 1:A:27:GLN:H 15 0.13 (1,1032) 1:A:22:VAL:O 1:A:26:ASN:H 15 0.13 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD21 8 0.13 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD22 8 0.13 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD21 8 0.13 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD22 8 0.13 | |
| (1,1099) 1:A:124:GLY:O 1:A:98:ILE:H 19 0.13 (1,1098) 1:A:124:GLY:O 1:A:98:ILE:N 7 0.13 (1,1098) 1:A:124:GLY:O 1:A:98:ILE:N 10 0.13 (1,1070) 1:A:108:SER:O 1:A:112:GLN:H 5 0.13 (1,1046) 1:A:46:PHE:O 1:A:50:LEU:H 1 0.13 (1,1034) 1:A:23:SER:O 1:A:27:GLN:H 2 0.13 (1,1034) 1:A:23:SER:O 1:A:27:GLN:H 15 0.13 (1,1032) 1:A:22:VAL:O 1:A:26:ASN:H 15 0.13 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD21 8 0.13 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 8 0.13 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD21 8 0.13 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD22 8 0.13 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD22 8 0.13 | |
| (1,1099) 1:A:124:GLY:O 1:A:98:ILE:H 19 0.13 (1,1098) 1:A:124:GLY:O 1:A:98:ILE:N 7 0.13 (1,1098) 1:A:124:GLY:O 1:A:98:ILE:N 10 0.13 (1,1070) 1:A:108:SER:O 1:A:112:GLN:H 5 0.13 (1,1046) 1:A:46:PHE:O 1:A:50:LEU:H 1 0.13 (1,1034) 1:A:23:SER:O 1:A:27:GLN:H 2 0.13 (1,1034) 1:A:23:SER:O 1:A:27:GLN:H 15 0.13 (1,1032) 1:A:22:VAL:O 1:A:26:ASN:H 15 0.13 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD21 8 0.13 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 8 0.13 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD21 8 0.13 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD22 8 0.13 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD22 8 0.13 | |
| (1,1098) 1:A:124:GLY:O 1:A:98:ILE:N 7 0.13 (1,1098) 1:A:124:GLY:O 1:A:98:ILE:N 10 0.13 (1,1070) 1:A:108:SER:O 1:A:112:GLN:H 5 0.13 (1,1046) 1:A:46:PHE:O 1:A:50:LEU:H 1 0.13 (1,1034) 1:A:23:SER:O 1:A:27:GLN:H 2 0.13 (1,1034) 1:A:23:SER:O 1:A:27:GLN:H 15 0.13 (1,1032) 1:A:22:VAL:O 1:A:26:ASN:H 15 0.13 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD21 8 0.13 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 8 0.13 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD21 8 0.13 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD22 8 0.13 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD22 8 0.13 | |
| (1,1098) 1:A:124:GLY:O 1:A:98:ILE:N 10 0.13 (1,1070) 1:A:108:SER:O 1:A:112:GLN:H 5 0.13 (1,1046) 1:A:46:PHE:O 1:A:50:LEU:H 1 0.13 (1,1034) 1:A:23:SER:O 1:A:27:GLN:H 2 0.13 (1,1034) 1:A:23:SER:O 1:A:27:GLN:H 15 0.13 (1,1032) 1:A:22:VAL:O 1:A:26:ASN:H 15 0.13 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD21 8 0.13 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 8 0.13 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD21 8 0.13 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD22 8 0.13 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD22 8 0.13 | |
| (1,1070) 1:A:108:SER:O 1:A:112:GLN:H 5 0.13 (1,1046) 1:A:46:PHE:O 1:A:50:LEU:H 1 0.13 (1,1034) 1:A:23:SER:O 1:A:27:GLN:H 2 0.13 (1,1034) 1:A:23:SER:O 1:A:27:GLN:H 15 0.13 (1,1032) 1:A:22:VAL:O 1:A:26:ASN:H 15 0.13 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD21 8 0.13 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD22 8 0.13 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD21 8 0.13 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD22 8 0.13 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD22 8 0.13 | |
| (1,1046) 1:A:46:PHE:O 1:A:50:LEU:H 1 0.13 (1,1034) 1:A:23:SER:O 1:A:27:GLN:H 2 0.13 (1,1034) 1:A:23:SER:O 1:A:27:GLN:H 15 0.13 (1,1032) 1:A:22:VAL:O 1:A:26:ASN:H 15 0.13 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD21 8 0.13 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD22 8 0.13 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD21 8 0.13 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD22 8 0.13 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD22 8 0.13 | |
| (1,1034) 1:A:23:SER:O 1:A:27:GLN:H 15 0.13 (1,1032) 1:A:22:VAL:O 1:A:26:ASN:H 15 0.13 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD21 8 0.13 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD22 8 0.13 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 8 0.13 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD21 8 0.13 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD22 8 0.13 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD22 8 0.13 | |
| (1,1032) 1:A:22:VAL:O 1:A:26:ASN:H 15 0.13 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD21 8 0.13 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD22 8 0.13 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 8 0.13 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD21 8 0.13 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD22 8 0.13 | |
| (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD21 8 0.13 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD22 8 0.13 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 8 0.13 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD21 8 0.13 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD22 8 0.13 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD22 8 0.13 | |
| (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD22 8 0.13 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 8 0.13 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD21 8 0.13 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD22 8 0.13 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD22 8 0.13 | |
| (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 8 0.13 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD21 8 0.13 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD22 8 0.13 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD22 8 0.13 | |
| (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD21 8 0.13 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD22 8 0.13 | |
| (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD21 8 0.13 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD22 8 0.13 | |
| (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD22 8 0.13 | |
| (1 1002) 1 A 107 I DI IID10 1 A 07 I DI IID00 0 0 10 | |
| (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD23 8 0.13 | |
| (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD21 8 0.13 | |
| (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD22 8 0.13 | |
| (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 8 0.13 | |
| (1,1017) 1:A:101:ILE:HA 1:A:128:ILE:H 7 0.13 | |
| (1,1013) 1:A:126:VAL:HA 1:A:193:GLN:HA 15 0.13 | |
| (1,1003) 1:A:59:GLN:H 1:A:37:ALA:H 10 0.13 | |
| (1,994) 1:A:79:THR:H 1:A:54:VAL:H 17 0.12 | |
| (1,993) 1:A:36:LEU:H 1:A:99:VAL:H 1 0.12 | |
| (1,988) 1:A:117:VAL:HG21 1:A:121:LEU:H 11 0.12 | |
| (1,988) 1:A:117:VAL:HG22 1:A:121:LEU:H 11 0.12 | |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,988) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:H | 11 | 0.12 |
| (1,967) | 1:A:146:ASP:H | 1:A:149:LEU:HD11 | 6 | 0.12 |
| (1,967) | 1:A:146:ASP:H | 1:A:149:LEU:HD12 | 6 | 0.12 |
| (1,967) | 1:A:146:ASP:H | 1:A:149:LEU:HD13 | 6 | 0.12 |
| (1,964) | 1:A:116:LYS:H | 1:A:117:VAL:HG21 | 6 | 0.12 |
| (1,964) | 1:A:116:LYS:H | 1:A:117:VAL:HG22 | 6 | 0.12 |
| (1,964) | 1:A:116:LYS:H | 1:A:117:VAL:HG23 | 6 | 0.12 |
| (1,964) | 1:A:116:LYS:H | 1:A:117:VAL:HG21 | 9 | 0.12 |
| (1,964) | 1:A:116:LYS:H | 1:A:117:VAL:HG22 | 9 | 0.12 |
| (1,964) | 1:A:116:LYS:H | 1:A:117:VAL:HG23 | 9 | 0.12 |
| (1,964) | 1:A:116:LYS:H | 1:A:117:VAL:HG21 | 19 | 0.12 |
| (1,964) | 1:A:116:LYS:H | 1:A:117:VAL:HG22 | 19 | 0.12 |
| (1,964) | 1:A:116:LYS:H | 1:A:117:VAL:HG23 | 19 | 0.12 |
| (1,954) | 1:A:70:LEU:H | 1:A:78:ILE:HD11 | 17 | 0.12 |
| (1,954) | 1:A:70:LEU:H | 1:A:78:ILE:HD12 | 17 | 0.12 |
| (1,954) | 1:A:70:LEU:H | 1:A:78:ILE:HD13 | 17 | 0.12 |
| (1,936) | 1:A:153:LEU:HD21 | 1:A:157:GLN:H | 3 | 0.12 |
| (1,936) | 1:A:153:LEU:HD22 | 1:A:157:GLN:H | 3 | 0.12 |
| (1,936) | 1:A:153:LEU:HD23 | 1:A:157:GLN:H | 3 | 0.12 |
| (1,934) | 1:A:137:LEU:HD11 | 1:A:145:LYS:H | 17 | 0.12 |
| (1,934) | 1:A:137:LEU:HD12 | 1:A:145:LYS:H | 17 | 0.12 |
| (1,934) | 1:A:137:LEU:HD13 | 1:A:145:LYS:H | 17 | 0.12 |
| (1,912) | 1:A:56:ALA:H | 1:A:81:VAL:HG21 | 5 | 0.12 |
| (1,912) | 1:A:56:ALA:H | 1:A:81:VAL:HG22 | 5 | 0.12 |
| (1,912) | 1:A:56:ALA:H | 1:A:81:VAL:HG23 | 5 | 0.12 |
| (1,896) | 1:A:166:LEU:HD11 | 1:A:193:GLN:H | 4 | 0.12 |
| (1,896) | 1:A:166:LEU:HD12 | 1:A:193:GLN:H | 4 | 0.12 |
| (1,896) | 1:A:166:LEU:HD13 | 1:A:193:GLN:H | 4 | 0.12 |
| (1,891) | 1:A:125:GLY:H | 1:A:163:LEU:HD21 | 15 | 0.12 |
| (1,891) | 1:A:125:GLY:H | 1:A:163:LEU:HD22 | 15 | 0.12 |
| (1,891) | 1:A:125:GLY:H | 1:A:163:LEU:HD23 | 15 | 0.12 |
| (1,891) | 1:A:125:GLY:H | 1:A:163:LEU:HD21 | 18 | 0.12 |
| (1,891) | 1:A:125:GLY:H | 1:A:163:LEU:HD22 | 18 | 0.12 |
| (1,891) | 1:A:125:GLY:H | 1:A:163:LEU:HD23 | 18 | 0.12 |
| (1,854) | 1:A:131:GLY:H | 1:A:153:LEU:HD21 | 2 | 0.12 |
| (1,854) | 1:A:131:GLY:H | 1:A:153:LEU:HD22 | 2 | 0.12 |
| (1,854) | 1:A:131:GLY:H | 1:A:153:LEU:HD23 | 2 | 0.12 |
| (1,854) | 1:A:131:GLY:H | 1:A:153:LEU:HD21 | 4 | 0.12 |
| (1,854) | 1:A:131:GLY:H | 1:A:153:LEU:HD22 | 4 | 0.12 |
| (1,854) | 1:A:131:GLY:H | 1:A:153:LEU:HD23 | 4 | 0.12 |
| (1,854) | 1:A:131:GLY:H | 1:A:153:LEU:HD21 | 17 | 0.12 |
| (1,854) | 1:A:131:GLY:H | 1:A:153:LEU:HD22 | 17 | 0.12 |



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

| (1.054) | Atom-1 | $\mathbf{Atom-2}$ | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|-------------------|-------|---------------|
| (1,854) | 1:A:131:GLY:H | 1:A:153:LEU:HD23 | 17 | 0.12 |
| (1,848) | 1:A:91:VAL:HG21 | 1:A:95:TRP:HE1 | 2 | 0.12 |
| (1,848) | 1:A:91:VAL:HG22 | 1:A:95:TRP:HE1 | 2 | 0.12 |
| (1,848) | 1:A:91:VAL:HG23 | 1:A:95:TRP:HE1 | 2 | 0.12 |
| (1,848) | 1:A:91:VAL:HG21 | 1:A:95:TRP:HE1 | 6 | 0.12 |
| (1,848) | 1:A:91:VAL:HG22 | 1:A:95:TRP:HE1 | 6 | 0.12 |
| (1,848) | 1:A:91:VAL:HG23 | 1:A:95:TRP:HE1 | 6 | 0.12 |
| (1,841) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:146:ASP:H | 4 | 0.12 |
| (1,841) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:146:ASP:H | 4 | 0.12 |
| (1,841) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:146:ASP:H | 4 | 0.12 |
| (1,840) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:121:LEU:H | 14 | 0.12 |
| (1,840) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:121:LEU:H | 14 | 0.12 |
| (1,840) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:121:LEU:H | 14 | 0.12 |
| (1,831) | 1:A:117:VAL:HG11 | 1:A:118:TYR:H | 1 | 0.12 |
| (1,831) | 1:A:117:VAL:HG12 | 1:A:118:TYR:H | 1 | 0.12 |
| (1,831) | 1:A:117:VAL:HG13 | 1:A:118:TYR:H | 1 | 0.12 |
| (1,831) | 1:A:117:VAL:HG11 | 1:A:118:TYR:H | 2 | 0.12 |
| (1,831) | 1:A:117:VAL:HG12 | 1:A:118:TYR:H | 2 | 0.12 |
| (1,831) | 1:A:117:VAL:HG13 | 1:A:118:TYR:H | 2 | 0.12 |
| (1,827) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:36:LEU:H | 10 | 0.12 |
| (1,827) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:36:LEU:H | 10 | 0.12 |
| (1,827) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:36:LEU:H | 10 | 0.12 |
| (1,827) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:36:LEU:H | 13 | 0.12 |
| (1,827) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:36:LEU:H | 13 | 0.12 |
| (1,827) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:36:LEU:H | 13 | 0.12 |
| (1,827) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:36:LEU:H | 20 | 0.12 |
| (1,827) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:36:LEU:H | 20 | 0.12 |
| (1,827) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:36:LEU:H | 20 | 0.12 |
| (1,823) | 1:A:23:SER:H | 1:A:24:VAL:HG21 | 19 | 0.12 |
| (1,823) | 1:A:23:SER:H | 1:A:24:VAL:HG22 | 19 | 0.12 |
| (1,823) | 1:A:23:SER:H | 1:A:24:VAL:HG23 | 19 | 0.12 |
| (1,809) | 1:A:91:VAL:HG11 | 1:A:92:ALA:H | 1 | 0.12 |
| (1,809) | 1:A:91:VAL:HG12 | 1:A:92:ALA:H | 1 | 0.12 |
| (1,809) | 1:A:91:VAL:HG13 | 1:A:92:ALA:H | 1 | 0.12 |
| (1,809) | 1:A:91:VAL:HG11 | 1:A:92:ALA:H | 14 | 0.12 |
| (1,809) | 1:A:91:VAL:HG12 | 1:A:92:ALA:H | 14 | 0.12 |
| (1,809) | 1:A:91:VAL:HG13 | 1:A:92:ALA:H | 14 | 0.12 |
| (1,806) | 1:A:166:LEU:HD21 | 1:A:193:GLN:H | 3 | 0.12 |
| (1,806) | 1:A:166:LEU:HD22 | 1:A:193:GLN:H | 3 | 0.12 |
| (1,806) | 1:A:166:LEU:HD23 | 1:A:193:GLN:H | 3 | 0.12 |
| (1,801) | 1:A:113:LEU:HD11 | 1:A:116:LYS:H | 6 | 0.12 |
| (1,801) | 1:A:113:LEU:HD12 | 1:A:116:LYS:H | 6 | 0.12 |



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

| (1,801) 1:A:113:LEU:HD13 1:A:116:LYS:H 6 0.12 (1,790) 1:A:84:ASN:H 1:A:85:LEU:HD21 9 0.12 (1,790) 1:A:84:ASN:H 1:A:85:LEU:HD22 9 0.12 (1,790) 1:A:84:ASN:H 1:A:85:LEU:HD23 9 0.12 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD11 14 0.12 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD13 14 0.12 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD13 14 0.12 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD12 14 0.12 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD13 14 0.12 (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD11 14 0.12 (1,776) 1:A:147:LEU:HD21 1:A:150:LEU:HD13 14 0.12 (1,776) 1:A:147:LEU:HD21 1:A:150:LEU:HD21 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD21 1:A:150:LEU:HD21 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD22 <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) |
|--|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,790) 1:A:84:ASN:H 1:A:85:LEU:HD22 9 0.12 (1,790) 1:A:84:ASN:H 1:A:85:LEU:HD23 9 0.12 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD11 14 0.12 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD13 14 0.12 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD11 14 0.12 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD13 14 0.12 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD13 14 0.12 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD13 14 0.12 (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD13 14 0.12 (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD12 14 0.12 (1,776) 1:A:147:LEU:HD21 1:A:150:LEU:HD21 14 0.12 (1,772) 1:A:147:LEU:HD21 1:A:150:LEU:HD21 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD21 1:A:150:LEU:HD22 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LE | (1,801) | 1:A:113:LEU:HD13 | 1:A:116:LYS:H | 6 | 0.12 |
| (1,790) 1:A:84:ASN:H 1:A:85:LEU:HD23 9 0.12 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD11 14 0.12 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD12 14 0.12 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD13 14 0.12 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD11 14 0.12 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD13 14 0.12 (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD13 14 0.12 (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD11 14 0.12 (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD11 14 0.12 (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD11 14 0.12 (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD13 14 0.12 (1,776) 1:A:147:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD13 14 0.12 (1,776) 1:A:147:LEU:HD21 1:A:150:LEU:HD21 4 0.12 (1,732) 1:A | (1,790) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:85:LEU:HD21 | 9 | 0.12 |
| (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD11 14 0.12 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD12 14 0.12 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD13 14 0.12 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD13 14 0.12 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD11 14 0.12 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD11 14 0.12 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD13 14 0.12 (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD13 14 0.12 (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD11 14 0.12 (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD11 14 0.12 (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD12 14 0.12 (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD12 14 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD13 1:A:150:LEU:HD13 14 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD21 1:A:150:LEU:HD21 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD21 1:A:150:LEU:HD22 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD21 1:A:150:LEU:HD23 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD22 1:A:150:LEU:HD23 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD22 1:A:150:LEU:HD23 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD22 1:A:150:LEU:HD24 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD22 1:A:150:LEU:HD24 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD22 1:A:150:LEU:HD24 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD24 4 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD14 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD14 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD14 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD14 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD14 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD14 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD14 10 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG11 | (1,790) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:85:LEU:HD22 | 9 | 0.12 |
| (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD12 14 0.12 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD11 14 0.12 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD11 14 0.12 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD11 14 0.12 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD13 14 0.12 (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD13 14 0.12 (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD11 14 0.12 (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD11 14 0.12 (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD12 14 0.12 (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD12 14 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD13 1:A:150:LEU:HD13 14 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD13 1:A:150:LEU:HD13 14 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD21 1:A:150:LEU:HD21 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD21 1:A:150:LEU:HD22 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD22 1:A:150:LEU:HD23 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:150:LEU:HD21 4 0.12 (1,731) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD13 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD13 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD11 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD11 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD11 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD11 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD11 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD11 19 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD11 19 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD11 19 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD | (1,790) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:85:LEU:HD23 | 9 | 0.12 |
| (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD13 14 0.12 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD11 14 0.12 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD13 14 0.12 (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD13 14 0.12 (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD11 14 0.12 (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD12 14 0.12 (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD12 14 0.12 (1,776) 1:A:147:LEU:HD21 1:A:150:LEU:HD13 14 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD21 1:A:150:LEU:HD22 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD21 1:A:150:LEU:HD23 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD22 1:A:150:LEU:HD22 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD22 1:A:150:LEU:HD23 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:150:LEU:HD23 4 0.12 (1,732) 1 | (1,776) | 1:A:153:LEU:HD11 | 1:A:190:LEU:HD11 | 14 | 0.12 |
| (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD11 14 0.12 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD12 14 0.12 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD13 14 0.12 (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD11 14 0.12 (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD11 14 0.12 (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD12 14 0.12 (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD12 14 0.12 (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD13 14 0.12 (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD13 14 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD21 1:A:150:LEU:HD21 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD21 1:A:150:LEU:HD22 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD21 1:A:150:LEU:HD22 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD22 1:A:150:LEU:HD23 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD22 1:A:150:LEU:HD22 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD22 1:A:150:LEU:HD22 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD22 1:A:150:LEU:HD22 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD22 1:A:150:LEU:HD23 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:150:LEU:HD23 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:150:LEU:HD23 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:150:LEU:HD24 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:150:LEU:HD24 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:150:LEU:HD21 4 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD12 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD11 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD11 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD11 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD11 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD11 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 | (1,776) | 1:A:153:LEU:HD11 | 1:A:190:LEU:HD12 | 14 | 0.12 |
| (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD12 14 0.12 (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD13 14 0.12 (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD11 14 0.12 (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD11 14 0.12 (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD12 14 0.12 (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD13 14 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD21 1:A:150:LEU:HD13 14 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD21 1:A:150:LEU:HD22 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD21 1:A:150:LEU:HD23 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD21 1:A:150:LEU:HD23 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD22 1:A:150:LEU:HD23 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:150:LEU:HD23 4 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD23 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD11 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD11 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD11 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD11 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD11 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD11 9 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG11 1:A:101:ILE:HD11 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:10 | (1,776) | 1:A:153:LEU:HD11 | 1:A:190:LEU:HD13 | 14 | 0.12 |
| (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD13 14 0.12 (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD11 14 0.12 (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD12 14 0.12 (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD13 14 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD21 1:A:150:LEU:HD21 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD21 1:A:150:LEU:HD22 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD21 1:A:150:LEU:HD23 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD22 1:A:150:LEU:HD23 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD22 1:A:150:LEU:HD23 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD22 1:A:150:LEU:HD23 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:150:LEU:HD23 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:150:LEU:HD23 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:150:LEU:HD23 4 0.12 (1,732) 1:A:1 | (1,776) | 1:A:153:LEU:HD12 | 1:A:190:LEU:HD11 | 14 | 0.12 |
| (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD11 14 0.12 (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD12 14 0.12 (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD13 14 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD21 1:A:150:LEU:HD21 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD21 1:A:150:LEU:HD22 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD22 1:A:150:LEU:HD23 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD22 1:A:150:LEU:HD21 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD22 1:A:150:LEU:HD22 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD22 1:A:150:LEU:HD23 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:150:LEU:HD21 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:150:LEU:HD23 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:150:LEU:HD23 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD23 4 0.12 (1,701) 1:A:13 | (1,776) | 1:A:153:LEU:HD12 | 1:A:190:LEU:HD12 | 14 | 0.12 |
| (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD12 14 0.12 (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD13 14 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD21 1:A:150:LEU:HD21 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD21 1:A:150:LEU:HD22 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD22 1:A:150:LEU:HD23 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD22 1:A:150:LEU:HD22 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD22 1:A:150:LEU:HD23 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:150:LEU:HD23 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:150:LEU:HD21 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:150:LEU:HD22 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD23 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD23 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD13 9 0.12 (1,701) 1:A:137 | (1,776) | 1:A:153:LEU:HD12 | 1:A:190:LEU:HD13 | 14 | 0.12 |
| (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD13 14 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD21 1:A:150:LEU:HD21 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD21 1:A:150:LEU:HD22 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD21 1:A:150:LEU:HD23 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD22 1:A:150:LEU:HD21 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD22 1:A:150:LEU:HD22 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD22 1:A:150:LEU:HD23 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:150:LEU:HD21 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:150:LEU:HD22 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:150:LEU:HD23 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:150:LEU:HD23 4 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD13 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD13 9 0.12 (1,701) 1:A:137: | (1,776) | 1:A:153:LEU:HD13 | 1:A:190:LEU:HD11 | 14 | 0.12 |
| (1,732) 1:A:147:LEU:HD21 1:A:150:LEU:HD21 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD21 1:A:150:LEU:HD22 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD21 1:A:150:LEU:HD23 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD22 1:A:150:LEU:HD21 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD22 1:A:150:LEU:HD22 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:150:LEU:HD23 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:150:LEU:HD21 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:150:LEU:HD21 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:150:LEU:HD22 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:150:LEU:HD23 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD11 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD11 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD13 9 0.12 (1,701) 1:A:137:L | (1,776) | 1:A:153:LEU:HD13 | 1:A:190:LEU:HD12 | 14 | 0.12 |
| (1,732) 1:A:147:LEU:HD21 1:A:150:LEU:HD22 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD21 1:A:150:LEU:HD23 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD22 1:A:150:LEU:HD21 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD22 1:A:150:LEU:HD22 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:150:LEU:HD23 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:150:LEU:HD21 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:150:LEU:HD22 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:150:LEU:HD23 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:150:LEU:HD23 4 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD13 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD11 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD11 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD13 9 0.12 (1,701) 1:A:137:L | (1,776) | 1:A:153:LEU:HD13 | 1:A:190:LEU:HD13 | 14 | 0.12 |
| (1,732) 1:A:147:LEU:HD21 1:A:150:LEU:HD23 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD21 1:A:150:LEU:HD23 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD22 1:A:150:LEU:HD21 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD22 1:A:150:LEU:HD23 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:150:LEU:HD23 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:150:LEU:HD21 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:150:LEU:HD22 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:150:LEU:HD23 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:150:LEU:HD23 4 0.12 (1,701) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD13 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD13 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD11 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD13 9 0.12 (1,701) 1:A:137:L | | 1:A:147:LEU:HD21 | 1:A:150:LEU:HD21 | 4 | 0.12 |
| (1,732) 1:A:147:LEU:HD22 1:A:150:LEU:HD22 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD22 1:A:150:LEU:HD22 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD22 1:A:150:LEU:HD23 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:150:LEU:HD21 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:150:LEU:HD22 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:150:LEU:HD23 4 0.12 (1,701) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD23 4 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD11 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD13 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD11 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD13 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD13 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD13 9 0.12 (1,701) 1:A:137:L | (1,732) | 1:A:147:LEU:HD21 | 1:A:150:LEU:HD22 | 4 | 0.12 |
| (1,732) 1:A:147:LEU:HD22 1:A:150:LEU:HD22 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD22 1:A:150:LEU:HD23 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:150:LEU:HD21 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:150:LEU:HD22 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:150:LEU:HD23 4 0.12 (1,701) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD13 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD12 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD13 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD12 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD13 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD13 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD13 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD13 9 0.12 (1,694) 1:A:99:VA | (1,732) | 1:A:147:LEU:HD21 | 1:A:150:LEU:HD23 | 4 | 0.12 |
| (1,732) 1:A:147:LEU:HD22 1:A:150:LEU:HD23 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:150:LEU:HD21 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:150:LEU:HD22 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:150:LEU:HD23 4 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD11 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD12 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD13 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD11 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD13 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD13 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD13 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD13 9 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG11 1:A:101:ILE:HD13 9 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL | (1,732) | 1:A:147:LEU:HD22 | 1:A:150:LEU:HD21 | 4 | 0.12 |
| (1,732) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:150:LEU:HD21 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:150:LEU:HD22 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:150:LEU:HD23 4 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD11 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD12 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD13 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD11 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD13 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD13 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD13 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD11 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD11 9 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG11 1:A:101:ILE:HD11 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VA | / | 1:A:147:LEU:HD22 | 1:A:150:LEU:HD22 | 4 | 0.12 |
| (1,732) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:150:LEU:HD23 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:150:LEU:HD23 4 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD11 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD12 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD13 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD11 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD13 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD13 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD11 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD12 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD13 9 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG11 1:A:101:ILE:HD11 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG12 1:A:101:ILE:HD11 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VA | (1,732) | 1:A:147:LEU:HD22 | 1:A:150:LEU:HD23 | 4 | 0.12 |
| (1,732) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:150:LEU:HD23 4 0.12 (1,732) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:150:LEU:HD23 4 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD11 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD12 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD13 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD11 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD13 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD13 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD11 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD13 9 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG11 1:A:101:ILE:HD13 9 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG11 1:A:101:ILE:HD13 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG12 1:A:101:ILE:HD11 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL | (1,732) | 1:A:147:LEU:HD23 | 1:A:150:LEU:HD21 | 4 | 0.12 |
| (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD11 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD12 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD13 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD11 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD12 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD13 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD11 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD13 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD13 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD13 9 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG11 1:A:101:ILE:HD13 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG12 1:A:101:ILE:HD11 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG12 1:A:101:ILE:HD13 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VA | (1,732) | 1:A:147:LEU:HD23 | 1:A:150:LEU:HD22 | 4 | 0.12 |
| (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD12 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD13 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD11 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD12 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD13 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD11 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD12 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD13 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD13 9 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG11 1:A:101:ILE:HD13 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG11 1:A:101:ILE:HD11 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG12 1:A:101:ILE:HD13 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:101:ILE:HD13 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VA | (1,732) | 1:A:147:LEU:HD23 | 1:A:150:LEU:HD23 | 4 | 0.12 |
| (1,701) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD13 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD11 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD12 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD13 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD11 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD12 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD13 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD13 9 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG11 1:A:101:ILE:HD11 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG11 1:A:101:ILE:HD13 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG12 1:A:101:ILE:HD11 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG12 1:A:101:ILE:HD13 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:101:ILE:HD11 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:101:ILE:HD12 16 0.12 (1,694) | (1,701) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD11 | 9 | 0.12 |
| (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD11 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD12 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD13 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD11 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD12 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD13 9 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG11 1:A:101:ILE:HD11 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG11 1:A:101:ILE:HD12 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG12 1:A:101:ILE:HD11 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG12 1:A:101:ILE:HD12 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:101:ILE:HD13 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:101:ILE:HD11 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:101:ILE:HD12 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:101:ILE:HD13 16 0.12 (1,694) | (1,701) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD12 | 9 | 0.12 |
| (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD12 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD13 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD11 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD12 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD13 9 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG11 1:A:101:ILE:HD11 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG11 1:A:101:ILE:HD12 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG12 1:A:101:ILE:HD13 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG12 1:A:101:ILE:HD12 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:101:ILE:HD13 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:101:ILE:HD11 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:101:ILE:HD11 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:101:ILE:HD13 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:101:ILE:HD13 16 0.12 (1,694) | (1,701) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD13 | 9 | 0.12 |
| (1,701) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD13 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD11 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD12 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD13 9 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG11 1:A:101:ILE:HD11 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG11 1:A:101:ILE:HD12 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG12 1:A:101:ILE:HD13 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG12 1:A:101:ILE:HD12 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG12 1:A:101:ILE:HD13 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:101:ILE:HD11 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:101:ILE:HD11 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:101:ILE:HD12 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:101:ILE:HD12 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:101:ILE:HD13 16 0.12 (1,694) | (1,701) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD11 | 9 | 0.12 |
| (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD11 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD12 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD13 9 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG11 1:A:101:ILE:HD11 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG11 1:A:101:ILE:HD13 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG12 1:A:101:ILE:HD13 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG12 1:A:101:ILE:HD12 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG12 1:A:101:ILE:HD13 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:101:ILE:HD11 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:101:ILE:HD11 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:101:ILE:HD12 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:101:ILE:HD13 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:101:ILE:HD13 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:101:ILE:HD13 16 0.12 | (1,701) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD12 | 9 | 0.12 |
| (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD12 9 0.12 (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD13 9 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG11 1:A:101:ILE:HD11 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG11 1:A:101:ILE:HD12 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG11 1:A:101:ILE:HD13 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG12 1:A:101:ILE:HD11 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG12 1:A:101:ILE:HD13 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:101:ILE:HD11 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:101:ILE:HD11 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:101:ILE:HD12 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:101:ILE:HD12 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:101:ILE:HD13 16 0.12 (1,694) 1:A:146:ASP:H 1:A:150:LEU:H 8 0.12 | (1,701) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD13 | 9 | 0.12 |
| (1,701) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD13 9 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG11 1:A:101:ILE:HD11 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG11 1:A:101:ILE:HD12 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG11 1:A:101:ILE:HD13 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG12 1:A:101:ILE:HD11 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG12 1:A:101:ILE:HD12 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:101:ILE:HD13 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:101:ILE:HD11 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:101:ILE:HD12 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:101:ILE:HD13 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:101:ILE:HD13 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:101:ILE:HD13 16 0.12 (1,694) 1:A:146:ASP:H 1:A:150:LEU:H 8 0.12 | (1,701) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD11 | 9 | 0.12 |
| (1,694) 1:A:99:VAL:HG11 1:A:101:ILE:HD11 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG11 1:A:101:ILE:HD12 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG11 1:A:101:ILE:HD13 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG12 1:A:101:ILE:HD11 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG12 1:A:101:ILE:HD12 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:101:ILE:HD11 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:101:ILE:HD12 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:101:ILE:HD12 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:101:ILE:HD13 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:101:ILE:HD13 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:101:ILE:HD13 16 0.12 (1,694) 1:A:146:ASP:H 1:A:150:LEU:H 8 0.12 | (1,701) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD12 | 9 | 0.12 |
| (1,694) 1:A:99:VAL:HG11 1:A:101:ILE:HD12 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG11 1:A:101:ILE:HD13 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG12 1:A:101:ILE:HD11 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG12 1:A:101:ILE:HD12 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG12 1:A:101:ILE:HD13 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:101:ILE:HD11 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:101:ILE:HD12 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:101:ILE:HD13 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:101:ILE:HD13 16 0.12 (1,632) 1:A:146:ASP:H 1:A:150:LEU:H 8 0.12 | (1,701) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD13 | 9 | 0.12 |
| (1,694) 1:A:99:VAL:HG11 1:A:101:ILE:HD13 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG12 1:A:101:ILE:HD11 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG12 1:A:101:ILE:HD12 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG12 1:A:101:ILE:HD13 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:101:ILE:HD11 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:101:ILE:HD12 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:101:ILE:HD13 16 0.12 (1,694) 1:A:146:ASP:H 1:A:150:LEU:H 8 0.12 | (1,694) | 1:A:99:VAL:HG11 | 1:A:101:ILE:HD11 | 16 | 0.12 |
| (1,694) 1:A:99:VAL:HG11 1:A:101:ILE:HD13 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG12 1:A:101:ILE:HD11 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG12 1:A:101:ILE:HD12 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG12 1:A:101:ILE:HD13 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:101:ILE:HD11 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:101:ILE:HD12 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:101:ILE:HD13 16 0.12 (1,694) 1:A:146:ASP:H 1:A:150:LEU:H 8 0.12 | , | 1:A:99:VAL:HG11 | 1:A:101:ILE:HD12 | 16 | 0.12 |
| (1,694) 1:A:99:VAL:HG12 1:A:101:ILE:HD11 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG12 1:A:101:ILE:HD12 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG12 1:A:101:ILE:HD13 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:101:ILE:HD11 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:101:ILE:HD12 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:101:ILE:HD13 16 0.12 (1,632) 1:A:146:ASP:H 1:A:150:LEU:H 8 0.12 | · · / | 1:A:99:VAL:HG11 | 1:A:101:ILE:HD13 | 16 | 0.12 |
| (1,694) 1:A:99:VAL:HG12 1:A:101:ILE:HD12 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG12 1:A:101:ILE:HD13 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:101:ILE:HD11 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:101:ILE:HD12 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:101:ILE:HD13 16 0.12 (1,694) 1:A:146:ASP:H 1:A:150:LEU:H 8 0.12 | (1,694) | 1:A:99:VAL:HG12 | 1:A:101:ILE:HD11 | 16 | 0.12 |
| (1,694) 1:A:99:VAL:HG12 1:A:101:ILE:HD13 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:101:ILE:HD11 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:101:ILE:HD12 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:101:ILE:HD13 16 0.12 (1,632) 1:A:146:ASP:H 1:A:150:LEU:H 8 0.12 | , | 1:A:99:VAL:HG12 | 1:A:101:ILE:HD12 | 16 | 0.12 |
| (1,694) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:101:ILE:HD11 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:101:ILE:HD12 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:101:ILE:HD13 16 0.12 (1,632) 1:A:146:ASP:H 1:A:150:LEU:H 8 0.12 | · · / | 1:A:99:VAL:HG12 | 1:A:101:ILE:HD13 | 16 | 0.12 |
| (1,694) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:101:ILE:HD12 16 0.12 (1,694) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:101:ILE:HD13 16 0.12 (1,632) 1:A:146:ASP:H 1:A:150:LEU:H 8 0.12 | · · / | 1:A:99:VAL:HG13 | 1:A:101:ILE:HD11 | 16 | 0.12 |
| (1,694) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:101:ILE:HD13 16 0.12 (1,632) 1:A:146:ASP:H 1:A:150:LEU:H 8 0.12 | / | 1:A:99:VAL:HG13 | 1:A:101:ILE:HD12 | 16 | 0.12 |
| (1,632) 1:A:146:ASP:H 1:A:150:LEU:H 8 0.12 | ` ' | | 1:A:101:ILE:HD13 | 16 | 0.12 |
| | · · / | 1:A:146:ASP:H | 1:A:150:LEU:H | | |
| | (1,596) | 1:A:164:ASN:H | 1:A:195:LEU:H | | |



Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,596) | 1:A:164:ASN:H | 1:A:195:LEU:H | 13 | 0.12 |
| (1,570) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:145:LYS:H | 9 | 0.12 |
| (1,570) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:145:LYS:H | 9 | 0.12 |
| (1,570) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:145:LYS:H | 9 | 0.12 |
| (1,570) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:145:LYS:H | 19 | 0.12 |
| (1,570) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:145:LYS:H | 19 | 0.12 |
| (1,570) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:145:LYS:H | 19 | 0.12 |
| (1,560) | 1:A:47:LEU:HD21 | 1:A:50:LEU:HD21 | 10 | 0.12 |
| (1,560) | 1:A:47:LEU:HD21 | 1:A:50:LEU:HD22 | 10 | 0.12 |
| (1,560) | 1:A:47:LEU:HD21 | 1:A:50:LEU:HD23 | 10 | 0.12 |
| (1,560) | 1:A:47:LEU:HD22 | 1:A:50:LEU:HD21 | 10 | 0.12 |
| (1,560) | 1:A:47:LEU:HD22 | 1:A:50:LEU:HD22 | 10 | 0.12 |
| (1,560) | 1:A:47:LEU:HD22 | 1:A:50:LEU:HD23 | 10 | 0.12 |
| (1,560) | 1:A:47:LEU:HD23 | 1:A:50:LEU:HD21 | 10 | 0.12 |
| (1,560) | 1:A:47:LEU:HD23 | 1:A:50:LEU:HD22 | 10 | 0.12 |
| (1,560) | 1:A:47:LEU:HD23 | 1:A:50:LEU:HD23 | 10 | 0.12 |
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD11 | 1:A:163:LEU:HD21 | 9 | 0.12 |
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD11 | 1:A:163:LEU:HD22 | 9 | 0.12 |
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD11 | 1:A:163:LEU:HD23 | 9 | 0.12 |
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD12 | 1:A:163:LEU:HD21 | 9 | 0.12 |
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD12 | 1:A:163:LEU:HD22 | 9 | 0.12 |
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD12 | 1:A:163:LEU:HD23 | 9 | 0.12 |
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD13 | 1:A:163:LEU:HD21 | 9 | 0.12 |
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD13 | 1:A:163:LEU:HD22 | 9 | 0.12 |
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD13 | 1:A:163:LEU:HD23 | 9 | 0.12 |
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD11 | 1:A:163:LEU:HD21 | 16 | 0.12 |
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD11 | 1:A:163:LEU:HD22 | 16 | 0.12 |
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD11 | 1:A:163:LEU:HD23 | 16 | 0.12 |
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD12 | 1:A:163:LEU:HD21 | 16 | 0.12 |
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD12 | 1:A:163:LEU:HD22 | 16 | 0.12 |
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD12 | 1:A:163:LEU:HD23 | 16 | 0.12 |
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD13 | 1:A:163:LEU:HD21 | 16 | 0.12 |
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD13 | 1:A:163:LEU:HD22 | 16 | 0.12 |
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD13 | 1:A:163:LEU:HD23 | 16 | 0.12 |
| (1,535) | 1:A:74:LYS:H | 1:A:76:VAL:HG11 | 7 | 0.12 |
| (1,535) | 1:A:74:LYS:H | 1:A:76:VAL:HG12 | 7 | 0.12 |
| (1,535) | 1:A:74:LYS:H | 1:A:76:VAL:HG13 | 7 | 0.12 |
| (1,511) | 1:A:145:LYS:H | 1:A:149:LEU:HD21 | 14 | 0.12 |
| (1,511) | 1:A:145:LYS:H | 1:A:149:LEU:HD22 | 14 | 0.12 |
| (1,511) | 1:A:145:LYS:H | 1:A:149:LEU:HD23 | 14 | 0.12 |
| (1,511) | 1:A:145:LYS:H | 1:A:149:LEU:HD21 | 15 | 0.12 |
| (1,511) | 1:A:145:LYS:H | 1:A:149:LEU:HD22 | 15 | 0.12 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,511) | 1:A:145:LYS:H | 1:A:149:LEU:HD23 | 15 | 0.12 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD21 | 1:A:160:LEU:HD11 | 9 | 0.12 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD21 | 1:A:160:LEU:HD12 | 9 | 0.12 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD21 | 1:A:160:LEU:HD13 | 9 | 0.12 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD22 | 1:A:160:LEU:HD11 | 9 | 0.12 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD22 | 1:A:160:LEU:HD12 | 9 | 0.12 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD22 | 1:A:160:LEU:HD13 | 9 | 0.12 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD23 | 1:A:160:LEU:HD11 | 9 | 0.12 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD23 | 1:A:160:LEU:HD12 | 9 | 0.12 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD23 | 1:A:160:LEU:HD13 | 9 | 0.12 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD21 | 1:A:160:LEU:HD11 | 18 | 0.12 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD21 | 1:A:160:LEU:HD12 | 18 | 0.12 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD21 | 1:A:160:LEU:HD13 | 18 | 0.12 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD22 | 1:A:160:LEU:HD11 | 18 | 0.12 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD22 | 1:A:160:LEU:HD12 | 18 | 0.12 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD22 | 1:A:160:LEU:HD13 | 18 | 0.12 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD23 | 1:A:160:LEU:HD11 | 18 | 0.12 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD23 | 1:A:160:LEU:HD12 | 18 | 0.12 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD23 | 1:A:160:LEU:HD13 | 18 | 0.12 |
| (1,491) | 1:A:37:ALA:H | 1:A:85:LEU:HD11 | 12 | 0.12 |
| (1,491) | 1:A:37:ALA:H | 1:A:85:LEU:HD12 | 12 | 0.12 |
| (1,491) | 1:A:37:ALA:H | 1:A:85:LEU:HD13 | 12 | 0.12 |
| (1,453) | 1:A:118:TYR:H | 1:A:121:LEU:HD21 | 4 | 0.12 |
| (1,453) | 1:A:118:TYR:H | 1:A:121:LEU:HD22 | 4 | 0.12 |
| (1,453) | 1:A:118:TYR:H | 1:A:121:LEU:HD23 | 4 | 0.12 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD21 | 1:A:195:LEU:HD21 | 3 | 0.12 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD21 | 1:A:195:LEU:HD22 | 3 | 0.12 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD21 | 1:A:195:LEU:HD23 | 3 | 0.12 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD22 | 1:A:195:LEU:HD21 | 3 | 0.12 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD22 | 1:A:195:LEU:HD22 | 3 | 0.12 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD22 | 1:A:195:LEU:HD23 | 3 | 0.12 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD23 | 1:A:195:LEU:HD21 | 3 | 0.12 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD23 | 1:A:195:LEU:HD22 | 3 | 0.12 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD23 | 1:A:195:LEU:HD23 | 3 | 0.12 |
| (1,392) | 1:A:63:GLY:H | 1:A:64:LEU:HD21 | 11 | 0.12 |
| (1,392) | 1:A:63:GLY:H | 1:A:64:LEU:HD22 | 11 | 0.12 |
| (1,392) | 1:A:63:GLY:H | 1:A:64:LEU:HD23 | 11 | 0.12 |
| (1,382) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:167:ILE:HD11 | 10 | 0.12 |
| (1,382) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:167:ILE:HD12 | 10 | 0.12 |
| (1,382) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:167:ILE:HD13 | 10 | 0.12 |
| (1,382) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:167:ILE:HD11 | 20 | 0.12 |
| (1,382) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:167:ILE:HD12 | 20 | 0.12 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,382) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:167:ILE:HD13 | 20 | 0.12 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD11 | 1:A:190:LEU:HD11 | 4 | 0.12 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD11 | 1:A:190:LEU:HD12 | 4 | 0.12 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD11 | 1:A:190:LEU:HD13 | 4 | 0.12 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD12 | 1:A:190:LEU:HD11 | 4 | 0.12 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD12 | 1:A:190:LEU:HD12 | 4 | 0.12 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD12 | 1:A:190:LEU:HD13 | 4 | 0.12 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD13 | 1:A:190:LEU:HD11 | 4 | 0.12 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD13 | 1:A:190:LEU:HD12 | 4 | 0.12 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD13 | 1:A:190:LEU:HD13 | 4 | 0.12 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD11 | 1:A:190:LEU:HD11 | 6 | 0.12 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD11 | 1:A:190:LEU:HD12 | 6 | 0.12 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD11 | 1:A:190:LEU:HD13 | 6 | 0.12 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD12 | 1:A:190:LEU:HD11 | 6 | 0.12 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD12 | 1:A:190:LEU:HD12 | 6 | 0.12 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD12 | 1:A:190:LEU:HD13 | 6 | 0.12 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD13 | 1:A:190:LEU:HD11 | 6 | 0.12 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD13 | 1:A:190:LEU:HD12 | 6 | 0.12 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD13 | 1:A:190:LEU:HD13 | 6 | 0.12 |
| (1,367) | 1:A:21:LEU:HD11 | 1:A:128:ILE:HD11 | 14 | 0.12 |
| (1,367) | 1:A:21:LEU:HD11 | 1:A:128:ILE:HD12 | 14 | 0.12 |
| (1,367) | 1:A:21:LEU:HD11 | 1:A:128:ILE:HD13 | 14 | 0.12 |
| (1,367) | 1:A:21:LEU:HD12 | 1:A:128:ILE:HD11 | 14 | 0.12 |
| (1,367) | 1:A:21:LEU:HD12 | 1:A:128:ILE:HD12 | 14 | 0.12 |
| (1,367) | 1:A:21:LEU:HD12 | 1:A:128:ILE:HD13 | 14 | 0.12 |
| (1,367) | 1:A:21:LEU:HD13 | 1:A:128:ILE:HD11 | 14 | 0.12 |
| (1,367) | 1:A:21:LEU:HD13 | 1:A:128:ILE:HD12 | 14 | 0.12 |
| (1,367) | 1:A:21:LEU:HD13 | 1:A:128:ILE:HD13 | 14 | 0.12 |
| (1,346) | 1:A:175:LEU:HD21 | 1:A:184:LYS:H | 1 | 0.12 |
| (1,346) | 1:A:175:LEU:HD22 | 1:A:184:LYS:H | 1 | 0.12 |
| (1,346) | 1:A:175:LEU:HD23 | 1:A:184:LYS:H | 1 | 0.12 |
| (1,311) | 1:A:51:GLY:H | 1:A:76:VAL:HG11 | 17 | 0.12 |
| (1,311) | 1:A:51:GLY:H | 1:A:76:VAL:HG12 | 17 | 0.12 |
| (1,311) | 1:A:51:GLY:H | 1:A:76:VAL:HG13 | 17 | 0.12 |
| (1,289) | 1:A:101:ILE:HD11 | 1:A:128:ILE:H | 9 | 0.12 |
| (1,289) | 1:A:101:ILE:HD12 | 1:A:128:ILE:H | 9 | 0.12 |
| (1,289) | 1:A:101:ILE:HD13 | 1:A:128:ILE:H | 9 | 0.12 |
| (1,289) | 1:A:101:ILE:HD11 | 1:A:128:ILE:H | 14 | 0.12 |
| (1,289) | 1:A:101:ILE:HD12 | 1:A:128:ILE:H | 14 | 0.12 |
| (1,289) | 1:A:101:ILE:HD13 | 1:A:128:ILE:H | 14 | 0.12 |
| (1,270) | 1:A:121:LEU:HD11 | 1:A:124:GLY:H | 10 | 0.12 |
| (1,270) | 1:A:121:LEU:HD12 | 1:A:124:GLY:H | 10 | 0.12 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,270) | 1:A:121:LEU:HD13 | 1:A:124:GLY:H | 10 | 0.12 |
| (1,266) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:118:TYR:H | 8 | 0.12 |
| (1,266) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:118:TYR:H | 8 | 0.12 |
| (1,266) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:118:TYR:H | 8 | 0.12 |
| (1,263) | 1:A:163:LEU:HD11 | 1:A:164:ASN:H | 11 | 0.12 |
| (1,263) | 1:A:163:LEU:HD12 | 1:A:164:ASN:H | 11 | 0.12 |
| (1,263) | 1:A:163:LEU:HD13 | 1:A:164:ASN:H | 11 | 0.12 |
| (1,259) | 1:A:71:ALA:H | 1:A:78:ILE:HD11 | 7 | 0.12 |
| (1,259) | 1:A:71:ALA:H | 1:A:78:ILE:HD12 | 7 | 0.12 |
| (1,259) | 1:A:71:ALA:H | 1:A:78:ILE:HD13 | 7 | 0.12 |
| (1,259) | 1:A:71:ALA:H | 1:A:78:ILE:HD11 | 8 | 0.12 |
| (1,259) | 1:A:71:ALA:H | 1:A:78:ILE:HD12 | 8 | 0.12 |
| (1,259) | 1:A:71:ALA:H | 1:A:78:ILE:HD13 | 8 | 0.12 |
| (1,259) | 1:A:71:ALA:H | 1:A:78:ILE:HD11 | 14 | 0.12 |
| (1,259) | 1:A:71:ALA:H | 1:A:78:ILE:HD12 | 14 | 0.12 |
| (1,259) | 1:A:71:ALA:H | 1:A:78:ILE:HD13 | 14 | 0.12 |
| (1,233) | 1:A:54:VAL:HG11 | 1:A:55:THR:H | 15 | 0.12 |
| (1,233) | 1:A:54:VAL:HG12 | 1:A:55:THR:H | 15 | 0.12 |
| (1,233) | 1:A:54:VAL:HG13 | 1:A:55:THR:H | 15 | 0.12 |
| (1,232) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:H | 6 | 0.12 |
| (1,232) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:H | 6 | 0.12 |
| (1,232) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:H | 6 | 0.12 |
| (1,231) | 1:A:137:LEU:HD11 | 1:A:147:LEU:H | 20 | 0.12 |
| (1,231) | 1:A:137:LEU:HD12 | 1:A:147:LEU:H | 20 | 0.12 |
| (1,231) | 1:A:137:LEU:HD13 | 1:A:147:LEU:H | 20 | 0.12 |
| (1,230) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:150:LEU:HD21 | 7 | 0.12 |
| (1,230) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:150:LEU:HD22 | 7 | 0.12 |
| (1,230) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:150:LEU:HD23 | 7 | 0.12 |
| (1,228) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:147:LEU:HD11 | 8 | 0.12 |
| (1,228) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:147:LEU:HD12 | 8 | 0.12 |
| (1,228) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:147:LEU:HD13 | 8 | 0.12 |
| (1,226) | 1:A:57:VAL:HG11 | 1:A:82:GLN:H | 3 | 0.12 |
| (1,226) | 1:A:57:VAL:HG12 | 1:A:82:GLN:H | 3 | 0.12 |
| (1,226) | 1:A:57:VAL:HG13 | 1:A:82:GLN:H | 3 | 0.12 |
| (1,226) | 1:A:57:VAL:HG11 | 1:A:82:GLN:H | 15 | 0.12 |
| (1,226) | 1:A:57:VAL:HG12 | 1:A:82:GLN:H | 15 | 0.12 |
| (1,226) | 1:A:57:VAL:HG13 | 1:A:82:GLN:H | 15 | 0.12 |
| (1,205) | 1:A:24:VAL:HG11 | 1:A:192:GLY:H | 18 | 0.12 |
| (1,205) | 1:A:24:VAL:HG12 | 1:A:192:GLY:H | 18 | 0.12 |
| (1,205) | 1:A:24:VAL:HG13 | 1:A:192:GLY:H | 18 | 0.12 |
| (1,202) | 1:A:138:GLN:H | 1:A:147:LEU:HD21 | 2 | 0.12 |
| (1,202) | 1:A:138:GLN:H | 1:A:147:LEU:HD22 | 2 | 0.12 |



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

| (1,202) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD23 2 0.12 (1,174) 1:A:61:SER:H 1:A:62:VAL:HG11 5 0.12 (1,174) 1:A:61:SER:H 1:A:62:VAL:HG12 5 0.12 (1,174) 1:A:61:SER:H 1:A:62:VAL:HG13 5 0.12 (1,172) 1:A:24:VAL:H 1:A:191:LEU:HD21 2 0.12 (1,122) 1:A:24:VAL:H 1:A:191:LEU:HD22 2 0.12 (1,113) 1:A:127:PHE:H 1:A:192:GLY:O 15 0.12 (1,1034) 1:A:154:GLY:O 1:A:98:ILE:H 2 0.12 (1,1034) 1:A:25:SER:O 1:A:27:GLN:H 8 0.12 (1,1034) 1:A:23:SER:O 1:A:27:GLN:H 11 0.12 (1,1034) 1:A:23:SER:O 1:A:27:GLN:H 11 0.12 (1,1032) 1:A:22:VAL:O 1:A:26:ASN:H 2 0.12 (1,1032) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD21 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 3 <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) |
|--|----------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,174) 1:A:61:SER:H 1:A:62:VAL:HG13 5 0.12 (1,174) 1:A:61:SER:H 1:A:62:VAL:HG13 5 0.12 (1,122) 1:A:24:VAL:H 1:A:191:LEU:HD21 2 0.12 (1,122) 1:A:24:VAL:H 1:A:191:LEU:HD22 2 0.12 (1,122) 1:A:24:VAL:H 1:A:191:LEU:HD23 2 0.12 (1,113) 1:A:127:PHE:H 1:A:192:GLY:O 15 0.12 (1,1039) 1:A:124:GLY:O 1:A:98:ILE:H 2 0.12 (1,1084) 1:A:154:GLU:O 1:A:27:GLN:H 8 0.12 (1,1034) 1:A:23:SER:O 1:A:27:GLN:H 8 0.12 (1,1034) 1:A:23:SER:O 1:A:27:GLN:H 8 0.12 (1,1032) 1:A:22:VAL:O 1:A:26:ASN:H 2 0.12 (1,1032) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD21 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD22 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 3 | (1,202) | 1:A:138:GLN:H | 1:A:147:LEU:HD23 | 2 | 0.12 |
| (1,174) 1:A:61:SER:H 1:A:62:VAL:HG13 5 0.12 (1,122) 1:A:24:VAL:H 1:A:191:LEU:HD21 2 0.12 (1,122) 1:A:24:VAL:H 1:A:191:LEU:HD22 2 0.12 (1,122) 1:A:24:VAL:H 1:A:191:LEU:HD23 2 0.12 (1,1113) 1:A:127:PHE:H 1:A:191:LEU:HD23 2 0.12 (1,1113) 1:A:127:PHE:H 1:A:192:GLY:O 15 0.12 (1,1099) 1:A:124:GDY:O 1:A:98:ILE:H 2 0.12 (1,1084) 1:A:124:GU:O 1:A:158:SER:H 2 0.12 (1,1084) 1:A:23:SER:O 1:A:27:GLN:H 8 0.12 (1,1034) 1:A:23:SER:O 1:A:27:GLN:H 8 0.12 (1,1034) 1:A:23:SER:O 1:A:27:GLN:H 11 0.12 (1,1032) 1:A:22:VAL:O 1:A:26:ASN:H 2 0.12 (1,1032) 1:A:22:VAL:O 1:A:26:ASN:H 10 0.12 (1,1032) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD21 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD22 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD23 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD14 1:A:85:LEU:HD24 9 0.12 (1,1023 | (1,174) | 1:A:61:SER:H | 1:A:62:VAL:HG11 | 5 | 0.12 |
| (1,122) 1:A:24:VAL:H 1:A:191:LEU:HD21 2 0.12 (1,122) 1:A:24:VAL:H 1:A:191:LEU:HD22 2 0.12 (1,113) 1:A:127:PHE:H 1:A:191:LEU:HD23 2 0.12 (1,1113) 1:A:127:PHE:H 1:A:191:LEU:HD23 2 0.12 (1,1099) 1:A:124:GLY:O 1:A:98:ILE:H 2 0.12 (1,1084) 1:A:154:GLU:O 1:A:158:SER:H 8 0.12 (1,1034) 1:A:23:SER:O 1:A:27:GLN:H 8 0.12 (1,1034) 1:A:23:SER:O 1:A:27:GLN:H 11 0.12 (1,1032) 1:A:22:VAL:O 1:A:26:ASN:H 2 0.12 (1,1032) 1:A:22:VAL:O 1:A:26:ASN:H 10 0.12 (1,1032) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD21 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD22 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD22 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD23 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD14 1:A:85:LEU:HD24 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD14 1:A:85:LEU:HD24 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD29 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD24 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD14 1:A:85:LEU:HD29 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD14 1:A:85:LEU:HD24 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD15 1:A:85:LEU:HD24 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD14 1:A:85:LEU:H | (1,174) | 1:A:61:SER:H | 1:A:62:VAL:HG12 | 5 | 0.12 |
| (1,122) 1:A:24:VAL:H 1:A:191:LEU:HD22 2 0.12 (1,122) 1:A:24:VAL:H 1:A:191:LEU:HD23 2 0.12 (1,1113) 1:A:127:PHE:H 1:A:192:GLY:O 15 0.12 (1,1099) 1:A:124:GLY:O 1:A:98:ILE:H 2 0.12 (1,1084) 1:A:154:GLU:O 1:A:158:SER:H 8 0.12 (1,1034) 1:A:23:SER:O 1:A:27:GLN:H 8 0.12 (1,1034) 1:A:23:SER:O 1:A:27:GLN:H 11 0.12 (1,1032) 1:A:22:VAL:O 1:A:26:ASN:H 2 0.12 (1,1032) 1:A:22:VAL:O 1:A:26:ASN:H 2 0.12 (1,1032) 1:A:105:IEU:HD11 1:A:85:IEU:HD21 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:IEU:HD11 1:A:85:IEU:HD22 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:IEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD21 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:IEU:HD11 1:A:85:LEU:HD21 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:IEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD23 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD23 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD14 1:A:85:LEU:HD24 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD14 1:A:85:LEU:H | (1,174) | 1:A:61:SER:H | 1:A:62:VAL:HG13 | 5 | 0.12 |
| (1,122) 1:A:24:VAL:H 1:A:191:LEU:HD23 2 0.12 (1,1113) 1:A:127:PHE:H 1:A:192:GLY:O 15 0.12 (1,1099) 1:A:124:GLY:O 1:A:98:ILE:H 2 0.12 (1,1084) 1:A:154:GLU:O 1:A:158:SER:H 8 0.12 (1,1034) 1:A:23:SER:O 1:A:27:GLN:H 8 0.12 (1,1034) 1:A:23:SER:O 1:A:27:GLN:H 11 0.12 (1,1032) 1:A:22:VAL:O 1:A:26:ASN:H 2 0.12 (1,1032) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD21 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD22 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD23 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD23 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD23 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD | (1,122) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:191:LEU:HD21 | 2 | 0.12 |
| (1,1113) 1:A:127:PHE:H 1:A:192:GLY:O 15 0.12 (1,1099) 1:A:124:GLY:O 1:A:98:ILE:H 2 0.12 (1,1084) 1:A:154:GLU:O 1:A:158:SER:H 8 0.12 (1,1034) 1:A:23:SER:O 1:A:27:GLN:H 8 0.12 (1,1034) 1:A:23:SER:O 1:A:27:GLN:H 11 0.12 (1,1032) 1:A:22:VAL:O 1:A:26:ASN:H 2 0.12 (1,1032) 1:A:22:VAL:O 1:A:26:ASN:H 10 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:285:LEU:HD21 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD22 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD23 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD23 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD23 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD2 | (1,122) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:191:LEU:HD22 | 2 | 0.12 |
| (1,1099) 1:A:124;GLY;O 1:A:98;ILE;H 2 0.12 (1,1084) 1:A:154;GLU;O 1:A:158;SER;H 8 0.12 (1,1034) 1:A:23;SER;O 1:A:27;GLN;H 8 0.12 (1,1034) 1:A:23;SER;O 1:A:27;GLN;H 8 0.12 (1,1032) 1:A:22;VAL;O 1:A:26;ASN;H 2 0.12 (1,1032) 1:A:22;VAL;O 1:A:26;ASN;H 10 0.12 (1,1032) 1:A:105;LEU;HD11 1:A:85;LEU;HD21 3 0.12 (1,1023) 1:A:105;LEU;HD11 1:A:85;LEU;HD22 3 0.12 (1,1023) 1:A:105;LEU;HD12 1:A:85;LEU;HD23 3 0.12 (1,1023) 1:A:105;LEU;HD12 1:A:85;LEU;HD21 3 0.12 (1,1023) 1:A:105;LEU;HD12 1:A:85;LEU;HD23 3 0.12 (1,1023) 1:A:105;LEU;HD12 1:A:85;LEU;HD21 3 0.12 (1,1023) 1:A:105;LEU;HD13 1:A:85;LEU;HD23 3 0.12 (1,1023) 1:A:105;LEU;HD13 1:A:85;LEU;H | (1,122) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:191:LEU:HD23 | 2 | 0.12 |
| (1,1084) 1:A:154:GLU:O 1:A:158:SER:H 8 0.12 (1,1034) 1:A:23:SER:O 1:A:27:GLN:H 8 0.12 (1,1034) 1:A:23:SER:O 1:A:27:GLN:H 11 0.12 (1,1032) 1:A:22:VAL:O 1:A:26:ASN:H 2 0.12 (1,1032) 1:A:22:VAL:O 1:A:26:ASN:H 10 0.12 (1,1032) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD21 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD22 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD21 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD23 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD23 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:8 | (1,1113) | 1:A:127:PHE:H | 1:A:192:GLY:O | 15 | 0.12 |
| (1,1034) 1:A:23:SER:O 1:A:27:GLN:H 8 0.12 (1,1034) 1:A:23:SER:O 1:A:27:GLN:H 11 0.12 (1,1032) 1:A:22:VAL:O 1:A:26:ASN:H 2 0.12 (1,1032) 1:A:22:VAL:O 1:A:26:ASN:H 10 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD21 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD22 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD23 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD23 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD23 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD21 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD22 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 | (1,1099) | 1:A:124:GLY:O | 1:A:98:ILE:H | 2 | 0.12 |
| (1,1034) 1:A:23:SER:O 1:A:27:GLN:H 11 0.12 (1,1032) 1:A:22:VAL:O 1:A:26:ASN:H 2 0.12 (1,1032) 1:A:22:VAL:O 1:A:26:ASN:H 10 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD21 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD22 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD21 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD23 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD23 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 | (1,1084) | 1:A:154:GLU:O | 1:A:158:SER:H | 8 | 0.12 |
| (1,1032) 1:A:22:VAL:O 1:A:26:ASN:H 2 0.12 (1,1032) 1:A:22:VAL:O 1:A:26:ASN:H 10 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD21 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD22 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD23 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD21 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD22 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD23 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 | (1,1034) | 1:A:23:SER:O | 1:A:27:GLN:H | 8 | 0.12 |
| (1,1032) 1:A:22:VAL:O 1:A:26:ASN:H 10 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD21 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD22 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD21 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD22 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD23 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD | (1,1034) | 1:A:23:SER:O | 1:A:27:GLN:H | 11 | 0.12 |
| (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD21 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD22 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD21 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD22 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD21 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD22 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD21 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD22 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD23 9 0.12 (1,1023) 1:A:105: | (1,1032) | 1:A:22:VAL:O | 1:A:26:ASN:H | 2 | 0.12 |
| (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD22 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD21 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD22 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD21 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD22 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD21 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD22 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD23 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD23 9 0.12 (1,1023) 1:A:105: | (1,1032) | 1:A:22:VAL:O | 1:A:26:ASN:H | 10 | 0.12 |
| (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD21 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD21 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD22 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD22 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD21 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD22 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD23 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 9 0.12 (1,1023) 1:A:105: | (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:85:LEU:HD21 | 3 | 0.12 |
| (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD21 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD22 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD23 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD21 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD22 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD21 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD22 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD21 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD22 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD23 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 9 0.12 (1,1023) 1:A:105: | (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:85:LEU:HD22 | 3 | 0.12 |
| (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD23 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD21 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD22 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD21 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD22 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD21 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD22 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 9 0.12 (1,1023) 1:A:105: | (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:85:LEU:HD23 | 3 | 0.12 |
| (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD23 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD21 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD22 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD21 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD22 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD21 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD23 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 9 0.12 (1,1023) 1:A:105: | (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:85:LEU:HD21 | 3 | 0.12 |
| (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD22 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD22 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD21 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD22 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD21 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD22 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD23 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD22 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 9 0.12 (1,1023) 1:A:105: | (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:85:LEU:HD22 | 3 | 0.12 |
| (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD21 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD22 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD21 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD22 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD23 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD21 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD22 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD22 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 9 0.12 (1,1023) 1:A:105: | (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:85:LEU:HD23 | 3 | 0.12 |
| (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 3 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD21 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD22 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD21 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD22 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD23 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD21 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD22 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD22 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 9 0.12 (1,1023) 1:A:105: | (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:85:LEU:HD21 | 3 | 0.12 |
| (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD21 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD22 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD21 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD22 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD21 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD22 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:35:GLN:H 1:A:37:ALA:H 1 0.12 (1,1023 | (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:85:LEU:HD22 | 3 | 0.12 |
| (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD22 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD21 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD22 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD23 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD21 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD22 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 9 0.12 (1,1023) 1:A:101:ILE:HA 1:A:85:LEU:HD23 9 0.12 (1,1023) 1:A:101:ILE:HA 1:A:37:ALA:H 1 0.12 (1,1003) 1:A:59:GLN:H 1:A:37:ALA:H 1 0.12 (1,988) 1:A:117:VAL:HG21 1:A:121:LEU:H 1 0.11 (1,988) 1:A:138:GLN:H | (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:85:LEU:HD23 | 3 | 0.12 |
| (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD21 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD22 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD23 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD21 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD22 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 9 0.12 (1,1023) 1:A:101:ILE:HA 1:A:85:LEU:HD23 9 0.12 (1,1023) 1:A:101:ILE:HA 1:A:128:ILE:H 14 0.12 (1,1003) 1:A:59:GLN:H 1:A:37:ALA:H 1 0.12 (1,988) 1:A:117:VAL:HG21 1:A:121:LEU:H 1 0.11 (1,988) 1:A:117:VAL:HG22 1:A:121:LEU:H 1 0.11 (1,986) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD11 6 0.11 (1,986) 1:A:138:GLN:H <td< td=""><td>(1,1023)</td><td>1:A:105:LEU:HD11</td><td>1:A:85:LEU:HD21</td><td>9</td><td>0.12</td></td<> | (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:85:LEU:HD21 | 9 | 0.12 |
| (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD21 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD22 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD23 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD21 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD22 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:128:ILE:H 14 0.12 (1,1023) 1:A:159:GLN:H 1:A:37:ALA:H 1 0.12 (1,1003) 1:A:17:VAL:HG21 1:A:121:LEU:H 1 0.11 (1,988) 1:A:117:VAL:HG22 1:A:121:LEU:H 1 0.11 (1,986) 1:A:138:GLN:H | (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:85:LEU:HD22 | 9 | 0.12 |
| (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD22 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD23 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD21 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD22 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 9 0.12 (1,1023) 1:A:101:ILE:HA 1:A:128:ILE:H 14 0.12 (1,1017) 1:A:101:ILE:HA 1:A:128:ILE:H 14 0.12 (1,1003) 1:A:59:GLN:H 1:A:37:ALA:H 1 0.12 (1,988) 1:A:117:VAL:HG21 1:A:121:LEU:H 1 0.11 (1,988) 1:A:117:VAL:HG22 1:A:121:LEU:H 1 0.11 (1,986) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD11 6 0.11 (1,986) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD12 6 0.11 | (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:85:LEU:HD23 | 9 | 0.12 |
| (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD23 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD21 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD22 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 9 0.12 (1,1017) 1:A:101:ILE:HA 1:A:128:ILE:H 14 0.12 (1,1003) 1:A:59:GLN:H 1:A:37:ALA:H 1 0.12 (1,1003) 1:A:59:GLN:H 1:A:37:ALA:H 4 0.12 (1,988) 1:A:117:VAL:HG21 1:A:121:LEU:H 1 0.11 (1,988) 1:A:117:VAL:HG22 1:A:121:LEU:H 1 0.11 (1,986) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD11 6 0.11 (1,986) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD12 6 0.11 | (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:85:LEU:HD21 | 9 | 0.12 |
| (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD21 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD22 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 9 0.12 (1,1017) 1:A:101:ILE:HA 1:A:128:ILE:H 14 0.12 (1,1003) 1:A:59:GLN:H 1:A:37:ALA:H 1 0.12 (1,1003) 1:A:59:GLN:H 1:A:37:ALA:H 4 0.12 (1,988) 1:A:117:VAL:HG21 1:A:121:LEU:H 1 0.11 (1,988) 1:A:117:VAL:HG22 1:A:121:LEU:H 1 0.11 (1,986) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD11 6 0.11 (1,986) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD12 6 0.11 | (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:85:LEU:HD22 | 9 | 0.12 |
| (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD22 9 0.12 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 9 0.12 (1,1017) 1:A:101:ILE:HA 1:A:128:ILE:H 14 0.12 (1,1003) 1:A:59:GLN:H 1:A:37:ALA:H 1 0.12 (1,1003) 1:A:59:GLN:H 1:A:37:ALA:H 4 0.12 (1,988) 1:A:117:VAL:HG21 1:A:121:LEU:H 1 0.11 (1,988) 1:A:117:VAL:HG22 1:A:121:LEU:H 1 0.11 (1,986) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD11 6 0.11 (1,986) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD12 6 0.11 | (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:85:LEU:HD23 | 9 | 0.12 |
| (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 9 0.12 (1,1017) 1:A:101:ILE:HA 1:A:128:ILE:H 14 0.12 (1,1003) 1:A:59:GLN:H 1:A:37:ALA:H 1 0.12 (1,1003) 1:A:59:GLN:H 1:A:37:ALA:H 4 0.12 (1,988) 1:A:117:VAL:HG21 1:A:121:LEU:H 1 0.11 (1,988) 1:A:117:VAL:HG22 1:A:121:LEU:H 1 0.11 (1,986) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD11 6 0.11 (1,986) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD12 6 0.11 | (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:85:LEU:HD21 | 9 | 0.12 |
| (1,1017) 1:A:101:ILE:HA 1:A:128:ILE:H 14 0.12 (1,1003) 1:A:59:GLN:H 1:A:37:ALA:H 1 0.12 (1,1003) 1:A:59:GLN:H 1:A:37:ALA:H 4 0.12 (1,988) 1:A:117:VAL:HG21 1:A:121:LEU:H 1 0.11 (1,988) 1:A:117:VAL:HG22 1:A:121:LEU:H 1 0.11 (1,988) 1:A:117:VAL:HG23 1:A:121:LEU:H 1 0.11 (1,986) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD11 6 0.11 (1,986) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD12 6 0.11 | (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:85:LEU:HD22 | 9 | 0.12 |
| (1,1003) 1:A:59:GLN:H 1:A:37:ALA:H 1 0.12 (1,1003) 1:A:59:GLN:H 1:A:37:ALA:H 4 0.12 (1,988) 1:A:117:VAL:HG21 1:A:121:LEU:H 1 0.11 (1,988) 1:A:117:VAL:HG22 1:A:121:LEU:H 1 0.11 (1,988) 1:A:117:VAL:HG23 1:A:121:LEU:H 1 0.11 (1,986) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD11 6 0.11 (1,986) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD12 6 0.11 | (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:85:LEU:HD23 | 9 | 0.12 |
| (1,1003) 1:A:59:GLN:H 1:A:37:ALA:H 1 0.12 (1,1003) 1:A:59:GLN:H 1:A:37:ALA:H 4 0.12 (1,988) 1:A:117:VAL:HG21 1:A:121:LEU:H 1 0.11 (1,988) 1:A:117:VAL:HG22 1:A:121:LEU:H 1 0.11 (1,988) 1:A:117:VAL:HG23 1:A:121:LEU:H 1 0.11 (1,986) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD11 6 0.11 (1,986) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD12 6 0.11 | , , | 1:A:101:ILE:HA | 1:A:128:ILE:H | 14 | 0.12 |
| (1,1003) 1:A:59:GLN:H 1:A:37:ALA:H 4 0.12 (1,988) 1:A:117:VAL:HG21 1:A:121:LEU:H 1 0.11 (1,988) 1:A:117:VAL:HG22 1:A:121:LEU:H 1 0.11 (1,988) 1:A:117:VAL:HG23 1:A:121:LEU:H 1 0.11 (1,986) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD11 6 0.11 (1,986) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD12 6 0.11 | | 1:A:59:GLN:H | 1:A:37:ALA:H | 1 | 0.12 |
| (1,988) 1:A:117:VAL:HG21 1:A:121:LEU:H 1 0.11 (1,988) 1:A:117:VAL:HG22 1:A:121:LEU:H 1 0.11 (1,988) 1:A:117:VAL:HG23 1:A:121:LEU:H 1 0.11 (1,986) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD11 6 0.11 (1,986) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD12 6 0.11 | | 1:A:59:GLN:H | 1:A:37:ALA:H | 4 | 0.12 |
| (1,988) 1:A:117:VAL:HG22 1:A:121:LEU:H 1 0.11 (1,988) 1:A:117:VAL:HG23 1:A:121:LEU:H 1 0.11 (1,986) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD11 6 0.11 (1,986) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD12 6 0.11 | ` , | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:H | 1 | 0.11 |
| (1,988) 1:A:117:VAL:HG23 1:A:121:LEU:H 1 0.11 (1,986) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD11 6 0.11 (1,986) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD12 6 0.11 | , , | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:H | 1 | 0.11 |
| (1,986) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD11 6 0.11 (1,986) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD12 6 0.11 | | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:H | 1 | 0.11 |
| (1,986) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD12 6 0.11 | _ ` | 1:A:138:GLN:H | 1:A:147:LEU:HD11 | 6 | 0.11 |
| | | 1:A:138:GLN:H | 1:A:147:LEU:HD12 | 6 | 0.11 |
| | (1,986) | 1:A:138:GLN:H | 1:A:147:LEU:HD13 | 6 | 0.11 |
| (1,972) 1:A:85:LEU:HD21 1:A:89:ASP:H 16 0.11 | | | | 16 | |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,972) | 1:A:85:LEU:HD22 | 1:A:89:ASP:H | 16 | 0.11 |
| (1,972) | 1:A:85:LEU:HD23 | 1:A:89:ASP:H | 16 | 0.11 |
| (1,964) | 1:A:116:LYS:H | 1:A:117:VAL:HG21 | 14 | 0.11 |
| (1,964) | 1:A:116:LYS:H | 1:A:117:VAL:HG22 | 14 | 0.11 |
| (1,964) | 1:A:116:LYS:H | 1:A:117:VAL:HG23 | 14 | 0.11 |
| (1,964) | 1:A:116:LYS:H | 1:A:117:VAL:HG21 | 20 | 0.11 |
| (1,964) | 1:A:116:LYS:H | 1:A:117:VAL:HG22 | 20 | 0.11 |
| (1,964) | 1:A:116:LYS:H | 1:A:117:VAL:HG23 | 20 | 0.11 |
| (1,957) | 1:A:136:GLN:H | 1:A:150:LEU:HD11 | 18 | 0.11 |
| (1,957) | 1:A:136:GLN:H | 1:A:150:LEU:HD12 | 18 | 0.11 |
| (1,957) | 1:A:136:GLN:H | 1:A:150:LEU:HD13 | 18 | 0.11 |
| (1,932) | 1:A:172:GLU:H | 1:A:187:LEU:HD11 | 11 | 0.11 |
| (1,932) | 1:A:172:GLU:H | 1:A:187:LEU:HD12 | 11 | 0.11 |
| (1,932) | 1:A:172:GLU:H | 1:A:187:LEU:HD13 | 11 | 0.11 |
| (1,932) | 1:A:172:GLU:H | 1:A:187:LEU:HD11 | 14 | 0.11 |
| (1,932) | 1:A:172:GLU:H | 1:A:187:LEU:HD12 | 14 | 0.11 |
| (1,932) | 1:A:172:GLU:H | 1:A:187:LEU:HD13 | 14 | 0.11 |
| (1,912) | 1:A:56:ALA:H | 1:A:81:VAL:HG21 | 19 | 0.11 |
| (1,912) | 1:A:56:ALA:H | 1:A:81:VAL:HG22 | 19 | 0.11 |
| (1,912) | 1:A:56:ALA:H | 1:A:81:VAL:HG23 | 19 | 0.11 |
| (1,897) | 1:A:163:LEU:HD21 | 1:A:193:GLN:H | 2 | 0.11 |
| (1,897) | 1:A:163:LEU:HD22 | 1:A:193:GLN:H | 2 | 0.11 |
| (1,897) | 1:A:163:LEU:HD23 | 1:A:193:GLN:H | 2 | 0.11 |
| (1,897) | 1:A:163:LEU:HD21 | 1:A:193:GLN:H | 5 | 0.11 |
| (1,897) | 1:A:163:LEU:HD22 | 1:A:193:GLN:H | 5 | 0.11 |
| (1,897) | 1:A:163:LEU:HD23 | 1:A:193:GLN:H | 5 | 0.11 |
| (1,897) | 1:A:163:LEU:HD21 | 1:A:193:GLN:H | 18 | 0.11 |
| (1,897) | 1:A:163:LEU:HD22 | 1:A:193:GLN:H | 18 | 0.11 |
| (1,897) | 1:A:163:LEU:HD23 | 1:A:193:GLN:H | 18 | 0.11 |
| (1,885) | 1:A:50:LEU:H | 1:A:54:VAL:HG21 | 2 | 0.11 |
| (1,885) | 1:A:50:LEU:H | 1:A:54:VAL:HG22 | 2 | 0.11 |
| (1,885) | 1:A:50:LEU:H | 1:A:54:VAL:HG23 | 2 | 0.11 |
| (1,885) | 1:A:50:LEU:H | 1:A:54:VAL:HG21 | 17 | 0.11 |
| (1,885) | 1:A:50:LEU:H | 1:A:54:VAL:HG22 | 17 | 0.11 |
| (1,885) | 1:A:50:LEU:H | 1:A:54:VAL:HG23 | 17 | 0.11 |
| (1,875) | 1:A:105:LEU:HD21 | 1:A:109:LEU:H | 16 | 0.11 |
| (1,875) | 1:A:105:LEU:HD22 | 1:A:109:LEU:H | 16 | 0.11 |
| (1,875) | 1:A:105:LEU:HD23 | 1:A:109:LEU:H | 16 | 0.11 |
| (1,812) | 1:A:130:GLU:H | 1:A:156:LEU:HD11 | 15 | 0.11 |
| (1,812) | 1:A:130:GLU:H | 1:A:156:LEU:HD12 | 15 | 0.11 |
| (1,812) | 1:A:130:GLU:H | 1:A:156:LEU:HD13 | 15 | 0.11 |
| (1,812) | 1:A:130:GLU:H | 1:A:156:LEU:HD11 | 19 | 0.11 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,812) | 1:A:130:GLU:H | 1:A:156:LEU:HD12 | 19 | 0.11 |
| (1,812) | 1:A:130:GLU:H | 1:A:156:LEU:HD13 | 19 | 0.11 |
| (1,809) | 1:A:91:VAL:HG11 | 1:A:92:ALA:H | 18 | 0.11 |
| (1,809) | 1:A:91:VAL:HG12 | 1:A:92:ALA:H | 18 | 0.11 |
| (1,809) | 1:A:91:VAL:HG13 | 1:A:92:ALA:H | 18 | 0.11 |
| (1,801) | 1:A:113:LEU:HD11 | 1:A:116:LYS:H | 7 | 0.11 |
| (1,801) | 1:A:113:LEU:HD12 | 1:A:116:LYS:H | 7 | 0.11 |
| (1,801) | 1:A:113:LEU:HD13 | 1:A:116:LYS:H | 7 | 0.11 |
| (1,801) | 1:A:113:LEU:HD11 | 1:A:116:LYS:H | 14 | 0.11 |
| (1,801) | 1:A:113:LEU:HD12 | 1:A:116:LYS:H | 14 | 0.11 |
| (1,801) | 1:A:113:LEU:HD13 | 1:A:116:LYS:H | 14 | 0.11 |
| (1,79) | 1:A:175:LEU:HD21 | 1:A:185:ALA:H | 7 | 0.11 |
| (1,79) | 1:A:175:LEU:HD22 | 1:A:185:ALA:H | 7 | 0.11 |
| (1,79) | 1:A:175:LEU:HD23 | 1:A:185:ALA:H | 7 | 0.11 |
| (1,773) | 1:A:126:VAL:HG21 | 1:A:166:LEU:HD11 | 12 | 0.11 |
| (1,773) | 1:A:126:VAL:HG21 | 1:A:166:LEU:HD12 | 12 | 0.11 |
| (1,773) | 1:A:126:VAL:HG21 | 1:A:166:LEU:HD13 | 12 | 0.11 |
| (1,773) | 1:A:126:VAL:HG22 | 1:A:166:LEU:HD11 | 12 | 0.11 |
| (1,773) | 1:A:126:VAL:HG22 | 1:A:166:LEU:HD12 | 12 | 0.11 |
| (1,773) | 1:A:126:VAL:HG22 | 1:A:166:LEU:HD13 | 12 | 0.11 |
| (1,773) | 1:A:126:VAL:HG23 | 1:A:166:LEU:HD11 | 12 | 0.11 |
| (1,773) | 1:A:126:VAL:HG23 | 1:A:166:LEU:HD12 | 12 | 0.11 |
| (1,773) | 1:A:126:VAL:HG23 | 1:A:166:LEU:HD13 | 12 | 0.11 |
| (1,77) | 1:A:173:ARG:H | 1:A:185:ALA:H | 4 | 0.11 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD11 | 1:A:78:ILE:HD11 | 17 | 0.11 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD11 | 1:A:78:ILE:HD12 | 17 | 0.11 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD11 | 1:A:78:ILE:HD13 | 17 | 0.11 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD12 | 1:A:78:ILE:HD11 | 17 | 0.11 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD12 | 1:A:78:ILE:HD12 | 17 | 0.11 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD12 | 1:A:78:ILE:HD13 | 17 | 0.11 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD13 | 1:A:78:ILE:HD11 | 17 | 0.11 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD13 | 1:A:78:ILE:HD12 | 17 | 0.11 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD13 | 1:A:78:ILE:HD13 | 17 | 0.11 |
| (1,750) | 1:A:81:VAL:HG21 | 1:A:85:LEU:HD21 | 9 | 0.11 |
| (1,750) | 1:A:81:VAL:HG21 | 1:A:85:LEU:HD22 | 9 | 0.11 |
| (1,750) | 1:A:81:VAL:HG21 | 1:A:85:LEU:HD23 | 9 | 0.11 |
| (1,750) | 1:A:81:VAL:HG22 | 1:A:85:LEU:HD21 | 9 | 0.11 |
| (1,750) | 1:A:81:VAL:HG22 | 1:A:85:LEU:HD22 | 9 | 0.11 |
| (1,750) | 1:A:81:VAL:HG22 | 1:A:85:LEU:HD23 | 9 | 0.11 |
| (1,750) | 1:A:81:VAL:HG23 | 1:A:85:LEU:HD21 | 9 | 0.11 |
| (1,750) | 1:A:81:VAL:HG23 | 1:A:85:LEU:HD22 | 9 | 0.11 |
| (1,750) | 1:A:81:VAL:HG23 | 1:A:85:LEU:HD23 | 9 | 0.11 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,746) | 1:A:160:LEU:HD11 | 1:A:163:LEU:HD11 | 4 | 0.11 |
| (1,746) | 1:A:160:LEU:HD11 | 1:A:163:LEU:HD12 | 4 | 0.11 |
| (1,746) | 1:A:160:LEU:HD11 | 1:A:163:LEU:HD13 | 4 | 0.11 |
| (1,746) | 1:A:160:LEU:HD12 | 1:A:163:LEU:HD11 | 4 | 0.11 |
| (1,746) | 1:A:160:LEU:HD12 | 1:A:163:LEU:HD12 | 4 | 0.11 |
| (1,746) | 1:A:160:LEU:HD12 | 1:A:163:LEU:HD13 | 4 | 0.11 |
| (1,746) | 1:A:160:LEU:HD13 | 1:A:163:LEU:HD11 | 4 | 0.11 |
| (1,746) | 1:A:160:LEU:HD13 | 1:A:163:LEU:HD12 | 4 | 0.11 |
| (1,746) | 1:A:160:LEU:HD13 | 1:A:163:LEU:HD13 | 4 | 0.11 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD21 | 1:A:150:LEU:HD21 | 2 | 0.11 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD21 | 1:A:150:LEU:HD22 | 2 | 0.11 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD21 | 1:A:150:LEU:HD23 | 2 | 0.11 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD22 | 1:A:150:LEU:HD21 | 2 | 0.11 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD22 | 1:A:150:LEU:HD22 | 2 | 0.11 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD22 | 1:A:150:LEU:HD23 | 2 | 0.11 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD23 | 1:A:150:LEU:HD21 | 2 | 0.11 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD23 | 1:A:150:LEU:HD22 | 2 | 0.11 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD23 | 1:A:150:LEU:HD23 | 2 | 0.11 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD21 | 1:A:150:LEU:HD21 | 7 | 0.11 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD21 | 1:A:150:LEU:HD22 | 7 | 0.11 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD21 | 1:A:150:LEU:HD23 | 7 | 0.11 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD22 | 1:A:150:LEU:HD21 | 7 | 0.11 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD22 | 1:A:150:LEU:HD22 | 7 | 0.11 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD22 | 1:A:150:LEU:HD23 | 7 | 0.11 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD23 | 1:A:150:LEU:HD21 | 7 | 0.11 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD23 | 1:A:150:LEU:HD22 | 7 | 0.11 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD23 | 1:A:150:LEU:HD23 | 7 | 0.11 |
| (1,654) | 1:A:60:SER:H | 1:A:83:SER:H | 18 | 0.11 |
| (1,635) | 1:A:113:LEU:H | 1:A:114:TYR:H | 7 | 0.11 |
| (1,632) | 1:A:146:ASP:H | 1:A:150:LEU:H | 6 | 0.11 |
| (1,596) | 1:A:164:ASN:H | 1:A:195:LEU:H | 5 | 0.11 |
| (1,590) | 1:A:171:LEU:H | 1:A:187:LEU:H | 12 | 0.11 |
| (1,574) | 1:A:36:LEU:HD11 | 1:A:85:LEU:HD21 | 15 | 0.11 |
| (1,574) | 1:A:36:LEU:HD11 | 1:A:85:LEU:HD22 | 15 | 0.11 |
| (1,574) | 1:A:36:LEU:HD11 | 1:A:85:LEU:HD23 | 15 | 0.11 |
| (1,574) | 1:A:36:LEU:HD12 | 1:A:85:LEU:HD21 | 15 | 0.11 |
| (1,574) | 1:A:36:LEU:HD12 | 1:A:85:LEU:HD22 | 15 | 0.11 |
| (1,574) | 1:A:36:LEU:HD12 | 1:A:85:LEU:HD23 | 15 | 0.11 |
| (1,574) | 1:A:36:LEU:HD13 | 1:A:85:LEU:HD21 | 15 | 0.11 |
| (1,574) | 1:A:36:LEU:HD13 | 1:A:85:LEU:HD22 | 15 | 0.11 |
| (1,574) | 1:A:36:LEU:HD13 | 1:A:85:LEU:HD23 | 15 | 0.11 |
| (1,572) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:28:ILE:HD11 | 7 | 0.11 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,572) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:28:ILE:HD12 | 7 | 0.11 |
| (1,572) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:28:ILE:HD13 | 7 | 0.11 |
| (1,572) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:28:ILE:HD11 | 7 | 0.11 |
| (1,572) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:28:ILE:HD12 | 7 | 0.11 |
| (1,572) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:28:ILE:HD13 | 7 | 0.11 |
| (1,572) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:28:ILE:HD11 | 7 | 0.11 |
| (1,572) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:28:ILE:HD12 | 7 | 0.11 |
| (1,572) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:28:ILE:HD13 | 7 | 0.11 |
| (1,572) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:28:ILE:HD11 | 8 | 0.11 |
| (1,572) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:28:ILE:HD12 | 8 | 0.11 |
| (1,572) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:28:ILE:HD13 | 8 | 0.11 |
| (1,572) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:28:ILE:HD11 | 8 | 0.11 |
| (1,572) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:28:ILE:HD12 | 8 | 0.11 |
| (1,572) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:28:ILE:HD13 | 8 | 0.11 |
| (1,572) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:28:ILE:HD11 | 8 | 0.11 |
| (1,572) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:28:ILE:HD12 | 8 | 0.11 |
| (1,572) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:28:ILE:HD13 | 8 | 0.11 |
| (1,567) | 1:A:70:LEU:HD11 | 1:A:74:LYS:H | 20 | 0.11 |
| (1,567) | 1:A:70:LEU:HD12 | 1:A:74:LYS:H | 20 | 0.11 |
| (1,567) | 1:A:70:LEU:HD13 | 1:A:74:LYS:H | 20 | 0.11 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD11 | 1:A:54:VAL:HG21 | 6 | 0.11 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD11 | 1:A:54:VAL:HG22 | 6 | 0.11 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD11 | 1:A:54:VAL:HG23 | 6 | 0.11 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD12 | 1:A:54:VAL:HG21 | 6 | 0.11 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD12 | 1:A:54:VAL:HG22 | 6 | 0.11 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD12 | 1:A:54:VAL:HG23 | 6 | 0.11 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD13 | 1:A:54:VAL:HG21 | 6 | 0.11 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD13 | 1:A:54:VAL:HG22 | 6 | 0.11 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD13 | 1:A:54:VAL:HG23 | 6 | 0.11 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD21 | 1:A:81:VAL:HG11 | 20 | 0.11 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD21 | 1:A:81:VAL:HG12 | 20 | 0.11 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD21 | 1:A:81:VAL:HG13 | 20 | 0.11 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD22 | 1:A:81:VAL:HG11 | 20 | 0.11 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD22 | 1:A:81:VAL:HG12 | 20 | 0.11 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD22 | 1:A:81:VAL:HG13 | 20 | 0.11 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD23 | 1:A:81:VAL:HG11 | 20 | 0.11 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD23 | 1:A:81:VAL:HG12 | 20 | 0.11 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD23 | 1:A:81:VAL:HG13 | 20 | 0.11 |
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD11 | 1:A:163:LEU:HD21 | 7 | 0.11 |
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD11 | 1:A:163:LEU:HD22 | 7 | 0.11 |
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD11 | 1:A:163:LEU:HD23 | 7 | 0.11 |
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD12 | 1:A:163:LEU:HD21 | 7 | 0.11 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD12 | 1:A:163:LEU:HD22 | 7 | 0.11 |
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD12 | 1:A:163:LEU:HD23 | 7 | 0.11 |
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD13 | 1:A:163:LEU:HD21 | 7 | 0.11 |
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD13 | 1:A:163:LEU:HD22 | 7 | 0.11 |
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD13 | 1:A:163:LEU:HD23 | 7 | 0.11 |
| (1,535) | 1:A:74:LYS:H | 1:A:76:VAL:HG11 | 11 | 0.11 |
| (1,535) | 1:A:74:LYS:H | 1:A:76:VAL:HG12 | 11 | 0.11 |
| (1,535) | 1:A:74:LYS:H | 1:A:76:VAL:HG13 | 11 | 0.11 |
| (1,518) | 1:A:117:VAL:HG11 | 1:A:121:LEU:HD11 | 7 | 0.11 |
| (1,518) | 1:A:117:VAL:HG11 | 1:A:121:LEU:HD12 | 7 | 0.11 |
| (1,518) | 1:A:117:VAL:HG11 | 1:A:121:LEU:HD13 | 7 | 0.11 |
| (1,518) | 1:A:117:VAL:HG12 | 1:A:121:LEU:HD11 | 7 | 0.11 |
| (1,518) | 1:A:117:VAL:HG12 | 1:A:121:LEU:HD12 | 7 | 0.11 |
| (1,518) | 1:A:117:VAL:HG12 | 1:A:121:LEU:HD13 | 7 | 0.11 |
| (1,518) | 1:A:117:VAL:HG13 | 1:A:121:LEU:HD11 | 7 | 0.11 |
| (1,518) | 1:A:117:VAL:HG13 | 1:A:121:LEU:HD12 | 7 | 0.11 |
| (1,518) | 1:A:117:VAL:HG13 | 1:A:121:LEU:HD13 | 7 | 0.11 |
| (1,511) | 1:A:145:LYS:H | 1:A:149:LEU:HD21 | 12 | 0.11 |
| (1,511) | 1:A:145:LYS:H | 1:A:149:LEU:HD22 | 12 | 0.11 |
| (1,511) | 1:A:145:LYS:H | 1:A:149:LEU:HD23 | 12 | 0.11 |
| (1,510) | 1:A:137:LEU:HD11 | 1:A:150:LEU:H | 5 | 0.11 |
| (1,510) | 1:A:137:LEU:HD12 | 1:A:150:LEU:H | 5 | 0.11 |
| (1,510) | 1:A:137:LEU:HD13 | 1:A:150:LEU:H | 5 | 0.11 |
| (1,510) | 1:A:137:LEU:HD11 | 1:A:150:LEU:H | 12 | 0.11 |
| (1,510) | 1:A:137:LEU:HD12 | 1:A:150:LEU:H | 12 | 0.11 |
| (1,510) | 1:A:137:LEU:HD13 | 1:A:150:LEU:H | 12 | 0.11 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD21 | 1:A:160:LEU:HD11 | 16 | 0.11 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD21 | 1:A:160:LEU:HD12 | 16 | 0.11 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD21 | 1:A:160:LEU:HD13 | 16 | 0.11 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD22 | 1:A:160:LEU:HD11 | 16 | 0.11 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD22 | 1:A:160:LEU:HD12 | 16 | 0.11 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD22 | 1:A:160:LEU:HD13 | 16 | 0.11 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD23 | 1:A:160:LEU:HD11 | 16 | 0.11 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD23 | 1:A:160:LEU:HD12 | 16 | 0.11 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD23 | 1:A:160:LEU:HD13 | 16 | 0.11 |
| (1,491) | 1:A:37:ALA:H | 1:A:85:LEU:HD11 | 4 | 0.11 |
| (1,491) | 1:A:37:ALA:H | 1:A:85:LEU:HD12 | 4 | 0.11 |
| (1,491) | 1:A:37:ALA:H | 1:A:85:LEU:HD13 | 4 | 0.11 |
| (1,467) | 1:A:62:VAL:HG11 | 1:A:63:GLY:H | 20 | 0.11 |
| (1,467) | 1:A:62:VAL:HG12 | 1:A:63:GLY:H | 20 | 0.11 |
| (1,467) | 1:A:62:VAL:HG13 | 1:A:63:GLY:H | 20 | 0.11 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD11 | 1:A:117:VAL:HG11 | 2 | 0.11 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD11 | 1:A:117:VAL:HG12 | 2 | 0.11 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD11 | 1:A:117:VAL:HG13 | 2 | 0.11 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD12 | 1:A:117:VAL:HG11 | 2 | 0.11 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD12 | 1:A:117:VAL:HG12 | 2 | 0.11 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD12 | 1:A:117:VAL:HG13 | 2 | 0.11 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD13 | 1:A:117:VAL:HG11 | 2 | 0.11 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD13 | 1:A:117:VAL:HG12 | 2 | 0.11 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD13 | 1:A:117:VAL:HG13 | 2 | 0.11 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD11 | 1:A:117:VAL:HG11 | 5 | 0.11 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD11 | 1:A:117:VAL:HG12 | 5 | 0.11 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD11 | 1:A:117:VAL:HG13 | 5 | 0.11 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD12 | 1:A:117:VAL:HG11 | 5 | 0.11 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD12 | 1:A:117:VAL:HG12 | 5 | 0.11 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD12 | 1:A:117:VAL:HG13 | 5 | 0.11 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD13 | 1:A:117:VAL:HG11 | 5 | 0.11 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD13 | 1:A:117:VAL:HG12 | 5 | 0.11 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD13 | 1:A:117:VAL:HG13 | 5 | 0.11 |
| (1,453) | 1:A:118:TYR:H | 1:A:121:LEU:HD21 | 19 | 0.11 |
| (1,453) | 1:A:118:TYR:H | 1:A:121:LEU:HD22 | 19 | 0.11 |
| (1,453) | 1:A:118:TYR:H | 1:A:121:LEU:HD23 | 19 | 0.11 |
| (1,419) | 1:A:169:ASN:H | 1:A:171:LEU:HD21 | 10 | 0.11 |
| (1,419) | 1:A:169:ASN:H | 1:A:171:LEU:HD22 | 10 | 0.11 |
| (1,419) | 1:A:169:ASN:H | 1:A:171:LEU:HD23 | 10 | 0.11 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD21 | 1:A:195:LEU:HD21 | 13 | 0.11 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD21 | 1:A:195:LEU:HD22 | 13 | 0.11 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD21 | 1:A:195:LEU:HD23 | 13 | 0.11 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD22 | 1:A:195:LEU:HD21 | 13 | 0.11 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD22 | 1:A:195:LEU:HD22 | 13 | 0.11 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD22 | 1:A:195:LEU:HD23 | 13 | 0.11 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD23 | 1:A:195:LEU:HD21 | 13 | 0.11 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD23 | 1:A:195:LEU:HD22 | 13 | 0.11 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD23 | 1:A:195:LEU:HD23 | 13 | 0.11 |
| (1,399) | 1:A:34:LEU:H | 1:A:99:VAL:HG21 | 4 | 0.11 |
| (1,399) | 1:A:34:LEU:H | 1:A:99:VAL:HG22 | 4 | 0.11 |
| (1,399) | 1:A:34:LEU:H | 1:A:99:VAL:HG23 | 4 | 0.11 |
| (1,399) | 1:A:34:LEU:H | 1:A:99:VAL:HG21 | 7 | 0.11 |
| (1,399) | 1:A:34:LEU:H | 1:A:99:VAL:HG22 | 7 | 0.11 |
| (1,399) | 1:A:34:LEU:H | 1:A:99:VAL:HG23 | 7 | 0.11 |
| (1,399) | 1:A:34:LEU:H | 1:A:99:VAL:HG21 | 8 | 0.11 |
| (1,399) | 1:A:34:LEU:H | 1:A:99:VAL:HG22 | 8 | 0.11 |
| (1,399) | 1:A:34:LEU:H | 1:A:99:VAL:HG23 | 8 | 0.11 |
| (1,399) | 1:A:34:LEU:H | 1:A:99:VAL:HG21 | 9 | 0.11 |



Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,399) | 1:A:34:LEU:H | 1:A:99:VAL:HG22 | 9 | 0.11 |
| (1,399) | 1:A:34:LEU:H | 1:A:99:VAL:HG23 | 9 | 0.11 |
| (1,399) | 1:A:34:LEU:H | 1:A:99:VAL:HG21 | 15 | 0.11 |
| (1,399) | 1:A:34:LEU:H | 1:A:99:VAL:HG22 | 15 | 0.11 |
| (1,399) | 1:A:34:LEU:H | 1:A:99:VAL:HG23 | 15 | 0.11 |
| (1,382) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:167:ILE:HD11 | 16 | 0.11 |
| (1,382) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:167:ILE:HD12 | 16 | 0.11 |
| (1,382) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:167:ILE:HD13 | 16 | 0.11 |
| (1,375) | 1:A:33:ILE:HD11 | 1:A:47:LEU:HD11 | 12 | 0.11 |
| (1,375) | 1:A:33:ILE:HD11 | 1:A:47:LEU:HD12 | 12 | 0.11 |
| (1,375) | 1:A:33:ILE:HD11 | 1:A:47:LEU:HD13 | 12 | 0.11 |
| (1,375) | 1:A:33:ILE:HD12 | 1:A:47:LEU:HD11 | 12 | 0.11 |
| (1,375) | 1:A:33:ILE:HD12 | 1:A:47:LEU:HD12 | 12 | 0.11 |
| (1,375) | 1:A:33:ILE:HD12 | 1:A:47:LEU:HD13 | 12 | 0.11 |
| (1,375) | 1:A:33:ILE:HD13 | 1:A:47:LEU:HD11 | 12 | 0.11 |
| (1,375) | 1:A:33:ILE:HD13 | 1:A:47:LEU:HD12 | 12 | 0.11 |
| (1,375) | 1:A:33:ILE:HD13 | 1:A:47:LEU:HD13 | 12 | 0.11 |
| (1,311) | 1:A:51:GLY:H | 1:A:76:VAL:HG11 | 1 | 0.11 |
| (1,311) | 1:A:51:GLY:H | 1:A:76:VAL:HG12 | 1 | 0.11 |
| (1,311) | 1:A:51:GLY:H | 1:A:76:VAL:HG13 | 1 | 0.11 |
| (1,304) | 1:A:91:VAL:HG11 | 1:A:93:ASP:H | 17 | 0.11 |
| (1,304) | 1:A:91:VAL:HG12 | 1:A:93:ASP:H | 17 | 0.11 |
| (1,304) | 1:A:91:VAL:HG13 | 1:A:93:ASP:H | 17 | 0.11 |
| (1,296) | 1:A:137:LEU:HD11 | 1:A:149:LEU:H | 2 | 0.11 |
| (1,296) | 1:A:137:LEU:HD12 | 1:A:149:LEU:H | 2 | 0.11 |
| (1,296) | 1:A:137:LEU:HD13 | 1:A:149:LEU:H | 2 | 0.11 |
| (1,296) | 1:A:137:LEU:HD11 | 1:A:149:LEU:H | 9 | 0.11 |
| (1,296) | 1:A:137:LEU:HD12 | 1:A:149:LEU:H | 9 | 0.11 |
| (1,296) | 1:A:137:LEU:HD13 | 1:A:149:LEU:H | 9 | 0.11 |
| (1,295) | 1:A:153:LEU:H | 1:A:190:LEU:HD21 | 4 | 0.11 |
| (1,295) | 1:A:153:LEU:H | 1:A:190:LEU:HD22 | 4 | 0.11 |
| (1,295) | 1:A:153:LEU:H | 1:A:190:LEU:HD23 | 4 | 0.11 |
| (1,295) | 1:A:153:LEU:H | 1:A:190:LEU:HD21 | 20 | 0.11 |
| (1,295) | 1:A:153:LEU:H | 1:A:190:LEU:HD22 | 20 | 0.11 |
| (1,295) | 1:A:153:LEU:H | 1:A:190:LEU:HD23 | 20 | 0.11 |
| (1,289) | 1:A:101:ILE:HD11 | 1:A:128:ILE:H | 19 | 0.11 |
| (1,289) | 1:A:101:ILE:HD12 | 1:A:128:ILE:H | 19 | 0.11 |
| (1,289) | 1:A:101:ILE:HD13 | 1:A:128:ILE:H | 19 | 0.11 |
| (1,289) | 1:A:101:ILE:HD11 | 1:A:128:ILE:H | 20 | 0.11 |
| (1,289) | 1:A:101:ILE:HD12 | 1:A:128:ILE:H | 20 | 0.11 |
| (1,289) | 1:A:101:ILE:HD13 | 1:A:128:ILE:H | 20 | 0.11 |
| (1,269) | 1:A:145:LYS:H | 1:A:149:LEU:HD11 | 6 | 0.11 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,269) | 1:A:145:LYS:H | 1:A:149:LEU:HD12 | 6 | 0.11 |
| (1,269) | 1:A:145:LYS:H | 1:A:149:LEU:HD13 | 6 | 0.11 |
| (1,269) | 1:A:145:LYS:H | 1:A:149:LEU:HD11 | 8 | 0.11 |
| (1,269) | 1:A:145:LYS:H | 1:A:149:LEU:HD12 | 8 | 0.11 |
| (1,269) | 1:A:145:LYS:H | 1:A:149:LEU:HD13 | 8 | 0.11 |
| (1,263) | 1:A:163:LEU:HD11 | 1:A:164:ASN:H | 10 | 0.11 |
| (1,263) | 1:A:163:LEU:HD12 | 1:A:164:ASN:H | 10 | 0.11 |
| (1,263) | 1:A:163:LEU:HD13 | 1:A:164:ASN:H | 10 | 0.11 |
| (1,259) | 1:A:71:ALA:H | 1:A:78:ILE:HD11 | 5 | 0.11 |
| (1,259) | 1:A:71:ALA:H | 1:A:78:ILE:HD12 | 5 | 0.11 |
| (1,259) | 1:A:71:ALA:H | 1:A:78:ILE:HD13 | 5 | 0.11 |
| (1,259) | 1:A:71:ALA:H | 1:A:78:ILE:HD11 | 16 | 0.11 |
| (1,259) | 1:A:71:ALA:H | 1:A:78:ILE:HD12 | 16 | 0.11 |
| (1,259) | 1:A:71:ALA:H | 1:A:78:ILE:HD13 | 16 | 0.11 |
| (1,236) | 1:A:21:LEU:HD11 | 1:A:25:ALA:H | 4 | 0.11 |
| (1,236) | 1:A:21:LEU:HD12 | 1:A:25:ALA:H | 4 | 0.11 |
| (1,236) | 1:A:21:LEU:HD13 | 1:A:25:ALA:H | 4 | 0.11 |
| (1,233) | 1:A:54:VAL:HG11 | 1:A:55:THR:H | 6 | 0.11 |
| (1,233) | 1:A:54:VAL:HG12 | 1:A:55:THR:H | 6 | 0.11 |
| (1,233) | 1:A:54:VAL:HG13 | 1:A:55:THR:H | 6 | 0.11 |
| (1,230) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:150:LEU:HD21 | 16 | 0.11 |
| (1,230) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:150:LEU:HD22 | 16 | 0.11 |
| (1,230) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:150:LEU:HD23 | 16 | 0.11 |
| (1,229) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:147:LEU:HD21 | 1 | 0.11 |
| (1,229) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:147:LEU:HD22 | 1 | 0.11 |
| (1,229) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:147:LEU:HD23 | 1 | 0.11 |
| (1,229) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:147:LEU:HD21 | 11 | 0.11 |
| (1,229) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:147:LEU:HD22 | 11 | 0.11 |
| (1,229) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:147:LEU:HD23 | 11 | 0.11 |
| (1,217) | 1:A:163:LEU:HD11 | 1:A:195:LEU:H | 1 | 0.11 |
| (1,217) | 1:A:163:LEU:HD12 | 1:A:195:LEU:H | 1 | 0.11 |
| (1,217) | 1:A:163:LEU:HD13 | 1:A:195:LEU:H | 1 | 0.11 |
| (1,217) | 1:A:163:LEU:HD11 | 1:A:195:LEU:H | 15 | 0.11 |
| (1,217) | 1:A:163:LEU:HD12 | 1:A:195:LEU:H | 15 | 0.11 |
| (1,217) | 1:A:163:LEU:HD13 | 1:A:195:LEU:H | 15 | 0.11 |
| (1,217) | 1:A:163:LEU:HD11 | 1:A:195:LEU:H | 16 | 0.11 |
| (1,217) | 1:A:163:LEU:HD12 | 1:A:195:LEU:H | 16 | 0.11 |
| (1,217) | 1:A:163:LEU:HD13 | 1:A:195:LEU:H | 16 | 0.11 |
| (1,176) | 1:A:186:ALA:H | 1:A:187:LEU:HD21 | 7 | 0.11 |
| (1,176) | 1:A:186:ALA:H | 1:A:187:LEU:HD22 | 7 | 0.11 |
| (1,176) | 1:A:186:ALA:H | 1:A:187:LEU:HD23 | 7 | 0.11 |
| (1,175) | 1:A:163:LEU:HD11 | 1:A:166:LEU:H | 17 | 0.11 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,175) | 1:A:163:LEU:HD12 | 1:A:166:LEU:H | 17 | 0.11 |
| (1,175) | 1:A:163:LEU:HD13 | 1:A:166:LEU:H | 17 | 0.11 |
| (1,174) | 1:A:61:SER:H | 1:A:62:VAL:HG11 | 3 | 0.11 |
| (1,174) | 1:A:61:SER:H | 1:A:62:VAL:HG12 | 3 | 0.11 |
| (1,174) | 1:A:61:SER:H | 1:A:62:VAL:HG13 | 3 | 0.11 |
| (1,174) | 1:A:61:SER:H | 1:A:62:VAL:HG11 | 16 | 0.11 |
| (1,174) | 1:A:61:SER:H | 1:A:62:VAL:HG12 | 16 | 0.11 |
| (1,174) | 1:A:61:SER:H | 1:A:62:VAL:HG13 | 16 | 0.11 |
| (1,123) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:128:ILE:HD11 | 1 | 0.11 |
| (1,123) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:128:ILE:HD12 | 1 | 0.11 |
| (1,123) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:128:ILE:HD13 | 1 | 0.11 |
| (1,123) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:128:ILE:HD11 | 9 | 0.11 |
| (1,123) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:128:ILE:HD12 | 9 | 0.11 |
| (1,123) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:128:ILE:HD13 | 9 | 0.11 |
| (1,1109) | 1:A:129:LEU:H | 1:A:190:LEU:O | 19 | 0.11 |
| (1,1105) | 1:A:102:PHE:H | 1:A:128:ILE:O | 11 | 0.11 |
| (1,1099) | 1:A:124:GLY:O | 1:A:98:ILE:H | 18 | 0.11 |
| (1,1084) | 1:A:154:GLU:O | 1:A:158:SER:H | 19 | 0.11 |
| (1,1035) | 1:A:23:SER:O | 1:A:27:GLN:N | 3 | 0.11 |
| (1,1034) | 1:A:23:SER:O | 1:A:27:GLN:H | 9 | 0.11 |
| (1,1034) | 1:A:23:SER:O | 1:A:27:GLN:H | 16 | 0.11 |
| (1,1032) | 1:A:22:VAL:O | 1:A:26:ASN:H | 8 | 0.11 |
| (1,1017) | 1:A:101:ILE:HA | 1:A:128:ILE:H | 19 | 0.11 |
| (1,1016) | 1:A:165:TRP:HZ3 | 1:A:127:PHE:HZ | 3 | 0.11 |
| (1,101) | 1:A:135:GLU:H | 1:A:138:GLN:H | 4 | 0.11 |
| (1,1003) | 1:A:59:GLN:H | 1:A:37:ALA:H | 5 | 0.11 |
| (1,1003) | 1:A:59:GLN:H | 1:A:37:ALA:H | 17 | 0.11 |
| (1,1003) | 1:A:59:GLN:H | 1:A:37:ALA:H | 18 | 0.11 |
| (1,997) | 1:A:81:VAL:H | 1:A:58:ASP:H | 14 | 0.1 |
| (1,994) | 1:A:79:THR:H | 1:A:54:VAL:H | 4 | 0.1 |
| (1,989) | 1:A:163:LEU:HD11 | 1:A:165:TRP:HE1 | 2 | 0.1 |
| (1,989) | 1:A:163:LEU:HD12 | 1:A:165:TRP:HE1 | 2 | 0.1 |
| (1,989) | 1:A:163:LEU:HD13 | 1:A:165:TRP:HE1 | 2 | 0.1 |
| (1,964) | 1:A:116:LYS:H | 1:A:117:VAL:HG21 | 1 | 0.1 |
| (1,964) | 1:A:116:LYS:H | 1:A:117:VAL:HG22 | 1 | 0.1 |
| (1,964) | 1:A:116:LYS:H | 1:A:117:VAL:HG23 | 1 | 0.1 |
| (1,932) | 1:A:172:GLU:H | 1:A:187:LEU:HD11 | 16 | 0.1 |
| (1,932) | 1:A:172:GLU:H | 1:A:187:LEU:HD12 | 16 | 0.1 |
| (1,932) | 1:A:172:GLU:H | 1:A:187:LEU:HD13 | 16 | 0.1 |
| (1,912) | 1:A:56:ALA:H | 1:A:81:VAL:HG21 | 3 | 0.1 |
| (1,912) | 1:A:56:ALA:H | 1:A:81:VAL:HG22 | 3 | 0.1 |
| (1,912) | 1:A:56:ALA:H | 1:A:81:VAL:HG23 | 3 | 0.1 |



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

| (1,912) 1:A:56:ALA:H 1:A:81:VAL:HG21 4 0.1 (1,912) 1:A:56:ALA:H 1:A:81:VAL:HG22 4 0.1 (1,912) 1:A:56:ALA:H 1:A:81:VAL:HG23 4 0.1 (1,902) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:169:ASN:H 11 0.1 (1,902) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:169:ASN:H 11 0.1 (1,902) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:169:ASN:H 11 0.1 (1,885) 1:A:50:LEU:H 1:A:54:VAL:HG21 14 0.1 (1,885) 1:A:50:LEU:H 1:A:54:VAL:HG22 14 0.1 (1,885) 1:A:50:LEU:H 1:A:54:VAL:HG22 14 0.1 (1,885) 1:A:50:LEU:H 1:A:54:VAL:HG22 14 0.1 (1,885) 1:A:30:LEU:H 1:A:54:VAL:HG22 14 0.1 (1,885) 1:A:31:GLY:H 1:A:153:LEU:HD21 9 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD21 9 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD22 9 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD22 9 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD23 9 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD21 15 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD21 15 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD22 15 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD22 15 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD22 15 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD23 15 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD23 15 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD22 20 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD23 20 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD23 20 0.1 (1,857) 1:A:34:LEU:HD11 1:A:36:LEU:H 2 0.1 (1,827) 1:A:34:LEU:HD11 1:A:36:LEU:H 2 0.1 (1,827) 1:A:34:LEU:HD11 1:A:36:LEU:H 2 0.1 (1,827) 1:A:34:LEU:HD11 1:A:36:LEU:H 4 0.1 (1,827) 1:A:34:LEU:HD11 1:A:36:LEU:H 10 0.1 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD11 10 0.1 (1,811) 1:A:166:LEU:HD22 1:A:39:GLN:H 6 0.1 (1,806) 1:A:166:LEU:HD23 1:A:193:GLN:H 6 0.1 (1,806) 1:A:166:LEU:HD23 1:A:193:GLN:H 6 0.1 (1,708) 1:A:136:GLD:HD12 1:A:190:LEU:HD11 11 0.1 (1,708) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD11 11 0.1 (1,709) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD11 11 0.1 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD11 16 0.1 (1,776) 1:A:153: | Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|--|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,912) 1:A:56:ALA:H 1:A:81:VAL:HG23 4 0.1 (1,902) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:169:ASN:H 11 0.1 (1,902) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:169:ASN:H 11 0.1 (1,902) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:169:ASN:H 11 0.1 (1,902) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:169:ASN:H 11 0.1 (1,885) 1:A:50:LEU:H 1:A:54:VAL:HG21 14 0.1 (1,885) 1:A:50:LEU:H 1:A:54:VAL:HG22 14 0.1 (1,885) 1:A:50:LEU:H 1:A:54:VAL:HG22 14 0.1 (1,885) 1:A:50:LEU:H 1:A:54:VAL:HG23 14 0.1 (1,884) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD21 9 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD22 9 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD22 9 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD23 9 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD22 15 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD22 15 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD23 20 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD22 20 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD22 20 0.1 (1,854) 1:A:34:LEU:HD11 1:A:36:LEU:H 2 0.1 (1,827) 1:A:34:LEU:HD12 1:A:36:LEU:H 4 0.1 (1,827) 1:A:34:LEU:HD11 1:A:36:LEU:H 4 0.1 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD11 10 0.1 (1,806) 1:A:166:LEU:HD22 1:A:193:GLN:H 6 0.1 (1,806) 1:A:166:LEU:HD22 1:A:193:GLN:H 6 0.1 (1,806) 1:A:166:LEU:HD22 1:A:193:GLN:H 6 0.1 (1,708) 1:A:166:LEU:HD12 1:A:109:LEU:HD11 11 0.1 (1,706) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:109:LEU:HD11 11 0.1 (1,706) 1:A:153:LEU:HD11 | (1,912) | 1:A:56:ALA:H | 1:A:81:VAL:HG21 | 4 | 0.1 |
| (1,902) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:169:ASN:H 11 0.1 (1,902) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:169:ASN:H 11 0.1 (1,902) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:169:ASN:H 11 0.1 (1,885) 1:A:50:LEU:H 1:A:54:VAL:HG21 14 0.1 (1,885) 1:A:50:LEU:H 1:A:54:VAL:HG22 14 0.1 (1,885) 1:A:50:LEU:H 1:A:54:VAL:HG23 14 0.1 (1,885) 1:A:50:LEU:H 1:A:54:VAL:HG23 14 0.1 (1,884) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD21 9 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD23 9 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD22 15 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD22 15 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD23 15 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD23 15 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD23 | (1,912) | 1:A:56:ALA:H | 1:A:81:VAL:HG22 | 4 | 0.1 |
| (1,902) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:169:ASN:H 11 0.1 (1,902) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:169:ASN:H 11 0.1 (1,885) 1:A:50:LEU:H 1:A:54:VAL:HG21 14 0.1 (1,885) 1:A:50:LEU:H 1:A:54:VAL:HG22 14 0.1 (1,885) 1:A:50:LEU:H 1:A:54:VAL:HG23 14 0.1 (1,884) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD21 9 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD22 9 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD22 9 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD23 9 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD21 15 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD21 15 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD23 15 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD23 15 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD22 20 0.1 (1,857) 1:A:34:LEU:HD11 1:A:36:LEU:H 2 0.1 (1,827) 1:A:34:LEU:HD11 1:A:36:LEU:H 2 0.1 (1,827) 1:A:34:LEU:HD13 1:A:36:LEU:H 2 0.1 (1,827) 1:A:34:LEU:HD11 1:A:36:LEU:H 4 0.1 (1,827) 1:A:34:LEU:HD11 1:A:36:LEU:H 6 0.1 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD11 10 0.1 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD11 10 0.1 (1,811) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD11 10 0.1 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD11 10 0.1 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD11 10 0.1 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD11 16 0.1 (1,806) 1:A:166:LEU:HD22 1:A:193:GLN:H 6 0.1 (1,806) 1:A:166:LEU:HD22 1:A:193:GLN:H 6 0.1 (1,708) 1:A:166:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD11 11 0.1 (1,708) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD11 11 0.1 (1,709) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD11 11 0.1 (1,700) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD11 16 0.1 (1,700) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD11 16 0.1 | (1,912) | 1:A:56:ALA:H | 1:A:81:VAL:HG23 | 4 | 0.1 |
| (1,902) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:169:ASN:H 11 0.1 (1,885) 1:A:50:LEU:H 1:A:54:VAL:HG21 14 0.1 (1,885) 1:A:50:LEU:H 1:A:54:VAL:HG22 14 0.1 (1,885) 1:A:50:LEU:H 1:A:54:VAL:HG22 14 0.1 (1,885) 1:A:50:LEU:H 1:A:54:VAL:HG23 14 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD21 9 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD22 9 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD23 9 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD23 9 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD23 15 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD22 15 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD23 15 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD22 15 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD22 20 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD22 20 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD21 20 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD22 20 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD22 20 0.1 (1,857) 1:A:34:LEU:HD11 1:A:36:LEU:H 2 0.1 (1,827) 1:A:34:LEU:HD11 1:A:36:LEU:H 4 0.1 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD11 10 0.1 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD11 10 0.1 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD11 10 0.1 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD11 16 0.1 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD11 16 0.1 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD11 16 0.1 (1,806) 1:A:166:LEU:HD21 1:A:193:GLN:H 6 0.1 (1,806) 1:A:166:LEU:HD21 1:A:193:GLN:H 6 0.1 (1,708) 1:A:166:LEU:HD21 1:A:193:GLN:H 6 0.1 (1,708) 1:A:166:LEU:HD11 1:A:193:GLN:H 10 0.1 (1,708) 1:A:166:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD11 11 0.1 (1,709) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD11 11 0.1 (1,700) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD11 11 0.1 (1,700) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD11 11 0.1 (1,700) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD11 16 0.1 (1,700) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD11 16 0.1 | (1,902) | 1:A:153:LEU:HD11 | 1:A:169:ASN:H | 11 | 0.1 |
| (1,885) 1:A:50:LEU:H 1:A:54:VAL:HG21 14 0.1 (1,885) 1:A:50:LEU:H 1:A:54:VAL:HG22 14 0.1 (1,885) 1:A:50:LEU:H 1:A:54:VAL:HG23 14 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD21 9 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD23 9 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD21 15 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD21 15 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD22 15 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD23 15 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD22 20 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD22 20 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD22 20 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD23 20 0.1 (1,827) 1:A:34:LEU:HD11 1:A:36:LEU:H | (1,902) | 1:A:153:LEU:HD12 | 1:A:169:ASN:H | 11 | 0.1 |
| (1,885) 1:A:50:LEU:H 1:A:54:VAL:HG22 14 0.1 (1,885) 1:A:50:LEU:H 1:A:54:VAL:HG23 14 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD21 9 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD22 9 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD21 15 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD22 15 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD23 15 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD23 15 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD22 20 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD23 20 0.1 (1,824) 1:A:34:LEU:HD11 1:A:36:LEU:HD23 20 0.1 (1,827) 1:A:34:LEU:HD11 1:A:36:LEU:H 2 0.1 (1,827) 1:A:34:LEU:HD13 1:A:36:LEU:H 2 0.1 (1,827) 1:A:34:LEU:HD13 1:A:36:LEU:H | (1,902) | 1:A:153:LEU:HD13 | 1:A:169:ASN:H | 11 | 0.1 |
| (1,885) 1:A:50:LEU:H 1:A:54:VAL:HG23 14 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD21 9 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD22 9 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD23 9 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD21 15 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD22 15 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD21 20 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD21 20 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD22 20 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD23 20 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD22 20 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD23 20 0.1 (1,857) 1:A:34:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD23 20 0.1 (1,827) 1:A:34:LEU:HD13 1:A:36:LEU:H | (1,885) | 1:A:50:LEU:H | 1:A:54:VAL:HG21 | 14 | 0.1 |
| (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD21 9 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD22 9 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD23 9 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD21 15 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD22 15 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD23 15 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD22 20 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD22 20 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD22 20 0.1 (1,854) 1:A:34:LEU:HD11 1:A:36:LEU:HD23 20 0.1 (1,827) 1:A:34:LEU:HD12 1:A:36:LEU:H 2 0.1 (1,827) 1:A:34:LEU:HD13 1:A:36:LEU:H 2 0.1 (1,827) 1:A:34:LEU:HD13 1:A:36:LEU:H 4 0.1 (1,827) 1:A:34:LEU:HD13 1:A:36:LEU:H | (1,885) | 1:A:50:LEU:H | 1:A:54:VAL:HG22 | 14 | 0.1 |
| (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD22 9 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD23 9 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD21 15 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD22 15 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD23 15 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD22 20 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD22 20 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD22 20 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD23 20 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD23 20 0.1 (1,854) 1:A:34:LEU:HD11 1:A:36:LEU:H 2 0.1 (1,827) 1:A:34:LEU:HD12 1:A:36:LEU:H 2 0.1 (1,827) 1:A:34:LEU:HD13 1:A:36:LEU:H 4 0.1 (1,827) 1:A:34:LEU:HD13 1:A:36:LEU:H | (1,885) | 1:A:50:LEU:H | 1:A:54:VAL:HG23 | 14 | 0.1 |
| (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD23 9 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD21 15 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD22 15 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD23 15 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD21 20 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD22 20 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD23 20 0.1 (1,827) 1:A:34:LEU:HD11 1:A:36:LEU:H 2 0.1 (1,827) 1:A:34:LEU:HD12 1:A:36:LEU:H 2 0.1 (1,827) 1:A:34:LEU:HD13 1:A:36:LEU:H 2 0.1 (1,827) 1:A:34:LEU:HD12 1:A:36:LEU:H 4 0.1 (1,827) 1:A:34:LEU:HD13 1:A:36:LEU:H 4 0.1 (1,827) 1:A:34:GEU:HD13 1:A:36:LEU:H 4 0.1 (1,827) 1:A:34:LEU:HD13 1:A:36:LEU:H 4 <td>(1,854)</td> <td>1:A:131:GLY:H</td> <td>1:A:153:LEU:HD21</td> <td>9</td> <td>0.1</td> | (1,854) | 1:A:131:GLY:H | 1:A:153:LEU:HD21 | 9 | 0.1 |
| (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD21 15 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD22 15 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD23 15 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD21 20 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD22 20 0.1 (1,854) 1:A:34:LEU:HD11 1:A:36:LEU:HD23 20 0.1 (1,854) 1:A:34:LEU:HD11 1:A:36:LEU:H 2 0.1 (1,827) 1:A:34:LEU:HD12 1:A:36:LEU:H 2 0.1 (1,827) 1:A:34:LEU:HD13 1:A:36:LEU:H 2 0.1 (1,827) 1:A:34:LEU:HD11 1:A:36:LEU:H 4 0.1 (1,827) 1:A:34:LEU:HD12 1:A:36:LEU:H 4 0.1 (1,827) 1:A:34:LEU:HD13 1:A:36:LEU:H 4 0.1 (1,827) 1:A:34:CEU:HD13 1:A:36:LEU:H 4 0.1 (1,827) 1:A:34:CEU:HD13 1:A:36:LEU:HD11 10 | (1,854) | 1:A:131:GLY:H | 1:A:153:LEU:HD22 | 9 | 0.1 |
| (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD22 15 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD23 15 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD21 20 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD22 20 0.1 (1,854) 1:A:34:LEU:HD11 1:A:36:LEU:HD23 20 0.1 (1,827) 1:A:34:LEU:HD11 1:A:36:LEU:H 2 0.1 (1,827) 1:A:34:LEU:HD12 1:A:36:LEU:H 2 0.1 (1,827) 1:A:34:LEU:HD13 1:A:36:LEU:H 2 0.1 (1,827) 1:A:34:LEU:HD11 1:A:36:LEU:H 4 0.1 (1,827) 1:A:34:LEU:HD12 1:A:36:LEU:H 4 0.1 (1,827) 1:A:34:LEU:HD13 1:A:36:LEU:H 4 0.1 (1,827) 1:A:34:LEU:HD12 1:A:36:LEU:H 4 0.1 (1,827) 1:A:34:G:ASP:H 1:A:147:LEU:HD11 10 0.1 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD12 10 | (1,854) | 1:A:131:GLY:H | 1:A:153:LEU:HD23 | 9 | 0.1 |
| (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD23 15 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD21 20 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD22 20 0.1 (1,854) 1:A:313:GLY:H 1:A:153:LEU:HD23 20 0.1 (1,827) 1:A:34:LEU:HD11 1:A:36:LEU:H 2 0.1 (1,827) 1:A:34:LEU:HD12 1:A:36:LEU:H 2 0.1 (1,827) 1:A:34:LEU:HD13 1:A:36:LEU:H 2 0.1 (1,827) 1:A:34:LEU:HD11 1:A:36:LEU:H 4 0.1 (1,827) 1:A:34:LEU:HD12 1:A:36:LEU:H 4 0.1 (1,827) 1:A:34:LEU:HD13 1:A:36:LEU:HD13 10 0.1 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD11 10 <td>(1,854)</td> <td>1:A:131:GLY:H</td> <td>1:A:153:LEU:HD21</td> <td>15</td> <td>0.1</td> | (1,854) | 1:A:131:GLY:H | 1:A:153:LEU:HD21 | 15 | 0.1 |
| (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD21 20 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD22 20 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD23 20 0.1 (1,827) 1:A:34:LEU:HD11 1:A:36:LEU:H 2 0.1 (1,827) 1:A:34:LEU:HD12 1:A:36:LEU:H 2 0.1 (1,827) 1:A:34:LEU:HD13 1:A:36:LEU:H 2 0.1 (1,827) 1:A:34:LEU:HD12 1:A:36:LEU:H 4 0.1 (1,827) 1:A:34:LEU:HD12 1:A:36:LEU:H 4 0.1 (1,827) 1:A:34:LEU:HD13 1:A:36:LEU:H 4 0.1 (1,827) 1:A:34:LEU:HD13 1:A:36:LEU:H 4 0.1 (1,827) 1:A:34:LEU:HD13 1:A:36:LEU:H 4 0.1 (1,827) 1:A:34:G:ASP:H 1:A:147:LEU:HD11 10 0.1 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD13 10 0.1 (1,811) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD11 16 <td>(1,854)</td> <td>1:A:131:GLY:H</td> <td>1:A:153:LEU:HD22</td> <td>15</td> <td>0.1</td> | (1,854) | 1:A:131:GLY:H | 1:A:153:LEU:HD22 | 15 | 0.1 |
| (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD22 20 0.1 (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD23 20 0.1 (1,827) 1:A:34:LEU:HD11 1:A:36:LEU:H 2 0.1 (1,827) 1:A:34:LEU:HD12 1:A:36:LEU:H 2 0.1 (1,827) 1:A:34:LEU:HD13 1:A:36:LEU:H 2 0.1 (1,827) 1:A:34:LEU:HD11 1:A:36:LEU:H 4 0.1 (1,827) 1:A:34:LEU:HD12 1:A:36:LEU:H 4 0.1 (1,827) 1:A:34:LEU:HD13 1:A:36:LEU:H 4 0.1 (1,827) 1:A:34:LEU:HD13 1:A:36:LEU:H 4 0.1 (1,827) 1:A:34:LEU:HD13 1:A:36:LEU:H 4 0.1 (1,827) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD11 10 0.1 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD12 10 0.1 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD13 10 0.1 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD12 16 | (1,854) | 1:A:131:GLY:H | 1:A:153:LEU:HD23 | 15 | 0.1 |
| (1,854) 1:A:131:GLY:H 1:A:153:LEU:HD23 20 0.1 (1,827) 1:A:34:LEU:HD11 1:A:36:LEU:H 2 0.1 (1,827) 1:A:34:LEU:HD12 1:A:36:LEU:H 2 0.1 (1,827) 1:A:34:LEU:HD13 1:A:36:LEU:H 2 0.1 (1,827) 1:A:34:LEU:HD11 1:A:36:LEU:H 4 0.1 (1,827) 1:A:34:LEU:HD12 1:A:36:LEU:H 4 0.1 (1,827) 1:A:34:LEU:HD13 1:A:36:LEU:H 4 0.1 (1,827) 1:A:34:LEU:HD13 1:A:36:LEU:H 4 0.1 (1,827) 1:A:34:LEU:HD13 1:A:36:LEU:H 4 0.1 (1,827) 1:A:46:ASP:H 1:A:147:LEU:HD11 10 0.1 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD12 10 0.1 (1,811) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD13 10 0.1 (1,811) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD11 16 0.1 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD13 16 | (1,854) | 1:A:131:GLY:H | 1:A:153:LEU:HD21 | 20 | 0.1 |
| (1,827) 1:A:34:LEU:HD11 1:A:36:LEU:H 2 0.1 (1,827) 1:A:34:LEU:HD12 1:A:36:LEU:H 2 0.1 (1,827) 1:A:34:LEU:HD13 1:A:36:LEU:H 2 0.1 (1,827) 1:A:34:LEU:HD11 1:A:36:LEU:H 4 0.1 (1,827) 1:A:34:LEU:HD12 1:A:36:LEU:H 4 0.1 (1,827) 1:A:34:LEU:HD13 1:A:36:LEU:H 4 0.1 (1,827) 1:A:46:ASP:H 1:A:47:LEU:HD11 10 0.1 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD13 10 0.1 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD13 10 0.1 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD13 16 0.1 (1,806) 1:A:166:LEU:HD21 1:A:193:GLN:H 6 | (1,854) | 1:A:131:GLY:H | 1:A:153:LEU:HD22 | 20 | 0.1 |
| (1,827) 1:A:34:LEU:HD12 1:A:36:LEU:H 2 0.1 (1,827) 1:A:34:LEU:HD13 1:A:36:LEU:H 2 0.1 (1,827) 1:A:34:LEU:HD11 1:A:36:LEU:H 4 0.1 (1,827) 1:A:34:LEU:HD12 1:A:36:LEU:H 4 0.1 (1,827) 1:A:34:LEU:HD13 1:A:36:LEU:H 4 0.1 (1,827) 1:A:34:LEU:HD13 1:A:36:LEU:H 4 0.1 (1,827) 1:A:34:LEU:HD13 1:A:36:LEU:H 4 0.1 (1,827) 1:A:46:ASP:H 1:A:147:LEU:HD11 10 0.1 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD12 10 0.1 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD13 10 0.1 (1,811) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD11 16 0.1 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD13 16 0.1 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD13 16 0.1 (1,806) 1:A:166:LEU:HD21 1:A:193:GLN:H 6 <td>(1,854)</td> <td>1:A:131:GLY:H</td> <td>1:A:153:LEU:HD23</td> <td>20</td> <td>0.1</td> | (1,854) | 1:A:131:GLY:H | 1:A:153:LEU:HD23 | 20 | 0.1 |
| (1,827) 1:A:34:LEU:HD13 1:A:36:LEU:H 2 0.1 (1,827) 1:A:34:LEU:HD11 1:A:36:LEU:H 4 0.1 (1,827) 1:A:34:LEU:HD12 1:A:36:LEU:H 4 0.1 (1,827) 1:A:34:LEU:HD13 1:A:36:LEU:H 4 0.1 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD11 10 0.1 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD12 10 0.1 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD13 10 0.1 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD13 10 0.1 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD11 16 0.1 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD12 16 0.1 (1,800) 1:A:166:LEU:HD21 1:A:193:GLN:H 6 0.1 (1,806) 1:A:166:LEU:HD22 1:A:193:GLN:H 6 0.1 (1,806) 1:A:166:LEU:HD23 1:A:193:GLN:H 6 0.1 (1,798) 1:A:86:ALA:H 1:A:109:LEU:HD11 <td< td=""><td>(1,827)</td><td>1:A:34:LEU:HD11</td><td>1:A:36:LEU:H</td><td>2</td><td>0.1</td></td<> | (1,827) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:36:LEU:H | 2 | 0.1 |
| (1,827) 1:A:34:LEU:HD13 1:A:36:LEU:H 2 0.1 (1,827) 1:A:34:LEU:HD11 1:A:36:LEU:H 4 0.1 (1,827) 1:A:34:LEU:HD12 1:A:36:LEU:H 4 0.1 (1,827) 1:A:34:LEU:HD13 1:A:36:LEU:H 4 0.1 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD11 10 0.1 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD12 10 0.1 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD13 10 0.1 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD13 10 0.1 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD11 16 0.1 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD12 16 0.1 (1,806) 1:A:166:LEU:HD21 1:A:193:GLN:H 6 0.1 (1,806) 1:A:166:LEU:HD22 1:A:193:GLN:H 6 0.1 (1,806) 1:A:166:LEU:HD23 1:A:193:GLN:H 6 0.1 (1,798) 1:A:86:ALA:H 1:A:109:LEU:HD11 <td< td=""><td>(1,827)</td><td>1:A:34:LEU:HD12</td><td>1:A:36:LEU:H</td><td>2</td><td>0.1</td></td<> | (1,827) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:36:LEU:H | 2 | 0.1 |
| (1,827) 1:A:34:LEU:HD12 1:A:36:LEU:H 4 0.1 (1,827) 1:A:34:LEU:HD13 1:A:36:LEU:H 4 0.1 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD11 10 0.1 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD12 10 0.1 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD13 10 0.1 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD11 16 0.1 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD12 16 0.1 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD13 16 0.1 (1,806) 1:A:166:LEU:HD21 1:A:193:GLN:H 6 0.1 (1,806) 1:A:166:LEU:HD22 1:A:193:GLN:H 6 0.1 (1,806) 1:A:166:LEU:HD23 1:A:193:GLN:H 6 0.1 (1,798) 1:A:86:ALA:H 1:A:109:LEU:HD11 11 0.1 (1,798) 1:A:86:ALA:H 1:A:109:LEU:HD13 11 0.1 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD12 | (1,827) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:36:LEU:H | 2 | 0.1 |
| (1,827) 1:A:34:LEU:HD13 1:A:36:LEU:H 4 0.1 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD11 10 0.1 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD12 10 0.1 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD13 10 0.1 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD11 16 0.1 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD12 16 0.1 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD13 16 0.1 (1,806) 1:A:166:LEU:HD21 1:A:193:GLN:H 6 0.1 (1,806) 1:A:166:LEU:HD22 1:A:193:GLN:H 6 0.1 (1,806) 1:A:166:LEU:HD23 1:A:193:GLN:H 6 0.1 (1,798) 1:A:86:ALA:H 1:A:109:LEU:HD11 11 0.1 (1,798) 1:A:86:ALA:H 1:A:109:LEU:HD13 11 0.1 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD12 16 0.1 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD13 <td>(1,827)</td> <td>1:A:34:LEU:HD11</td> <td>1:A:36:LEU:H</td> <td>4</td> <td>0.1</td> | (1,827) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:36:LEU:H | 4 | 0.1 |
| (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD11 10 0.1 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD12 10 0.1 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD13 10 0.1 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD11 16 0.1 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD12 16 0.1 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD13 16 0.1 (1,800) 1:A:136:GLN:H 1:A:193:GLN:H 6 0.1 (1,806) 1:A:166:LEU:HD22 1:A:193:GLN:H 6 0.1 (1,806) 1:A:166:LEU:HD23 1:A:193:GLN:H 6 0.1 (1,798) 1:A:86:ALA:H 1:A:109:LEU:HD11 11 0.1 (1,798) 1:A:86:ALA:H 1:A:109:LEU:HD12 11 0.1 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD11 16 0.1 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD11 16 0.1 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD12 | (1,827) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:36:LEU:H | 4 | 0.1 |
| (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD12 10 0.1 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD13 10 0.1 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD11 16 0.1 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD12 16 0.1 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD13 16 0.1 (1,806) 1:A:166:LEU:HD21 1:A:193:GLN:H 6 0.1 (1,806) 1:A:166:LEU:HD22 1:A:193:GLN:H 6 0.1 (1,806) 1:A:166:LEU:HD23 1:A:193:GLN:H 6 0.1 (1,806) 1:A:166:LEU:HD23 1:A:193:GLN:H 6 0.1 (1,798) 1:A:86:ALA:H 1:A:190:LEU:HD11 11 0.1 (1,798) 1:A:86:ALA:H 1:A:109:LEU:HD13 11 0.1 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD11 16 0.1 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD13 16 0.1 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD11 16 0.1 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 < | (1,827) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:36:LEU:H | 4 | 0.1 |
| (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD13 10 0.1 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD11 16 0.1 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD12 16 0.1 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD13 16 0.1 (1,806) 1:A:166:LEU:HD21 1:A:193:GLN:H 6 0.1 (1,806) 1:A:166:LEU:HD22 1:A:193:GLN:H 6 0.1 (1,806) 1:A:166:LEU:HD23 1:A:193:GLN:H 6 0.1 (1,798) 1:A:86:ALA:H 1:A:109:LEU:HD11 11 0.1 (1,798) 1:A:86:ALA:H 1:A:109:LEU:HD12 11 0.1 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD11 16 0.1 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD11 16 0.1 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD11 16 0.1 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD12 16 0.1 | (1,811) | 1:A:146:ASP:H | 1:A:147:LEU:HD11 | 10 | 0.1 |
| (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD11 16 0.1 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD12 16 0.1 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD13 16 0.1 (1,806) 1:A:166:LEU:HD21 1:A:193:GLN:H 6 0.1 (1,806) 1:A:166:LEU:HD22 1:A:193:GLN:H 6 0.1 (1,806) 1:A:166:LEU:HD23 1:A:193:GLN:H 6 0.1 (1,798) 1:A:86:ALA:H 1:A:193:GLN:H 6 0.1 (1,798) 1:A:86:ALA:H 1:A:109:LEU:HD11 11 0.1 (1,798) 1:A:86:ALA:H 1:A:109:LEU:HD13 11 0.1 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD11 16 0.1 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD11 16 0.1 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD11 16 0.1 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD12 16 0.1 | (1,811) | 1:A:146:ASP:H | 1:A:147:LEU:HD12 | 10 | 0.1 |
| (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD12 16 0.1 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD13 16 0.1 (1,806) 1:A:166:LEU:HD21 1:A:193:GLN:H 6 0.1 (1,806) 1:A:166:LEU:HD22 1:A:193:GLN:H 6 0.1 (1,806) 1:A:166:LEU:HD23 1:A:193:GLN:H 6 0.1 (1,798) 1:A:86:ALA:H 1:A:109:LEU:HD11 11 0.1 (1,798) 1:A:86:ALA:H 1:A:109:LEU:HD12 11 0.1 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD11 16 0.1 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD13 16 0.1 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD11 16 0.1 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD11 16 0.1 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD12 16 0.1 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD12 16 0.1 | (1,811) | 1:A:146:ASP:H | 1:A:147:LEU:HD13 | 10 | 0.1 |
| (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD13 16 0.1 (1,806) 1:A:166:LEU:HD21 1:A:193:GLN:H 6 0.1 (1,806) 1:A:166:LEU:HD22 1:A:193:GLN:H 6 0.1 (1,806) 1:A:166:LEU:HD23 1:A:193:GLN:H 6 0.1 (1,798) 1:A:86:ALA:H 1:A:109:LEU:HD11 11 0.1 (1,798) 1:A:86:ALA:H 1:A:109:LEU:HD12 11 0.1 (1,778) 1:A:86:ALA:H 1:A:109:LEU:HD13 11 0.1 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD11 16 0.1 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD13 16 0.1 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD11 16 0.1 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD11 16 0.1 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD12 16 0.1 | (1,810) | 1:A:136:GLN:H | 1:A:147:LEU:HD11 | 16 | 0.1 |
| (1,806) 1:A:166:LEU:HD21 1:A:193:GLN:H 6 0.1 (1,806) 1:A:166:LEU:HD22 1:A:193:GLN:H 6 0.1 (1,806) 1:A:166:LEU:HD23 1:A:193:GLN:H 6 0.1 (1,798) 1:A:86:ALA:H 1:A:109:LEU:HD11 11 0.1 (1,798) 1:A:86:ALA:H 1:A:109:LEU:HD12 11 0.1 (1,798) 1:A:86:ALA:H 1:A:109:LEU:HD13 11 0.1 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD11 16 0.1 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD13 16 0.1 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD11 16 0.1 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD11 16 0.1 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD12 16 0.1 | (1,810) | 1:A:136:GLN:H | 1:A:147:LEU:HD12 | 16 | 0.1 |
| (1,806) 1:A:166:LEU:HD22 1:A:193:GLN:H 6 0.1 (1,806) 1:A:166:LEU:HD23 1:A:193:GLN:H 6 0.1 (1,798) 1:A:86:ALA:H 1:A:109:LEU:HD11 11 0.1 (1,798) 1:A:86:ALA:H 1:A:109:LEU:HD12 11 0.1 (1,798) 1:A:86:ALA:H 1:A:109:LEU:HD13 11 0.1 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD11 16 0.1 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD13 16 0.1 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD11 16 0.1 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD11 16 0.1 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD12 16 0.1 | (1,810) | 1:A:136:GLN:H | 1:A:147:LEU:HD13 | 16 | 0.1 |
| (1,806) 1:A:166:LEU:HD23 1:A:193:GLN:H 6 0.1 (1,798) 1:A:86:ALA:H 1:A:109:LEU:HD11 11 0.1 (1,798) 1:A:86:ALA:H 1:A:109:LEU:HD12 11 0.1 (1,798) 1:A:86:ALA:H 1:A:109:LEU:HD13 11 0.1 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD11 16 0.1 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD13 16 0.1 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD11 16 0.1 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD11 16 0.1 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD12 16 0.1 | (1,806) | 1:A:166:LEU:HD21 | 1:A:193:GLN:H | 6 | 0.1 |
| (1,806) 1:A:166:LEU:HD23 1:A:193:GLN:H 6 0.1 (1,798) 1:A:86:ALA:H 1:A:109:LEU:HD11 11 0.1 (1,798) 1:A:86:ALA:H 1:A:109:LEU:HD12 11 0.1 (1,798) 1:A:86:ALA:H 1:A:109:LEU:HD13 11 0.1 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD11 16 0.1 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD13 16 0.1 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD11 16 0.1 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD11 16 0.1 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD12 16 0.1 | (1,806) | 1:A:166:LEU:HD22 | 1:A:193:GLN:H | 6 | 0.1 |
| (1,798) 1:A:86:ALA:H 1:A:109:LEU:HD11 11 0.1 (1,798) 1:A:86:ALA:H 1:A:109:LEU:HD12 11 0.1 (1,798) 1:A:86:ALA:H 1:A:109:LEU:HD13 11 0.1 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD11 16 0.1 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD12 16 0.1 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD13 16 0.1 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD11 16 0.1 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD12 16 0.1 | | 1:A:166:LEU:HD23 | 1:A:193:GLN:H | 6 | 0.1 |
| (1,798) 1:A:86:ALA:H 1:A:109:LEU:HD12 11 0.1 (1,798) 1:A:86:ALA:H 1:A:109:LEU:HD13 11 0.1 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD11 16 0.1 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD12 16 0.1 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD13 16 0.1 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD11 16 0.1 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD12 16 0.1 | | 1:A:86:ALA:H | 1:A:109:LEU:HD11 | 11 | 0.1 |
| (1,798) 1:A:86:ALA:H 1:A:109:LEU:HD13 11 0.1 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD11 16 0.1 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD12 16 0.1 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD13 16 0.1 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD11 16 0.1 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD12 16 0.1 | | 1:A:86:ALA:H | 1:A:109:LEU:HD12 | 11 | 0.1 |
| (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD11 16 0.1 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD12 16 0.1 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD13 16 0.1 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD11 16 0.1 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD12 16 0.1 | | 1:A:86:ALA:H | 1:A:109:LEU:HD13 | 11 | 0.1 |
| (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD12 16 0.1 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD13 16 0.1 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD11 16 0.1 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD12 16 0.1 | | 1:A:153:LEU:HD11 | 1:A:190:LEU:HD11 | 16 | 0.1 |
| (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD13 16 0.1 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD11 16 0.1 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD12 16 0.1 | | 1:A:153:LEU:HD11 | 1:A:190:LEU:HD12 | 16 | 0.1 |
| (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD11 16 0.1 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD12 16 0.1 | , , | | 1:A:190:LEU:HD13 | 16 | 0.1 |
| (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD12 16 0.1 | | 1:A:153:LEU:HD12 | 1:A:190:LEU:HD11 | 16 | 0.1 |
| | , | 1:A:153:LEU:HD12 | 1:A:190:LEU:HD12 | 16 | 0.1 |
| | | | | | |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|-----------------|
| (1,776) | 1:A:153:LEU:HD13 | 1:A:190:LEU:HD11 | 16 | 0.1 |
| (1,776) | 1:A:153:LEU:HD13 | 1:A:190:LEU:HD12 | 16 | 0.1 |
| (1,776) | 1:A:153:LEU:HD13 | 1:A:190:LEU:HD13 | 16 | 0.1 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD11 | 1:A:78:ILE:HD11 | 12 | 0.1 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD11 | 1:A:78:ILE:HD12 | 12 | 0.1 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD11 | 1:A:78:ILE:HD13 | 12 | 0.1 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD12 | 1:A:78:ILE:HD11 | 12 | 0.1 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD12 | 1:A:78:ILE:HD12 | 12 | 0.1 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD12 | 1:A:78:ILE:HD13 | 12 | 0.1 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD13 | 1:A:78:ILE:HD11 | 12 | 0.1 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD13 | 1:A:78:ILE:HD12 | 12 | 0.1 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD13 | 1:A:78:ILE:HD13 | 12 | 0.1 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD21 | 1:A:99:VAL:HG21 | 1 | 0.1 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD21 | 1:A:99:VAL:HG22 | 1 | 0.1 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD21 | 1:A:99:VAL:HG23 | 1 | 0.1 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD22 | 1:A:99:VAL:HG21 | 1 | 0.1 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD22 | 1:A:99:VAL:HG22 | 1 | 0.1 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD22 | 1:A:99:VAL:HG23 | 1 | 0.1 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD23 | 1:A:99:VAL:HG21 | 1 | 0.1 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD23 | 1:A:99:VAL:HG22 | 1 | 0.1 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD23 | 1:A:99:VAL:HG23 | 1 | 0.1 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD21 | 1:A:99:VAL:HG21 | 5 | 0.1 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD21 | 1:A:99:VAL:HG22 | 5 | 0.1 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD21 | 1:A:99:VAL:HG23 | 5 | 0.1 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD22 | 1:A:99:VAL:HG21 | 5 | 0.1 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD22 | 1:A:99:VAL:HG22 | 5 | 0.1 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD22 | 1:A:99:VAL:HG23 | 5 | 0.1 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD23 | 1:A:99:VAL:HG21 | 5 | 0.1 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD23 | 1:A:99:VAL:HG22 | 5 | 0.1 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD23 | 1:A:99:VAL:HG23 | 5 | 0.1 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD21 | 1:A:150:LEU:HD21 | 3 | 0.1 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD21 | 1:A:150:LEU:HD22 | 3 | 0.1 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD21 | 1:A:150:LEU:HD23 | 3 | 0.1 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD22 | 1:A:150:LEU:HD21 | 3 | 0.1 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD22 | 1:A:150:LEU:HD22 | 3 | 0.1 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD22 | 1:A:150:LEU:HD23 | 3 | 0.1 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD23 | 1:A:150:LEU:HD21 | 3 | 0.1 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD23 | 1:A:150:LEU:HD22 | 3 | 0.1 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD23 | 1:A:150:LEU:HD23 | 3 | 0.1 |
| (1,679) | 1:A:171:LEU:HD11 | 1:A:187:LEU:HD11 | 12 | 0.1 |
| (1,679) | 1:A:171:LEU:HD11 | 1:A:187:LEU:HD12 | 12 | 0.1 |
| (1,679) | 1:A:171:LEU:HD11 | 1:A:187:LEU:HD13 | 12 | 0.1 |
| () | <u> </u> | 1 3 | | od on next nage |



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

| (1,679) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:187:LEU:HD12 1:A:187:LEU:HD12 1:A:187:LEU:HD12 1:A:187:LEU:HD13 12 0.1 (1,679) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:187:LEU:HD13 1:A:187:LEU:HD13 1:A:187:LEU:HD11 12 0.1 (1,679) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:187:LEU:HD12 12 0.1 (1,667) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:187:LEU:HD13 12 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD11 1:A:121:LEU:HD21 10 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD11 1:A:121:LEU:HD22 10 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD11 1:A:121:LEU:HD23 10 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD12 1:A:121:LEU:HD22 10 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD13 1:A:121:LEU:HD22 10 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD13 1:A:121:LEU:HD21 10 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD13 1:A:121:LEU:HD23 10 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD13 1:A:121:LEU:HD23 10 0.1 (1,665) | Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|--|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,679) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:187:LEU:HD13 12 0.1 (1,679) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:187:LEU:HD11 12 0.1 (1,679) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:187:LEU:HD12 12 0.1 (1,679) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:187:LEU:HD13 12 0.1 (1,679) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:187:LEU:HD13 12 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD11 1:A:121:LEU:HD21 10 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD11 1:A:121:LEU:HD22 10 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD11 1:A:121:LEU:HD22 10 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD12 1:A:121:LEU:HD23 10 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD12 1:A:121:LEU:HD23 10 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD12 1:A:121:LEU:HD21 10 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD12 1:A:121:LEU:HD23 10 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD13 1:A:121:LEU:HD23 10 0.1 (1,654) 1:A:146:ASP:H 1:A:145:LEU:HD33 10 0.1 (1,652) 1:A:146:ASP:H 1:A:150:LEU:H 19 0.1 (1,632) 1:A:146:ASP:H 1:A:150:LEU:H 19 0.1 (1,628) 1:A:146:ASP:H 1:A:145:LEU:H 19 0.1 (1,596) 1:A:164:ASN:H 1:A:195:LEU:H 19 0.1 (1,596) 1:A:164:ASN:H 1:A:195:LEU:H 19 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD21 1:A:28:ILE:HD11 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD21 1:A:28:ILE:HD11 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD21 1:A:28:ILE:HD11 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD22 1:A:28:ILE:HD13 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD22 1:A:28:ILE:HD13 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD22 1:A:28:ILE:HD13 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD23 1:A:28:ILE:HD13 20 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:28:ILE:HD13 20 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:24:ILE:HD23 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD23 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LE | (1,679) | 1:A:171:LEU:HD12 | 1:A:187:LEU:HD11 | 12 | 0.1 |
| (1,679) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:187:LEU:HD11 12 0.1 (1,679) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:187:LEU:HD12 12 0.1 (1,679) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:187:LEU:HD13 12 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD11 1:A:121:LEU:HD21 10 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD11 1:A:121:LEU:HD22 10 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD11 1:A:121:LEU:HD22 10 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD11 1:A:121:LEU:HD23 10 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD12 1:A:121:LEU:HD23 10 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD12 1:A:121:LEU:HD21 10 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD12 1:A:121:LEU:HD22 10 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD12 1:A:121:LEU:HD22 10 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD13 1:A:121:LEU:HD23 10 0.1 (1,654) 1:A:60:SER:H 1:A:38:SER:H 10 0.1 (1,632) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:H 19 0.1 (1,698) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:H 19 0.1 (1,596) 1:A:146:ASN:H 1:A:195:LEU:H 19 0.1 (1,596) 1:A:146:ASN:H 1:A:195:LEU:H 19 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD21 1:A:28:ILE:HD11 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD21 1:A:28:ILE:HD12 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD21 1:A:28:ILE:HD12 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD22 1:A:28:ILE:HD11 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD22 1:A:28:ILE:HD13 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD22 1:A:28:ILE:HD11 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD22 1:A:28:ILE:HD13 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD23 1:A:28:ILE:HD13 20 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:28:ILE:HD13 20 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD23 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD23 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD | (1,679) | 1:A:171:LEU:HD12 | 1:A:187:LEU:HD12 | 12 | 0.1 |
| (1,679) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:187:LEU:HD12 12 0.1 (1,679) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:187:LEU:HD13 12 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD11 1:A:121:LEU:HD22 10 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD11 1:A:121:LEU:HD22 10 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD11 1:A:121:LEU:HD22 10 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD11 1:A:121:LEU:HD23 10 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD12 1:A:121:LEU:HD23 10 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD12 1:A:121:LEU:HD22 10 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD12 1:A:121:LEU:HD22 10 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD12 1:A:121:LEU:HD22 10 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD13 1:A:121:LEU:HD23 10 0.1 (1,665) 1:A:146:ASP:H 1:A:150:LEU:H 19 0.1 (1,668) 1:A:146:ASP:H 1:A:150:LEU:H 19 0.1 (1,508) 1:A:146:ASN:H 1:A:195:LEU:H 19 0.1 (1,509) 1:A:146:ASN:H 1:A:195:LEU:H 19 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD21 1:A:28:ILE:HD11 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD21 1:A:28:ILE:HD12 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD22 1:A:28:ILE:HD12 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD22 1:A:28:ILE:HD11 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD22 1:A:28:ILE:HD12 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD22 1:A:28:ILE:HD11 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD22 1:A:28:ILE:HD11 20 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD22 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:28:ILE:HD13 20 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD22 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:28:ILE:HD13 20 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD22 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD22 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD22 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD23 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD22 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD23 17 0.1 (1, | (1,679) | 1:A:171:LEU:HD12 | 1:A:187:LEU:HD13 | 12 | 0.1 |
| (1,679) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:187:LEU:HD13 12 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD11 1:A:121:LEU:HD21 10 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD11 1:A:121:LEU:HD22 10 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD11 1:A:121:LEU:HD23 10 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD12 1:A:121:LEU:HD21 10 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD12 1:A:121:LEU:HD21 10 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD12 1:A:121:LEU:HD22 10 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD13 1:A:121:LEU:HD23 10 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD13 1:A:121:LEU:HD23 10 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD13 1:A:121:LEU:HD23 10 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD13 1:A:121:LEU:HD22 10 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD13 1:A:121:LEU:HD22 10 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD13 1:A:121:LEU:HD23 10 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD13 1:A:121:LEU:HD23 10 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD13 1:A:121:LEU:HD23 10 0.1 (1,656) 1:A:98:ILE:HD13 1:A:121:LEU:HD23 10 0.1 (1,656) 1:A:164:ASN:H 1:A:150:LEU:H 19 0.1 (1,632) 1:A:146:ASP:H 1:A:150:LEU:H 19 0.1 (1,632) 1:A:146:ASN:H 1:A:150:LEU:H 19 0.1 (1,596) 1:A:164:ASN:H 1:A:195:LEU:H 19 0.1 (1,596) 1:A:164:ASN:H 1:A:195:LEU:H 19 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD21 1:A:28:ILE:HD11 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD21 1:A:28:ILE:HD12 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD22 1:A:28:ILE:HD12 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD23 1:A:28:ILE:HD12 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD23 1:A:28:ILE:HD13 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD23 1:A:28:ILE:HD12 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD23 1:A:28:ILE:HD12 20 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD22 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:28:ILE:HD12 20 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:28:ILE:HD13 20 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:28:ILE:HD12 20 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:28:ILE:HD13 20 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD23 17 0.1 (1,569) 1:A:13 | (1,679) | 1:A:171:LEU:HD13 | 1:A:187:LEU:HD11 | 12 | 0.1 |
| (1,665) 1:A:98:ILE:HD11 1:A:121:LEU:HD21 10 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD11 1:A:121:LEU:HD22 10 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD11 1:A:121:LEU:HD23 10 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD12 1:A:121:LEU:HD22 10 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD12 1:A:121:LEU:HD22 10 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD12 1:A:121:LEU:HD22 10 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD13 1:A:121:LEU:HD23 10 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD13 1:A:121:LEU:HD23 10 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD13 1:A:121:LEU:HD21 10 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD13 1:A:121:LEU:HD22 10 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD13 1:A:121:LEU:HD23 10 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD13 1:A:121:LEU:HD23 10 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD13 1:A:121:LEU:HD23 10 0.1 (1,654) 1:A:60:SER:H 1:A:83:SER:H 10 0.1 (1,632) 1:A:146:ASP:H 1:A:150:LEU:H 19 0.1 (1,632) 1:A:146:ASP:H 1:A:150:LEU:H 19 0.1 (1,596) 1:A:164:ASN:H 1:A:195:LEU:H 3 0.1 (1,596) 1:A:164:ASN:H 1:A:195:LEU:H 3 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD21 1:A:28:ILE:HD11 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD21 1:A:28:ILE:HD12 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD21 1:A:28:ILE:HD12 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD22 1:A:28:ILE:HD13 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD23 1:A:28:ILE:HD11 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD23 1:A:28:ILE:HD13 20 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD23 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD23 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 | (1,679) | 1:A:171:LEU:HD13 | 1:A:187:LEU:HD12 | 12 | 0.1 |
| (1,665) 1:A:98:ILE:HD11 1:A:121:LEU:HD22 10 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD12 1:A:121:LEU:HD23 10 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD12 1:A:121:LEU:HD21 10 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD12 1:A:121:LEU:HD22 10 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD12 1:A:121:LEU:HD22 10 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD13 1:A:121:LEU:HD23 10 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD13 1:A:121:LEU:HD22 10 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD13 1:A:121:LEU:HD22 10 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD13 1:A:121:LEU:HD22 10 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD13 1:A:121:LEU:HD23 10 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD13 1:A:121:LEU:HD23 10 0.1 (1,654) 1:A:60:SER:H 1:A:83:SER:H 10 0.1 (1,632) 1:A:146:ASP:H 1:A:150:LEU:H 19 0.1 (1,628) 1:A:146:ASP:H 1:A:150:LEU:H 19 0.1 (1,596) 1:A:164:ASN:H 1:A:195:LEU:H 3 0.1 (1,596) 1:A:164:ASN:H 1:A:195:LEU:H 19 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD21 1:A:28:ILE:HD11 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD21 1:A:28:ILE:HD11 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD21 1:A:28:ILE:HD12 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD22 1:A:28:ILE:HD13 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD22 1:A:28:ILE:HD11 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD22 1:A:28:ILE:HD12 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD22 1:A:28:ILE:HD12 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD23 1:A:28:ILE:HD12 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD23 1:A:28:ILE:HD13 20 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD23 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD23 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD2 | (1,679) | 1:A:171:LEU:HD13 | 1:A:187:LEU:HD13 | 12 | 0.1 |
| (1,665) 1:A:98:ILE:HD11 1:A:121:LEU:HD23 10 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD12 1:A:121:LEU:HD21 10 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD12 1:A:121:LEU:HD22 10 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD12 1:A:121:LEU:HD23 10 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD13 1:A:121:LEU:HD23 10 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD13 1:A:121:LEU:HD21 10 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD13 1:A:121:LEU:HD22 10 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD13 1:A:121:LEU:HD22 10 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD13 1:A:121:LEU:HD23 10 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD13 1:A:121:LEU:HD23 10 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD13 1:A:121:LEU:HD23 10 0.1 (1,654) 1:A:60:SER:H 1:A:38:SER:H 10 0.1 (1,632) 1:A:146:ASP:H 1:A:150:LEU:H 19 0.1 (1,628) 1:A:145:LYS:H 1:A:147:LEU:H 5 0.1 (1,596) 1:A:164:ASN:H 1:A:195:LEU:H 3 0.1 (1,596) 1:A:164:ASN:H 1:A:195:LEU:H 19 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD21 1:A:28:ILE:HD11 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD21 1:A:28:ILE:HD12 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD21 1:A:28:ILE:HD12 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD21 1:A:28:ILE:HD13 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD22 1:A:28:ILE:HD13 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD22 1:A:28:ILE:HD11 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD22 1:A:28:ILE:HD11 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD22 1:A:28:ILE:HD11 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD23 1:A:28:ILE:HD12 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD23 1:A:28:ILE:HD11 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD23 1:A:28:ILE:HD11 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD23 1:A:28:ILE:HD13 20 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD23 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD23 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 | (1,665) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:121:LEU:HD21 | 10 | 0.1 |
| (1,665) 1:A:98:ILE:HD12 1:A:121:LEU:HD22 10 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD12 1:A:121:LEU:HD22 10 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD12 1:A:121:LEU:HD23 10 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD13 1:A:121:LEU:HD22 10 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD13 1:A:121:LEU:HD23 10 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD13 1:A:121:LEU:HD23 10 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD13 1:A:121:LEU:HD23 10 0.1 (1,665) 1:A:60:SER:H 1:A:33:SER:H 10 0.1 (1,654) 1:A:60:SER:H 1:A:3150:LEU:H 19 0.1 (1,628) 1:A:146:ASN:H 1:A:150:LEU:H 19 0.1 (1,596) 1:A:164:ASN:H 1:A:195:LEU:H 19 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD21 1:A:28:ILE:HD11 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD21 1:A:28:ILE:HD13 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD22 1:A:28:ILE:HD | (1,665) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:121:LEU:HD22 | 10 | 0.1 |
| (1,665) 1:A:98:ILE:HD12 1:A:121:LEU:HD22 10 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD12 1:A:121:LEU:HD23 10 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD13 1:A:121:LEU:HD21 10 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD13 1:A:121:LEU:HD22 10 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD13 1:A:121:LEU:HD23 10 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD13 1:A:121:LEU:HD23 10 0.1 (1,665) 1:A:66:SER:H 1:A:83:SER:H 10 0.1 (1,654) 1:A:66:SER:H 1:A:150:LEU:H 19 0.1 (1,628) 1:A:146:ASP:H 1:A:150:LEU:H 19 0.1 (1,628) 1:A:164:ASN:H 1:A:195:LEU:H 3 0.1 (1,596) 1:A:164:ASN:H 1:A:195:LEU:H 19 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD21 1:A:28:ILE:HD11 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD21 1:A:28:ILE:HD13 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD22 1:A:28:ILE:HD13 | (1,665) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:121:LEU:HD23 | 10 | 0.1 |
| (1,665) 1:A:98:ILE:HD12 1:A:121:LEU:HD23 10 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD13 1:A:121:LEU:HD21 10 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD13 1:A:121:LEU:HD22 10 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD13 1:A:121:LEU:HD23 10 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD13 1:A:121:LEU:HD23 10 0.1 (1,665) 1:A:66:SER:H 1:A:83:SER:H 10 0.1 (1,654) 1:A:164:ASP:H 1:A:150:LEU:H 19 0.1 (1,628) 1:A:145:LYS:H 1:A:150:LEU:H 5 0.1 (1,596) 1:A:164:ASN:H 1:A:195:LEU:H 3 0.1 (1,596) 1:A:164:ASN:H 1:A:195:LEU:H 9 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD21 1:A:28:ILE:HD11 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD21 1:A:28:ILE:HD13 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD22 1:A:28:ILE:HD13 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD22 1:A:28:ILE:HD13 | (1,665) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:121:LEU:HD21 | 10 | 0.1 |
| (1,665) 1:A:98:ILE:HD13 1:A:121:LEU:HD21 10 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD13 1:A:121:LEU:HD22 10 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD13 1:A:121:LEU:HD23 10 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD13 1:A:121:LEU:HD23 10 0.1 (1,664) 1:A:60:SER:H 1:A:83:SER:H 10 0.1 (1,632) 1:A:146:ASP:H 1:A:150:LEU:H 19 0.1 (1,628) 1:A:145:LYS:H 1:A:147:LEU:H 5 0.1 (1,596) 1:A:164:ASN:H 1:A:195:LEU:H 3 0.1 (1,596) 1:A:164:ASN:H 1:A:195:LEU:H 19 0.1 (1,596) 1:A:164:ASN:H 1:A:195:LEU:H 19 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD21 1:A:28:ILE:HD11 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD21 1:A:28:ILE:HD12 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD22 1:A:28:ILE:HD11 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD23 1:A:28:ILE:HD13 | (1,665) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:121:LEU:HD22 | 10 | 0.1 |
| (1,665) 1:A:98:ILE:HD13 1:A:121:LEU:HD22 10 0.1 (1,665) 1:A:98:ILE:HD13 1:A:121:LEU:HD23 10 0.1 (1,654) 1:A:60:SER:H 1:A:83:SER:H 10 0.1 (1,632) 1:A:146:ASP:H 1:A:150:LEU:H 19 0.1 (1,628) 1:A:145:LYS:H 1:A:147:LEU:H 5 0.1 (1,596) 1:A:164:ASN:H 1:A:195:LEU:H 3 0.1 (1,596) 1:A:164:ASN:H 1:A:195:LEU:H 19 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD21 1:A:28:ILE:HD11 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD21 1:A:28:ILE:HD12 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD21 1:A:28:ILE:HD13 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD22 1:A:28:ILE:HD11 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD22 1:A:28:ILE:HD11 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD23 1:A:28:ILE:HD12 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD23 1:A:28:ILE:HD11 | (1,665) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:121:LEU:HD23 | 10 | 0.1 |
| (1,665) 1:A:98:ILE:HD13 1:A:121:LEU:HD23 10 0.1 (1,654) 1:A:60:SER:H 1:A:83:SER:H 10 0.1 (1,632) 1:A:146:ASP:H 1:A:150:LEU:H 19 0.1 (1,628) 1:A:145:LYS:H 1:A:147:LEU:H 5 0.1 (1,596) 1:A:164:ASN:H 1:A:195:LEU:H 3 0.1 (1,596) 1:A:21:LEU:HD21 1:A:28:ILE:HD11 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD21 1:A:28:ILE:HD12 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD21 1:A:28:ILE:HD13 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD22 1:A:28:ILE:HD11 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD22 1:A:28:ILE:HD13 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD22 1:A:28:ILE:HD13 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD23 1:A:28:ILE:HD13 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD23 1:A:28:ILE:HD13 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD23 1:A:28:ILE:HD13 | (1,665) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:121:LEU:HD21 | 10 | 0.1 |
| (1,654) 1:A:60:SER:H 1:A:83:SER:H 10 0.1 (1,632) 1:A:146:ASP:H 1:A:150:LEU:H 19 0.1 (1,628) 1:A:145:LYS:H 1:A:147:LEU:H 5 0.1 (1,596) 1:A:164:ASN:H 1:A:195:LEU:H 3 0.1 (1,596) 1:A:21:LEU:HD21 1:A:28:ILE:HD11 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD21 1:A:28:ILE:HD12 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD21 1:A:28:ILE:HD13 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD22 1:A:28:ILE:HD13 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD22 1:A:28:ILE:HD13 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD22 1:A:28:ILE:HD13 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD23 1:A:28:ILE:HD13 | (1,665) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:121:LEU:HD22 | 10 | 0.1 |
| (1,632) 1:A:146:ASP:H 1:A:150:LEU:H 19 0.1 (1,628) 1:A:145:LYS:H 1:A:147:LEU:H 5 0.1 (1,596) 1:A:164:ASN:H 1:A:195:LEU:H 3 0.1 (1,596) 1:A:164:ASN:H 1:A:195:LEU:H 19 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD21 1:A:28:ILE:HD11 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD21 1:A:28:ILE:HD12 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD21 1:A:28:ILE:HD13 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD22 1:A:28:ILE:HD13 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD22 1:A:28:ILE:HD12 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD23 1:A:28:ILE:HD13 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD23 1:A:28:ILE:HD13 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD23 1:A:28:ILE:HD11 20 0.1 (1,572) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:28:ILE:HD13 20 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD22 </td <td>(1,665)</td> <td>1:A:98:ILE:HD13</td> <td>1:A:121:LEU:HD23</td> <td>10</td> <td>0.1</td> | (1,665) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:121:LEU:HD23 | 10 | 0.1 |
| (1,628) 1:A:145:LYS:H 1:A:147:LEU:H 5 0.1 (1,596) 1:A:164:ASN:H 1:A:195:LEU:H 3 0.1 (1,596) 1:A:164:ASN:H 1:A:195:LEU:H 19 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD21 1:A:28:ILE:HD11 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD21 1:A:28:ILE:HD12 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD21 1:A:28:ILE:HD13 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD22 1:A:28:ILE:HD11 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD22 1:A:28:ILE:HD12 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD22 1:A:28:ILE:HD12 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD23 1:A:28:ILE:HD13 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD23 1:A:28:ILE:HD11 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD23 1:A:28:ILE:HD12 20 0.1 (1,572) 1:A:13:1-LEU:HD23 1:A:28:ILE:HD12 20 0.1 (1,572) 1:A:21-LEU:HD23 1:A:28:ILE:HD1 | (1,654) | 1:A:60:SER:H | 1:A:83:SER:H | 10 | 0.1 |
| (1,596) 1:A:164:ASN:H 1:A:195:LEU:H 3 0.1 (1,596) 1:A:164:ASN:H 1:A:195:LEU:H 19 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD21 1:A:28:ILE:HD11 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD21 1:A:28:ILE:HD12 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD21 1:A:28:ILE:HD13 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD22 1:A:28:ILE:HD11 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD22 1:A:28:ILE:HD12 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD22 1:A:28:ILE:HD13 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD23 1:A:28:ILE:HD13 20 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD21 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147: | (1,632) | 1:A:146:ASP:H | 1:A:150:LEU:H | 19 | 0.1 |
| (1,596) 1:A:164:ASN:H 1:A:195:LEU:H 3 0.1 (1,596) 1:A:164:ASN:H 1:A:195:LEU:H 19 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD21 1:A:28:ILE:HD11 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD21 1:A:28:ILE:HD12 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD21 1:A:28:ILE:HD13 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD22 1:A:28:ILE:HD11 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD22 1:A:28:ILE:HD12 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD22 1:A:28:ILE:HD13 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD23 1:A:28:ILE:HD13 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD23 1:A:28:ILE:HD12 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD23 1:A:28:ILE:HD13 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD23 1:A:28:ILE:HD13 20 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD21 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147: | / | 1:A:145:LYS:H | 1:A:147:LEU:H | 5 | 0.1 |
| (1,572) 1:A:21:LEU:HD21 1:A:28:ILE:HD11 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD21 1:A:28:ILE:HD12 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD21 1:A:28:ILE:HD13 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD22 1:A:28:ILE:HD11 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD22 1:A:28:ILE:HD12 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD22 1:A:28:ILE:HD13 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD23 1:A:28:ILE:HD11 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD23 1:A:28:ILE:HD12 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD23 1:A:28:ILE:HD13 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD23 1:A:28:ILE:HD13 20 0.1 (1,569) 1:A:313:LEU:HD23 1:A:47:LEU:HD21 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD22 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD23 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 | (1,596) | 1:A:164:ASN:H | 1:A:195:LEU:H | 3 | 0.1 |
| (1,572) 1:A:21:LEU:HD21 1:A:28:ILE:HD12 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD21 1:A:28:ILE:HD13 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD22 1:A:28:ILE:HD11 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD22 1:A:28:ILE:HD12 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD22 1:A:28:ILE:HD13 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD23 1:A:28:ILE:HD11 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD23 1:A:28:ILE:HD12 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD23 1:A:28:ILE:HD13 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD23 1:A:28:ILE:HD13 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD23 1:A:28:ILE:HD13 20 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD21 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD22 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD23 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 | (1,596) | 1:A:164:ASN:H | 1:A:195:LEU:H | 19 | 0.1 |
| (1,572) 1:A:21:LEU:HD21 1:A:28:ILE:HD13 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD22 1:A:28:ILE:HD11 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD22 1:A:28:ILE:HD12 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD22 1:A:28:ILE:HD13 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD23 1:A:28:ILE:HD11 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD23 1:A:28:ILE:HD12 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD23 1:A:28:ILE:HD13 20 0.1 (1,572) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:47:LEU:HD21 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD22 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD23 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD23 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD23 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD21 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 | (1,572) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:28:ILE:HD11 | 20 | 0.1 |
| (1,572) 1:A:21:LEU:HD22 1:A:28:ILE:HD11 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD22 1:A:28:ILE:HD12 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD22 1:A:28:ILE:HD13 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD23 1:A:28:ILE:HD11 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD23 1:A:28:ILE:HD12 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD23 1:A:28:ILE:HD13 20 0.1 (1,572) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD21 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD22 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD23 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD23 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD23 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD21 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD23 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 | (1,572) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:28:ILE:HD12 | 20 | 0.1 |
| (1,572) 1:A:21:LEU:HD22 1:A:28:ILE:HD12 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD23 1:A:28:ILE:HD13 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD23 1:A:28:ILE:HD11 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD23 1:A:28:ILE:HD12 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD23 1:A:28:ILE:HD13 20 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD21 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD23 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD21 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD23 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD23 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 <td>(1,572)</td> <td>1:A:21:LEU:HD21</td> <td>1:A:28:ILE:HD13</td> <td>20</td> <td>0.1</td> | (1,572) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:28:ILE:HD13 | 20 | 0.1 |
| (1,572) 1:A:21:LEU:HD22 1:A:28:ILE:HD13 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD23 1:A:28:ILE:HD11 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD23 1:A:28:ILE:HD12 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD23 1:A:28:ILE:HD13 20 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD21 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD22 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD21 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD22 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD23 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD23 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD22 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD23 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD23 17 0.1 (1,567) 1:A:70:LEU:HD11 </td <td>(1,572)</td> <td>1:A:21:LEU:HD22</td> <td>1:A:28:ILE:HD11</td> <td>20</td> <td>0.1</td> | (1,572) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:28:ILE:HD11 | 20 | 0.1 |
| (1,572) 1:A:21:LEU:HD23 1:A:28:ILE:HD11 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD23 1:A:28:ILE:HD12 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD23 1:A:28:ILE:HD13 20 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD21 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD22 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD23 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD22 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD23 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD23 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD21 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD23 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD23 17 0.1 (1,567) 1:A:70:LEU:HD11 1:A:74:LYS:H 11 0.1 (1,567) 1:A:70:LEU:HD13 | (1,572) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:28:ILE:HD12 | 20 | 0.1 |
| (1,572) 1:A:21:LEU:HD23 1:A:28:ILE:HD12 20 0.1 (1,572) 1:A:21:LEU:HD23 1:A:28:ILE:HD13 20 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD21 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD23 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD21 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD22 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD23 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD21 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD22 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD23 17 0.1 (1,569) 1:A:70:LEU:HD13 1:A:74:LYS:H 11 0.1 (1,567) 1:A:70:LEU:HD12 1:A:74:LYS:H 11 0.1 (1,567) 1:A:70:LEU:HD13 1:A:74:LYS:H 11 0.1 | (1,572) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:28:ILE:HD13 | 20 | 0.1 |
| (1,572) 1:A:21:LEU:HD23 1:A:28:ILE:HD13 20 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD21 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD22 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD23 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD22 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD23 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD21 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD22 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD22 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD23 17 0.1 (1,567) 1:A:70:LEU:HD11 1:A:74:LYS:H 11 0.1 (1,567) 1:A:70:LEU:HD12 1:A:74:LYS:H 11 0.1 (1,567) 1:A:70:LEU:HD13 1:A:74:LYS:H 11 0.1 | (1,572) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:28:ILE:HD11 | 20 | 0.1 |
| (1,569) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD21 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD22 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD23 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD21 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD23 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD21 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD22 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD22 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD23 17 0.1 (1,567) 1:A:70:LEU:HD11 1:A:74:LYS:H 11 0.1 (1,567) 1:A:70:LEU:HD12 1:A:74:LYS:H 11 0.1 (1,567) 1:A:70:LEU:HD13 1:A:74:LYS:H 11 0.1 | (1,572) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:28:ILE:HD12 | 20 | 0.1 |
| (1,569) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD22 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD23 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD21 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD23 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD23 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD22 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD22 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD23 17 0.1 (1,567) 1:A:70:LEU:HD11 1:A:74:LYS:H 11 0.1 (1,567) 1:A:70:LEU:HD12 1:A:74:LYS:H 11 0.1 (1,567) 1:A:70:LEU:HD13 1:A:74:LYS:H 11 0.1 | (1,572) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:28:ILE:HD13 | 20 | 0.1 |
| (1,569) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:147:LEU:HD23 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD21 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD22 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD23 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD21 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD22 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD23 17 0.1 (1,567) 1:A:70:LEU:HD11 1:A:74:LYS:H 11 0.1 (1,567) 1:A:70:LEU:HD12 1:A:74:LYS:H 11 0.1 (1,567) 1:A:70:LEU:HD13 1:A:74:LYS:H 11 0.1 | (1,569) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD21 | 17 | 0.1 |
| (1,569) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD21 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD22 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD23 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD21 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD22 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD23 17 0.1 (1,567) 1:A:70:LEU:HD11 1:A:74:LYS:H 11 0.1 (1,567) 1:A:70:LEU:HD12 1:A:74:LYS:H 11 0.1 (1,567) 1:A:70:LEU:HD13 1:A:74:LYS:H 11 0.1 | (1,569) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD22 | 17 | 0.1 |
| (1,569) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD21 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD22 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD23 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD21 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD22 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD23 17 0.1 (1,567) 1:A:70:LEU:HD11 1:A:74:LYS:H 11 0.1 (1,567) 1:A:70:LEU:HD12 1:A:74:LYS:H 11 0.1 (1,567) 1:A:70:LEU:HD13 1:A:74:LYS:H 11 0.1 | (1,569) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD23 | 17 | 0.1 |
| (1,569) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD22 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD23 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD21 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD22 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD23 17 0.1 (1,567) 1:A:70:LEU:HD11 1:A:74:LYS:H 11 0.1 (1,567) 1:A:70:LEU:HD12 1:A:74:LYS:H 11 0.1 (1,567) 1:A:70:LEU:HD13 1:A:74:LYS:H 11 0.1 | | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD21 | 17 | 0.1 |
| (1,569) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:147:LEU:HD23 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD21 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD22 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD23 17 0.1 (1,567) 1:A:70:LEU:HD11 1:A:74:LYS:H 11 0.1 (1,567) 1:A:70:LEU:HD12 1:A:74:LYS:H 11 0.1 (1,567) 1:A:70:LEU:HD13 1:A:74:LYS:H 11 0.1 | | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD22 | 17 | 0.1 |
| (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD21 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD22 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD23 17 0.1 (1,567) 1:A:70:LEU:HD11 1:A:74:LYS:H 11 0.1 (1,567) 1:A:70:LEU:HD12 1:A:74:LYS:H 11 0.1 (1,567) 1:A:70:LEU:HD13 1:A:74:LYS:H 11 0.1 | | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD23 | 17 | |
| (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD22 17 0.1 (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD23 17 0.1 (1,567) 1:A:70:LEU:HD11 1:A:74:LYS:H 11 0.1 (1,567) 1:A:70:LEU:HD12 1:A:74:LYS:H 11 0.1 (1,567) 1:A:70:LEU:HD13 1:A:74:LYS:H 11 0.1 | ` ' | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD21 | 17 | 0.1 |
| (1,569) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:147:LEU:HD23 17 0.1 (1,567) 1:A:70:LEU:HD11 1:A:74:LYS:H 11 0.1 (1,567) 1:A:70:LEU:HD12 1:A:74:LYS:H 11 0.1 (1,567) 1:A:70:LEU:HD13 1:A:74:LYS:H 11 0.1 | , , | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD22 | 17 | |
| (1,567) 1:A:70:LEU:HD11 1:A:74:LYS:H 11 0.1 (1,567) 1:A:70:LEU:HD12 1:A:74:LYS:H 11 0.1 (1,567) 1:A:70:LEU:HD13 1:A:74:LYS:H 11 0.1 | | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD23 | 17 | 0.1 |
| (1,567) 1:A:70:LEU:HD12 1:A:74:LYS:H 11 0.1 (1,567) 1:A:70:LEU:HD13 1:A:74:LYS:H 11 0.1 | | 1:A:70:LEU:HD11 | 1:A:74:LYS:H | 11 | |
| (1,567) 1:A:70:LEU:HD13 1:A:74:LYS:H 11 0.1 | | 1:A:70:LEU:HD12 | 1:A:74:LYS:H | 11 | 0.1 |
| | , | 1:A:70:LEU:HD13 | 1:A:74:LYS:H | 11 | 0.1 |
| | · · / | | | 19 | |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,567) | 1:A:70:LEU:HD12 | 1:A:74:LYS:H | 19 | 0.1 |
| (1,567) | 1:A:70:LEU:HD13 | 1:A:74:LYS:H | 19 | 0.1 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:85:LEU:HD11 | 3 | 0.1 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:85:LEU:HD12 | 3 | 0.1 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:85:LEU:HD13 | 3 | 0.1 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:85:LEU:HD11 | 3 | 0.1 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:85:LEU:HD12 | 3 | 0.1 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:85:LEU:HD13 | 3 | 0.1 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:85:LEU:HD11 | 3 | 0.1 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:85:LEU:HD12 | 3 | 0.1 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:85:LEU:HD13 | 3 | 0.1 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD11 | 1:A:54:VAL:HG21 | 18 | 0.1 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD11 | 1:A:54:VAL:HG22 | 18 | 0.1 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD11 | 1:A:54:VAL:HG23 | 18 | 0.1 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD12 | 1:A:54:VAL:HG21 | 18 | 0.1 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD12 | 1:A:54:VAL:HG22 | 18 | 0.1 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD12 | 1:A:54:VAL:HG23 | 18 | 0.1 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD13 | 1:A:54:VAL:HG21 | 18 | 0.1 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD13 | 1:A:54:VAL:HG22 | 18 | 0.1 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD13 | 1:A:54:VAL:HG23 | 18 | 0.1 |
| (1,535) | 1:A:74:LYS:H | 1:A:76:VAL:HG11 | 9 | 0.1 |
| (1,535) | 1:A:74:LYS:H | 1:A:76:VAL:HG12 | 9 | 0.1 |
| (1,535) | 1:A:74:LYS:H | 1:A:76:VAL:HG13 | 9 | 0.1 |
| (1,507) | 1:A:37:ALA:H | 1:A:57:VAL:HG21 | 11 | 0.1 |
| (1,507) | 1:A:37:ALA:H | 1:A:57:VAL:HG22 | 11 | 0.1 |
| (1,507) | 1:A:37:ALA:H | 1:A:57:VAL:HG23 | 11 | 0.1 |
| (1,506) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:82:GLN:H | 3 | 0.1 |
| (1,506) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:82:GLN:H | 3 | 0.1 |
| (1,506) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:82:GLN:H | 3 | 0.1 |
| (1,467) | 1:A:62:VAL:HG11 | 1:A:63:GLY:H | 1 | 0.1 |
| (1,467) | 1:A:62:VAL:HG12 | 1:A:63:GLY:H | 1 | 0.1 |
| (1,467) | 1:A:62:VAL:HG13 | 1:A:63:GLY:H | 1 | 0.1 |
| (1,467) | 1:A:62:VAL:HG11 | 1:A:63:GLY:H | 6 | 0.1 |
| (1,467) | 1:A:62:VAL:HG12 | 1:A:63:GLY:H | 6 | 0.1 |
| (1,467) | 1:A:62:VAL:HG13 | 1:A:63:GLY:H | 6 | 0.1 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD11 | 1:A:117:VAL:HG11 | 11 | 0.1 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD11 | 1:A:117:VAL:HG12 | 11 | 0.1 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD11 | 1:A:117:VAL:HG13 | 11 | 0.1 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD12 | 1:A:117:VAL:HG11 | 11 | 0.1 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD12 | 1:A:117:VAL:HG12 | 11 | 0.1 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD12 | 1:A:117:VAL:HG13 | 11 | 0.1 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD13 | 1:A:117:VAL:HG11 | 11 | 0.1 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD13 | 1:A:117:VAL:HG12 | 11 | 0.1 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD13 | 1:A:117:VAL:HG13 | 11 | 0.1 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD21 | 1:A:195:LEU:HD21 | 11 | 0.1 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD21 | 1:A:195:LEU:HD22 | 11 | 0.1 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD21 | 1:A:195:LEU:HD23 | 11 | 0.1 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD22 | 1:A:195:LEU:HD21 | 11 | 0.1 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD22 | 1:A:195:LEU:HD22 | 11 | 0.1 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD22 | 1:A:195:LEU:HD23 | 11 | 0.1 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD23 | 1:A:195:LEU:HD21 | 11 | 0.1 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD23 | 1:A:195:LEU:HD22 | 11 | 0.1 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD23 | 1:A:195:LEU:HD23 | 11 | 0.1 |
| (1,399) | 1:A:34:LEU:H | 1:A:99:VAL:HG21 | 20 | 0.1 |
| (1,399) | 1:A:34:LEU:H | 1:A:99:VAL:HG22 | 20 | 0.1 |
| (1,399) | 1:A:34:LEU:H | 1:A:99:VAL:HG23 | 20 | 0.1 |
| (1,392) | 1:A:63:GLY:H | 1:A:64:LEU:HD21 | 3 | 0.1 |
| (1,392) | 1:A:63:GLY:H | 1:A:64:LEU:HD22 | 3 | 0.1 |
| (1,392) | 1:A:63:GLY:H | 1:A:64:LEU:HD23 | 3 | 0.1 |
| (1,390) | 1:A:47:LEU:H | 1:A:50:LEU:HD21 | 1 | 0.1 |
| (1,390) | 1:A:47:LEU:H | 1:A:50:LEU:HD22 | 1 | 0.1 |
| (1,390) | 1:A:47:LEU:H | 1:A:50:LEU:HD23 | 1 | 0.1 |
| (1,380) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:98:ILE:HD11 | 11 | 0.1 |
| (1,380) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:98:ILE:HD12 | 11 | 0.1 |
| (1,380) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:98:ILE:HD13 | 11 | 0.1 |
| (1,380) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:98:ILE:HD11 | 11 | 0.1 |
| (1,380) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:98:ILE:HD12 | 11 | 0.1 |
| (1,380) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:98:ILE:HD13 | 11 | 0.1 |
| (1,380) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:98:ILE:HD11 | 11 | 0.1 |
| (1,380) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:98:ILE:HD12 | 11 | 0.1 |
| (1,380) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:98:ILE:HD13 | 11 | 0.1 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD11 | 1:A:190:LEU:HD11 | 17 | 0.1 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD11 | 1:A:190:LEU:HD12 | 17 | 0.1 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD11 | 1:A:190:LEU:HD13 | 17 | 0.1 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD12 | 1:A:190:LEU:HD11 | 17 | 0.1 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD12 | 1:A:190:LEU:HD12 | 17 | 0.1 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD12 | 1:A:190:LEU:HD13 | 17 | 0.1 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD13 | 1:A:190:LEU:HD11 | 17 | 0.1 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD13 | 1:A:190:LEU:HD12 | 17 | 0.1 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD13 | 1:A:190:LEU:HD13 | 17 | 0.1 |
| (1,370) | 1:A:21:LEU:HD11 | 1:A:28:ILE:HD11 | 1 | 0.1 |
| (1,370) | 1:A:21:LEU:HD11 | 1:A:28:ILE:HD12 | 1 | 0.1 |
| (1,370) | 1:A:21:LEU:HD11 | 1:A:28:ILE:HD13 | 1 | 0.1 |
| (1,370) | 1:A:21:LEU:HD12 | 1:A:28:ILE:HD11 | 1 | 0.1 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,370) | 1:A:21:LEU:HD12 | 1:A:28:ILE:HD12 | 1 | 0.1 |
| (1,370) | 1:A:21:LEU:HD12 | 1:A:28:ILE:HD13 | 1 | 0.1 |
| (1,370) | 1:A:21:LEU:HD13 | 1:A:28:ILE:HD11 | 1 | 0.1 |
| (1,370) | 1:A:21:LEU:HD13 | 1:A:28:ILE:HD12 | 1 | 0.1 |
| (1,370) | 1:A:21:LEU:HD13 | 1:A:28:ILE:HD13 | 1 | 0.1 |
| (1,334) | 1:A:90:ILE:H | 1:A:91:VAL:HG21 | 6 | 0.1 |
| (1,334) | 1:A:90:ILE:H | 1:A:91:VAL:HG22 | 6 | 0.1 |
| (1,334) | 1:A:90:ILE:H | 1:A:91:VAL:HG23 | 6 | 0.1 |
| (1,324) | 1:A:148:ASP:H | 1:A:150:LEU:HD11 | 19 | 0.1 |
| (1,324) | 1:A:148:ASP:H | 1:A:150:LEU:HD12 | 19 | 0.1 |
| (1,324) | 1:A:148:ASP:H | 1:A:150:LEU:HD13 | 19 | 0.1 |
| (1,296) | 1:A:137:LEU:HD11 | 1:A:149:LEU:H | 8 | 0.1 |
| (1,296) | 1:A:137:LEU:HD12 | 1:A:149:LEU:H | 8 | 0.1 |
| (1,296) | 1:A:137:LEU:HD13 | 1:A:149:LEU:H | 8 | 0.1 |
| (1,295) | 1:A:153:LEU:H | 1:A:190:LEU:HD21 | 7 | 0.1 |
| (1,295) | 1:A:153:LEU:H | 1:A:190:LEU:HD22 | 7 | 0.1 |
| (1,295) | 1:A:153:LEU:H | 1:A:190:LEU:HD23 | 7 | 0.1 |
| (1,272) | 1:A:124:GLY:H | 1:A:163:LEU:HD21 | 13 | 0.1 |
| (1,272) | 1:A:124:GLY:H | 1:A:163:LEU:HD22 | 13 | 0.1 |
| (1,272) | 1:A:124:GLY:H | 1:A:163:LEU:HD23 | 13 | 0.1 |
| (1,263) | 1:A:163:LEU:HD11 | 1:A:164:ASN:H | 16 | 0.1 |
| (1,263) | 1:A:163:LEU:HD12 | 1:A:164:ASN:H | 16 | 0.1 |
| (1,263) | 1:A:163:LEU:HD13 | 1:A:164:ASN:H | 16 | 0.1 |
| (1,250) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:84:ASN:H | 19 | 0.1 |
| (1,250) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:84:ASN:H | 19 | 0.1 |
| (1,250) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:84:ASN:H | 19 | 0.1 |
| (1,229) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:147:LEU:HD21 | 4 | 0.1 |
| (1,229) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:147:LEU:HD22 | 4 | 0.1 |
| (1,229) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:147:LEU:HD23 | 4 | 0.1 |
| (1,229) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:147:LEU:HD21 | 7 | 0.1 |
| (1,229) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:147:LEU:HD22 | 7 | 0.1 |
| (1,229) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:147:LEU:HD23 | 7 | 0.1 |
| (1,217) | 1:A:163:LEU:HD11 | 1:A:195:LEU:H | 8 | 0.1 |
| (1,217) | 1:A:163:LEU:HD12 | 1:A:195:LEU:H | 8 | 0.1 |
| (1,217) | 1:A:163:LEU:HD13 | 1:A:195:LEU:H | 8 | 0.1 |
| (1,217) | 1:A:163:LEU:HD11 | 1:A:195:LEU:H | 13 | 0.1 |
| (1,217) | 1:A:163:LEU:HD12 | 1:A:195:LEU:H | 13 | 0.1 |
| (1,217) | 1:A:163:LEU:HD13 | 1:A:195:LEU:H | 13 | 0.1 |
| (1,217) | 1:A:163:LEU:HD11 | 1:A:195:LEU:H | 19 | 0.1 |
| (1,217) | 1:A:163:LEU:HD12 | 1:A:195:LEU:H | 19 | 0.1 |
| (1,217) | 1:A:163:LEU:HD13 | 1:A:195:LEU:H | 19 | 0.1 |
| (1,217) | 1:A:163:LEU:HD11 | 1:A:195:LEU:H | 20 | 0.1 |



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

| () | 1:A:163:LEU:HD12 | | | Violation (Å) |
|----------|----------------------|------------------|----|---------------|
| (1,217) | 1.11.100.EE 0.11E 12 | 1:A:195:LEU:H | 20 | 0.1 |
| | 1:A:163:LEU:HD13 | 1:A:195:LEU:H | 20 | 0.1 |
| (1,206) | 1:A:60:SER:H | 1:A:62:VAL:HG21 | 11 | 0.1 |
| (1,206) | 1:A:60:SER:H | 1:A:62:VAL:HG22 | 11 | 0.1 |
| (1,206) | 1:A:60:SER:H | 1:A:62:VAL:HG23 | 11 | 0.1 |
| (1,206) | 1:A:60:SER:H | 1:A:62:VAL:HG21 | 17 | 0.1 |
| (1,206) | 1:A:60:SER:H | 1:A:62:VAL:HG22 | 17 | 0.1 |
| (1,206) | 1:A:60:SER:H | 1:A:62:VAL:HG23 | 17 | 0.1 |
| (1,205) | 1:A:24:VAL:HG11 | 1:A:192:GLY:H | 5 | 0.1 |
| (1,205) | 1:A:24:VAL:HG12 | 1:A:192:GLY:H | 5 | 0.1 |
| (1,205) | 1:A:24:VAL:HG13 | 1:A:192:GLY:H | 5 | 0.1 |
| (1,201) | 1:A:157:GLN:H | 1:A:190:LEU:HD21 | 2 | 0.1 |
| (1,201) | 1:A:157:GLN:H | 1:A:190:LEU:HD22 | 2 | 0.1 |
| (1,201) | 1:A:157:GLN:H | 1:A:190:LEU:HD23 | 2 | 0.1 |
| (1,201) | 1:A:157:GLN:H | 1:A:190:LEU:HD21 | 4 | 0.1 |
| (1,201) | 1:A:157:GLN:H | 1:A:190:LEU:HD22 | 4 | 0.1 |
| (1,201) | 1:A:157:GLN:H | 1:A:190:LEU:HD23 | 4 | 0.1 |
| (1,174) | 1:A:61:SER:H | 1:A:62:VAL:HG11 | 9 | 0.1 |
| (1,174) | 1:A:61:SER:H | 1:A:62:VAL:HG12 | 9 | 0.1 |
| (1,174) | 1:A:61:SER:H | 1:A:62:VAL:HG13 | 9 | 0.1 |
| (1,174) | 1:A:61:SER:H | 1:A:62:VAL:HG11 | 10 | 0.1 |
| (1,174) | 1:A:61:SER:H | 1:A:62:VAL:HG12 | 10 | 0.1 |
| (1,174) | 1:A:61:SER:H | 1:A:62:VAL:HG13 | 10 | 0.1 |
| (1,174) | 1:A:61:SER:H | 1:A:62:VAL:HG11 | 11 | 0.1 |
| (1,174) | 1:A:61:SER:H | 1:A:62:VAL:HG12 | 11 | 0.1 |
| (1,174) | 1:A:61:SER:H | 1:A:62:VAL:HG13 | 11 | 0.1 |
| (1,158) | 1:A:163:LEU:H | 1:A:195:LEU:HD21 | 1 | 0.1 |
| (1,158) | 1:A:163:LEU:H | 1:A:195:LEU:HD22 | 1 | 0.1 |
| (1,158) | 1:A:163:LEU:H | 1:A:195:LEU:HD23 | 1 | 0.1 |
| (1,158) | 1:A:163:LEU:H | 1:A:195:LEU:HD21 | 9 | 0.1 |
| (1,158) | 1:A:163:LEU:H | 1:A:195:LEU:HD22 | 9 | 0.1 |
| (1,158) | 1:A:163:LEU:H | 1:A:195:LEU:HD23 | 9 | 0.1 |
| (1,1098) | 1:A:124:GLY:O | 1:A:98:ILE:N | 6 | 0.1 |
| (1,1097) | 1:A:32:LYS:O | 1:A:96:GLU:H | 1 | 0.1 |
| (1,108) | 1:A:145:LYS:H | 1:A:148:ASP:H | 10 | 0.1 |
| (1,1070) | 1:A:108:SER:O | 1:A:112:GLN:H | 12 | 0.1 |
| (1,1034) | 1:A:23:SER:O | 1:A:27:GLN:H | 19 | 0.1 |
| (1,1033) | 1:A:22:VAL:O | 1:A:26:ASN:N | 14 | 0.1 |
| (1,1026) | 1:A:95:TRP:HE1 | 1:A:91:VAL:H | 17 | 0.1 |
| (1,1017) | 1:A:101:ILE:HA | 1:A:128:ILE:H | 3 | 0.1 |
| (1,1017) | 1:A:101:ILE:HA | 1:A:128:ILE:H | 4 | 0.1 |
| (1,1016) | 1:A:165:TRP:HZ3 | 1:A:127:PHE:HZ | 6 | 0.1 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,1006) | 1:A:100:SER:H | 1:A:126:VAL:H | 3 | 0.1 |
| (1,1006) | 1:A:100:SER:H | 1:A:126:VAL:H | 16 | 0.1 |
| (1,994) | 1:A:79:THR:H | 1:A:54:VAL:H | 14 | 0.09 |
| (1,993) | 1:A:36:LEU:H | 1:A:99:VAL:H | 8 | 0.09 |
| (1,989) | 1:A:163:LEU:HD11 | 1:A:165:TRP:HE1 | 1 | 0.09 |
| (1,989) | 1:A:163:LEU:HD12 | 1:A:165:TRP:HE1 | 1 | 0.09 |
| (1,989) | 1:A:163:LEU:HD13 | 1:A:165:TRP:HE1 | 1 | 0.09 |
| (1,988) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:H | 4 | 0.09 |
| (1,988) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:H | 4 | 0.09 |
| (1,988) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:H | 4 | 0.09 |
| (1,964) | 1:A:116:LYS:H | 1:A:117:VAL:HG21 | 16 | 0.09 |
| (1,964) | 1:A:116:LYS:H | 1:A:117:VAL:HG22 | 16 | 0.09 |
| (1,964) | 1:A:116:LYS:H | 1:A:117:VAL:HG23 | 16 | 0.09 |
| (1,954) | 1:A:70:LEU:H | 1:A:78:ILE:HD11 | 7 | 0.09 |
| (1,954) | 1:A:70:LEU:H | 1:A:78:ILE:HD12 | 7 | 0.09 |
| (1,954) | 1:A:70:LEU:H | 1:A:78:ILE:HD13 | 7 | 0.09 |
| (1,936) | 1:A:153:LEU:HD21 | 1:A:157:GLN:H | 14 | 0.09 |
| (1,936) | 1:A:153:LEU:HD22 | 1:A:157:GLN:H | 14 | 0.09 |
| (1,936) | 1:A:153:LEU:HD23 | 1:A:157:GLN:H | 14 | 0.09 |
| (1,932) | 1:A:172:GLU:H | 1:A:187:LEU:HD11 | 10 | 0.09 |
| (1,932) | 1:A:172:GLU:H | 1:A:187:LEU:HD12 | 10 | 0.09 |
| (1,932) | 1:A:172:GLU:H | 1:A:187:LEU:HD13 | 10 | 0.09 |
| (1,915) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:148:ASP:H | 11 | 0.09 |
| (1,915) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:148:ASP:H | 11 | 0.09 |
| (1,915) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:148:ASP:H | 11 | 0.09 |
| (1,915) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:148:ASP:H | 15 | 0.09 |
| (1,915) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:148:ASP:H | 15 | 0.09 |
| (1,915) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:148:ASP:H | 15 | 0.09 |
| (1,91) | 1:A:112:GLN:H | 1:A:114:TYR:H | 9 | 0.09 |
| (1,907) | 1:A:33:ILE:H | 1:A:54:VAL:HG21 | 4 | 0.09 |
| (1,907) | 1:A:33:ILE:H | 1:A:54:VAL:HG22 | 4 | 0.09 |
| (1,907) | 1:A:33:ILE:H | 1:A:54:VAL:HG23 | 4 | 0.09 |
| (1,902) | 1:A:153:LEU:HD11 | 1:A:169:ASN:H | 20 | 0.09 |
| (1,902) | 1:A:153:LEU:HD12 | 1:A:169:ASN:H | 20 | 0.09 |
| (1,902) | 1:A:153:LEU:HD13 | 1:A:169:ASN:H | 20 | 0.09 |
| (1,900) | 1:A:153:LEU:H | 1:A:190:LEU:HD11 | 8 | 0.09 |
| (1,900) | 1:A:153:LEU:H | 1:A:190:LEU:HD12 | 8 | 0.09 |
| (1,900) | 1:A:153:LEU:H | 1:A:190:LEU:HD13 | 8 | 0.09 |
| (1,897) | 1:A:163:LEU:HD21 | 1:A:193:GLN:H | 10 | 0.09 |
| (1,897) | 1:A:163:LEU:HD22 | 1:A:193:GLN:H | 10 | 0.09 |
| (1,897) | 1:A:163:LEU:HD23 | 1:A:193:GLN:H | 10 | 0.09 |
| (1,897) | 1:A:163:LEU:HD21 | 1:A:193:GLN:H | 16 | 0.09 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,897) | 1:A:163:LEU:HD22 | 1:A:193:GLN:H | 16 | 0.09 |
| (1,897) | 1:A:163:LEU:HD23 | 1:A:193:GLN:H | 16 | 0.09 |
| (1,885) | 1:A:50:LEU:H | 1:A:54:VAL:HG21 | 4 | 0.09 |
| (1,885) | 1:A:50:LEU:H | 1:A:54:VAL:HG22 | 4 | 0.09 |
| (1,885) | 1:A:50:LEU:H | 1:A:54:VAL:HG23 | 4 | 0.09 |
| (1,885) | 1:A:50:LEU:H | 1:A:54:VAL:HG21 | 5 | 0.09 |
| (1,885) | 1:A:50:LEU:H | 1:A:54:VAL:HG22 | 5 | 0.09 |
| (1,885) | 1:A:50:LEU:H | 1:A:54:VAL:HG23 | 5 | 0.09 |
| (1,885) | 1:A:50:LEU:H | 1:A:54:VAL:HG21 | 7 | 0.09 |
| (1,885) | 1:A:50:LEU:H | 1:A:54:VAL:HG22 | 7 | 0.09 |
| (1,885) | 1:A:50:LEU:H | 1:A:54:VAL:HG23 | 7 | 0.09 |
| (1,885) | 1:A:50:LEU:H | 1:A:54:VAL:HG21 | 11 | 0.09 |
| (1,885) | 1:A:50:LEU:H | 1:A:54:VAL:HG22 | 11 | 0.09 |
| (1,885) | 1:A:50:LEU:H | 1:A:54:VAL:HG23 | 11 | 0.09 |
| (1,885) | 1:A:50:LEU:H | 1:A:54:VAL:HG21 | 19 | 0.09 |
| (1,885) | 1:A:50:LEU:H | 1:A:54:VAL:HG22 | 19 | 0.09 |
| (1,885) | 1:A:50:LEU:H | 1:A:54:VAL:HG23 | 19 | 0.09 |
| (1,854) | 1:A:131:GLY:H | 1:A:153:LEU:HD21 | 1 | 0.09 |
| (1,854) | 1:A:131:GLY:H | 1:A:153:LEU:HD22 | 1 | 0.09 |
| (1,854) | 1:A:131:GLY:H | 1:A:153:LEU:HD23 | 1 | 0.09 |
| (1,854) | 1:A:131:GLY:H | 1:A:153:LEU:HD21 | 5 | 0.09 |
| (1,854) | 1:A:131:GLY:H | 1:A:153:LEU:HD22 | 5 | 0.09 |
| (1,854) | 1:A:131:GLY:H | 1:A:153:LEU:HD23 | 5 | 0.09 |
| (1,854) | 1:A:131:GLY:H | 1:A:153:LEU:HD21 | 10 | 0.09 |
| (1,854) | 1:A:131:GLY:H | 1:A:153:LEU:HD22 | 10 | 0.09 |
| (1,854) | 1:A:131:GLY:H | 1:A:153:LEU:HD23 | 10 | 0.09 |
| (1,840) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:121:LEU:H | 16 | 0.09 |
| (1,840) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:121:LEU:H | 16 | 0.09 |
| (1,840) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:121:LEU:H | 16 | 0.09 |
| (1,827) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:36:LEU:H | 3 | 0.09 |
| (1,827) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:36:LEU:H | 3 | 0.09 |
| (1,827) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:36:LEU:H | 3 | 0.09 |
| (1,827) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:36:LEU:H | 5 | 0.09 |
| (1,827) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:36:LEU:H | 5 | 0.09 |
| (1,827) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:36:LEU:H | 5 | 0.09 |
| (1,827) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:36:LEU:H | 19 | 0.09 |
| (1,827) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:36:LEU:H | 19 | 0.09 |
| (1,827) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:36:LEU:H | 19 | 0.09 |
| (1,822) | 1:A:90:ILE:HD11 | 1:A:116:LYS:H | 9 | 0.09 |
| (1,822) | 1:A:90:ILE:HD12 | 1:A:116:LYS:H | 9 | 0.09 |
| (1,822) | 1:A:90:ILE:HD13 | 1:A:116:LYS:H | 9 | 0.09 |
| (1,811) | 1:A:146:ASP:H | 1:A:147:LEU:HD11 | 3 | 0.09 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,811) | 1:A:146:ASP:H | 1:A:147:LEU:HD12 | 3 | 0.09 |
| (1,811) | 1:A:146:ASP:H | 1:A:147:LEU:HD13 | 3 | 0.09 |
| (1,810) | 1:A:136:GLN:H | 1:A:147:LEU:HD11 | 1 | 0.09 |
| (1,810) | 1:A:136:GLN:H | 1:A:147:LEU:HD12 | 1 | 0.09 |
| (1,810) | 1:A:136:GLN:H | 1:A:147:LEU:HD13 | 1 | 0.09 |
| (1,810) | 1:A:136:GLN:H | 1:A:147:LEU:HD11 | 2 | 0.09 |
| (1,810) | 1:A:136:GLN:H | 1:A:147:LEU:HD12 | 2 | 0.09 |
| (1,810) | 1:A:136:GLN:H | 1:A:147:LEU:HD13 | 2 | 0.09 |
| (1,810) | 1:A:136:GLN:H | 1:A:147:LEU:HD11 | 4 | 0.09 |
| (1,810) | 1:A:136:GLN:H | 1:A:147:LEU:HD12 | 4 | 0.09 |
| (1,810) | 1:A:136:GLN:H | 1:A:147:LEU:HD13 | 4 | 0.09 |
| (1,806) | 1:A:166:LEU:HD21 | 1:A:193:GLN:H | 14 | 0.09 |
| (1,806) | 1:A:166:LEU:HD22 | 1:A:193:GLN:H | 14 | 0.09 |
| (1,806) | 1:A:166:LEU:HD23 | 1:A:193:GLN:H | 14 | 0.09 |
| (1,798) | 1:A:86:ALA:H | 1:A:109:LEU:HD11 | 18 | 0.09 |
| (1,798) | 1:A:86:ALA:H | 1:A:109:LEU:HD12 | 18 | 0.09 |
| (1,798) | 1:A:86:ALA:H | 1:A:109:LEU:HD13 | 18 | 0.09 |
| (1,791) | 1:A:121:LEU:HD21 | 1:A:127:PHE:H | 15 | 0.09 |
| (1,791) | 1:A:121:LEU:HD22 | 1:A:127:PHE:H | 15 | 0.09 |
| (1,791) | 1:A:121:LEU:HD23 | 1:A:127:PHE:H | 15 | 0.09 |
| (1,781) | 1:A:126:VAL:HG11 | 1:A:194:LYS:H | 10 | 0.09 |
| (1,781) | 1:A:126:VAL:HG12 | 1:A:194:LYS:H | 10 | 0.09 |
| (1,781) | 1:A:126:VAL:HG13 | 1:A:194:LYS:H | 10 | 0.09 |
| (1,776) | 1:A:153:LEU:HD11 | 1:A:190:LEU:HD11 | 10 | 0.09 |
| (1,776) | 1:A:153:LEU:HD11 | 1:A:190:LEU:HD12 | 10 | 0.09 |
| (1,776) | 1:A:153:LEU:HD11 | 1:A:190:LEU:HD13 | 10 | 0.09 |
| (1,776) | 1:A:153:LEU:HD12 | 1:A:190:LEU:HD11 | 10 | 0.09 |
| (1,776) | 1:A:153:LEU:HD12 | 1:A:190:LEU:HD12 | 10 | 0.09 |
| (1,776) | 1:A:153:LEU:HD12 | 1:A:190:LEU:HD13 | 10 | 0.09 |
| (1,776) | 1:A:153:LEU:HD13 | 1:A:190:LEU:HD11 | 10 | 0.09 |
| (1,776) | 1:A:153:LEU:HD13 | 1:A:190:LEU:HD12 | 10 | 0.09 |
| (1,776) | 1:A:153:LEU:HD13 | 1:A:190:LEU:HD13 | 10 | 0.09 |
| (1,757) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:50:LEU:HD11 | 9 | 0.09 |
| (1,757) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:50:LEU:HD12 | 9 | 0.09 |
| (1,757) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:50:LEU:HD13 | 9 | 0.09 |
| (1,757) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:50:LEU:HD11 | 9 | 0.09 |
| (1,757) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:50:LEU:HD12 | 9 | 0.09 |
| (1,757) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:50:LEU:HD13 | 9 | 0.09 |
| (1,757) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:50:LEU:HD11 | 9 | 0.09 |
| (1,757) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:50:LEU:HD12 | 9 | 0.09 |
| (1,757) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:50:LEU:HD13 | 9 | 0.09 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD21 | 1:A:99:VAL:HG21 | 2 | 0.09 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|-----------------|------------------|-------|---------------|
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD21 | 1:A:99:VAL:HG22 | 2 | 0.09 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD21 | 1:A:99:VAL:HG23 | 2 | 0.09 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD22 | 1:A:99:VAL:HG21 | 2 | 0.09 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD22 | 1:A:99:VAL:HG22 | 2 | 0.09 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD22 | 1:A:99:VAL:HG23 | 2 | 0.09 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD23 | 1:A:99:VAL:HG21 | 2 | 0.09 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD23 | 1:A:99:VAL:HG22 | 2 | 0.09 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD23 | 1:A:99:VAL:HG23 | 2 | 0.09 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD21 | 1:A:99:VAL:HG21 | 6 | 0.09 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD21 | 1:A:99:VAL:HG22 | 6 | 0.09 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD21 | 1:A:99:VAL:HG23 | 6 | 0.09 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD22 | 1:A:99:VAL:HG21 | 6 | 0.09 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD22 | 1:A:99:VAL:HG22 | 6 | 0.09 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD22 | 1:A:99:VAL:HG23 | 6 | 0.09 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD23 | 1:A:99:VAL:HG21 | 6 | 0.09 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD23 | 1:A:99:VAL:HG22 | 6 | 0.09 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD23 | 1:A:99:VAL:HG23 | 6 | 0.09 |
| (1,694) | 1:A:99:VAL:HG11 | 1:A:101:ILE:HD11 | 2 | 0.09 |
| (1,694) | 1:A:99:VAL:HG11 | 1:A:101:ILE:HD12 | 2 | 0.09 |
| (1,694) | 1:A:99:VAL:HG11 | 1:A:101:ILE:HD13 | 2 | 0.09 |
| (1,694) | 1:A:99:VAL:HG12 | 1:A:101:ILE:HD11 | 2 | 0.09 |
| (1,694) | 1:A:99:VAL:HG12 | 1:A:101:ILE:HD12 | 2 | 0.09 |
| (1,694) | 1:A:99:VAL:HG12 | 1:A:101:ILE:HD13 | 2 | 0.09 |
| (1,694) | 1:A:99:VAL:HG13 | 1:A:101:ILE:HD11 | 2 | 0.09 |
| (1,694) | 1:A:99:VAL:HG13 | 1:A:101:ILE:HD12 | 2 | 0.09 |
| (1,694) | 1:A:99:VAL:HG13 | 1:A:101:ILE:HD13 | 2 | 0.09 |
| (1,69) | 1:A:156:LEU:H | 1:A:159:GLU:H | 2 | 0.09 |
| (1,665) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:121:LEU:HD21 | 9 | 0.09 |
| (1,665) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:121:LEU:HD22 | 9 | 0.09 |
| (1,665) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:121:LEU:HD23 | 9 | 0.09 |
| (1,665) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:121:LEU:HD21 | 9 | 0.09 |
| (1,665) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:121:LEU:HD22 | 9 | 0.09 |
| (1,665) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:121:LEU:HD23 | 9 | 0.09 |
| (1,665) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:121:LEU:HD21 | 9 | 0.09 |
| (1,665) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:121:LEU:HD22 | 9 | 0.09 |
| (1,665) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:121:LEU:HD23 | 9 | 0.09 |
| (1,635) | 1:A:113:LEU:H | 1:A:114:TYR:H | 19 | 0.09 |
| (1,603) | 1:A:58:ASP:H | 1:A:81:VAL:H | 14 | 0.09 |
| (1,579) | 1:A:169:ASN:H | 1:A:189:GLN:H | 11 | 0.09 |
| (1,579) | 1:A:169:ASN:H | 1:A:189:GLN:H | 17 | 0.09 |
| (1,574) | 1:A:36:LEU:HD11 | 1:A:85:LEU:HD21 | 7 | 0.09 |
| (1,574) | 1:A:36:LEU:HD11 | 1:A:85:LEU:HD22 | 7 | 0.09 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,574) | 1:A:36:LEU:HD11 | 1:A:85:LEU:HD23 | 7 | 0.09 |
| (1,574) | 1:A:36:LEU:HD12 | 1:A:85:LEU:HD21 | 7 | 0.09 |
| (1,574) | 1:A:36:LEU:HD12 | 1:A:85:LEU:HD22 | 7 | 0.09 |
| (1,574) | 1:A:36:LEU:HD12 | 1:A:85:LEU:HD23 | 7 | 0.09 |
| (1,574) | 1:A:36:LEU:HD13 | 1:A:85:LEU:HD21 | 7 | 0.09 |
| (1,574) | 1:A:36:LEU:HD13 | 1:A:85:LEU:HD22 | 7 | 0.09 |
| (1,574) | 1:A:36:LEU:HD13 | 1:A:85:LEU:HD23 | 7 | 0.09 |
| (1,574) | 1:A:36:LEU:HD11 | 1:A:85:LEU:HD21 | 18 | 0.09 |
| (1,574) | 1:A:36:LEU:HD11 | 1:A:85:LEU:HD22 | 18 | 0.09 |
| (1,574) | 1:A:36:LEU:HD11 | 1:A:85:LEU:HD23 | 18 | 0.09 |
| (1,574) | 1:A:36:LEU:HD12 | 1:A:85:LEU:HD21 | 18 | 0.09 |
| (1,574) | 1:A:36:LEU:HD12 | 1:A:85:LEU:HD22 | 18 | 0.09 |
| (1,574) | 1:A:36:LEU:HD12 | 1:A:85:LEU:HD23 | 18 | 0.09 |
| (1,574) | 1:A:36:LEU:HD13 | 1:A:85:LEU:HD21 | 18 | 0.09 |
| (1,574) | 1:A:36:LEU:HD13 | 1:A:85:LEU:HD22 | 18 | 0.09 |
| (1,574) | 1:A:36:LEU:HD13 | 1:A:85:LEU:HD23 | 18 | 0.09 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD11 | 1:A:54:VAL:HG21 | 16 | 0.09 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD11 | 1:A:54:VAL:HG22 | 16 | 0.09 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD11 | 1:A:54:VAL:HG23 | 16 | 0.09 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD12 | 1:A:54:VAL:HG21 | 16 | 0.09 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD12 | 1:A:54:VAL:HG22 | 16 | 0.09 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD12 | 1:A:54:VAL:HG23 | 16 | 0.09 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD13 | 1:A:54:VAL:HG21 | 16 | 0.09 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD13 | 1:A:54:VAL:HG22 | 16 | 0.09 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD13 | 1:A:54:VAL:HG23 | 16 | 0.09 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD11 | 1:A:54:VAL:HG21 | 20 | 0.09 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD11 | 1:A:54:VAL:HG22 | 20 | 0.09 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD11 | 1:A:54:VAL:HG23 | 20 | 0.09 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD12 | 1:A:54:VAL:HG21 | 20 | 0.09 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD12 | 1:A:54:VAL:HG22 | 20 | 0.09 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD12 | 1:A:54:VAL:HG23 | 20 | 0.09 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD13 | 1:A:54:VAL:HG21 | 20 | 0.09 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD13 | 1:A:54:VAL:HG22 | 20 | 0.09 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD13 | 1:A:54:VAL:HG23 | 20 | 0.09 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD21 | 1:A:81:VAL:HG11 | 1 | 0.09 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD21 | 1:A:81:VAL:HG12 | 1 | 0.09 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD21 | 1:A:81:VAL:HG13 | 1 | 0.09 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD22 | 1:A:81:VAL:HG11 | 1 | 0.09 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD22 | 1:A:81:VAL:HG12 | 1 | 0.09 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD22 | 1:A:81:VAL:HG13 | 1 | 0.09 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD23 | 1:A:81:VAL:HG11 | 1 | 0.09 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD23 | 1:A:81:VAL:HG12 | 1 | 0.09 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD23 | 1:A:81:VAL:HG13 | 1 | 0.09 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD21 | 1:A:81:VAL:HG11 | 9 | 0.09 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD21 | 1:A:81:VAL:HG12 | 9 | 0.09 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD21 | 1:A:81:VAL:HG13 | 9 | 0.09 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD22 | 1:A:81:VAL:HG11 | 9 | 0.09 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD22 | 1:A:81:VAL:HG12 | 9 | 0.09 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD22 | 1:A:81:VAL:HG13 | 9 | 0.09 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD23 | 1:A:81:VAL:HG11 | 9 | 0.09 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD23 | 1:A:81:VAL:HG12 | 9 | 0.09 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD23 | 1:A:81:VAL:HG13 | 9 | 0.09 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD21 | 1:A:81:VAL:HG11 | 13 | 0.09 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD21 | 1:A:81:VAL:HG12 | 13 | 0.09 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD21 | 1:A:81:VAL:HG13 | 13 | 0.09 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD22 | 1:A:81:VAL:HG11 | 13 | 0.09 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD22 | 1:A:81:VAL:HG12 | 13 | 0.09 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD22 | 1:A:81:VAL:HG13 | 13 | 0.09 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD23 | 1:A:81:VAL:HG11 | 13 | 0.09 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD23 | 1:A:81:VAL:HG12 | 13 | 0.09 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD23 | 1:A:81:VAL:HG13 | 13 | 0.09 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD21 | 1:A:160:LEU:HD11 | 14 | 0.09 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD21 | 1:A:160:LEU:HD12 | 14 | 0.09 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD21 | 1:A:160:LEU:HD13 | 14 | 0.09 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD22 | 1:A:160:LEU:HD11 | 14 | 0.09 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD22 | 1:A:160:LEU:HD12 | 14 | 0.09 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD22 | 1:A:160:LEU:HD13 | 14 | 0.09 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD23 | 1:A:160:LEU:HD11 | 14 | 0.09 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD23 | 1:A:160:LEU:HD12 | 14 | 0.09 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD23 | 1:A:160:LEU:HD13 | 14 | 0.09 |
| (1,467) | 1:A:62:VAL:HG11 | 1:A:63:GLY:H | 3 | 0.09 |
| (1,467) | 1:A:62:VAL:HG12 | 1:A:63:GLY:H | 3 | 0.09 |
| (1,467) | 1:A:62:VAL:HG13 | 1:A:63:GLY:H | 3 | 0.09 |
| (1,462) | 1:A:129:LEU:HD11 | 1:A:153:LEU:HD21 | 14 | 0.09 |
| (1,462) | 1:A:129:LEU:HD11 | 1:A:153:LEU:HD22 | 14 | 0.09 |
| (1,462) | 1:A:129:LEU:HD11 | 1:A:153:LEU:HD23 | 14 | 0.09 |
| (1,462) | 1:A:129:LEU:HD12 | 1:A:153:LEU:HD21 | 14 | 0.09 |
| (1,462) | 1:A:129:LEU:HD12 | 1:A:153:LEU:HD22 | 14 | 0.09 |
| (1,462) | 1:A:129:LEU:HD12 | 1:A:153:LEU:HD23 | 14 | 0.09 |
| (1,462) | 1:A:129:LEU:HD13 | 1:A:153:LEU:HD21 | 14 | 0.09 |
| (1,462) | 1:A:129:LEU:HD13 | 1:A:153:LEU:HD22 | 14 | 0.09 |
| (1,462) | 1:A:129:LEU:HD13 | 1:A:153:LEU:HD23 | 14 | 0.09 |
| (1,453) | 1:A:118:TYR:H | 1:A:121:LEU:HD21 | 7 | 0.09 |
| (1,453) | 1:A:118:TYR:H | 1:A:121:LEU:HD22 | 7 | 0.09 |



Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,453) | 1:A:118:TYR:H | 1:A:121:LEU:HD23 | 7 | 0.09 |
| (1,422) | 1:A:47:LEU:HD11 | 1:A:99:VAL:HG11 | 16 | 0.09 |
| (1,422) | 1:A:47:LEU:HD11 | 1:A:99:VAL:HG12 | 16 | 0.09 |
| (1,422) | 1:A:47:LEU:HD11 | 1:A:99:VAL:HG13 | 16 | 0.09 |
| (1,422) | 1:A:47:LEU:HD12 | 1:A:99:VAL:HG11 | 16 | 0.09 |
| (1,422) | 1:A:47:LEU:HD12 | 1:A:99:VAL:HG12 | 16 | 0.09 |
| (1,422) | 1:A:47:LEU:HD12 | 1:A:99:VAL:HG13 | 16 | 0.09 |
| (1,422) | 1:A:47:LEU:HD13 | 1:A:99:VAL:HG11 | 16 | 0.09 |
| (1,422) | 1:A:47:LEU:HD13 | 1:A:99:VAL:HG12 | 16 | 0.09 |
| (1,422) | 1:A:47:LEU:HD13 | 1:A:99:VAL:HG13 | 16 | 0.09 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD21 | 1:A:195:LEU:HD21 | 4 | 0.09 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD21 | 1:A:195:LEU:HD22 | 4 | 0.09 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD21 | 1:A:195:LEU:HD23 | 4 | 0.09 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD22 | 1:A:195:LEU:HD21 | 4 | 0.09 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD22 | 1:A:195:LEU:HD22 | 4 | 0.09 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD22 | 1:A:195:LEU:HD23 | 4 | 0.09 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD23 | 1:A:195:LEU:HD21 | 4 | 0.09 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD23 | 1:A:195:LEU:HD22 | 4 | 0.09 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD23 | 1:A:195:LEU:HD23 | 4 | 0.09 |
| (1,407) | 1:A:126:VAL:HG11 | 1:A:163:LEU:HD21 | 5 | 0.09 |
| (1,407) | 1:A:126:VAL:HG11 | 1:A:163:LEU:HD22 | 5 | 0.09 |
| (1,407) | 1:A:126:VAL:HG11 | 1:A:163:LEU:HD23 | 5 | 0.09 |
| (1,407) | 1:A:126:VAL:HG12 | 1:A:163:LEU:HD21 | 5 | 0.09 |
| (1,407) | 1:A:126:VAL:HG12 | 1:A:163:LEU:HD22 | 5 | 0.09 |
| (1,407) | 1:A:126:VAL:HG12 | 1:A:163:LEU:HD23 | 5 | 0.09 |
| (1,407) | 1:A:126:VAL:HG13 | 1:A:163:LEU:HD21 | 5 | 0.09 |
| (1,407) | 1:A:126:VAL:HG13 | 1:A:163:LEU:HD22 | 5 | 0.09 |
| (1,407) | 1:A:126:VAL:HG13 | 1:A:163:LEU:HD23 | 5 | 0.09 |
| (1,407) | 1:A:126:VAL:HG11 | 1:A:163:LEU:HD21 | 9 | 0.09 |
| (1,407) | 1:A:126:VAL:HG11 | 1:A:163:LEU:HD22 | 9 | 0.09 |
| (1,407) | 1:A:126:VAL:HG11 | 1:A:163:LEU:HD23 | 9 | 0.09 |
| (1,407) | 1:A:126:VAL:HG12 | 1:A:163:LEU:HD21 | 9 | 0.09 |
| (1,407) | 1:A:126:VAL:HG12 | 1:A:163:LEU:HD22 | 9 | 0.09 |
| (1,407) | 1:A:126:VAL:HG12 | 1:A:163:LEU:HD23 | 9 | 0.09 |
| (1,407) | 1:A:126:VAL:HG13 | 1:A:163:LEU:HD21 | 9 | 0.09 |
| (1,407) | 1:A:126:VAL:HG13 | 1:A:163:LEU:HD22 | 9 | 0.09 |
| (1,407) | 1:A:126:VAL:HG13 | 1:A:163:LEU:HD23 | 9 | 0.09 |
| (1,399) | 1:A:34:LEU:H | 1:A:99:VAL:HG21 | 17 | 0.09 |
| (1,399) | 1:A:34:LEU:H | 1:A:99:VAL:HG22 | 17 | 0.09 |
| (1,399) | 1:A:34:LEU:H | 1:A:99:VAL:HG23 | 17 | 0.09 |
| (1,391) | 1:A:58:ASP:H | 1:A:64:LEU:HD21 | 20 | 0.09 |
| (1,391) | 1:A:58:ASP:H | 1:A:64:LEU:HD22 | 20 | 0.09 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,391) | 1:A:58:ASP:H | 1:A:64:LEU:HD23 | 20 | 0.09 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD11 | 1:A:190:LEU:HD11 | 9 | 0.09 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD11 | 1:A:190:LEU:HD12 | 9 | 0.09 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD11 | 1:A:190:LEU:HD13 | 9 | 0.09 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD12 | 1:A:190:LEU:HD11 | 9 | 0.09 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD12 | 1:A:190:LEU:HD12 | 9 | 0.09 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD12 | 1:A:190:LEU:HD13 | 9 | 0.09 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD13 | 1:A:190:LEU:HD11 | 9 | 0.09 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD13 | 1:A:190:LEU:HD12 | 9 | 0.09 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD13 | 1:A:190:LEU:HD13 | 9 | 0.09 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD11 | 1:A:190:LEU:HD11 | 15 | 0.09 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD11 | 1:A:190:LEU:HD12 | 15 | 0.09 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD11 | 1:A:190:LEU:HD13 | 15 | 0.09 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD12 | 1:A:190:LEU:HD11 | 15 | 0.09 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD12 | 1:A:190:LEU:HD12 | 15 | 0.09 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD12 | 1:A:190:LEU:HD13 | 15 | 0.09 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD13 | 1:A:190:LEU:HD11 | 15 | 0.09 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD13 | 1:A:190:LEU:HD12 | 15 | 0.09 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD13 | 1:A:190:LEU:HD13 | 15 | 0.09 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG21 | 1:A:128:ILE:HD11 | 5 | 0.09 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG21 | 1:A:128:ILE:HD12 | 5 | 0.09 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG21 | 1:A:128:ILE:HD13 | 5 | 0.09 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG22 | 1:A:128:ILE:HD11 | 5 | 0.09 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG22 | 1:A:128:ILE:HD12 | 5 | 0.09 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG22 | 1:A:128:ILE:HD13 | 5 | 0.09 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG23 | 1:A:128:ILE:HD11 | 5 | 0.09 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG23 | 1:A:128:ILE:HD12 | 5 | 0.09 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG23 | 1:A:128:ILE:HD13 | 5 | 0.09 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG21 | 1:A:128:ILE:HD11 | 9 | 0.09 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG21 | 1:A:128:ILE:HD12 | 9 | 0.09 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG21 | 1:A:128:ILE:HD13 | 9 | 0.09 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG22 | 1:A:128:ILE:HD11 | 9 | 0.09 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG22 | 1:A:128:ILE:HD12 | 9 | 0.09 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG22 | 1:A:128:ILE:HD13 | 9 | 0.09 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG23 | 1:A:128:ILE:HD11 | 9 | 0.09 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG23 | 1:A:128:ILE:HD12 | 9 | 0.09 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG23 | 1:A:128:ILE:HD13 | 9 | 0.09 |
| (1,358) | 1:A:90:ILE:HD11 | 1:A:113:LEU:HD11 | 10 | 0.09 |
| (1,358) | 1:A:90:ILE:HD11 | 1:A:113:LEU:HD12 | 10 | 0.09 |
| (1,358) | 1:A:90:ILE:HD11 | 1:A:113:LEU:HD13 | 10 | 0.09 |
| (1,358) | 1:A:90:ILE:HD12 | 1:A:113:LEU:HD11 | 10 | 0.09 |
| (1,358) | 1:A:90:ILE:HD12 | 1:A:113:LEU:HD12 | 10 | 0.09 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,358) | 1:A:90:ILE:HD12 | 1:A:113:LEU:HD13 | 10 | 0.09 |
| (1,358) | 1:A:90:ILE:HD13 | 1:A:113:LEU:HD11 | 10 | 0.09 |
| (1,358) | 1:A:90:ILE:HD13 | 1:A:113:LEU:HD12 | 10 | 0.09 |
| (1,358) | 1:A:90:ILE:HD13 | 1:A:113:LEU:HD13 | 10 | 0.09 |
| (1,346) | 1:A:175:LEU:HD21 | 1:A:184:LYS:H | 14 | 0.09 |
| (1,346) | 1:A:175:LEU:HD22 | 1:A:184:LYS:H | 14 | 0.09 |
| (1,346) | 1:A:175:LEU:HD23 | 1:A:184:LYS:H | 14 | 0.09 |
| (1,338) | 1:A:48:ALA:H | 1:A:54:VAL:HG11 | 14 | 0.09 |
| (1,338) | 1:A:48:ALA:H | 1:A:54:VAL:HG12 | 14 | 0.09 |
| (1,338) | 1:A:48:ALA:H | 1:A:54:VAL:HG13 | 14 | 0.09 |
| (1,303) | 1:A:91:VAL:H | 1:A:93:ASP:H | 17 | 0.09 |
| (1,295) | 1:A:153:LEU:H | 1:A:190:LEU:HD21 | 14 | 0.09 |
| (1,295) | 1:A:153:LEU:H | 1:A:190:LEU:HD22 | 14 | 0.09 |
| (1,295) | 1:A:153:LEU:H | 1:A:190:LEU:HD23 | 14 | 0.09 |
| (1,295) | 1:A:153:LEU:H | 1:A:190:LEU:HD21 | 17 | 0.09 |
| (1,295) | 1:A:153:LEU:H | 1:A:190:LEU:HD22 | 17 | 0.09 |
| (1,295) | 1:A:153:LEU:H | 1:A:190:LEU:HD23 | 17 | 0.09 |
| (1,254) | 1:A:57:VAL:HG11 | 1:A:83:SER:H | 13 | 0.09 |
| (1,254) | 1:A:57:VAL:HG12 | 1:A:83:SER:H | 13 | 0.09 |
| (1,254) | 1:A:57:VAL:HG13 | 1:A:83:SER:H | 13 | 0.09 |
| (1,254) | 1:A:57:VAL:HG11 | 1:A:83:SER:H | 17 | 0.09 |
| (1,254) | 1:A:57:VAL:HG12 | 1:A:83:SER:H | 17 | 0.09 |
| (1,254) | 1:A:57:VAL:HG13 | 1:A:83:SER:H | 17 | 0.09 |
| (1,250) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:84:ASN:H | 15 | 0.09 |
| (1,250) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:84:ASN:H | 15 | 0.09 |
| (1,250) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:84:ASN:H | 15 | 0.09 |
| (1,243) | 1:A:133:ALA:H | 1:A:150:LEU:HD11 | 6 | 0.09 |
| (1,243) | 1:A:133:ALA:H | 1:A:150:LEU:HD12 | 6 | 0.09 |
| (1,243) | 1:A:133:ALA:H | 1:A:150:LEU:HD13 | 6 | 0.09 |
| (1,229) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:147:LEU:HD21 | 2 | 0.09 |
| (1,229) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:147:LEU:HD22 | 2 | 0.09 |
| (1,229) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:147:LEU:HD23 | 2 | 0.09 |
| (1,226) | 1:A:57:VAL:HG11 | 1:A:82:GLN:H | 11 | 0.09 |
| (1,226) | 1:A:57:VAL:HG12 | 1:A:82:GLN:H | 11 | 0.09 |
| (1,226) | 1:A:57:VAL:HG13 | 1:A:82:GLN:H | 11 | 0.09 |
| (1,221) | 1:A:160:LEU:HD21 | 1:A:165:TRP:HE1 | 16 | 0.09 |
| (1,221) | 1:A:160:LEU:HD22 | 1:A:165:TRP:HE1 | 16 | 0.09 |
| (1,221) | 1:A:160:LEU:HD23 | 1:A:165:TRP:HE1 | 16 | 0.09 |
| (1,217) | 1:A:163:LEU:HD11 | 1:A:195:LEU:H | 7 | 0.09 |
| (1,217) | 1:A:163:LEU:HD12 | 1:A:195:LEU:H | 7 | 0.09 |
| (1,217) | 1:A:163:LEU:HD13 | 1:A:195:LEU:H | 7 | 0.09 |
| (1,212) | 1:A:86:ALA:H | 1:A:88:PHE:H | 12 | 0.09 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|-----------------|------------------|-------|---------------|
| (1,212) | 1:A:86:ALA:H | 1:A:88:PHE:H | 16 | 0.09 |
| (1,212) | 1:A:86:ALA:H | 1:A:88:PHE:H | 18 | 0.09 |
| (1,206) | 1:A:60:SER:H | 1:A:62:VAL:HG21 | 7 | 0.09 |
| (1,206) | 1:A:60:SER:H | 1:A:62:VAL:HG22 | 7 | 0.09 |
| (1,206) | 1:A:60:SER:H | 1:A:62:VAL:HG23 | 7 | 0.09 |
| (1,205) | 1:A:24:VAL:HG11 | 1:A:192:GLY:H | 14 | 0.09 |
| (1,205) | 1:A:24:VAL:HG12 | 1:A:192:GLY:H | 14 | 0.09 |
| (1,205) | 1:A:24:VAL:HG13 | 1:A:192:GLY:H | 14 | 0.09 |
| (1,205) | 1:A:24:VAL:HG11 | 1:A:192:GLY:H | 16 | 0.09 |
| (1,205) | 1:A:24:VAL:HG12 | 1:A:192:GLY:H | 16 | 0.09 |
| (1,205) | 1:A:24:VAL:HG13 | 1:A:192:GLY:H | 16 | 0.09 |
| (1,201) | 1:A:157:GLN:H | 1:A:190:LEU:HD21 | 10 | 0.09 |
| (1,201) | 1:A:157:GLN:H | 1:A:190:LEU:HD22 | 10 | 0.09 |
| (1,201) | 1:A:157:GLN:H | 1:A:190:LEU:HD23 | 10 | 0.09 |
| (1,201) | 1:A:157:GLN:H | 1:A:190:LEU:HD21 | 13 | 0.09 |
| (1,201) | 1:A:157:GLN:H | 1:A:190:LEU:HD22 | 13 | 0.09 |
| (1,201) | 1:A:157:GLN:H | 1:A:190:LEU:HD23 | 13 | 0.09 |
| (1,176) | 1:A:186:ALA:H | 1:A:187:LEU:HD21 | 5 | 0.09 |
| (1,176) | 1:A:186:ALA:H | 1:A:187:LEU:HD22 | 5 | 0.09 |
| (1,176) | 1:A:186:ALA:H | 1:A:187:LEU:HD23 | 5 | 0.09 |
| (1,174) | 1:A:61:SER:H | 1:A:62:VAL:HG11 | 1 | 0.09 |
| (1,174) | 1:A:61:SER:H | 1:A:62:VAL:HG12 | 1 | 0.09 |
| (1,174) | 1:A:61:SER:H | 1:A:62:VAL:HG13 | 1 | 0.09 |
| (1,163) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:81:VAL:H | 14 | 0.09 |
| (1,163) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:81:VAL:H | 14 | 0.09 |
| (1,163) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:81:VAL:H | 14 | 0.09 |
| (1,158) | 1:A:163:LEU:H | 1:A:195:LEU:HD21 | 2 | 0.09 |
| (1,158) | 1:A:163:LEU:H | 1:A:195:LEU:HD22 | 2 | 0.09 |
| (1,158) | 1:A:163:LEU:H | 1:A:195:LEU:HD23 | 2 | 0.09 |
| (1,153) | 1:A:57:VAL:H | 1:A:81:VAL:HG21 | 2 | 0.09 |
| (1,153) | 1:A:57:VAL:H | 1:A:81:VAL:HG22 | 2 | 0.09 |
| (1,153) | 1:A:57:VAL:H | 1:A:81:VAL:HG23 | 2 | 0.09 |
| (1,152) | 1:A:37:ALA:H | 1:A:57:VAL:H | 18 | 0.09 |
| (1,145) | 1:A:175:LEU:H | 1:A:184:LYS:H | 13 | 0.09 |
| (1,123) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:128:ILE:HD11 | 8 | 0.09 |
| (1,123) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:128:ILE:HD12 | 8 | 0.09 |
| (1,123) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:128:ILE:HD13 | 8 | 0.09 |
| (1,123) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:128:ILE:HD11 | 12 | 0.09 |
| (1,123) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:128:ILE:HD12 | 12 | 0.09 |
| (1,123) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:128:ILE:HD13 | 12 | 0.09 |
| (1,123) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:128:ILE:HD11 | 20 | 0.09 |
| (1,123) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:128:ILE:HD12 | 20 | 0.09 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,123) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:128:ILE:HD13 | 20 | 0.09 |
| (1,1117) | 1:A:167:ILE:H | 1:A:191:LEU:O | 5 | 0.09 |
| (1,109) | 1:A:149:LEU:H | 1:A:150:LEU:H | 8 | 0.09 |
| (1,108) | 1:A:145:LYS:H | 1:A:148:ASP:H | 15 | 0.09 |
| (1,1070) | 1:A:108:SER:O | 1:A:112:GLN:H | 7 | 0.09 |
| (1,1050) | 1:A:62:VAL:O | 1:A:66:LYS:H | 2 | 0.09 |
| (1,1046) | 1:A:46:PHE:O | 1:A:50:LEU:H | 13 | 0.09 |
| (1,1026) | 1:A:95:TRP:HE1 | 1:A:91:VAL:H | 18 | 0.09 |
| (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:85:LEU:HD21 | 5 | 0.09 |
| (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:85:LEU:HD22 | 5 | 0.09 |
| (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:85:LEU:HD23 | 5 | 0.09 |
| (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:85:LEU:HD21 | 5 | 0.09 |
| (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:85:LEU:HD22 | 5 | 0.09 |
| (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:85:LEU:HD23 | 5 | 0.09 |
| (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:85:LEU:HD21 | 5 | 0.09 |
| (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:85:LEU:HD22 | 5 | 0.09 |
| (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:85:LEU:HD23 | 5 | 0.09 |
| (1,101) | 1:A:135:GLU:H | 1:A:138:GLN:H | 19 | 0.09 |
| (1,101) | 1:A:135:GLU:H | 1:A:138:GLN:H | 20 | 0.09 |
| (1,997) | 1:A:81:VAL:H | 1:A:58:ASP:H | 12 | 0.08 |
| (1,994) | 1:A:79:THR:H | 1:A:54:VAL:H | 11 | 0.08 |
| (1,972) | 1:A:85:LEU:HD21 | 1:A:89:ASP:H | 6 | 0.08 |
| (1,972) | 1:A:85:LEU:HD22 | 1:A:89:ASP:H | 6 | 0.08 |
| (1,972) | 1:A:85:LEU:HD23 | 1:A:89:ASP:H | 6 | 0.08 |
| (1,972) | 1:A:85:LEU:HD21 | 1:A:89:ASP:H | 14 | 0.08 |
| (1,972) | 1:A:85:LEU:HD22 | 1:A:89:ASP:H | 14 | 0.08 |
| (1,972) | 1:A:85:LEU:HD23 | 1:A:89:ASP:H | 14 | 0.08 |
| (1,967) | 1:A:146:ASP:H | 1:A:149:LEU:HD11 | 17 | 0.08 |
| (1,967) | 1:A:146:ASP:H | 1:A:149:LEU:HD12 | 17 | 0.08 |
| (1,967) | 1:A:146:ASP:H | 1:A:149:LEU:HD13 | 17 | 0.08 |
| (1,964) | 1:A:116:LYS:H | 1:A:117:VAL:HG21 | 8 | 0.08 |
| (1,964) | 1:A:116:LYS:H | 1:A:117:VAL:HG22 | 8 | 0.08 |
| (1,964) | 1:A:116:LYS:H | 1:A:117:VAL:HG23 | 8 | 0.08 |
| (1,964) | 1:A:116:LYS:H | 1:A:117:VAL:HG21 | 12 | 0.08 |
| (1,964) | 1:A:116:LYS:H | 1:A:117:VAL:HG22 | 12 | 0.08 |
| (1,964) | 1:A:116:LYS:H | 1:A:117:VAL:HG23 | 12 | 0.08 |
| (1,942) | 1:A:49:SER:H | 1:A:50:LEU:HD21 | 7 | 0.08 |
| (1,942) | 1:A:49:SER:H | 1:A:50:LEU:HD22 | 7 | 0.08 |
| (1,942) | 1:A:49:SER:H | 1:A:50:LEU:HD23 | 7 | 0.08 |
| (1,942) | 1:A:49:SER:H | 1:A:50:LEU:HD21 | 11 | 0.08 |
| (1,942) | 1:A:49:SER:H | 1:A:50:LEU:HD22 | 11 | 0.08 |
| (1,942) | 1:A:49:SER:H | 1:A:50:LEU:HD23 | 11 | 0.08 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,912) | 1:A:56:ALA:H | 1:A:81:VAL:HG21 | 16 | 0.08 |
| (1,912) | 1:A:56:ALA:H | 1:A:81:VAL:HG22 | 16 | 0.08 |
| (1,912) | 1:A:56:ALA:H | 1:A:81:VAL:HG23 | 16 | 0.08 |
| (1,91) | 1:A:112:GLN:H | 1:A:114:TYR:H | 6 | 0.08 |
| (1,902) | 1:A:153:LEU:HD11 | 1:A:169:ASN:H | 2 | 0.08 |
| (1,902) | 1:A:153:LEU:HD12 | 1:A:169:ASN:H | 2 | 0.08 |
| (1,902) | 1:A:153:LEU:HD13 | 1:A:169:ASN:H | 2 | 0.08 |
| (1,900) | 1:A:153:LEU:H | 1:A:190:LEU:HD11 | 17 | 0.08 |
| (1,900) | 1:A:153:LEU:H | 1:A:190:LEU:HD12 | 17 | 0.08 |
| (1,900) | 1:A:153:LEU:H | 1:A:190:LEU:HD13 | 17 | 0.08 |
| (1,897) | 1:A:163:LEU:HD21 | 1:A:193:GLN:H | 12 | 0.08 |
| (1,897) | 1:A:163:LEU:HD22 | 1:A:193:GLN:H | 12 | 0.08 |
| (1,897) | 1:A:163:LEU:HD23 | 1:A:193:GLN:H | 12 | 0.08 |
| (1,897) | 1:A:163:LEU:HD21 | 1:A:193:GLN:H | 14 | 0.08 |
| (1,897) | 1:A:163:LEU:HD22 | 1:A:193:GLN:H | 14 | 0.08 |
| (1,897) | 1:A:163:LEU:HD23 | 1:A:193:GLN:H | 14 | 0.08 |
| (1,896) | 1:A:166:LEU:HD11 | 1:A:193:GLN:H | 9 | 0.08 |
| (1,896) | 1:A:166:LEU:HD12 | 1:A:193:GLN:H | 9 | 0.08 |
| (1,896) | 1:A:166:LEU:HD13 | 1:A:193:GLN:H | 9 | 0.08 |
| (1,891) | 1:A:125:GLY:H | 1:A:163:LEU:HD21 | 19 | 0.08 |
| (1,891) | 1:A:125:GLY:H | 1:A:163:LEU:HD22 | 19 | 0.08 |
| (1,891) | 1:A:125:GLY:H | 1:A:163:LEU:HD23 | 19 | 0.08 |
| (1,854) | 1:A:131:GLY:H | 1:A:153:LEU:HD21 | 11 | 0.08 |
| (1,854) | 1:A:131:GLY:H | 1:A:153:LEU:HD22 | 11 | 0.08 |
| (1,854) | 1:A:131:GLY:H | 1:A:153:LEU:HD23 | 11 | 0.08 |
| (1,854) | 1:A:131:GLY:H | 1:A:153:LEU:HD21 | 14 | 0.08 |
| (1,854) | 1:A:131:GLY:H | 1:A:153:LEU:HD22 | 14 | 0.08 |
| (1,854) | 1:A:131:GLY:H | 1:A:153:LEU:HD23 | 14 | 0.08 |
| (1,848) | 1:A:91:VAL:HG21 | 1:A:95:TRP:HE1 | 5 | 0.08 |
| (1,848) | 1:A:91:VAL:HG22 | 1:A:95:TRP:HE1 | 5 | 0.08 |
| (1,848) | 1:A:91:VAL:HG23 | 1:A:95:TRP:HE1 | 5 | 0.08 |
| (1,848) | 1:A:91:VAL:HG21 | 1:A:95:TRP:HE1 | 12 | 0.08 |
| (1,848) | 1:A:91:VAL:HG22 | 1:A:95:TRP:HE1 | 12 | 0.08 |
| (1,848) | 1:A:91:VAL:HG23 | 1:A:95:TRP:HE1 | 12 | 0.08 |
| (1,836) | 1:A:81:VAL:HG11 | 1:A:83:SER:H | 14 | 0.08 |
| (1,836) | 1:A:81:VAL:HG12 | 1:A:83:SER:H | 14 | 0.08 |
| (1,836) | 1:A:81:VAL:HG13 | 1:A:83:SER:H | 14 | 0.08 |
| (1,823) | 1:A:23:SER:H | 1:A:24:VAL:HG21 | 18 | 0.08 |
| (1,823) | 1:A:23:SER:H | 1:A:24:VAL:HG22 | 18 | 0.08 |
| (1,823) | 1:A:23:SER:H | 1:A:24:VAL:HG23 | 18 | 0.08 |
| (1,810) | 1:A:136:GLN:H | 1:A:147:LEU:HD11 | 14 | 0.08 |
| (1,810) | 1:A:136:GLN:H | 1:A:147:LEU:HD12 | 14 | 0.08 |



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

| (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD13 14 0.08 (1,809) 1:A:91:VAL:HG11 1:A:92:ALA:H 2 0.08 (1,809) 1:A:91:VAL:HG12 1:A:92:ALA:H 2 0.08 (1,809) 1:A:91:VAL:HG13 1:A:92:ALA:H 2 0.08 (1,809) 1:A:91:VAL:HG11 1:A:92:ALA:H 7 0.08 (1,809) 1:A:91:VAL:HG12 1:A:193:GLN:H 7 0.08 (1,806) 1:A:166:LEU:HD12 1:A:193:GLN:H 18 0.08 (1,806) 1:A:166:LEU:HD22 1:A:193:GLN:H 18 0.08 (1,806) 1:A:166:LEU:HD22 1:A:193:GLN:H 18 0.08 (1,806) 1:A:166:LEU:HD23 1:A:193:GLN:H 18 0.08 (1,798) 1:A:86:ALA:H 1:A:109:LEU:HD11 16 0.08 (1,798) 1:A:86:ALA:H 1:A:109:LEU:HD11 16 0.08 (1,798) 1:A:86:ALA:H 1:A:109:LEU:HD11 16 0.08 (1,798) 1:A:86:ALA:H 1:A:109:LEU:HD13 16 0.08 (1,799) 1:A:175:LEU:HD21 1:A:185:ALA:H 19 0.08 (1,79) 1:A:175:LEU:HD22 1:A:185:ALA:H 19 0.08 (1,79) 1:A:175:LEU:HD21 1:A:185:ALA:H 19 0.08 (1,79) 1:A:175:LEU:HD21 1:A:185:ALA:H 19 0.08 (1,79) 1:A:175:LEU:HD21 1:A:185:ALA:H 19 0.08 (1,79) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD11 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD11 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD11 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD13 15 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG21 1:A:166:LEU:HD13 15 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG21 1:A:166:LEU:HD13 15 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG21 1:A:166:LEU:HD13 15 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG21 1:A:166:LEU:HD11 1 10 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD13 1 10 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:1 | Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|--|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,809) 1:A:91:VAL:HG12 1:A:92:ALA:H 2 0.08 (1,809) 1:A:91:VAL:HG13 1:A:92:ALA:H 2 0.08 (1,809) 1:A:91:VAL:HG11 1:A:92:ALA:H 7 0.08 (1,809) 1:A:91:VAL:HG11 1:A:92:ALA:H 7 0.08 (1,809) 1:A:91:VAL:HG13 1:A:92:ALA:H 7 0.08 (1,809) 1:A:91:VAL:HG13 1:A:92:ALA:H 7 0.08 (1,806) 1:A:166:LEU:HD21 1:A:193:GLN:H 18 0.08 (1,806) 1:A:166:LEU:HD22 1:A:193:GLN:H 18 0.08 (1,806) 1:A:166:LEU:HD23 1:A:193:GLN:H 18 0.08 (1,708) 1:A:86:ALA:H 1:A:109:LEU:HD11 16 0.08 (1,798) 1:A:86:ALA:H 1:A:109:LEU:HD12 16 0.08 (1,798) 1:A:86:ALA:H 1:A:109:LEU:HD13 16 0.08 (1,798) 1:A:86:ALA:H 1:A:109:LEU:HD13 16 0.08 (1,799) 1:A:175:LEU:HD21 1:A:185:ALA:H 19 0.08 (1,79) 1:A:175:LEU:HD22 1:A:185:ALA:H 19 0.08 (1,79) 1:A:175:LEU:HD22 1:A:185:ALA:H 19 0.08 (1,79) 1:A:175:LEU:HD12 1:A:185:ALA:H 19 0.08 (1,79) 1:A:175:LEU:HD12 1:A:185:ALA:H 19 0.08 (1,79) 1:A:175:LEU:HD12 1:A:185:ALA:H 19 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD11 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD11 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD12 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD13 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD13 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD13 15 0.08 (1,7773) 1:A:126:VAL:HG21 1:A:166:LEU:HD14 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG21 1:A:166:LEU:HD14 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD11 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG23 1:A:166:LEU:HD14 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG23 1:A:166:LEU:HD11 13 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG23 1:A:166:LEU:HD11 13 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166: | (1,810) | 1:A:136:GLN:H | 1:A:147:LEU:HD13 | 14 | 0.08 |
| (1,809) 1:A:91:VAL:HG13 1:A:92:ALA:H 7 0.08 (1,809) 1:A:91:VAL:HG11 1:A:92:ALA:H 7 0.08 (1,809) 1:A:91:VAL:HG12 1:A:92:ALA:H 7 0.08 (1,809) 1:A:91:VAL:HG13 1:A:92:ALA:H 7 0.08 (1,809) 1:A:91:VAL:HG13 1:A:92:ALA:H 7 0.08 (1,806) 1:A:166:LEU:HD21 1:A:193:GLN:H 18 0.08 (1,806) 1:A:166:LEU:HD22 1:A:193:GLN:H 18 0.08 (1,806) 1:A:166:LEU:HD23 1:A:193:GLN:H 18 0.08 (1,798) 1:A:86:ALA:H 1:A:109:LEU:HD11 16 0.08 (1,798) 1:A:86:ALA:H 1:A:109:LEU:HD11 16 0.08 (1,798) 1:A:86:ALA:H 1:A:109:LEU:HD12 16 0.08 (1,799) 1:A:175:LEU:HD21 1:A:185:ALA:H 19 0.08 (1,79) 1:A:175:LEU:HD21 1:A:185:ALA:H 19 0.08 (1,79) 1:A:175:LEU:HD22 1:A:185:ALA:H 19 0.08 (1,79) 1:A:175:LEU:HD22 1:A:185:ALA:H 19 0.08 (1,79) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:185:ALA:H 19 0.08 (1,76) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD11 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD12 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD11 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD13 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD11 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD13 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD11 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD11 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD11 15 0.08 (1,777) 1:A:126:VAL:HG21 1:A:166:LEU:HD11 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG21 1:A:166:LEU:HD13 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG21 1:A:166:LEU:HD13 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD13 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD11 13 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 | (1,809) | 1:A:91:VAL:HG11 | 1:A:92:ALA:H | 2 | 0.08 |
| (1,809) 1:A:91:VAL:HG11 1:A:92:ALA:H 7 0.08 (1,809) 1:A:91:VAL:HG12 1:A:92:ALA:H 7 0.08 (1,809) 1:A:91:VAL:HG13 1:A:92:ALA:H 7 0.08 (1,806) 1:A:166:LEU:HD21 1:A:193:GLN:H 18 0.08 (1,806) 1:A:166:LEU:HD22 1:A:193:GLN:H 18 0.08 (1,806) 1:A:166:LEU:HD23 1:A:193:GLN:H 18 0.08 (1,806) 1:A:166:LEU:HD23 1:A:193:GLN:H 18 0.08 (1,798) 1:A:86:ALA:H 1:A:109:LEU:HD11 16 0.08 (1,798) 1:A:86:ALA:H 1:A:109:LEU:HD12 16 0.08 (1,799) 1:A:175:LEU:HD21 1:A:185:ALA:H 19 0.08 (1,799) 1:A:175:LEU:HD22 1:A:185:ALA:H 19 0.08 (1,79) 1:A:175:LEU:HD22 1:A:185:ALA:H 19 0.08 (1,79) 1:A:175:LEU:HD21 1:A:185:ALA:H 19 0.08 (1,79) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD11 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD11 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD12 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD12 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD13 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD11 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD11 15 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG21 1:A:166:LEU:HD11 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG21 1:A:166:LEU:HD11 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG21 1:A:166:LEU:HD11 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD11 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD11 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD11 13 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD11 13 0.08 (1,7 | (1,809) | 1:A:91:VAL:HG12 | 1:A:92:ALA:H | 2 | 0.08 |
| (1,809) 1:A:91:VAL:HG12 1:A:92:ALA:H 7 0.08 (1,809) 1:A:91:VAL:HG13 1:A:92:ALA:H 7 0.08 (1,806) 1:A:166:LEU:HD21 1:A:193:GLN:H 18 0.08 (1,806) 1:A:166:LEU:HD22 1:A:193:GLN:H 18 0.08 (1,806) 1:A:166:LEU:HD23 1:A:193:GLN:H 18 0.08 (1,798) 1:A:86:ALA:H 1:A:109:LEU:HD11 16 0.08 (1,798) 1:A:86:ALA:H 1:A:109:LEU:HD12 16 0.08 (1,798) 1:A:86:ALA:H 1:A:109:LEU:HD13 16 0.08 (1,799) 1:A:175:LEU:HD21 1:A:185:ALA:H 19 0.08 (1,79) 1:A:175:LEU:HD22 1:A:185:ALA:H 19 0.08 (1,79) 1:A:175:LEU:HD23 1:A:185:ALA:H 19 0.08 (1,79) 1:A:175:LEU:HD23 1:A:185:ALA:H 19 0.08 (1,79) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD11 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD12 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD13 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD13 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD11 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD11 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD11 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD11 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD11 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD11 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD11 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD11 15 0.08 (1,777) 1:A:126:VAL:HG21 1:A:166:LEU:HD11 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG21 1:A:166:LEU:HD12 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG21 1:A:166:LEU:HD11 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD11 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD11 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD11 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD11 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG23 1:A:166:LEU:HD11 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG21 1:A:166:LEU:HD11 13 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD11 13 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG21 1:A:166:LEU:HD11 13 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD11 13 0.08 (1,773) 1:A: | (1,809) | 1:A:91:VAL:HG13 | 1:A:92:ALA:H | 2 | 0.08 |
| (1,809) 1:A:91:VAL:HG13 1:A:92:ALA:H 7 0.08 (1,806) 1:A:166:LEU:HD21 1:A:193:GLN:H 18 0.08 (1,806) 1:A:166:LEU:HD22 1:A:193:GLN:H 18 0.08 (1,806) 1:A:166:LEU:HD23 1:A:193:GLN:H 18 0.08 (1,798) 1:A:86:ALA:H 1:A:109:LEU:HD11 16 0.08 (1,798) 1:A:86:ALA:H 1:A:109:LEU:HD11 16 0.08 (1,798) 1:A:86:ALA:H 1:A:109:LEU:HD12 16 0.08 (1,798) 1:A:86:ALA:H 1:A:109:LEU:HD13 16 0.08 (1,798) 1:A:86:ALA:H 1:A:109:LEU:HD13 16 0.08 (1,799) 1:A:175:LEU:HD21 1:A:185:ALA:H 19 0.08 (1,79) 1:A:175:LEU:HD22 1:A:185:ALA:H 19 0.08 (1,79) 1:A:175:LEU:HD22 1:A:185:ALA:H 19 0.08 (1,79) 1:A:175:LEU:HD23 1:A:185:ALA:H 19 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD11 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD12 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD12 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD11 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD11 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD11 15 0.08 (1,777) 1:A:126:VAL:HG21 1:A:166:LEU:HD11 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG21 1:A:166:LEU:HD13 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG21 1:A:166:LEU:HD13 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG21 1:A:166:LEU:HD11 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG21 1:A:166:LEU:HD11 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG23 1:A:166:LEU:HD11 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG23 1:A:166:LEU:HD11 13 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG21 1:A:166:LEU:HD11 13 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD11 13 0.08 (1 | (1,809) | 1:A:91:VAL:HG11 | 1:A:92:ALA:H | 7 | 0.08 |
| (1,806) 1:A:166:LEU:HD21 1:A:193:GLN:H 18 0.08 (1,806) 1:A:166:LEU:HD22 1:A:193:GLN:H 18 0.08 (1,806) 1:A:166:LEU:HD23 1:A:193:GLN:H 18 0.08 (1,798) 1:A:86:ALA:H 1:A:109:LEU:HD11 16 0.08 (1,798) 1:A:86:ALA:H 1:A:109:LEU:HD12 16 0.08 (1,798) 1:A:86:ALA:H 1:A:109:LEU:HD13 16 0.08 (1,798) 1:A:175:LEU:HD21 1:A:185:ALA:H 19 0.08 (1,79) 1:A:175:LEU:HD22 1:A:185:ALA:H 19 0.08 (1,79) 1:A:175:LEU:HD22 1:A:185:ALA:H 19 0.08 (1,79) 1:A:175:LEU:HD23 1:A:185:ALA:H 19 0.08 (1,79) 1:A:175:LEU:HD23 1:A:185:ALA:H 19 0.08 (1,79) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD11 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD11 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD11 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD12 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD13 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD11 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD11 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD11 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD13 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD11 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD13 15 0.08 (1,773) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD11 15 0.08 (1,773) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD11 15 0.08 (1,773) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD11 15 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG21 1:A:166:LEU:HD13 15 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG21 1:A:166:LEU:HD11 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG21 1:A:166:LEU:HD11 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD11 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD11 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD11 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG23 1:A:166:LEU:HD11 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG23 1:A:166:LEU:HD11 13 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD11 13 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD11 1 | (1,809) | 1:A:91:VAL:HG12 | 1:A:92:ALA:H | 7 | 0.08 |
| (1,806) 1:A:166:LEU:HD22 1:A:193:GLN:H 18 0.08 (1,806) 1:A:166:LEU:HD23 1:A:193:GLN:H 18 0.08 (1,798) 1:A:86:ALA:H 1:A:109:LEU:HD11 16 0.08 (1,798) 1:A:86:ALA:H 1:A:109:LEU:HD12 16 0.08 (1,798) 1:A:86:ALA:H 1:A:109:LEU:HD12 16 0.08 (1,798) 1:A:175:LEU:HD21 1:A:185:ALA:H 19 0.08 (1,79) 1:A:175:LEU:HD22 1:A:185:ALA:H 19 0.08 (1,79) 1:A:175:LEU:HD22 1:A:185:ALA:H 19 0.08 (1,79) 1:A:175:LEU:HD23 1:A:185:ALA:H 19 0.08 (1,79) 1:A:175:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD11 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD11 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD12 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD12 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD11 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD13 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD11 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD11 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD12 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD11 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD11 15 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG21 1:A:166:LEU:HD11 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG21 1:A:166:LEU:HD11 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG21 1:A:166:LEU:HD11 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD11 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD11 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG23 1:A:166:LEU:HD11 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG23 1:A:166:LEU:HD11 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG23 1:A:166:LEU:HD11 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG21 1:A:166:LEU:HD11 13 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:H | (1,809) | 1:A:91:VAL:HG13 | 1:A:92:ALA:H | 7 | 0.08 |
| (1,806) 1:A:166:LEU:HD23 1:A:193:GLN:H 18 0.08 (1,798) 1:A:86:ALA:H 1:A:109:LEU:HD11 16 0.08 (1,798) 1:A:86:ALA:H 1:A:109:LEU:HD12 16 0.08 (1,798) 1:A:86:ALA:H 1:A:109:LEU:HD13 16 0.08 (1,799) 1:A:175:LEU:HD21 1:A:185:ALA:H 19 0.08 (1,779) 1:A:175:LEU:HD23 1:A:185:ALA:H 19 0.08 (1,779) 1:A:175:LEU:HD23 1:A:185:ALA:H 19 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD11 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD13 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD11 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD13 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD11 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD13 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 <td>(1,806)</td> <td>1:A:166:LEU:HD21</td> <td>1:A:193:GLN:H</td> <td>18</td> <td>0.08</td> | (1,806) | 1:A:166:LEU:HD21 | 1:A:193:GLN:H | 18 | 0.08 |
| (1,798) 1:A:86:ALA:H 1:A:109:LEU:HD11 16 0.08 (1,798) 1:A:86:ALA:H 1:A:109:LEU:HD12 16 0.08 (1,798) 1:A:86:ALA:H 1:A:109:LEU:HD13 16 0.08 (1,799) 1:A:175:LEU:HD21 1:A:185:ALA:H 19 0.08 (1,79) 1:A:175:LEU:HD22 1:A:185:ALA:H 19 0.08 (1,79) 1:A:175:LEU:HD23 1:A:185:ALA:H 19 0.08 (1,79) 1:A:175:LEU:HD23 1:A:185:ALA:H 19 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD11 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD12 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD12 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD13 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD13 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD13 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD11 15 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG21 1:A:166:LEU:HD13 15 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG21 1:A:166:LEU:HD11 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG21 1:A:166:LEU:HD11 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG21 1:A:166:LEU:HD11 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD13 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD11 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD11 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG23 1:A:166:LEU:HD11 1 3 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG21 1:A:166:LEU:HD11 1 3 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD11 1 3 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD11 1 3 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG | (1,806) | 1:A:166:LEU:HD22 | 1:A:193:GLN:H | 18 | 0.08 |
| (1,798) 1:A:86:ALA:H 1:A:109:LEU:HD12 16 0.08 (1,798) 1:A:86:ALA:H 1:A:109:LEU:HD13 16 0.08 (1,79) 1:A:175:LEU:HD21 1:A:185:ALA:H 19 0.08 (1,79) 1:A:175:LEU:HD22 1:A:185:ALA:H 19 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD11 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD12 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD13 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD11 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD13 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD13 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD11 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD11 15 0.08 (1,776) 1:A:16:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD12 15 0.08 (1,776) 1:A:16:15 | (1,806) | 1:A:166:LEU:HD23 | 1:A:193:GLN:H | 18 | 0.08 |
| (1,798) 1:A:86:ALA:H 1:A:109:LEU:HD13 16 0.08 (1,79) 1:A:175:LEU:HD21 1:A:185:ALA:H 19 0.08 (1,79) 1:A:175:LEU:HD22 1:A:185:ALA:H 19 0.08 (1,79) 1:A:175:LEU:HD23 1:A:185:ALA:H 19 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD11 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD12 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD13 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD11 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD13 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD11 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU: | (1,798) | 1:A:86:ALA:H | 1:A:109:LEU:HD11 | 16 | 0.08 |
| (1,79) 1:A:175:LEU:HD21 1:A:185:ALA:H 19 0.08 (1,79) 1:A:175:LEU:HD22 1:A:185:ALA:H 19 0.08 (1,79) 1:A:175:LEU:HD23 1:A:185:ALA:H 19 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD11 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD12 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD13 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD11 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD13 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD13 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD13 15 0.08 (1,773) 1:A:153: | (1,798) | 1:A:86:ALA:H | 1:A:109:LEU:HD12 | 16 | 0.08 |
| (1,79) 1:A:175:LEU:HD22 1:A:185:ALA:H 19 0.08 (1,79) 1:A:175:LEU:HD23 1:A:185:ALA:H 19 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD11 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD12 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD13 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD11 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD13 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD13 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD11 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD12 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD13 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD13 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD13 15 0.08 (1,773) 1:A: | (1,798) | 1:A:86:ALA:H | 1:A:109:LEU:HD13 | 16 | 0.08 |
| (1,79) 1:A:175:LEU:HD22 1:A:185:ALA:H 19 0.08 (1,79) 1:A:175:LEU:HD23 1:A:185:ALA:H 19 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD11 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD12 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD13 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD12 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD13 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD13 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD13 15 0.08 (1,773) 1:A: | (1,79) | 1:A:175:LEU:HD21 | 1:A:185:ALA:H | 19 | 0.08 |
| (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD11 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD12 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD13 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD11 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD12 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD13 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD11 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD12 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD12 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD13 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD12 15 0.08 (1,777) 1:A:166:VAL:HG21 1:A:166:LEU:HD13 15 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD13 8 0.08 (1,773) < | (1,79) | 1:A:175:LEU:HD22 | 1:A:185:ALA:H | 19 | 0.08 |
| (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD12 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD13 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD11 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD13 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD11 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD11 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD12 15 0.08 (1,777) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD13 15 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG21 1:A:166:LEU:HD12 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD13 8 0.08 (1,773) <t< td=""><td>(1,79)</td><td>1:A:175:LEU:HD23</td><td>1:A:185:ALA:H</td><td>19</td><td>0.08</td></t<> | (1,79) | 1:A:175:LEU:HD23 | 1:A:185:ALA:H | 19 | 0.08 |
| (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD13 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD11 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD12 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD13 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD11 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD12 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD13 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD13 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:166:LEU:HD13 15 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG21 1:A:166:LEU:HD12 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD13 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD12 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG23 1:A:166:LEU:HD13 8 0.08 (1,773) | (1,776) | 1:A:153:LEU:HD11 | 1:A:190:LEU:HD11 | 15 | 0.08 |
| (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD12 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD12 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD13 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD11 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD12 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD13 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD13 15 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG21 1:A:166:LEU:HD11 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG21 1:A:166:LEU:HD13 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD12 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD13 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG23 1:A:166:LEU:HD11 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG23 1:A:166:LEU:HD11 13 0.08 (1,773) 1 | (1,776) | 1:A:153:LEU:HD11 | 1:A:190:LEU:HD12 | 15 | 0.08 |
| (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD13 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD13 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD11 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD12 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD13 15 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG21 1:A:166:LEU:HD11 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG21 1:A:166:LEU:HD13 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD11 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD12 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD13 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG23 1:A:166:LEU:HD11 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG23 1:A:166:LEU:HD13 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG21 1:A:166:LEU:HD13 8 0.08 (1,773) 1:A: | (1,776) | 1:A:153:LEU:HD11 | 1:A:190:LEU:HD13 | 15 | 0.08 |
| (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD13 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD11 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD12 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD13 15 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG21 1:A:166:LEU:HD11 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG21 1:A:166:LEU:HD12 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG21 1:A:166:LEU:HD13 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD11 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD12 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD13 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG23 1:A:166:LEU:HD11 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG23 1:A:166:LEU:HD13 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG21 1:A:166:LEU:HD11 13 0.08 (1,773) 1:A: | (1,776) | 1:A:153:LEU:HD12 | 1:A:190:LEU:HD11 | 15 | 0.08 |
| (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD11 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD12 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD13 15 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG21 1:A:166:LEU:HD11 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG21 1:A:166:LEU:HD12 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD13 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD11 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD12 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD13 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG23 1:A:166:LEU:HD11 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG23 1:A:166:LEU:HD13 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG21 1:A:166:LEU:HD11 13 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG21 1:A:166:LEU:HD12 13 0.08 (1,773) 1:A: | (1,776) | 1:A:153:LEU:HD12 | 1:A:190:LEU:HD12 | 15 | 0.08 |
| (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD12 15 0.08 (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD13 15 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG21 1:A:166:LEU:HD11 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG21 1:A:166:LEU:HD12 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG21 1:A:166:LEU:HD13 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD11 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD12 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD13 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG23 1:A:166:LEU:HD11 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG23 1:A:166:LEU:HD11 13 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG21 1:A:166:LEU:HD11 13 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG21 1:A:166:LEU:HD12 13 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD13 13 0.08 (1,773) 1:A | (1,776) | 1:A:153:LEU:HD12 | 1:A:190:LEU:HD13 | 15 | 0.08 |
| (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD13 15 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG21 1:A:166:LEU:HD11 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG21 1:A:166:LEU:HD12 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG21 1:A:166:LEU:HD13 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD11 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD12 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD13 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG23 1:A:166:LEU:HD11 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG23 1:A:166:LEU:HD12 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG23 1:A:166:LEU:HD13 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG21 1:A:166:LEU:HD11 13 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG21 1:A:166:LEU:HD13 13 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD11 13 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD12 13 0.08 (1,773)< | | 1:A:153:LEU:HD13 | 1:A:190:LEU:HD11 | 15 | 0.08 |
| (1,773) 1:A:126:VAL:HG21 1:A:166:LEU:HD11 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG21 1:A:166:LEU:HD12 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG21 1:A:166:LEU:HD13 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD11 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD12 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG23 1:A:166:LEU:HD13 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG23 1:A:166:LEU:HD11 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG23 1:A:166:LEU:HD13 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG21 1:A:166:LEU:HD11 13 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG21 1:A:166:LEU:HD12 13 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD11 13 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD11 13 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD12 13 0.08 (1,773) 1:A: | (1,776) | 1:A:153:LEU:HD13 | 1:A:190:LEU:HD12 | 15 | 0.08 |
| (1,773) 1:A:126:VAL:HG21 1:A:166:LEU:HD12 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG21 1:A:166:LEU:HD13 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD11 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD12 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD13 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG23 1:A:166:LEU:HD11 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG23 1:A:166:LEU:HD12 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG23 1:A:166:LEU:HD13 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG21 1:A:166:LEU:HD11 13 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG21 1:A:166:LEU:HD13 13 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD11 13 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD13 13 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD13 13 0.08 (1,773) 1:A: | (1,776) | 1:A:153:LEU:HD13 | 1:A:190:LEU:HD13 | 15 | 0.08 |
| (1,773) 1:A:126:VAL:HG21 1:A:166:LEU:HD13 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD11 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD12 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD13 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG23 1:A:166:LEU:HD11 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG23 1:A:166:LEU:HD12 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG23 1:A:166:LEU:HD13 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG21 1:A:166:LEU:HD11 13 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG21 1:A:166:LEU:HD13 13 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD11 13 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD12 13 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD13 13 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG23 1:A:166:LEU:HD13 13 0.08 (1,773) 1:A | (1,773) | 1:A:126:VAL:HG21 | 1:A:166:LEU:HD11 | 8 | 0.08 |
| (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD11 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD12 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD13 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG23 1:A:166:LEU:HD11 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG23 1:A:166:LEU:HD12 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG23 1:A:166:LEU:HD13 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG21 1:A:166:LEU:HD11 13 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG21 1:A:166:LEU:HD13 13 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD11 13 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD12 13 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD13 13 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG23 1:A:166:LEU:HD13 13 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG23 1:A:166:LEU:HD11 13 0.08 | (1,773) | 1:A:126:VAL:HG21 | 1:A:166:LEU:HD12 | 8 | 0.08 |
| (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD12 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD13 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG23 1:A:166:LEU:HD11 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG23 1:A:166:LEU:HD12 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG23 1:A:166:LEU:HD13 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG21 1:A:166:LEU:HD11 13 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG21 1:A:166:LEU:HD12 13 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD11 13 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD12 13 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD12 13 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD13 13 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG23 1:A:166:LEU:HD11 13 0.08 | (1,773) | 1:A:126:VAL:HG21 | 1:A:166:LEU:HD13 | 8 | 0.08 |
| (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD13 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG23 1:A:166:LEU:HD11 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG23 1:A:166:LEU:HD12 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG23 1:A:166:LEU:HD13 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG21 1:A:166:LEU:HD11 13 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG21 1:A:166:LEU:HD12 13 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD13 13 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD12 13 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD13 13 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD13 13 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG23 1:A:166:LEU:HD11 13 0.08 | (1,773) | 1:A:126:VAL:HG22 | 1:A:166:LEU:HD11 | 8 | 0.08 |
| (1,773) 1:A:126:VAL:HG23 1:A:166:LEU:HD11 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG23 1:A:166:LEU:HD12 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG23 1:A:166:LEU:HD13 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG21 1:A:166:LEU:HD11 13 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG21 1:A:166:LEU:HD12 13 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG21 1:A:166:LEU:HD13 13 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD11 13 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD12 13 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD13 13 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG23 1:A:166:LEU:HD11 13 0.08 | (1,773) | 1:A:126:VAL:HG22 | 1:A:166:LEU:HD12 | 8 | 0.08 |
| (1,773) 1:A:126:VAL:HG23 1:A:166:LEU:HD12 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG23 1:A:166:LEU:HD13 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG21 1:A:166:LEU:HD11 13 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG21 1:A:166:LEU:HD12 13 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG21 1:A:166:LEU:HD13 13 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD11 13 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD12 13 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD13 13 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG23 1:A:166:LEU:HD11 13 0.08 | (1,773) | 1:A:126:VAL:HG22 | 1:A:166:LEU:HD13 | 8 | 0.08 |
| (1,773) 1:A:126:VAL:HG23 1:A:166:LEU:HD13 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG21 1:A:166:LEU:HD11 13 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG21 1:A:166:LEU:HD12 13 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG21 1:A:166:LEU:HD13 13 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD11 13 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD12 13 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD13 13 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG23 1:A:166:LEU:HD11 13 0.08 | (1,773) | 1:A:126:VAL:HG23 | 1:A:166:LEU:HD11 | 8 | 0.08 |
| (1,773) 1:A:126:VAL:HG23 1:A:166:LEU:HD13 8 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG21 1:A:166:LEU:HD11 13 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG21 1:A:166:LEU:HD12 13 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG21 1:A:166:LEU:HD13 13 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD11 13 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD12 13 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD13 13 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG23 1:A:166:LEU:HD11 13 0.08 | (1,773) | 1:A:126:VAL:HG23 | 1:A:166:LEU:HD12 | 8 | 0.08 |
| (1,773) 1:A:126:VAL:HG21 1:A:166:LEU:HD11 13 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG21 1:A:166:LEU:HD12 13 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG21 1:A:166:LEU:HD13 13 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD11 13 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD12 13 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD13 13 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG23 1:A:166:LEU:HD11 13 0.08 | | 1:A:126:VAL:HG23 | 1:A:166:LEU:HD13 | 8 | 0.08 |
| (1,773) 1:A:126:VAL:HG21 1:A:166:LEU:HD12 13 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG21 1:A:166:LEU:HD13 13 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD11 13 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD12 13 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD13 13 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG23 1:A:166:LEU:HD11 13 0.08 | | 1:A:126:VAL:HG21 | 1:A:166:LEU:HD11 | 13 | 0.08 |
| (1,773) 1:A:126:VAL:HG21 1:A:166:LEU:HD13 13 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD11 13 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD12 13 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD13 13 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG23 1:A:166:LEU:HD11 13 0.08 | | 1:A:126:VAL:HG21 | 1:A:166:LEU:HD12 | 13 | 0.08 |
| (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD11 13 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD12 13 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD13 13 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG23 1:A:166:LEU:HD11 13 0.08 | | 1:A:126:VAL:HG21 | 1:A:166:LEU:HD13 | 13 | 0.08 |
| (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD12 13 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD13 13 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG23 1:A:166:LEU:HD11 13 0.08 | ` ' | 1:A:126:VAL:HG22 | 1:A:166:LEU:HD11 | 13 | 0.08 |
| (1,773) 1:A:126:VAL:HG22 1:A:166:LEU:HD13 13 0.08 (1,773) 1:A:126:VAL:HG23 1:A:166:LEU:HD11 13 0.08 | _ ` | 1:A:126:VAL:HG22 | 1:A:166:LEU:HD12 | 13 | 0.08 |
| (1,773) 1:A:126:VAL:HG23 1:A:166:LEU:HD11 13 0.08 | | | 1:A:166:LEU:HD13 | 13 | 0.08 |
| | / | 1:A:126:VAL:HG23 | 1:A:166:LEU:HD11 | 13 | 0.08 |
| | (1,773) | | | | |



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

| $ \begin{array}{c c} (1,773) \\ (1,77) \\ (1,769) \\ (1,769) \\ (1,769) \end{array} $ | 1:A:173:ARG:H 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:166:LEU:HD13 1:A:185:ALA:H | 13 | 0.08 |
|---|----------------------------------|-----------------------------------|-----|------|
| (1,769) (1,769) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:185:ALA:H | 1.4 | |
| (1,769) | | | 14 | 0.08 |
| · ' / | 4 4 00 11 13 135 : : | 1:A:121:LEU:HD11 | 13 | 0.08 |
| (1,769) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:121:LEU:HD12 | 13 | 0.08 |
| 1 \ / / | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:121:LEU:HD13 | 13 | 0.08 |
| (1,769) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:121:LEU:HD11 | 13 | 0.08 |
| (1,769) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:121:LEU:HD12 | 13 | 0.08 |
| (1,769) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:121:LEU:HD13 | 13 | 0.08 |
| (1,769) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:121:LEU:HD11 | 13 | 0.08 |
| (1,769) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:121:LEU:HD12 | 13 | 0.08 |
| (1,769) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:121:LEU:HD13 | 13 | 0.08 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD11 | 1:A:78:ILE:HD11 | 11 | 0.08 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD11 | 1:A:78:ILE:HD12 | 11 | 0.08 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD11 | 1:A:78:ILE:HD13 | 11 | 0.08 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD12 | 1:A:78:ILE:HD11 | 11 | 0.08 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD12 | 1:A:78:ILE:HD12 | 11 | 0.08 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD12 | 1:A:78:ILE:HD13 | 11 | 0.08 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD13 | 1:A:78:ILE:HD11 | 11 | 0.08 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD13 | 1:A:78:ILE:HD12 | 11 | 0.08 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD13 | 1:A:78:ILE:HD13 | 11 | 0.08 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD21 | 1:A:99:VAL:HG21 | 4 | 0.08 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD21 | 1:A:99:VAL:HG22 | 4 | 0.08 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD21 | 1:A:99:VAL:HG23 | 4 | 0.08 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD22 | 1:A:99:VAL:HG21 | 4 | 0.08 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD22 | 1:A:99:VAL:HG22 | 4 | 0.08 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD22 | 1:A:99:VAL:HG23 | 4 | 0.08 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD23 | 1:A:99:VAL:HG21 | 4 | 0.08 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD23 | 1:A:99:VAL:HG22 | 4 | 0.08 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD23 | 1:A:99:VAL:HG23 | 4 | 0.08 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD21 | 1:A:99:VAL:HG21 | 11 | 0.08 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD21 | 1:A:99:VAL:HG22 | 11 | 0.08 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD21 | 1:A:99:VAL:HG23 | 11 | 0.08 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD22 | 1:A:99:VAL:HG21 | 11 | 0.08 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD22 | 1:A:99:VAL:HG22 | 11 | 0.08 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD22 | 1:A:99:VAL:HG23 | 11 | 0.08 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD23 | 1:A:99:VAL:HG21 | 11 | 0.08 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD23 | 1:A:99:VAL:HG22 | 11 | 0.08 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD23 | 1:A:99:VAL:HG23 | 11 | 0.08 |
| (1,660) | 1:A:162:SER:H | 1:A:165:TRP:HE1 | 20 | 0.08 |
| (1,596) | 1:A:164:ASN:H | 1:A:195:LEU:H | 10 | 0.08 |
| (1,596) | 1:A:164:ASN:H | 1:A:195:LEU:H | 12 | 0.08 |
| (1,579) | 1:A:169:ASN:H | 1:A:189:GLN:H | 3 | 0.08 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,567) | 1:A:70:LEU:HD11 | 1:A:74:LYS:H | 9 | 0.08 |
| (1,567) | 1:A:70:LEU:HD12 | 1:A:74:LYS:H | 9 | 0.08 |
| (1,567) | 1:A:70:LEU:HD13 | 1:A:74:LYS:H | 9 | 0.08 |
| (1,558) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:109:LEU:HD11 | 4 | 0.08 |
| (1,558) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:109:LEU:HD12 | 4 | 0.08 |
| (1,558) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:109:LEU:HD13 | 4 | 0.08 |
| (1,558) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:109:LEU:HD11 | 4 | 0.08 |
| (1,558) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:109:LEU:HD12 | 4 | 0.08 |
| (1,558) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:109:LEU:HD13 | 4 | 0.08 |
| (1,558) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:109:LEU:HD11 | 4 | 0.08 |
| (1,558) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:109:LEU:HD12 | 4 | 0.08 |
| (1,558) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:109:LEU:HD13 | 4 | 0.08 |
| (1,558) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:109:LEU:HD11 | 7 | 0.08 |
| (1,558) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:109:LEU:HD12 | 7 | 0.08 |
| (1,558) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:109:LEU:HD13 | 7 | 0.08 |
| (1,558) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:109:LEU:HD11 | 7 | 0.08 |
| (1,558) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:109:LEU:HD12 | 7 | 0.08 |
| (1,558) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:109:LEU:HD13 | 7 | 0.08 |
| (1,558) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:109:LEU:HD11 | 7 | 0.08 |
| (1,558) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:109:LEU:HD12 | 7 | 0.08 |
| (1,558) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:109:LEU:HD13 | 7 | 0.08 |
| (1,535) | 1:A:74:LYS:H | 1:A:76:VAL:HG11 | 12 | 0.08 |
| (1,535) | 1:A:74:LYS:H | 1:A:76:VAL:HG12 | 12 | 0.08 |
| (1,535) | 1:A:74:LYS:H | 1:A:76:VAL:HG13 | 12 | 0.08 |
| (1,535) | 1:A:74:LYS:H | 1:A:76:VAL:HG11 | 17 | 0.08 |
| (1,535) | 1:A:74:LYS:H | 1:A:76:VAL:HG12 | 17 | 0.08 |
| (1,535) | 1:A:74:LYS:H | 1:A:76:VAL:HG13 | 17 | 0.08 |
| (1,511) | 1:A:145:LYS:H | 1:A:149:LEU:HD21 | 1 | 0.08 |
| (1,511) | 1:A:145:LYS:H | 1:A:149:LEU:HD22 | 1 | 0.08 |
| (1,511) | 1:A:145:LYS:H | 1:A:149:LEU:HD23 | 1 | 0.08 |
| (1,511) | 1:A:145:LYS:H | 1:A:149:LEU:HD21 | 3 | 0.08 |
| (1,511) | 1:A:145:LYS:H | 1:A:149:LEU:HD22 | 3 | 0.08 |
| (1,511) | 1:A:145:LYS:H | 1:A:149:LEU:HD23 | 3 | 0.08 |
| (1,511) | 1:A:145:LYS:H | 1:A:149:LEU:HD21 | 4 | 0.08 |
| (1,511) | 1:A:145:LYS:H | 1:A:149:LEU:HD22 | 4 | 0.08 |
| (1,511) | 1:A:145:LYS:H | 1:A:149:LEU:HD23 | 4 | 0.08 |
| (1,508) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:85:LEU:HD21 | 12 | 0.08 |
| (1,508) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:85:LEU:HD22 | 12 | 0.08 |
| (1,508) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:85:LEU:HD23 | 12 | 0.08 |
| (1,508) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:85:LEU:HD21 | 12 | 0.08 |
| (1,508) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:85:LEU:HD22 | 12 | 0.08 |
| (1,508) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:85:LEU:HD23 | 12 | 0.08 |



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

| (1,508) 1:A:57:VAL:HG23 1:A:85:LEU:HD22 12 0.08 (1,508) 1:A:57:VAL:HG23 1:A:85:LEU:HD23 12 0.08 (1,508) 1:A:57:VAL:HG23 1:A:85:LEU:HD23 12 0.08 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG21 8 0.08 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG22 8 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD11 1:A:163:LEU:HD21 17 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD11 1:A:163:LEU:HD22 17 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD11 1:A:163:LEU:HD23 17 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD12 1:A:163:LEU:HD21 17 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD12 1:A:163:LEU:HD22 17 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD13 1:A:163:LEU:HD21 17 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD13 1:A:163:LEU:HD23 17 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD13 1:A:163:LEU:HD21 17 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD | Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|--|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,508) 1:A:57:VAL:HG23 1:A:85:LEU:HD23 12 0.08 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG21 8 0.08 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG21 8 0.08 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG22 8 0.08 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG22 8 0.08 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG22 8 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD11 1:A:163:LEU:HD21 17 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD11 1:A:163:LEU:HD22 17 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD11 1:A:163:LEU:HD22 17 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD12 1:A:163:LEU:HD23 17 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD12 1:A:163:LEU:HD23 17 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD12 1:A:163:LEU:HD21 17 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD12 1:A:163:LEU:HD23 17 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD13 1:A:163:LEU:HD23 17 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD13 1:A:163:LEU:HD21 17 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD13 1:A:163:LEU:HD21 17 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD13 1:A:163:LEU:HD23 17 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD13 1:A:163:LEU:HD23 17 0.08 (1,401) 1:A:37:ALA:H 1:A:85:LEU:HD13 1 0.08 (1,401) 1:A:37:ALA:H 1:A:85:LEU:HD13 1 0.08 (1,401) 1:A:37:ALA:H 1:A:85:LEU:HD11 3 0.08 (1,401) 1:A:37:ALA:H 1:A:85:LEU:HD11 3 0.08 (1,401) 1:A:62:VAL:HG11 1:A:63:GLY:H 4 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG11 1:A:63:GLY:H 4 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG11 1:A:63:GLY:H 4 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG11 1:A:63:GLY:H 7 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG11 1:A:63:GLY:H 7 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG11 1:A:63:GLY:H 7 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG11 1:A:63:GLY:H 1 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG12 1:A:63:GLY:H 1 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG11 1:A:63:GLY:H 1 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG12 1:A:63:GLY:H 1 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG11 1:A:63:GLY:H 1 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD21 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD22 4 0.08 (1,462) 1 | (1,508) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:85:LEU:HD21 | 12 | 0.08 |
| (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG21 8 0.08 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG22 8 0.08 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG22 8 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD11 1:A:163:LEU:HD21 17 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD11 1:A:163:LEU:HD21 17 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD11 1:A:163:LEU:HD22 17 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD12 1:A:163:LEU:HD23 17 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD12 1:A:163:LEU:HD21 17 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD12 1:A:163:LEU:HD21 17 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD12 1:A:163:LEU:HD22 17 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD12 1:A:163:LEU:HD22 17 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD12 1:A:163:LEU:HD23 17 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD13 1:A:163:LEU:HD23 17 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD13 1:A:163:LEU:HD21 17 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD13 1:A:163:LEU:HD21 17 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD13 1:A:163:LEU:HD22 17 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD13 1:A:163:LEU:HD23 17 0.08 (1,491) 1:A:37:ALA:H 1:A:85:LEU:HD12 3 0.08 (1,491) 1:A:37:ALA:H 1:A:85:LEU:HD13 3 0.08 (1,491) 1:A:37:ALA:H 1:A:85:LEU:HD13 3 0.08 (1,491) 1:A:62:VAL:HG11 1:A:63:GLY:H 4 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG11 1:A:63:GLY:H 4 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG12 1:A:63:GLY:H 4 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG13 1:A:63:GLY:H 4 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG13 1:A:63:GLY:H 7 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG13 1:A:63:GLY:H 11 0.08 (1,467) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD22 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:153:LEU | (1,508) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:85:LEU:HD22 | 12 | 0.08 |
| (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG22 8 0.08 (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG23 8 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD11 1:A:163:LEU:HD21 17 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD11 1:A:163:LEU:HD22 17 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD11 1:A:163:LEU:HD22 17 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD12 1:A:163:LEU:HD23 17 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD12 1:A:163:LEU:HD23 17 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD12 1:A:163:LEU:HD22 17 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD12 1:A:163:LEU:HD22 17 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD12 1:A:163:LEU:HD23 17 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD13 1:A:163:LEU:HD23 17 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD13 1:A:163:LEU:HD23 17 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD13 1:A:163:LEU:HD21 17 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD13 1:A:163:LEU:HD23 17 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD13 1:A:163:LEU:HD23 17 0.08 (1,402) 1:A:160:LEU:HD13 1:A:163:LEU:HD23 17 0.08 (1,491) 1:A:37:ALA:H 1:A:85:LEU:HD12 3 0.08 (1,491) 1:A:37:ALA:H 1:A:85:LEU:HD12 3 0.08 (1,491) 1:A:37:ALA:H 1:A:85:LEU:HD12 3 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG11 1:A:63:GLY:H 4 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG11 1:A:63:GLY:H 4 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG11 1:A:63:GLY:H 4 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG11 1:A:63:GLY:H 7 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG11 1:A:63:GLY:H 11 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG11 1:A:63:GLY:H 4 0.08 (1,467) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD22 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD22 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD21 4 0.08 (1,462) 1: | (1,508) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:85:LEU:HD23 | 12 | 0.08 |
| (1,507) 1:A:37:ALA:H 1:A:57:VAL:HG23 8 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD11 1:A:163:LEU:HD21 17 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD11 1:A:163:LEU:HD22 17 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD11 1:A:163:LEU:HD22 17 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD12 1:A:163:LEU:HD23 17 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD12 1:A:163:LEU:HD21 17 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD12 1:A:163:LEU:HD21 17 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD12 1:A:163:LEU:HD23 17 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD13 1:A:163:LEU:HD23 17 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD13 1:A:163:LEU:HD23 17 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD13 1:A:163:LEU:HD22 17 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD13 1:A:163:LEU:HD22 17 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD13 1:A:163:LEU:HD23 17 0.08 (1,491) 1:A:37:ALA:H 1:A:85:LEU:HD12 17 0.08 (1,491) 1:A:37:ALA:H 1:A:85:LEU:HD12 3 0.08 (1,491) 1:A:37:ALA:H 1:A:85:LEU:HD12 3 0.08 (1,491) 1:A:37:ALA:H 1:A:85:LEU:HD12 3 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG11 1:A:63:GLY:H 4 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG11 1:A:63:GLY:H 4 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG11 1:A:63:GLY:H 4 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG11 1:A:63:GLY:H 7 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG11 1:A:63:GLY:H 1 0.08 (1,467) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD22 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD22 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD22 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD | (1,507) | 1:A:37:ALA:H | 1:A:57:VAL:HG21 | 8 | 0.08 |
| (1,502) 1:A:160:LEU:HD11 1:A:163:LEU:HD21 17 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD11 1:A:163:LEU:HD22 17 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD11 1:A:163:LEU:HD23 17 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD12 1:A:163:LEU:HD21 17 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD12 1:A:163:LEU:HD23 17 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD13 1:A:163:LEU:HD23 17 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD13 1:A:163:LEU:HD21 17 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD13 1:A:163:LEU:HD22 17 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD13 1:A:163:LEU:HD23 17 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD13 1:A:163:LEU:HD23 17 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD13 1:A:163:LEU:HD23 17 0.08 (1,491) 1:A:37:ALA:H 1:A:85:LEU:HD13 3 0.08 (1,491) 1:A:37:ALA:H 1:A:63:GLY:H 1 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL: | (1,507) | 1:A:37:ALA:H | 1:A:57:VAL:HG22 | 8 | 0.08 |
| (1,502) 1:A:160:LEU:HD11 1:A:163:LEU:HD22 17 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD11 1:A:163:LEU:HD23 17 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD12 1:A:163:LEU:HD21 17 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD12 1:A:163:LEU:HD22 17 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD12 1:A:163:LEU:HD22 17 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD13 1:A:163:LEU:HD22 17 0.08 (1,402) 1:A:160:LEU:HD13 1:A:163:LEU:HD23 17 0.08 (1,491) 1:A:37:ALA:H 1:A:85:LEU:HD12 3 0.08 (1,491) 1:A:37:ALA:H 1:A:85:LEU:HD11 3 0.08 (1,491) 1:A:37:ALA:H 1:A:85:LEU:HD12 3 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG11 1:A:63:GLY:H 4 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG11 1:A:63:GLY:H 4 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG12 1:A:63:GLY:H 4 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG13 1:A:63:GLY:H 4 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG11 1:A:63:GLY:H 7 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG12 1:A:63:GLY:H 7 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG11 1:A:63:GLY:H 7 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG13 1:A:63:GLY:H 7 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG13 1:A:63:GLY:H 7 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG13 1:A:63:GLY:H 11 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD21 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD21 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD22 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD23 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD23 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:153:LEU:HD23 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD22 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD23 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD22 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD22 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD22 4 0.08 (1,462) 1:A: | (1,507) | 1:A:37:ALA:H | 1:A:57:VAL:HG23 | 8 | 0.08 |
| (1,502) 1:A:160:LEU:HD11 1:A:163:LEU:HD23 17 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD12 1:A:163:LEU:HD21 17 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD12 1:A:163:LEU:HD22 17 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD12 1:A:163:LEU:HD23 17 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD13 1:A:163:LEU:HD23 17 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD13 1:A:163:LEU:HD21 17 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD13 1:A:163:LEU:HD22 17 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD13 1:A:163:LEU:HD22 17 0.08 (1,402) 1:A:160:LEU:HD13 1:A:163:LEU:HD23 17 0.08 (1,401) 1:A:37:ALA:H 1:A:85:LEU:HD12 17 0.08 (1,401) 1:A:37:ALA:H 1:A:85:LEU:HD11 3 0.08 (1,401) 1:A:37:ALA:H 1:A:85:LEU:HD12 3 0.08 (1,401) 1:A:62:VAL:HG11 1:A:63:GLY:H 4 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG11 1:A:63:GLY:H 4 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG12 1:A:63:GLY:H 4 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG13 1:A:63:GLY:H 4 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG13 1:A:63:GLY:H 7 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG13 1:A:63:GLY:H 7 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG12 1:A:63:GLY:H 7 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG13 1:A:63:GLY:H 7 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG13 1:A:63:GLY:H 7 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG13 1:A:63:GLY:H 11 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD21 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD21 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD22 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD23 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD23 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD23 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD21 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:153:LEU:HD22 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:153:LEU:HD24 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD22 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 | (1,502) | 1:A:160:LEU:HD11 | 1:A:163:LEU:HD21 | 17 | 0.08 |
| (1,502) 1:A:160:LEU:HD12 1:A:163:LEU:HD21 17 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD12 1:A:163:LEU:HD22 17 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD12 1:A:163:LEU:HD23 17 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD13 1:A:163:LEU:HD21 17 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD13 1:A:163:LEU:HD22 17 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD13 1:A:163:LEU:HD22 17 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD13 1:A:163:LEU:HD22 17 0.08 (1,401) 1:A:37:ALA:H 1:A:63:LEU:HD23 17 0.08 (1,401) 1:A:37:ALA:H 1:A:85:LEU:HD13 3 0.08 (1,401) 1:A:37:ALA:H 1:A:85:LEU:HD11 3 0.08 (1,401) 1:A:37:ALA:H 1:A:85:LEU:HD12 3 0.08 (1,401) 1:A:62:VAL:HG11 1:A:63:GLY:H 4 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG12 1:A:63:GLY:H 4 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG13 1:A:63:GLY:H 4 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG13 1:A:63:GLY:H 7 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG11 1:A:63:GLY:H 7 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG11 1:A:63:GLY:H 7 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG13 1:A:63:GLY:H 1 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG11 1:A:63:GLY:H 1 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG13 1:A:63:GLY:H 1 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG13 1:A:63:GLY:H 1 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD21 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD22 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD23 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD21 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD22 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD21 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD22 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD21 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD22 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD22 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD23 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD22 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:H | (1,502) | 1:A:160:LEU:HD11 | 1:A:163:LEU:HD22 | 17 | 0.08 |
| (1,502) 1:A:160:LEU:HD12 1:A:163:LEU:HD22 17 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD13 1:A:163:LEU:HD23 17 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD13 1:A:163:LEU:HD21 17 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD13 1:A:163:LEU:HD22 17 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD13 1:A:163:LEU:HD23 17 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD13 1:A:163:LEU:HD12 17 0.08 (1,491) 1:A:37:ALA:H 1:A:85:LEU:HD11 3 0.08 (1,491) 1:A:37:ALA:H 1:A:85:LEU:HD11 3 0.08 (1,491) 1:A:37:ALA:H 1:A:85:LEU:HD12 3 0.08 (1,491) 1:A:37:ALA:H 1:A:85:LEU:HD13 3 0.08 (1,491) 1:A:37:ALA:H 1:A:85:LEU:HD13 3 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG11 1:A:63:GLY:H 4 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG12 1:A:63:GLY:H 4 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG13 1:A:63:GLY:H 4 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG11 1:A:63:GLY:H 7 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG11 1:A:63:GLY:H 7 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG12 1:A:63:GLY:H 7 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG13 1:A:63:GLY:H 7 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG13 1:A:63:GLY:H 11 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG13 1:A:63:GLY:H 11 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG13 1:A:63:GLY:H 11 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD21 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD22 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD23 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD24 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD24 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD24 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:153:LEU:HD24 4 0.08 (1,462) 1:A: | (1,502) | 1:A:160:LEU:HD11 | 1:A:163:LEU:HD23 | 17 | 0.08 |
| (1,502) 1:A:160:LEU:HD12 1:A:163:LEU:HD23 17 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD13 1:A:163:LEU:HD21 17 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD13 1:A:163:LEU:HD22 17 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD13 1:A:163:LEU:HD23 17 0.08 (1,491) 1:A:37:ALA:H 1:A:85:LEU:HD11 3 0.08 (1,491) 1:A:37:ALA:H 1:A:85:LEU:HD11 3 0.08 (1,491) 1:A:37:ALA:H 1:A:85:LEU:HD12 3 0.08 (1,491) 1:A:37:ALA:H 1:A:85:LEU:HD13 3 0.08 (1,491) 1:A:37:ALA:H 1:A:85:LEU:HD13 3 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG11 1:A:63:GLY:H 4 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG12 1:A:63:GLY:H 4 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG13 1:A:63:GLY:H 4 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG11 1:A:63:GLY:H 7 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG11 1:A:63:GLY:H 7 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG12 1:A:63:GLY:H 7 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG12 1:A:63:GLY:H 7 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG11 1:A:63:GLY:H 7 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG13 1:A:63:GLY:H 11 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG13 1:A:63:GLY:H 11 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG11 1:A:63:GLY:H 11 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG11 1:A:63:GLY:H 11 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG11 1:A:63:GLY:H 11 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD21 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD22 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD22 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD22 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD22 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:153:LEU:HD24 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD14 1: | (1,502) | 1:A:160:LEU:HD12 | 1:A:163:LEU:HD21 | 17 | 0.08 |
| (1,502) 1:A:160:LEU:HD13 1:A:163:LEU:HD21 17 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD13 1:A:163:LEU:HD22 17 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD13 1:A:163:LEU:HD23 17 0.08 (1,491) 1:A:37:ALA:H 1:A:85:LEU:HD11 3 0.08 (1,491) 1:A:37:ALA:H 1:A:85:LEU:HD12 3 0.08 (1,491) 1:A:62:VAL:HG11 1:A:63:GLY:H 4 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG11 1:A:63:GLY:H 4 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG12 1:A:63:GLY:H 4 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG13 1:A:63:GLY:H 7 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG11 1:A:63:GLY:H 7 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG12 1:A:63:GLY:H 7 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG13 1:A:63:GLY:H 7 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG13 1:A:63:GLY:H 1 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG13 1:A:63:GLY:H | (1,502) | 1:A:160:LEU:HD12 | 1:A:163:LEU:HD22 | 17 | 0.08 |
| (1,502) 1:A:160:LEU:HD13 1:A:163:LEU:HD22 17 0.08 (1,502) 1:A:160:LEU:HD13 1:A:163:LEU:HD23 17 0.08 (1,491) 1:A:37:ALA:H 1:A:85:LEU:HD11 3 0.08 (1,491) 1:A:37:ALA:H 1:A:85:LEU:HD12 3 0.08 (1,491) 1:A:62:VAL:HG11 1:A:63:GLY:H 4 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG11 1:A:63:GLY:H 4 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG12 1:A:63:GLY:H 4 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG13 1:A:63:GLY:H 7 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG11 1:A:63:GLY:H 7 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG12 1:A:63:GLY:H 7 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG13 1:A:63:GLY:H 7 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG13 1:A:63:GLY:H 7 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG11 1:A:63:GLY:H 1 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG11 1:A:63:GLY:H <td< td=""><td>(1,502)</td><td>1:A:160:LEU:HD12</td><td>1:A:163:LEU:HD23</td><td>17</td><td>0.08</td></td<> | (1,502) | 1:A:160:LEU:HD12 | 1:A:163:LEU:HD23 | 17 | 0.08 |
| (1,502) 1:A:160:LEU:HD13 1:A:163:LEU:HD23 17 0.08 (1,491) 1:A:37:ALA:H 1:A:85:LEU:HD11 3 0.08 (1,491) 1:A:37:ALA:H 1:A:85:LEU:HD12 3 0.08 (1,491) 1:A:37:ALA:H 1:A:85:LEU:HD13 3 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG11 1:A:63:GLY:H 4 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG12 1:A:63:GLY:H 4 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG13 1:A:63:GLY:H 7 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG11 1:A:63:GLY:H 7 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG12 1:A:63:GLY:H 7 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG13 1:A:63:GLY:H 7 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG11 1:A:63:GLY:H 1 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG13 1:A:63:GLY:H 1 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG11 1:A:63:GLY:H 1 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG13 1:A:63:GLY:H 1 <td>(1,502)</td> <td>1:A:160:LEU:HD13</td> <td>1:A:163:LEU:HD21</td> <td>17</td> <td>0.08</td> | (1,502) | 1:A:160:LEU:HD13 | 1:A:163:LEU:HD21 | 17 | 0.08 |
| (1,491) 1:A:37:ALA:H 1:A:85:LEU:HD11 3 0.08 (1,491) 1:A:37:ALA:H 1:A:85:LEU:HD12 3 0.08 (1,491) 1:A:37:ALA:H 1:A:63:GLY:H 4 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG11 1:A:63:GLY:H 4 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG12 1:A:63:GLY:H 4 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG13 1:A:63:GLY:H 7 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG11 1:A:63:GLY:H 7 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG12 1:A:63:GLY:H 7 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG13 1:A:63:GLY:H 7 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG11 1:A:63:GLY:H 11 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG13 1:A:63:GLY:H 11 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG13 1:A:63:GLY:H 11 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD21 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD23 4 | (1,502) | 1:A:160:LEU:HD13 | 1:A:163:LEU:HD22 | 17 | 0.08 |
| (1,491) 1:A:37:ALA:H 1:A:85:LEU:HD12 3 0.08 (1,491) 1:A:37:ALA:H 1:A:85:LEU:HD13 3 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG11 1:A:63:GLY:H 4 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG12 1:A:63:GLY:H 4 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG13 1:A:63:GLY:H 4 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG11 1:A:63:GLY:H 7 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG12 1:A:63:GLY:H 7 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG13 1:A:63:GLY:H 7 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG13 1:A:63:GLY:H 1 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG13 1:A:63:GLY:H 11 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG13 1:A:63:GLY:H 11 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG13 1:A:63:GLY:H 11 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD21 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD22 <t< td=""><td>(1,502)</td><td>1:A:160:LEU:HD13</td><td>1:A:163:LEU:HD23</td><td>17</td><td>0.08</td></t<> | (1,502) | 1:A:160:LEU:HD13 | 1:A:163:LEU:HD23 | 17 | 0.08 |
| (1,491) 1:A:37:ALA:H 1:A:85:LEU:HD13 3 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG11 1:A:63:GLY:H 4 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG12 1:A:63:GLY:H 4 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG13 1:A:63:GLY:H 4 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG11 1:A:63:GLY:H 7 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG12 1:A:63:GLY:H 7 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG13 1:A:63:GLY:H 7 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG13 1:A:63:GLY:H 11 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG12 1:A:63:GLY:H 11 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG13 1:A:63:GLY:H 11 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG12 1:A:63:GLY:H 11 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG13 1:A:63:GLY:H 11 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG12 1:A:63:GLY:H 11 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD21 | (1,491) | 1:A:37:ALA:H | 1:A:85:LEU:HD11 | 3 | 0.08 |
| (1,467) 1:A:62:VAL:HG11 1:A:63:GLY:H 4 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG12 1:A:63:GLY:H 4 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG13 1:A:63:GLY:H 4 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG11 1:A:63:GLY:H 7 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG12 1:A:63:GLY:H 7 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG13 1:A:63:GLY:H 7 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG11 1:A:63:GLY:H 11 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG12 1:A:63:GLY:H 11 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG13 1:A:63:GLY:H 11 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG13 1:A:63:GLY:H 11 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG13 1:A:63:GLY:H 11 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG12 1:A:63:GLY:H 11 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD21 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:153:LEU:HD22 | (1,491) | 1:A:37:ALA:H | 1:A:85:LEU:HD12 | 3 | 0.08 |
| (1,467) 1:A:62:VAL:HG11 1:A:63:GLY:H 4 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG12 1:A:63:GLY:H 4 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG13 1:A:63:GLY:H 4 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG11 1:A:63:GLY:H 7 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG12 1:A:63:GLY:H 7 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG13 1:A:63:GLY:H 7 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG11 1:A:63:GLY:H 11 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG12 1:A:63:GLY:H 11 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG12 1:A:63:GLY:H 11 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG13 1:A:63:GLY:H 11 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG12 1:A:63:GLY:H 11 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD21 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD23 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:153:LEU:HD24 | (' | 1:A:37:ALA:H | 1:A:85:LEU:HD13 | 3 | 0.08 |
| (1,467) 1:A:62:VAL:HG13 1:A:63:GLY:H 4 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG11 1:A:63:GLY:H 7 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG12 1:A:63:GLY:H 7 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG12 1:A:63:GLY:H 7 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG11 1:A:63:GLY:H 11 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG12 1:A:63:GLY:H 11 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG13 1:A:63:GLY:H 11 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG13 1:A:63:GLY:H 11 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG13 1:A:63:GLY:H 11 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:63:GLY:H 11 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD22 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:153:LEU:HD23 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:153:LEU:HD23 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:153:LEU:HD23 </td <td></td> <td>1:A:62:VAL:HG11</td> <td>1:A:63:GLY:H</td> <td>4</td> <td>0.08</td> | | 1:A:62:VAL:HG11 | 1:A:63:GLY:H | 4 | 0.08 |
| (1,467) 1:A:62:VAL:HG11 1:A:63:GLY:H 7 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG12 1:A:63:GLY:H 7 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG13 1:A:63:GLY:H 7 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG11 1:A:63:GLY:H 11 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG12 1:A:63:GLY:H 11 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG13 1:A:63:GLY:H 11 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG13 1:A:63:GLY:H 11 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG13 1:A:63:GLY:H 11 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD21 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD23 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:153:LEU:HD21 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:153:LEU:HD23 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:153:LEU:HD21 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:153:LE | (1,467) | 1:A:62:VAL:HG12 | 1:A:63:GLY:H | 4 | 0.08 |
| (1,467) 1:A:62:VAL:HG12 1:A:63:GLY:H 7 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG13 1:A:63:GLY:H 7 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG11 1:A:63:GLY:H 11 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG12 1:A:63:GLY:H 11 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG13 1:A:63:GLY:H 11 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG13 1:A:63:GLY:H 11 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG13 1:A:63:GLY:H 11 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:63:GLY:H 11 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:63:GLY:H 11 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:63:GLY:H 11 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:153:LEU:HD23 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:153:LEU:HD23 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:153:LEU:HD23 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD | (1,467) | 1:A:62:VAL:HG13 | 1:A:63:GLY:H | 4 | 0.08 |
| (1,467) 1:A:62:VAL:HG13 1:A:63:GLY:H 7 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG11 1:A:63:GLY:H 11 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG12 1:A:63:GLY:H 11 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG13 1:A:63:GLY:H 11 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG13 1:A:63:GLY:H 11 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD22 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:153:LEU:HD23 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:153:LEU:HD22 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:153:LEU:HD23 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153: | (1,467) | 1:A:62:VAL:HG11 | 1:A:63:GLY:H | 7 | 0.08 |
| (1,467) 1:A:62:VAL:HG11 1:A:63:GLY:H 11 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG12 1:A:63:GLY:H 11 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG13 1:A:63:GLY:H 11 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG13 1:A:63:GLY:H 11 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD21 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD22 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:153:LEU:HD21 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:153:LEU:HD22 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:153:LEU:HD23 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:153:LEU:HD21 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:153:LEU:HD23 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD23 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD21 20 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD22 20 0.08 (1,462) 1:A: | (1,467) | 1:A:62:VAL:HG12 | 1:A:63:GLY:H | 7 | 0.08 |
| (1,467) 1:A:62:VAL:HG12 1:A:63:GLY:H 11 0.08 (1,467) 1:A:62:VAL:HG13 1:A:63:GLY:H 11 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD21 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD22 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD23 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:153:LEU:HD21 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:153:LEU:HD22 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:153:LEU:HD23 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:153:LEU:HD22 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:153:LEU:HD23 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD21 20 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD22 20 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD23 20 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:153:LEU:HD21 20 0.08 (1,462) | (1,467) | 1:A:62:VAL:HG13 | 1:A:63:GLY:H | 7 | 0.08 |
| (1,467) 1:A:62:VAL:HG13 1:A:63:GLY:H 11 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD21 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD22 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD23 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:153:LEU:HD21 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:153:LEU:HD22 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:153:LEU:HD23 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:153:LEU:HD21 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:153:LEU:HD22 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:153:LEU:HD23 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD21 20 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD22 20 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:153:LEU:HD21 20 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:153:LEU:HD22 20 0.08 (1,462) | (1,467) | 1:A:62:VAL:HG11 | 1:A:63:GLY:H | 11 | 0.08 |
| (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD21 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD22 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD23 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:153:LEU:HD21 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:153:LEU:HD22 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:153:LEU:HD23 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:153:LEU:HD21 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:153:LEU:HD22 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:153:LEU:HD23 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD21 20 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD22 20 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:153:LEU:HD21 20 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:153:LEU:HD21 20 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:153:LEU:HD21 20 0.08 | (1,467) | 1:A:62:VAL:HG12 | 1:A:63:GLY:H | 11 | 0.08 |
| (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD22 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD23 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:153:LEU:HD21 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:153:LEU:HD22 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:153:LEU:HD23 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:153:LEU:HD21 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:153:LEU:HD22 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:153:LEU:HD23 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD21 20 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD22 20 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:153:LEU:HD21 20 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:153:LEU:HD21 20 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:153:LEU:HD22 20 0.08 | (1,467) | 1:A:62:VAL:HG13 | 1:A:63:GLY:H | 11 | 0.08 |
| (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD23 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:153:LEU:HD21 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:153:LEU:HD22 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:153:LEU:HD23 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:153:LEU:HD21 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:153:LEU:HD22 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:153:LEU:HD23 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD21 20 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD22 20 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD23 20 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:153:LEU:HD21 20 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:153:LEU:HD21 20 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:153:LEU:HD22 20 0.08 | (1,462) | 1:A:129:LEU:HD11 | 1:A:153:LEU:HD21 | 4 | 0.08 |
| (1,462) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:153:LEU:HD21 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:153:LEU:HD22 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:153:LEU:HD23 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:153:LEU:HD21 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:153:LEU:HD22 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:153:LEU:HD23 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD21 20 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD22 20 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:153:LEU:HD21 20 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:153:LEU:HD21 20 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:153:LEU:HD21 20 0.08 | (1,462) | 1:A:129:LEU:HD11 | 1:A:153:LEU:HD22 | 4 | 0.08 |
| (1,462) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:153:LEU:HD22 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:153:LEU:HD23 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:153:LEU:HD21 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:153:LEU:HD22 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:153:LEU:HD23 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD21 20 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD22 20 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:153:LEU:HD23 20 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:153:LEU:HD21 20 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:153:LEU:HD21 20 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:153:LEU:HD22 20 0.08 | (1,462) | 1:A:129:LEU:HD11 | 1:A:153:LEU:HD23 | 4 | 0.08 |
| (1,462) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:153:LEU:HD23 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:153:LEU:HD21 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:153:LEU:HD22 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:153:LEU:HD23 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD21 20 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD22 20 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:153:LEU:HD21 20 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:153:LEU:HD21 20 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:153:LEU:HD22 20 0.08 | (1,462) | 1:A:129:LEU:HD12 | 1:A:153:LEU:HD21 | 4 | 0.08 |
| (1,462) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:153:LEU:HD21 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:153:LEU:HD22 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:153:LEU:HD23 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD21 20 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD22 20 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD23 20 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:153:LEU:HD21 20 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:153:LEU:HD22 20 0.08 | (1,462) | 1:A:129:LEU:HD12 | 1:A:153:LEU:HD22 | 4 | 0.08 |
| (1,462) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:153:LEU:HD21 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:153:LEU:HD22 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:153:LEU:HD23 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD21 20 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD22 20 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD23 20 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:153:LEU:HD21 20 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:153:LEU:HD22 20 0.08 | , , | 1:A:129:LEU:HD12 | 1:A:153:LEU:HD23 | 4 | 0.08 |
| (1,462) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:153:LEU:HD22 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:153:LEU:HD23 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD21 20 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD22 20 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD23 20 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:153:LEU:HD21 20 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:153:LEU:HD22 20 0.08 | _ ` ' | 1:A:129:LEU:HD13 | 1:A:153:LEU:HD21 | 4 | 0.08 |
| (1,462) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:153:LEU:HD23 4 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD21 20 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD22 20 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD23 20 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:153:LEU:HD21 20 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:153:LEU:HD22 20 0.08 | | 1:A:129:LEU:HD13 | 1:A:153:LEU:HD22 | 4 | 0.08 |
| (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD21 20 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD22 20 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD23 20 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:153:LEU:HD21 20 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:153:LEU:HD22 20 0.08 | ` ' | 1:A:129:LEU:HD13 | 1:A:153:LEU:HD23 | 4 | 0.08 |
| (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD22 20 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD23 20 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:153:LEU:HD21 20 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:153:LEU:HD22 20 0.08 | _ , , , | 1:A:129:LEU:HD11 | 1:A:153:LEU:HD21 | 20 | 0.08 |
| (1,462) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:153:LEU:HD23 20 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:153:LEU:HD21 20 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:153:LEU:HD22 20 0.08 | , , | 1:A:129:LEU:HD11 | 1:A:153:LEU:HD22 | 20 | 0.08 |
| (1,462) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:153:LEU:HD21 20 0.08 (1,462) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:153:LEU:HD22 20 0.08 | , , | 1:A:129:LEU:HD11 | 1:A:153:LEU:HD23 | 20 | 0.08 |
| (1,462) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:153:LEU:HD22 20 0.08 | (1,462) | 1:A:129:LEU:HD12 | 1:A:153:LEU:HD21 | 20 | 0.08 |
| | · · / | 1:A:129:LEU:HD12 | 1:A:153:LEU:HD22 | 20 | 0.08 |
| | (1,462) | | 1:A:153:LEU:HD23 | 20 | 0.08 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,462) | 1:A:129:LEU:HD13 | 1:A:153:LEU:HD21 | 20 | 0.08 |
| (1,462) | 1:A:129:LEU:HD13 | 1:A:153:LEU:HD22 | 20 | 0.08 |
| (1,462) | 1:A:129:LEU:HD13 | 1:A:153:LEU:HD23 | 20 | 0.08 |
| (1,455) | 1:A:121:LEU:HD21 | 1:A:160:LEU:HD21 | 7 | 0.08 |
| (1,455) | 1:A:121:LEU:HD21 | 1:A:160:LEU:HD22 | 7 | 0.08 |
| (1,455) | 1:A:121:LEU:HD21 | 1:A:160:LEU:HD23 | 7 | 0.08 |
| (1,455) | 1:A:121:LEU:HD22 | 1:A:160:LEU:HD21 | 7 | 0.08 |
| (1,455) | 1:A:121:LEU:HD22 | 1:A:160:LEU:HD22 | 7 | 0.08 |
| (1,455) | 1:A:121:LEU:HD22 | 1:A:160:LEU:HD23 | 7 | 0.08 |
| (1,455) | 1:A:121:LEU:HD23 | 1:A:160:LEU:HD21 | 7 | 0.08 |
| (1,455) | 1:A:121:LEU:HD23 | 1:A:160:LEU:HD22 | 7 | 0.08 |
| (1,455) | 1:A:121:LEU:HD23 | 1:A:160:LEU:HD23 | 7 | 0.08 |
| (1,453) | 1:A:118:TYR:H | 1:A:121:LEU:HD21 | 13 | 0.08 |
| (1,453) | 1:A:118:TYR:H | 1:A:121:LEU:HD22 | 13 | 0.08 |
| (1,453) | 1:A:118:TYR:H | 1:A:121:LEU:HD23 | 13 | 0.08 |
| (1,453) | 1:A:118:TYR:H | 1:A:121:LEU:HD21 | 14 | 0.08 |
| (1,453) | 1:A:118:TYR:H | 1:A:121:LEU:HD22 | 14 | 0.08 |
| (1,453) | 1:A:118:TYR:H | 1:A:121:LEU:HD23 | 14 | 0.08 |
| (1,424) | 1:A:128:ILE:HD11 | 1:A:191:LEU:HD21 | 20 | 0.08 |
| (1,424) | 1:A:128:ILE:HD11 | 1:A:191:LEU:HD22 | 20 | 0.08 |
| (1,424) | 1:A:128:ILE:HD11 | 1:A:191:LEU:HD23 | 20 | 0.08 |
| (1,424) | 1:A:128:ILE:HD12 | 1:A:191:LEU:HD21 | 20 | 0.08 |
| (1,424) | 1:A:128:ILE:HD12 | 1:A:191:LEU:HD22 | 20 | 0.08 |
| (1,424) | 1:A:128:ILE:HD12 | 1:A:191:LEU:HD23 | 20 | 0.08 |
| (1,424) | 1:A:128:ILE:HD13 | 1:A:191:LEU:HD21 | 20 | 0.08 |
| (1,424) | 1:A:128:ILE:HD13 | 1:A:191:LEU:HD22 | 20 | 0.08 |
| (1,424) | 1:A:128:ILE:HD13 | 1:A:191:LEU:HD23 | 20 | 0.08 |
| (1,422) | 1:A:47:LEU:HD11 | 1:A:99:VAL:HG11 | 12 | 0.08 |
| (1,422) | 1:A:47:LEU:HD11 | 1:A:99:VAL:HG12 | 12 | 0.08 |
| (1,422) | 1:A:47:LEU:HD11 | 1:A:99:VAL:HG13 | 12 | 0.08 |
| (1,422) | 1:A:47:LEU:HD12 | 1:A:99:VAL:HG11 | 12 | 0.08 |
| (1,422) | 1:A:47:LEU:HD12 | 1:A:99:VAL:HG12 | 12 | 0.08 |
| (1,422) | 1:A:47:LEU:HD12 | 1:A:99:VAL:HG13 | 12 | 0.08 |
| (1,422) | 1:A:47:LEU:HD13 | 1:A:99:VAL:HG11 | 12 | 0.08 |
| (1,422) | 1:A:47:LEU:HD13 | 1:A:99:VAL:HG12 | 12 | 0.08 |
| (1,422) | 1:A:47:LEU:HD13 | 1:A:99:VAL:HG13 | 12 | 0.08 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD21 | 1:A:195:LEU:HD21 | 14 | 0.08 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD21 | 1:A:195:LEU:HD22 | 14 | 0.08 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD21 | 1:A:195:LEU:HD23 | 14 | 0.08 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD22 | 1:A:195:LEU:HD21 | 14 | 0.08 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD22 | 1:A:195:LEU:HD22 | 14 | 0.08 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD22 | 1:A:195:LEU:HD23 | 14 | 0.08 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD23 | 1:A:195:LEU:HD21 | 14 | 0.08 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD23 | 1:A:195:LEU:HD22 | 14 | 0.08 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD23 | 1:A:195:LEU:HD23 | 14 | 0.08 |
| (1,399) | 1:A:34:LEU:H | 1:A:99:VAL:HG21 | 10 | 0.08 |
| (1,399) | 1:A:34:LEU:H | 1:A:99:VAL:HG22 | 10 | 0.08 |
| (1,399) | 1:A:34:LEU:H | 1:A:99:VAL:HG23 | 10 | 0.08 |
| (1,399) | 1:A:34:LEU:H | 1:A:99:VAL:HG21 | 14 | 0.08 |
| (1,399) | 1:A:34:LEU:H | 1:A:99:VAL:HG22 | 14 | 0.08 |
| (1,399) | 1:A:34:LEU:H | 1:A:99:VAL:HG23 | 14 | 0.08 |
| (1,390) | 1:A:47:LEU:H | 1:A:50:LEU:HD21 | 15 | 0.08 |
| (1,390) | 1:A:47:LEU:H | 1:A:50:LEU:HD22 | 15 | 0.08 |
| (1,390) | 1:A:47:LEU:H | 1:A:50:LEU:HD23 | 15 | 0.08 |
| (1,386) | 1:A:50:LEU:H | 1:A:76:VAL:HG21 | 10 | 0.08 |
| (1,386) | 1:A:50:LEU:H | 1:A:76:VAL:HG22 | 10 | 0.08 |
| (1,386) | 1:A:50:LEU:H | 1:A:76:VAL:HG23 | 10 | 0.08 |
| (1,382) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:167:ILE:HD11 | 6 | 0.08 |
| (1,382) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:167:ILE:HD12 | 6 | 0.08 |
| (1,382) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:167:ILE:HD13 | 6 | 0.08 |
| (1,382) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:167:ILE:HD11 | 8 | 0.08 |
| (1,382) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:167:ILE:HD12 | 8 | 0.08 |
| (1,382) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:167:ILE:HD13 | 8 | 0.08 |
| (1,377) | 1:A:33:ILE:HD11 | 1:A:47:LEU:HD21 | 17 | 0.08 |
| (1,377) | 1:A:33:ILE:HD11 | 1:A:47:LEU:HD22 | 17 | 0.08 |
| (1,377) | 1:A:33:ILE:HD11 | 1:A:47:LEU:HD23 | 17 | 0.08 |
| (1,377) | 1:A:33:ILE:HD12 | 1:A:47:LEU:HD21 | 17 | 0.08 |
| (1,377) | 1:A:33:ILE:HD12 | 1:A:47:LEU:HD22 | 17 | 0.08 |
| (1,377) | 1:A:33:ILE:HD12 | 1:A:47:LEU:HD23 | 17 | 0.08 |
| (1,377) | 1:A:33:ILE:HD13 | 1:A:47:LEU:HD21 | 17 | 0.08 |
| (1,377) | 1:A:33:ILE:HD13 | 1:A:47:LEU:HD22 | 17 | 0.08 |
| (1,377) | 1:A:33:ILE:HD13 | 1:A:47:LEU:HD23 | 17 | 0.08 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG21 | 1:A:128:ILE:HD11 | 4 | 0.08 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG21 | 1:A:128:ILE:HD12 | 4 | 0.08 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG21 | 1:A:128:ILE:HD13 | 4 | 0.08 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG22 | 1:A:128:ILE:HD11 | 4 | 0.08 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG22 | 1:A:128:ILE:HD12 | 4 | 0.08 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG22 | 1:A:128:ILE:HD13 | 4 | 0.08 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG23 | 1:A:128:ILE:HD11 | 4 | 0.08 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG23 | 1:A:128:ILE:HD12 | 4 | 0.08 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG23 | 1:A:128:ILE:HD13 | 4 | 0.08 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG21 | 1:A:128:ILE:HD11 | 15 | 0.08 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG21 | 1:A:128:ILE:HD12 | 15 | 0.08 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG21 | 1:A:128:ILE:HD13 | 15 | 0.08 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|-----------------|------------------|-------|---------------|
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG22 | 1:A:128:ILE:HD11 | 15 | 0.08 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG22 | 1:A:128:ILE:HD12 | 15 | 0.08 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG22 | 1:A:128:ILE:HD13 | 15 | 0.08 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG23 | 1:A:128:ILE:HD11 | 15 | 0.08 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG23 | 1:A:128:ILE:HD12 | 15 | 0.08 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG23 | 1:A:128:ILE:HD13 | 15 | 0.08 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG21 | 1:A:128:ILE:HD11 | 20 | 0.08 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG21 | 1:A:128:ILE:HD12 | 20 | 0.08 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG21 | 1:A:128:ILE:HD13 | 20 | 0.08 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG22 | 1:A:128:ILE:HD11 | 20 | 0.08 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG22 | 1:A:128:ILE:HD12 | 20 | 0.08 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG22 | 1:A:128:ILE:HD13 | 20 | 0.08 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG23 | 1:A:128:ILE:HD11 | 20 | 0.08 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG23 | 1:A:128:ILE:HD12 | 20 | 0.08 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG23 | 1:A:128:ILE:HD13 | 20 | 0.08 |
| (1,367) | 1:A:21:LEU:HD11 | 1:A:128:ILE:HD11 | 8 | 0.08 |
| (1,367) | 1:A:21:LEU:HD11 | 1:A:128:ILE:HD12 | 8 | 0.08 |
| (1,367) | 1:A:21:LEU:HD11 | 1:A:128:ILE:HD13 | 8 | 0.08 |
| (1,367) | 1:A:21:LEU:HD12 | 1:A:128:ILE:HD11 | 8 | 0.08 |
| (1,367) | 1:A:21:LEU:HD12 | 1:A:128:ILE:HD12 | 8 | 0.08 |
| (1,367) | 1:A:21:LEU:HD12 | 1:A:128:ILE:HD13 | 8 | 0.08 |
| (1,367) | 1:A:21:LEU:HD13 | 1:A:128:ILE:HD11 | 8 | 0.08 |
| (1,367) | 1:A:21:LEU:HD13 | 1:A:128:ILE:HD12 | 8 | 0.08 |
| (1,367) | 1:A:21:LEU:HD13 | 1:A:128:ILE:HD13 | 8 | 0.08 |
| (1,358) | 1:A:90:ILE:HD11 | 1:A:113:LEU:HD11 | 4 | 0.08 |
| (1,358) | 1:A:90:ILE:HD11 | 1:A:113:LEU:HD12 | 4 | 0.08 |
| (1,358) | 1:A:90:ILE:HD11 | 1:A:113:LEU:HD13 | 4 | 0.08 |
| (1,358) | 1:A:90:ILE:HD12 | 1:A:113:LEU:HD11 | 4 | 0.08 |
| (1,358) | 1:A:90:ILE:HD12 | 1:A:113:LEU:HD12 | 4 | 0.08 |
| (1,358) | 1:A:90:ILE:HD12 | 1:A:113:LEU:HD13 | 4 | 0.08 |
| (1,358) | 1:A:90:ILE:HD13 | 1:A:113:LEU:HD11 | 4 | 0.08 |
| (1,358) | 1:A:90:ILE:HD13 | 1:A:113:LEU:HD12 | 4 | 0.08 |
| (1,358) | 1:A:90:ILE:HD13 | 1:A:113:LEU:HD13 | 4 | 0.08 |
| (1,358) | 1:A:90:ILE:HD11 | 1:A:113:LEU:HD11 | 9 | 0.08 |
| (1,358) | 1:A:90:ILE:HD11 | 1:A:113:LEU:HD12 | 9 | 0.08 |
| (1,358) | 1:A:90:ILE:HD11 | 1:A:113:LEU:HD13 | 9 | 0.08 |
| (1,358) | 1:A:90:ILE:HD12 | 1:A:113:LEU:HD11 | 9 | 0.08 |
| (1,358) | 1:A:90:ILE:HD12 | 1:A:113:LEU:HD12 | 9 | 0.08 |
| (1,358) | 1:A:90:ILE:HD12 | 1:A:113:LEU:HD13 | 9 | 0.08 |
| (1,358) | 1:A:90:ILE:HD13 | 1:A:113:LEU:HD11 | 9 | 0.08 |
| (1,358) | 1:A:90:ILE:HD13 | 1:A:113:LEU:HD12 | 9 | 0.08 |
| (1,358) | 1:A:90:ILE:HD13 | 1:A:113:LEU:HD13 | 9 | 0.08 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,358) | 1:A:90:ILE:HD11 | 1:A:113:LEU:HD11 | 17 | 0.08 |
| (1,358) | 1:A:90:ILE:HD11 | 1:A:113:LEU:HD12 | 17 | 0.08 |
| (1,358) | 1:A:90:ILE:HD11 | 1:A:113:LEU:HD13 | 17 | 0.08 |
| (1,358) | 1:A:90:ILE:HD12 | 1:A:113:LEU:HD11 | 17 | 0.08 |
| (1,358) | 1:A:90:ILE:HD12 | 1:A:113:LEU:HD12 | 17 | 0.08 |
| (1,358) | 1:A:90:ILE:HD12 | 1:A:113:LEU:HD13 | 17 | 0.08 |
| (1,358) | 1:A:90:ILE:HD13 | 1:A:113:LEU:HD11 | 17 | 0.08 |
| (1,358) | 1:A:90:ILE:HD13 | 1:A:113:LEU:HD12 | 17 | 0.08 |
| (1,358) | 1:A:90:ILE:HD13 | 1:A:113:LEU:HD13 | 17 | 0.08 |
| (1,333) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:139:TYR:H | 11 | 0.08 |
| (1,333) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:139:TYR:H | 11 | 0.08 |
| (1,333) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:139:TYR:H | 11 | 0.08 |
| (1,295) | 1:A:153:LEU:H | 1:A:190:LEU:HD21 | 18 | 0.08 |
| (1,295) | 1:A:153:LEU:H | 1:A:190:LEU:HD22 | 18 | 0.08 |
| (1,295) | 1:A:153:LEU:H | 1:A:190:LEU:HD23 | 18 | 0.08 |
| (1,289) | 1:A:101:ILE:HD11 | 1:A:128:ILE:H | 8 | 0.08 |
| (1,289) | 1:A:101:ILE:HD12 | 1:A:128:ILE:H | 8 | 0.08 |
| (1,289) | 1:A:101:ILE:HD13 | 1:A:128:ILE:H | 8 | 0.08 |
| (1,289) | 1:A:101:ILE:HD11 | 1:A:128:ILE:H | 18 | 0.08 |
| (1,289) | 1:A:101:ILE:HD12 | 1:A:128:ILE:H | 18 | 0.08 |
| (1,289) | 1:A:101:ILE:HD13 | 1:A:128:ILE:H | 18 | 0.08 |
| (1,263) | 1:A:163:LEU:HD11 | 1:A:164:ASN:H | 13 | 0.08 |
| (1,263) | 1:A:163:LEU:HD12 | 1:A:164:ASN:H | 13 | 0.08 |
| (1,263) | 1:A:163:LEU:HD13 | 1:A:164:ASN:H | 13 | 0.08 |
| (1,263) | 1:A:163:LEU:HD11 | 1:A:164:ASN:H | 18 | 0.08 |
| (1,263) | 1:A:163:LEU:HD12 | 1:A:164:ASN:H | 18 | 0.08 |
| (1,263) | 1:A:163:LEU:HD13 | 1:A:164:ASN:H | 18 | 0.08 |
| (1,260) | 1:A:171:LEU:HD21 | 1:A:189:GLN:H | 5 | 0.08 |
| (1,260) | 1:A:171:LEU:HD22 | 1:A:189:GLN:H | 5 | 0.08 |
| (1,260) | 1:A:171:LEU:HD23 | 1:A:189:GLN:H | 5 | 0.08 |
| (1,250) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:84:ASN:H | 2 | 0.08 |
| (1,250) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:84:ASN:H | 2 | 0.08 |
| (1,250) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:84:ASN:H | 2 | 0.08 |
| (1,246) | 1:A:156:LEU:H | 1:A:190:LEU:HD21 | 2 | 0.08 |
| (1,246) | 1:A:156:LEU:H | 1:A:190:LEU:HD22 | 2 | 0.08 |
| (1,246) | 1:A:156:LEU:H | 1:A:190:LEU:HD23 | 2 | 0.08 |
| (1,233) | 1:A:54:VAL:HG11 | 1:A:55:THR:H | 5 | 0.08 |
| (1,233) | 1:A:54:VAL:HG12 | 1:A:55:THR:H | 5 | 0.08 |
| (1,233) | 1:A:54:VAL:HG13 | 1:A:55:THR:H | 5 | 0.08 |
| (1,229) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:147:LEU:HD21 | 14 | 0.08 |
| (1,229) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:147:LEU:HD22 | 14 | 0.08 |
| (1,229) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:147:LEU:HD23 | 14 | 0.08 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,229) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:147:LEU:HD21 | 20 | 0.08 |
| (1,229) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:147:LEU:HD22 | 20 | 0.08 |
| (1,229) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:147:LEU:HD23 | 20 | 0.08 |
| (1,226) | 1:A:57:VAL:HG11 | 1:A:82:GLN:H | 7 | 0.08 |
| (1,226) | 1:A:57:VAL:HG12 | 1:A:82:GLN:H | 7 | 0.08 |
| (1,226) | 1:A:57:VAL:HG13 | 1:A:82:GLN:H | 7 | 0.08 |
| (1,211) | 1:A:85:LEU:H | 1:A:88:PHE:H | 8 | 0.08 |
| (1,206) | 1:A:60:SER:H | 1:A:62:VAL:HG21 | 4 | 0.08 |
| (1,206) | 1:A:60:SER:H | 1:A:62:VAL:HG22 | 4 | 0.08 |
| (1,206) | 1:A:60:SER:H | 1:A:62:VAL:HG23 | 4 | 0.08 |
| (1,201) | 1:A:157:GLN:H | 1:A:190:LEU:HD21 | 8 | 0.08 |
| (1,201) | 1:A:157:GLN:H | 1:A:190:LEU:HD22 | 8 | 0.08 |
| (1,201) | 1:A:157:GLN:H | 1:A:190:LEU:HD23 | 8 | 0.08 |
| (1,201) | 1:A:157:GLN:H | 1:A:190:LEU:HD21 | 9 | 0.08 |
| (1,201) | 1:A:157:GLN:H | 1:A:190:LEU:HD22 | 9 | 0.08 |
| (1,201) | 1:A:157:GLN:H | 1:A:190:LEU:HD23 | 9 | 0.08 |
| (1,175) | 1:A:163:LEU:HD11 | 1:A:166:LEU:H | 3 | 0.08 |
| (1,175) | 1:A:163:LEU:HD12 | 1:A:166:LEU:H | 3 | 0.08 |
| (1,175) | 1:A:163:LEU:HD13 | 1:A:166:LEU:H | 3 | 0.08 |
| (1,163) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:81:VAL:H | 1 | 0.08 |
| (1,163) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:81:VAL:H | 1 | 0.08 |
| (1,163) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:81:VAL:H | 1 | 0.08 |
| (1,159) | 1:A:160:LEU:HD21 | 1:A:163:LEU:H | 17 | 0.08 |
| (1,159) | 1:A:160:LEU:HD22 | 1:A:163:LEU:H | 17 | 0.08 |
| (1,159) | 1:A:160:LEU:HD23 | 1:A:163:LEU:H | 17 | 0.08 |
| (1,153) | 1:A:57:VAL:H | 1:A:81:VAL:HG21 | 16 | 0.08 |
| (1,153) | 1:A:57:VAL:H | 1:A:81:VAL:HG22 | 16 | 0.08 |
| (1,153) | 1:A:57:VAL:H | 1:A:81:VAL:HG23 | 16 | 0.08 |
| (1,152) | 1:A:37:ALA:H | 1:A:57:VAL:H | 1 | 0.08 |
| (1,1117) | 1:A:167:ILE:H | 1:A:191:LEU:O | 7 | 0.08 |
| (1,1113) | 1:A:127:PHE:H | 1:A:192:GLY:O | 14 | 0.08 |
| (1,1099) | 1:A:124:GLY:O | 1:A:98:ILE:H | 20 | 0.08 |
| (1,1085) | 1:A:154:GLU:O | 1:A:158:SER:N | 14 | 0.08 |
| (1,108) | 1:A:145:LYS:H | 1:A:148:ASP:H | 2 | 0.08 |
| (1,108) | 1:A:145:LYS:H | 1:A:148:ASP:H | 3 | 0.08 |
| (1,108) | 1:A:145:LYS:H | 1:A:148:ASP:H | 12 | 0.08 |
| (1,108) | 1:A:145:LYS:H | 1:A:148:ASP:H | 14 | 0.08 |
| (1,1074) | 1:A:110:ARG:O | 1:A:114:TYR:H | 16 | 0.08 |
| (1,1070) | 1:A:108:SER:O | 1:A:112:GLN:H | 8 | 0.08 |
| (1,1070) | 1:A:108:SER:O | 1:A:112:GLN:H | 15 | 0.08 |
| (1,1046) | 1:A:46:PHE:O | 1:A:50:LEU:H | 15 | 0.08 |
| (1,1026) | 1:A:95:TRP:HE1 | 1:A:91:VAL:H | 6 | 0.08 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,1017) | 1:A:101:ILE:HA | 1:A:128:ILE:H | 2 | 0.08 |
| (1,1006) | 1:A:100:SER:H | 1:A:126:VAL:H | 4 | 0.08 |
| (1,1000) | 1:A:55:THR:H | 1:A:35:CYS:H | 14 | 0.08 |
| (1,994) | 1:A:79:THR:H | 1:A:54:VAL:H | 7 | 0.07 |
| (1,994) | 1:A:79:THR:H | 1:A:54:VAL:H | 10 | 0.07 |
| (1,994) | 1:A:79:THR:H | 1:A:54:VAL:H | 15 | 0.07 |
| (1,993) | 1:A:36:LEU:H | 1:A:99:VAL:H | 2 | 0.07 |
| (1,993) | 1:A:36:LEU:H | 1:A:99:VAL:H | 6 | 0.07 |
| (1,988) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:H | 7 | 0.07 |
| (1,988) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:H | 7 | 0.07 |
| (1,988) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:H | 7 | 0.07 |
| (1,984) | 1:A:132:PHE:H | 1:A:150:LEU:HD21 | 17 | 0.07 |
| (1,984) | 1:A:132:PHE:H | 1:A:150:LEU:HD22 | 17 | 0.07 |
| (1,984) | 1:A:132:PHE:H | 1:A:150:LEU:HD23 | 17 | 0.07 |
| (1,974) | 1:A:128:ILE:H | 1:A:129:LEU:HD21 | 16 | 0.07 |
| (1,974) | 1:A:128:ILE:H | 1:A:129:LEU:HD22 | 16 | 0.07 |
| (1,974) | 1:A:128:ILE:H | 1:A:129:LEU:HD23 | 16 | 0.07 |
| (1,972) | 1:A:85:LEU:HD21 | 1:A:89:ASP:H | 1 | 0.07 |
| (1,972) | 1:A:85:LEU:HD22 | 1:A:89:ASP:H | 1 | 0.07 |
| (1,972) | 1:A:85:LEU:HD23 | 1:A:89:ASP:H | 1 | 0.07 |
| (1,964) | 1:A:116:LYS:H | 1:A:117:VAL:HG21 | 2 | 0.07 |
| (1,964) | 1:A:116:LYS:H | 1:A:117:VAL:HG22 | 2 | 0.07 |
| (1,964) | 1:A:116:LYS:H | 1:A:117:VAL:HG23 | 2 | 0.07 |
| (1,964) | 1:A:116:LYS:H | 1:A:117:VAL:HG21 | 5 | 0.07 |
| (1,964) | 1:A:116:LYS:H | 1:A:117:VAL:HG22 | 5 | 0.07 |
| (1,964) | 1:A:116:LYS:H | 1:A:117:VAL:HG23 | 5 | 0.07 |
| (1,962) | 1:A:26:ASN:H | 1:A:28:ILE:HD11 | 15 | 0.07 |
| (1,962) | 1:A:26:ASN:H | 1:A:28:ILE:HD12 | 15 | 0.07 |
| (1,962) | 1:A:26:ASN:H | 1:A:28:ILE:HD13 | 15 | 0.07 |
| (1,954) | 1:A:70:LEU:H | 1:A:78:ILE:HD11 | 14 | 0.07 |
| (1,954) | 1:A:70:LEU:H | 1:A:78:ILE:HD12 | 14 | 0.07 |
| (1,954) | 1:A:70:LEU:H | 1:A:78:ILE:HD13 | 14 | 0.07 |
| (1,954) | 1:A:70:LEU:H | 1:A:78:ILE:HD11 | 20 | 0.07 |
| (1,954) | 1:A:70:LEU:H | 1:A:78:ILE:HD12 | 20 | 0.07 |
| (1,954) | 1:A:70:LEU:H | 1:A:78:ILE:HD13 | 20 | 0.07 |
| (1,907) | 1:A:33:ILE:H | 1:A:54:VAL:HG21 | 6 | 0.07 |
| (1,907) | 1:A:33:ILE:H | 1:A:54:VAL:HG22 | 6 | 0.07 |
| (1,907) | 1:A:33:ILE:H | 1:A:54:VAL:HG23 | 6 | 0.07 |
| (1,902) | 1:A:153:LEU:HD11 | 1:A:169:ASN:H | 5 | 0.07 |
| (1,902) | 1:A:153:LEU:HD12 | 1:A:169:ASN:H | 5 | 0.07 |
| (1,902) | 1:A:153:LEU:HD13 | 1:A:169:ASN:H | 5 | 0.07 |
| (1,902) | 1:A:153:LEU:HD11 | 1:A:169:ASN:H | 16 | 0.07 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,902) | 1:A:153:LEU:HD12 | 1:A:169:ASN:H | 16 | 0.07 |
| (1,902) | 1:A:153:LEU:HD13 | 1:A:169:ASN:H | 16 | 0.07 |
| (1,897) | 1:A:163:LEU:HD21 | 1:A:193:GLN:H | 4 | 0.07 |
| (1,897) | 1:A:163:LEU:HD22 | 1:A:193:GLN:H | 4 | 0.07 |
| (1,897) | 1:A:163:LEU:HD23 | 1:A:193:GLN:H | 4 | 0.07 |
| (1,897) | 1:A:163:LEU:HD21 | 1:A:193:GLN:H | 7 | 0.07 |
| (1,897) | 1:A:163:LEU:HD22 | 1:A:193:GLN:H | 7 | 0.07 |
| (1,897) | 1:A:163:LEU:HD23 | 1:A:193:GLN:H | 7 | 0.07 |
| (1,891) | 1:A:125:GLY:H | 1:A:163:LEU:HD21 | 2 | 0.07 |
| (1,891) | 1:A:125:GLY:H | 1:A:163:LEU:HD22 | 2 | 0.07 |
| (1,891) | 1:A:125:GLY:H | 1:A:163:LEU:HD23 | 2 | 0.07 |
| (1,891) | 1:A:125:GLY:H | 1:A:163:LEU:HD21 | 12 | 0.07 |
| (1,891) | 1:A:125:GLY:H | 1:A:163:LEU:HD22 | 12 | 0.07 |
| (1,891) | 1:A:125:GLY:H | 1:A:163:LEU:HD23 | 12 | 0.07 |
| (1,848) | 1:A:91:VAL:HG21 | 1:A:95:TRP:HE1 | 16 | 0.07 |
| (1,848) | 1:A:91:VAL:HG22 | 1:A:95:TRP:HE1 | 16 | 0.07 |
| (1,848) | 1:A:91:VAL:HG23 | 1:A:95:TRP:HE1 | 16 | 0.07 |
| (1,840) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:121:LEU:H | 8 | 0.07 |
| (1,840) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:121:LEU:H | 8 | 0.07 |
| (1,840) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:121:LEU:H | 8 | 0.07 |
| (1,831) | 1:A:117:VAL:HG11 | 1:A:118:TYR:H | 5 | 0.07 |
| (1,831) | 1:A:117:VAL:HG12 | 1:A:118:TYR:H | 5 | 0.07 |
| (1,831) | 1:A:117:VAL:HG13 | 1:A:118:TYR:H | 5 | 0.07 |
| (1,831) | 1:A:117:VAL:HG11 | 1:A:118:TYR:H | 12 | 0.07 |
| (1,831) | 1:A:117:VAL:HG12 | 1:A:118:TYR:H | 12 | 0.07 |
| (1,831) | 1:A:117:VAL:HG13 | 1:A:118:TYR:H | 12 | 0.07 |
| (1,823) | 1:A:23:SER:H | 1:A:24:VAL:HG21 | 10 | 0.07 |
| (1,823) | 1:A:23:SER:H | 1:A:24:VAL:HG22 | 10 | 0.07 |
| (1,823) | 1:A:23:SER:H | 1:A:24:VAL:HG23 | 10 | 0.07 |
| (1,815) | 1:A:170:ASN:H | 1:A:171:LEU:HD21 | 15 | 0.07 |
| (1,815) | 1:A:170:ASN:H | 1:A:171:LEU:HD22 | 15 | 0.07 |
| (1,815) | 1:A:170:ASN:H | 1:A:171:LEU:HD23 | 15 | 0.07 |
| (1,815) | 1:A:170:ASN:H | 1:A:171:LEU:HD21 | 19 | 0.07 |
| (1,815) | 1:A:170:ASN:H | 1:A:171:LEU:HD22 | 19 | 0.07 |
| (1,815) | 1:A:170:ASN:H | 1:A:171:LEU:HD23 | 19 | 0.07 |
| (1,811) | 1:A:146:ASP:H | 1:A:147:LEU:HD11 | 1 | 0.07 |
| (1,811) | 1:A:146:ASP:H | 1:A:147:LEU:HD12 | 1 | 0.07 |
| (1,811) | 1:A:146:ASP:H | 1:A:147:LEU:HD13 | 1 | 0.07 |
| (1,810) | 1:A:136:GLN:H | 1:A:147:LEU:HD11 | 15 | 0.07 |
| (1,810) | 1:A:136:GLN:H | 1:A:147:LEU:HD12 | 15 | 0.07 |
| (1,810) | 1:A:136:GLN:H | 1:A:147:LEU:HD13 | 15 | 0.07 |
| (1,798) | 1:A:86:ALA:H | 1:A:109:LEU:HD11 | 15 | 0.07 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,798) | 1:A:86:ALA:H | 1:A:109:LEU:HD12 | 15 | 0.07 |
| (1,798) | 1:A:86:ALA:H | 1:A:109:LEU:HD13 | 15 | 0.07 |
| (1,781) | 1:A:126:VAL:HG11 | 1:A:194:LYS:H | 13 | 0.07 |
| (1,781) | 1:A:126:VAL:HG12 | 1:A:194:LYS:H | 13 | 0.07 |
| (1,781) | 1:A:126:VAL:HG13 | 1:A:194:LYS:H | 13 | 0.07 |
| (1,778) | 1:A:166:LEU:H | 1:A:191:LEU:HD11 | 2 | 0.07 |
| (1,778) | 1:A:166:LEU:H | 1:A:191:LEU:HD12 | 2 | 0.07 |
| (1,778) | 1:A:166:LEU:H | 1:A:191:LEU:HD13 | 2 | 0.07 |
| (1,778) | 1:A:166:LEU:H | 1:A:191:LEU:HD11 | 7 | 0.07 |
| (1,778) | 1:A:166:LEU:H | 1:A:191:LEU:HD12 | 7 | 0.07 |
| (1,778) | 1:A:166:LEU:H | 1:A:191:LEU:HD13 | 7 | 0.07 |
| (1,773) | 1:A:126:VAL:HG21 | 1:A:166:LEU:HD11 | 7 | 0.07 |
| (1,773) | 1:A:126:VAL:HG21 | 1:A:166:LEU:HD12 | 7 | 0.07 |
| (1,773) | 1:A:126:VAL:HG21 | 1:A:166:LEU:HD13 | 7 | 0.07 |
| (1,773) | 1:A:126:VAL:HG22 | 1:A:166:LEU:HD11 | 7 | 0.07 |
| (1,773) | 1:A:126:VAL:HG22 | 1:A:166:LEU:HD12 | 7 | 0.07 |
| (1,773) | 1:A:126:VAL:HG22 | 1:A:166:LEU:HD13 | 7 | 0.07 |
| (1,773) | 1:A:126:VAL:HG23 | 1:A:166:LEU:HD11 | 7 | 0.07 |
| (1,773) | 1:A:126:VAL:HG23 | 1:A:166:LEU:HD12 | 7 | 0.07 |
| (1,773) | 1:A:126:VAL:HG23 | 1:A:166:LEU:HD13 | 7 | 0.07 |
| (1,769) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:121:LEU:HD11 | 9 | 0.07 |
| (1,769) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:121:LEU:HD12 | 9 | 0.07 |
| (1,769) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:121:LEU:HD13 | 9 | 0.07 |
| (1,769) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:121:LEU:HD11 | 9 | 0.07 |
| (1,769) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:121:LEU:HD12 | 9 | 0.07 |
| (1,769) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:121:LEU:HD13 | 9 | 0.07 |
| (1,769) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:121:LEU:HD11 | 9 | 0.07 |
| (1,769) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:121:LEU:HD12 | 9 | 0.07 |
| (1,769) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:121:LEU:HD13 | 9 | 0.07 |
| (1,750) | 1:A:81:VAL:HG21 | 1:A:85:LEU:HD21 | 5 | 0.07 |
| (1,750) | 1:A:81:VAL:HG21 | 1:A:85:LEU:HD22 | 5 | 0.07 |
| (1,750) | 1:A:81:VAL:HG21 | 1:A:85:LEU:HD23 | 5 | 0.07 |
| (1,750) | 1:A:81:VAL:HG22 | 1:A:85:LEU:HD21 | 5 | 0.07 |
| (1,750) | 1:A:81:VAL:HG22 | 1:A:85:LEU:HD22 | 5 | 0.07 |
| (1,750) | 1:A:81:VAL:HG22 | 1:A:85:LEU:HD23 | 5 | 0.07 |
| (1,750) | 1:A:81:VAL:HG23 | 1:A:85:LEU:HD21 | 5 | 0.07 |
| (1,750) | 1:A:81:VAL:HG23 | 1:A:85:LEU:HD22 | 5 | 0.07 |
| (1,750) | 1:A:81:VAL:HG23 | 1:A:85:LEU:HD23 | 5 | 0.07 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD21 | 1:A:99:VAL:HG21 | 14 | 0.07 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD21 | 1:A:99:VAL:HG22 | 14 | 0.07 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD21 | 1:A:99:VAL:HG23 | 14 | 0.07 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD22 | 1:A:99:VAL:HG21 | 14 | 0.07 |



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

| (1,741) 1:A:47:LEU:HD22 1:A:99:VAL:HG22 14 0.07 (1,741) 1:A:47:LEU:HD23 1:A:99:VAL:HG23 14 0.07 (1,741) 1:A:47:LEU:HD23 1:A:99:VAL:HG21 14 0.07 (1,741) 1:A:47:LEU:HD23 1:A:99:VAL:HG22 14 0.07 (1,741) 1:A:47:LEU:HD23 1:A:99:VAL:HG23 14 0.07 (1,732) 1:A:147:LEU:HD21 1:A:150:LEU:HD21 5 0.07 (1,732) 1:A:147:LEU:HD21 1:A:150:LEU:HD22 5 0.07 (1,732) 1:A:147:LEU:HD22 1:A:150:LEU:HD23 5 0.07 (1,732) 1:A:147:LEU:HD22 1:A:150:LEU:HD23 5 0.07 (1,732) 1:A:147:LEU:HD22 1:A:150:LEU:HD23 5 0.07 (1,732) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:150:LEU:HD23 5 0.07 (1,732) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:150:LEU:HD21 5 0.07 (1,732) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:150:LEU:HD23 5 0.07 (1,732) 1:A:147:LEU:HD | Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|--|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,741) 1:A:47:LEU:HD23 1:A:99:VAL:HG21 14 0.07 (1,741) 1:A:47:LEU:HD23 1:A:99:VAL:HG22 14 0.07 (1,741) 1:A:47:LEU:HD23 1:A:99:VAL:HG22 14 0.07 (1,732) 1:A:147:LEU:HD21 1:A:150:LEU:HD21 5 0.07 (1,732) 1:A:147:LEU:HD21 1:A:150:LEU:HD22 5 0.07 (1,732) 1:A:147:LEU:HD21 1:A:150:LEU:HD22 5 0.07 (1,732) 1:A:147:LEU:HD21 1:A:150:LEU:HD23 5 0.07 (1,732) 1:A:147:LEU:HD22 1:A:150:LEU:HD23 5 0.07 (1,732) 1:A:147:LEU:HD22 1:A:150:LEU:HD21 5 0.07 (1,732) 1:A:147:LEU:HD22 1:A:150:LEU:HD22 5 0.07 (1,732) 1:A:147:LEU:HD22 1:A:150:LEU:HD22 5 0.07 (1,732) 1:A:147:LEU:HD22 1:A:150:LEU:HD23 5 0.07 (1,732) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:150:LEU:HD23 5 0.07 (1,732) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:150:LEU:HD22 5 0.07 (1,732) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:150:LEU:HD22 5 0.07 (1,732) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:150:LEU:HD22 5 0.07 (1,732) 1:A:147:LEU:HD13 1:A:150:LEU:HD22 5 0.07 (1,732) 1:A:147:LEU:HD13 1:A:150:LEU:HD22 6 0.07 (1,733) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:150:LEU:HD22 6 0.07 (1,733) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:150:LEU:HD22 6 0.07 (1,733) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:150:LEU:HD22 6 0.07 (1,733) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:150:LEU:HD23 6 0.07 (1,733) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:150:LEU:HD23 6 0.07 (1,733) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:150:LEU:HD23 6 0.07 (1,733) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:150:LEU:HD23 6 0.07 (1,733) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:150:LEU:HD23 6 0.07 (1,733) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:150:LEU:HD23 1 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:187:LEU:HD11 1 1.00 (1,679) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:187:LEU:HD11 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 | (1,741) | 1:A:47:LEU:HD22 | 1:A:99:VAL:HG22 | 14 | 0.07 |
| (1,74) 1:A:47:LEU:HD23 1:A:99:VAL:HG22 14 0.07 (1,741) 1:A:47:LEU:HD21 1:A:150:LEU:HD21 5 0.07 (1,732) 1:A:147:LEU:HD21 1:A:150:LEU:HD22 5 0.07 (1,732) 1:A:147:LEU:HD21 1:A:150:LEU:HD23 5 0.07 (1,732) 1:A:147:LEU:HD21 1:A:150:LEU:HD23 5 0.07 (1,732) 1:A:147:LEU:HD22 1:A:150:LEU:HD23 5 0.07 (1,732) 1:A:147:LEU:HD22 1:A:150:LEU:HD21 5 0.07 (1,732) 1:A:147:LEU:HD22 1:A:150:LEU:HD22 5 0.07 (1,732) 1:A:147:LEU:HD22 1:A:150:LEU:HD22 5 0.07 (1,732) 1:A:147:LEU:HD22 1:A:150:LEU:HD23 5 0.07 (1,732) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:150:LEU:HD22 5 0.07 (1,732) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:150:LEU:HD22 6 0.07 (1,733) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:150:LEU:HD21 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:150:LEU:HD22 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:150:LEU:HD22 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:150:LEU:HD22 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:150:LEU:HD21 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:150:LEU:HD23 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:150:LEU:HD23 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:150:LEU:HD23 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:150:LEU:HD22 6 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:187:LEU:HD12 14 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:187:LEU:HD11 14 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:187:LEU:HD11 14 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:187:LEU:HD11 14 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:187:LEU:HD13 14 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:187:LEU:HD11 14 0.07 (1,635) 1:A:113:LEU:H 1:A:14:TYR:H 10 0.07 (1,635) 1:A:113:LEU:H 1:A:14:TYR:H 10 0.07 (1,635) 1:A:133:ALA:H 1:A:14:TYR:H 10 0.07 (1,635) 1:A:133:ALA:H 1:A:14:TYR:H 10 0.07 (1,635 | (1,741) | 1:A:47:LEU:HD22 | 1:A:99:VAL:HG23 | 14 | 0.07 |
| (1,74) 1:A:47:LEU:HD23 1:A:99:VAL:HG23 14 0.07 (1,732) 1:A:147:LEU:HD21 1:A:150:LEU:HD21 5 0.07 (1,732) 1:A:147:LEU:HD21 1:A:150:LEU:HD22 5 0.07 (1,732) 1:A:147:LEU:HD21 1:A:150:LEU:HD22 5 0.07 (1,732) 1:A:147:LEU:HD21 1:A:150:LEU:HD23 5 0.07 (1,732) 1:A:147:LEU:HD22 1:A:150:LEU:HD21 5 0.07 (1,732) 1:A:147:LEU:HD22 1:A:150:LEU:HD22 5 0.07 (1,732) 1:A:147:LEU:HD22 1:A:150:LEU:HD23 5 0.07 (1,732) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:150:LEU:HD23 5 0.07 (1,732) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:150:LEU:HD23 5 0.07 (1,732) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:150:LEU:HD21 5 0.07 (1,732) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:150:LEU:HD21 5 0.07 (1,732) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:150:LEU:HD22 5 0.07 (1,732) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:150:LEU:HD22 6 0.07 (1,732) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:150:LEU:HD23 5 0.07 (1,732) 1:A:147:LEU:HD13 1:A:150:LEU:HD23 6 0.07 (1,733) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:150:LEU:HD22 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:150:LEU:HD22 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:150:LEU:HD23 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:150:LEU:HD23 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:150:LEU:HD23 6 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:187:LEU:HD11 14 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:187:LEU:HD13 14 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:187:LEU:HD13 14 0.07 (1,635) 1:A:133:LEU:H 1:A:14:TYR:H 1 0.07 (1,635) 1:A:133: | (1,741) | 1:A:47:LEU:HD23 | 1:A:99:VAL:HG21 | 14 | 0.07 |
| (1,732) 1:A:147:LEU:HD21 1:A:150:LEU:HD21 5 0.07 (1,732) 1:A:147:LEU:HD21 1:A:150:LEU:HD22 5 0.07 (1,732) 1:A:147:LEU:HD21 1:A:150:LEU:HD23 5 0.07 (1,732) 1:A:147:LEU:HD22 1:A:150:LEU:HD22 5 0.07 (1,732) 1:A:147:LEU:HD22 1:A:150:LEU:HD23 5 0.07 (1,732) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:150:LEU:HD21 5 0.07 (1,732) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:150:LEU:HD21 5 0.07 (1,732) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:150:LEU:HD22 5 0.07 (1,732) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:150:LEU:HD23 5 0.07 (1,732) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:150:LEU:HD23 5 0.07 (1,713) 1:A:147:LEU:HD11 1:A:150:LEU:HD23 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:150:LEU:HD23 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:150:LEU:HD23 6 0.07 (1,713) 1:A:137:L | (1,741) | 1:A:47:LEU:HD23 | 1:A:99:VAL:HG22 | 14 | 0.07 |
| 1,732 | (1,741) | 1:A:47:LEU:HD23 | 1:A:99:VAL:HG23 | 14 | 0.07 |
| (1,732) 1:A:147:LEU:HD21 1:A:150:LEU:HD23 5 0.07 (1,732) 1:A:147:LEU:HD22 1:A:150:LEU:HD21 5 0.07 (1,732) 1:A:147:LEU:HD22 1:A:150:LEU:HD22 5 0.07 (1,732) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:150:LEU:HD23 5 0.07 (1,732) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:150:LEU:HD22 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:150:LEU:HD23 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:150:LEU:HD23 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:150:LEU:HD23 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:150:LEU:HD22 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:150:LEU:HD23 6 0.07 (1,713) 1:A:137:L | (1,732) | 1:A:147:LEU:HD21 | 1:A:150:LEU:HD21 | 5 | 0.07 |
| (1,732) 1:A:147:LEU:HD22 1:A:150:LEU:HD21 5 0.07 (1,732) 1:A:147:LEU:HD22 1:A:150:LEU:HD22 5 0.07 (1,732) 1:A:147:LEU:HD22 1:A:150:LEU:HD23 5 0.07 (1,732) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:150:LEU:HD21 5 0.07 (1,732) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:150:LEU:HD22 5 0.07 (1,732) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:150:LEU:HD22 5 0.07 (1,732) 1:A:147:LEU:HD11 1:A:150:LEU:HD22 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:150:LEU:HD22 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:150:LEU:HD21 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:150:LEU:HD23 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:150:LEU:HD23 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:150:LEU:HD23 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:150:LEU:HD23 6 0.07 (1,713) 1:A:137:L | (1,732) | 1:A:147:LEU:HD21 | 1:A:150:LEU:HD22 | 5 | 0.07 |
| (1,732) 1:A:147:LEU:HD22 1:A:150:LEU:HD22 5 0.07 (1,732) 1:A:147:LEU:HD22 1:A:150:LEU:HD23 5 0.07 (1,732) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:150:LEU:HD21 5 0.07 (1,732) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:150:LEU:HD22 5 0.07 (1,732) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:150:LEU:HD23 5 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:150:LEU:HD21 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:150:LEU:HD22 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:150:LEU:HD23 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:150:LEU:HD21 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:150:LEU:HD22 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:150:LEU:HD23 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:150:LEU:HD22 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:150:LEU:HD21 6 0.07 (1,713) 1:A:137:L | (1,732) | 1:A:147:LEU:HD21 | 1:A:150:LEU:HD23 | 5 | 0.07 |
| (1,732) 1:A:147:LEU:HD22 1:A:150:LEU:HD23 5 0.07 (1,732) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:150:LEU:HD21 5 0.07 (1,732) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:150:LEU:HD22 5 0.07 (1,732) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:150:LEU:HD23 5 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:150:LEU:HD21 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:150:LEU:HD22 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:150:LEU:HD23 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:150:LEU:HD23 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:150:LEU:HD22 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:150:LEU:HD23 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:150:LEU:HD22 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:150:LEU:HD23 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:150:LEU:HD23 6 0.07 (1,713) 1:A:147:L | (1,732) | 1:A:147:LEU:HD22 | 1:A:150:LEU:HD21 | 5 | 0.07 |
| (1,732) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:150:LEU:HD21 5 0.07 (1,732) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:150:LEU:HD22 5 0.07 (1,732) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:150:LEU:HD23 5 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:150:LEU:HD21 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:150:LEU:HD22 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:150:LEU:HD23 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:150:LEU:HD23 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:150:LEU:HD22 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:150:LEU:HD23 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:150:LEU:HD23 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:150:LEU:HD22 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:150:LEU:HD23 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:150:LEU:HD23 6 0.07 (1,679) 1:A:171:L | (1,732) | 1:A:147:LEU:HD22 | 1:A:150:LEU:HD22 | 5 | 0.07 |
| (1,732) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:150:LEU:HD22 5 0.07 (1,732) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:150:LEU:HD23 5 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:150:LEU:HD21 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:150:LEU:HD22 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:150:LEU:HD23 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:150:LEU:HD21 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:150:LEU:HD22 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:150:LEU:HD23 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:150:LEU:HD23 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:150:LEU:HD24 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:150:LEU:HD22 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:150:LEU:HD22 6 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:187:LEU:HD13 14 0.07 (1,679) 1:A:171: | (1,732) | 1:A:147:LEU:HD22 | 1:A:150:LEU:HD23 | 5 | 0.07 |
| (1,732) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:150:LEU:HD23 5 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:150:LEU:HD21 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:150:LEU:HD22 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:150:LEU:HD23 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:150:LEU:HD21 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:150:LEU:HD22 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:150:LEU:HD23 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:150:LEU:HD23 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:150:LEU:HD22 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:150:LEU:HD23 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:150:LEU:HD22 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:150:LEU:HD23 6 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:187:LEU:HD13 14 0.07 (1,679) 1:A:171: | (1,732) | 1:A:147:LEU:HD23 | 1:A:150:LEU:HD21 | 5 | 0.07 |
| (1,732) 1:A:147:LEU:HD23 1:A:150:LEU:HD23 5 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:150:LEU:HD21 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:150:LEU:HD22 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:150:LEU:HD23 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:150:LEU:HD22 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:150:LEU:HD23 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:150:LEU:HD23 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:150:LEU:HD23 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:150:LEU:HD22 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:150:LEU:HD22 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:150:LEU:HD22 6 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:187:LEU:HD13 14 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:187:LEU:HD13 14 0.07 (1,679) 1:A:171 | (1,732) | 1:A:147:LEU:HD23 | 1:A:150:LEU:HD22 | 5 | 0.07 |
| (1,713) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:150:LEU:HD21 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:150:LEU:HD22 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:150:LEU:HD23 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:150:LEU:HD21 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:150:LEU:HD23 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:150:LEU:HD23 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:150:LEU:HD21 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:150:LEU:HD22 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:150:LEU:HD23 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:150:LEU:HD23 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:150:LEU:HD23 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:151:LEU:HD13 1:A:1007 1 (1,679) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:187:LEU:HD13 14 0.07 (1,679) 1:A: | | 1:A:147:LEU:HD23 | 1:A:150:LEU:HD23 | 5 | 0.07 |
| (1,713) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:150:LEU:HD23 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:150:LEU:HD21 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:150:LEU:HD22 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:150:LEU:HD23 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:150:LEU:HD21 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:150:LEU:HD22 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:150:LEU:HD23 6 0.07 (1,713) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:150:LEU:HD23 6 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:187:LEU:HD12 14 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:187:LEU:HD13 14 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:187:LEU:HD13 14 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:187:LEU:HD13 14 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:187:LEU:HD13 14 0.07 (1,679) 1:A: | / | 1:A:137:LEU:HD11 | 1:A:150:LEU:HD21 | 6 | 0.07 |
| (1,713) 1:A:137:LEU:HD11 1:A:150:LEU:HD23 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:150:LEU:HD21 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:150:LEU:HD22 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:150:LEU:HD23 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:150:LEU:HD21 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:150:LEU:HD22 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:150:LEU:HD23 6 0.07 (1,713) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:150:LEU:HD23 6 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:187:LEU:HD12 14 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:187:LEU:HD13 14 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:187:LEU:HD13 14 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:187:LEU:HD13 14 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:187:LEU:HD13 14 0.07 (1,679) 1:A: | (1,713) | 1:A:137:LEU:HD11 | 1:A:150:LEU:HD22 | 6 | 0.07 |
| (1,713) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:150:LEU:HD21 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:150:LEU:HD22 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:150:LEU:HD23 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:150:LEU:HD21 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:150:LEU:HD22 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:150:LEU:HD23 6 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:187:LEU:HD11 14 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:187:LEU:HD12 14 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:187:LEU:HD13 14 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:187:LEU:HD13 14 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:187:LEU:HD13 14 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:187:LEU:HD13 14 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:187:LEU:HD13 14 0.07 (1,679) 1: | (' / | 1:A:137:LEU:HD11 | 1:A:150:LEU:HD23 | 6 | 0.07 |
| (1,713) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:150:LEU:HD22 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:150:LEU:HD23 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:150:LEU:HD21 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:150:LEU:HD22 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:150:LEU:HD23 6 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:187:LEU:HD11 14 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:187:LEU:HD12 14 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:187:LEU:HD13 14 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:187:LEU:HD11 14 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:187:LEU:HD13 14 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:187:LEU:HD13 14 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:187:LEU:HD13 14 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:187:LEU:HD13 14 0.07 (1,679) 1 | / | 1:A:137:LEU:HD12 | 1:A:150:LEU:HD21 | 6 | 0.07 |
| (1,713) 1:A:137:LEU:HD12 1:A:150:LEU:HD23 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:150:LEU:HD21 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:150:LEU:HD22 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:150:LEU:HD23 6 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:187:LEU:HD11 14 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:187:LEU:HD12 14 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:187:LEU:HD13 14 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:187:LEU:HD11 14 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:187:LEU:HD13 14 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:187:LEU:HD13 14 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:187:LEU:HD11 14 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:187:LEU:HD13 14 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:187:LEU:HD13 14 0.07 (1,679) | (1,713) | 1:A:137:LEU:HD12 | 1:A:150:LEU:HD22 | 6 | 0.07 |
| (1,713) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:150:LEU:HD21 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:150:LEU:HD22 6 0.07 (1,713) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:150:LEU:HD23 6 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:187:LEU:HD11 14 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:187:LEU:HD12 14 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:187:LEU:HD13 14 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:187:LEU:HD11 14 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:187:LEU:HD13 14 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:187:LEU:HD13 14 0.07 (1,679) <td< td=""><td> /</td><td>1:A:137:LEU:HD12</td><td>1:A:150:LEU:HD23</td><td>6</td><td>0.07</td></td<> | / | 1:A:137:LEU:HD12 | 1:A:150:LEU:HD23 | 6 | 0.07 |
| (1,713) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:150:LEU:HD23 6 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:187:LEU:HD11 14 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:187:LEU:HD12 14 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:187:LEU:HD13 14 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:187:LEU:HD11 14 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:187:LEU:HD13 14 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:187:LEU:HD13 14 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:187:LEU:HD11 14 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:187:LEU:HD12 14 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:187:LEU:HD13 14 0.07 (1,635) 1:A:113:LEU:H 1:A:114:TYR:H 1 0.07 (1,635) 1:A:113:LEU:H 1:A:114:TYR:H 6 0.07 (1,635) 1:A:13:LEU:H 1:A:114:TYR:H 10 0.07 (1,635) 1:A:13:LEU:H | | 1:A:137:LEU:HD13 | 1:A:150:LEU:HD21 | 6 | 0.07 |
| (1,713) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:150:LEU:HD23 6 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:187:LEU:HD11 14 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:187:LEU:HD12 14 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:187:LEU:HD13 14 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:187:LEU:HD11 14 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:187:LEU:HD13 14 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:187:LEU:HD13 14 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:187:LEU:HD11 14 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:187:LEU:HD12 14 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:187:LEU:HD13 14 0.07 (1,635) 1:A:113:LEU:HD13 1:A:114:TYR:H 1 0.07 (1,635) 1:A:113:LEU:H 1:A:114:TYR:H 6 0.07 (1,635) 1:A:113:LEU:H 1:A:114:TYR:H 10 0.07 (1,635) 1:A:13:LEU:H </td <td>(1,713)</td> <td>1:A:137:LEU:HD13</td> <td>1:A:150:LEU:HD22</td> <td>6</td> <td>0.07</td> | (1,713) | 1:A:137:LEU:HD13 | 1:A:150:LEU:HD22 | 6 | 0.07 |
| (1,679) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:187:LEU:HD12 14 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:187:LEU:HD13 14 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:187:LEU:HD11 14 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:187:LEU:HD12 14 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:187:LEU:HD13 14 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:187:LEU:HD12 14 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:187:LEU:HD13 14 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:187:LEU:HD13 14 0.07 (1,679) 1:A:113:LEU:HD13 14 0.07 (1,635) 1:A:113:LEU:HD13 1:A:187:LEU:HD13 14 0.07 (1,635) 1:A:113:LEU:H 1:A:114:TYR:H 1 0.07 (1,635) 1:A:113:LEU:H 1:A:114:TYR:H 1 0.07 (1,635) 1:A:113:LEU:H 1:A:114:TYR:H 14 0.07 (1,635) 1:A:113:LEU:H 1:A:114:TYR:H 17 0.07 (1,635) 1:A:133:ALA:H 1:A:1 | (1,713) | 1:A:137:LEU:HD13 | 1:A:150:LEU:HD23 | 6 | 0.07 |
| (1,679) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:187:LEU:HD13 14 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:187:LEU:HD11 14 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:187:LEU:HD12 14 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:187:LEU:HD13 14 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:187:LEU:HD11 14 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:187:LEU:HD12 14 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:187:LEU:HD13 14 0.07 (1,635) 1:A:113:LEU:HD13 1:A:114:TYR:H 1 0.07 (1,635) 1:A:113:LEU:H 1:A:114:TYR:H 1 0.07 (1,635) 1:A:113:LEU:H 1:A:114:TYR:H 10 0.07 (1,635) 1:A:113:LEU:H 1:A:114:TYR:H 14 0.07 (1,635) 1:A:113:LEU:H 1:A:114:TYR:H 10 0.07 (1,635) 1:A:13:LEU:H 1:A:114:TYR:H 10 0.07 (1,635) 1:A:13:A:145:LYS:H 1:A:147:LEU:H 0.07 (1,628) 1:A:13:A:145:LYS:H < | (1,679) | 1:A:171:LEU:HD11 | 1:A:187:LEU:HD11 | 14 | 0.07 |
| (1,679) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:187:LEU:HD11 14 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:187:LEU:HD12 14 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:187:LEU:HD13 14 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:187:LEU:HD11 14 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:187:LEU:HD12 14 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:187:LEU:HD13 14 0.07 (1,635) 1:A:113:LEU:H 1:A:114:TYR:H 1 0.07 (1,635) 1:A:113:LEU:H 1:A:114:TYR:H 6 0.07 (1,635) 1:A:113:LEU:H 1:A:114:TYR:H 14 0.07 (1,635) 1:A:113:LEU:H 1:A:114:TYR:H 14 0.07 (1,635) 1:A:113:LEU:H 1:A:114:TYR:H 10 0.07 (1,635) 1:A:113:LEU:H 1:A:114:TYR:H 17 0.07 (1,636) 1:A:113:LEU:H 1:A:114:TYR:H 10 0.07 (1,628) 1:A:13:A:145:LYS:H 1:A: | (1,679) | 1:A:171:LEU:HD11 | 1:A:187:LEU:HD12 | 14 | 0.07 |
| (1,679) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:187:LEU:HD12 14 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:187:LEU:HD13 14 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:187:LEU:HD11 14 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:187:LEU:HD12 14 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:187:LEU:HD13 14 0.07 (1,635) 1:A:113:LEU:H 1:A:114:TYR:H 1 0.07 (1,635) 1:A:113:LEU:H 1:A:114:TYR:H 6 0.07 (1,635) 1:A:113:LEU:H 1:A:114:TYR:H 10 0.07 (1,635) 1:A:113:LEU:H 1:A:114:TYR:H 14 0.07 (1,635) 1:A:113:LEU:H 1:A:114:TYR:H 14 0.07 (1,635) 1:A:13:LEU:H 1:A:114:TYR:H 17 0.07 (1,635) 1:A:13:LEU:H 1:A:14:TYR:H 17 0.07 (1,635) 1:A:13:LEU:H 1:A:14:TYR:H 10 0.07 (1,635) 1:A:13:LEU:H 1:A:14:TYR:H 10 0.07 (1,636) 1:A:13:LEU:H 1:A:14:TYR: | (1,679) | 1:A:171:LEU:HD11 | 1:A:187:LEU:HD13 | 14 | 0.07 |
| (1,679) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:187:LEU:HD13 14 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:187:LEU:HD11 14 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:187:LEU:HD12 14 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:187:LEU:HD13 14 0.07 (1,635) 1:A:113:LEU:H 1:A:114:TYR:H 1 0.07 (1,635) 1:A:113:LEU:H 1:A:114:TYR:H 6 0.07 (1,635) 1:A:113:LEU:H 1:A:114:TYR:H 10 0.07 (1,635) 1:A:113:LEU:H 1:A:114:TYR:H 14 0.07 (1,635) 1:A:113:LEU:H 1:A:114:TYR:H 17 0.07 (1,635) 1:A:13:LEU:H 1:A:114:TYR:H 17 0.07 (1,635) 1:A:13:LEU:H 1:A:14:TYR:H 17 0.07 (1,635) 1:A:13:LEU:H 1:A:14:TYR:H 17 0.07 (1,636) 1:A:13:LEU:H 1:A:14:TYE:H 10 0.07 (1,628) 1:A:13:A:14:LEU:H 1:A:136:GLN:H 6 0.07 (1,603) 1:A:58:ASP:H 1:A:18:LEU:H </td <td>(1,679)</td> <td>1:A:171:LEU:HD12</td> <td>1:A:187:LEU:HD11</td> <td>14</td> <td>0.07</td> | (1,679) | 1:A:171:LEU:HD12 | 1:A:187:LEU:HD11 | 14 | 0.07 |
| (1,679) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:187:LEU:HD11 14 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:187:LEU:HD12 14 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:187:LEU:HD13 14 0.07 (1,635) 1:A:113:LEU:H 1:A:114:TYR:H 1 0.07 (1,635) 1:A:113:LEU:H 1:A:114:TYR:H 6 0.07 (1,635) 1:A:113:LEU:H 1:A:114:TYR:H 10 0.07 (1,635) 1:A:113:LEU:H 1:A:114:TYR:H 14 0.07 (1,635) 1:A:113:LEU:H 1:A:114:TYR:H 17 0.07 (1,628) 1:A:13:LEU:H 1:A:147:LEU:H 10 0.07 (1,623) 1:A:133:ALA:H 1:A:136:GLN:H 6 0.07 (1,603) 1:A:58:ASP:H 1:A:81:VAL:H 12 0.07 (1,591) 1:A:171:LEU:H 1:A:188:ILE:H 6 0.07 | (1,679) | 1:A:171:LEU:HD12 | 1:A:187:LEU:HD12 | 14 | 0.07 |
| (1,679) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:187:LEU:HD12 14 0.07 (1,679) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:187:LEU:HD13 14 0.07 (1,635) 1:A:113:LEU:H 1:A:114:TYR:H 1 0.07 (1,635) 1:A:113:LEU:H 1:A:114:TYR:H 6 0.07 (1,635) 1:A:113:LEU:H 1:A:114:TYR:H 10 0.07 (1,635) 1:A:113:LEU:H 1:A:114:TYR:H 17 0.07 (1,635) 1:A:13:LEU:H 1:A:114:TYR:H 17 0.07 (1,635) 1:A:13:LEU:H 1:A:147:LEU:H 10 0.07 (1,628) 1:A:13:ALA:H 1:A:147:LEU:H 10 0.07 (1,623) 1:A:133:ALA:H 1:A:136:GLN:H 6 0.07 (1,603) 1:A:58:ASP:H 1:A:81:VAL:H 12 0.07 (1,591) 1:A:171:LEU:H 1:A:188:ILE:H 6 0.07 | (1,679) | 1:A:171:LEU:HD12 | 1:A:187:LEU:HD13 | 14 | 0.07 |
| (1,679) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:187:LEU:HD13 14 0.07 (1,635) 1:A:113:LEU:H 1:A:114:TYR:H 1 0.07 (1,635) 1:A:113:LEU:H 1:A:114:TYR:H 6 0.07 (1,635) 1:A:113:LEU:H 1:A:114:TYR:H 10 0.07 (1,635) 1:A:113:LEU:H 1:A:114:TYR:H 17 0.07 (1,635) 1:A:113:LEU:H 1:A:114:TYR:H 17 0.07 (1,628) 1:A:145:LYS:H 1:A:147:LEU:H 10 0.07 (1,623) 1:A:133:ALA:H 1:A:136:GLN:H 6 0.07 (1,603) 1:A:58:ASP:H 1:A:81:VAL:H 12 0.07 (1,591) 1:A:171:LEU:H 1:A:188:ILE:H 6 0.07 | (1,679) | 1:A:171:LEU:HD13 | 1:A:187:LEU:HD11 | 14 | 0.07 |
| (1,635) 1:A:113:LEU:H 1:A:114:TYR:H 1 0.07 (1,635) 1:A:113:LEU:H 1:A:114:TYR:H 6 0.07 (1,635) 1:A:113:LEU:H 1:A:114:TYR:H 10 0.07 (1,635) 1:A:113:LEU:H 1:A:114:TYR:H 14 0.07 (1,635) 1:A:113:LEU:H 1:A:114:TYR:H 17 0.07 (1,628) 1:A:145:LYS:H 1:A:147:LEU:H 10 0.07 (1,623) 1:A:133:ALA:H 1:A:136:GLN:H 6 0.07 (1,603) 1:A:58:ASP:H 1:A:81:VAL:H 12 0.07 (1,591) 1:A:171:LEU:H 1:A:188:ILE:H 6 0.07 | (1,679) | 1:A:171:LEU:HD13 | 1:A:187:LEU:HD12 | 14 | 0.07 |
| (1,635) 1:A:113:LEU:H 1:A:114:TYR:H 6 0.07 (1,635) 1:A:113:LEU:H 1:A:114:TYR:H 10 0.07 (1,635) 1:A:113:LEU:H 1:A:114:TYR:H 14 0.07 (1,635) 1:A:113:LEU:H 1:A:114:TYR:H 17 0.07 (1,628) 1:A:145:LYS:H 1:A:147:LEU:H 10 0.07 (1,623) 1:A:133:ALA:H 1:A:136:GLN:H 6 0.07 (1,603) 1:A:58:ASP:H 1:A:81:VAL:H 12 0.07 (1,591) 1:A:171:LEU:H 1:A:188:ILE:H 6 0.07 | (1,679) | 1:A:171:LEU:HD13 | 1:A:187:LEU:HD13 | 14 | 0.07 |
| (1,635) 1:A:113:LEU:H 1:A:114:TYR:H 6 0.07 (1,635) 1:A:113:LEU:H 1:A:114:TYR:H 10 0.07 (1,635) 1:A:113:LEU:H 1:A:114:TYR:H 14 0.07 (1,635) 1:A:113:LEU:H 1:A:114:TYR:H 17 0.07 (1,628) 1:A:145:LYS:H 1:A:147:LEU:H 10 0.07 (1,623) 1:A:133:ALA:H 1:A:136:GLN:H 6 0.07 (1,603) 1:A:58:ASP:H 1:A:81:VAL:H 12 0.07 (1,591) 1:A:171:LEU:H 1:A:188:ILE:H 6 0.07 | | 1:A:113:LEU:H | 1:A:114:TYR:H | 1 | 0.07 |
| (1,635) 1:A:113:LEU:H 1:A:114:TYR:H 10 0.07 (1,635) 1:A:113:LEU:H 1:A:114:TYR:H 14 0.07 (1,635) 1:A:13:LEU:H 1:A:114:TYR:H 17 0.07 (1,628) 1:A:145:LYS:H 1:A:147:LEU:H 10 0.07 (1,623) 1:A:133:ALA:H 1:A:136:GLN:H 6 0.07 (1,603) 1:A:58:ASP:H 1:A:81:VAL:H 12 0.07 (1,591) 1:A:171:LEU:H 1:A:188:ILE:H 6 0.07 | | 1:A:113:LEU:H | 1:A:114:TYR:H | 6 | 0.07 |
| (1,635) 1:A:113:LEU:H 1:A:114:TYR:H 14 0.07 (1,635) 1:A:113:LEU:H 1:A:114:TYR:H 17 0.07 (1,628) 1:A:145:LYS:H 1:A:147:LEU:H 10 0.07 (1,623) 1:A:133:ALA:H 1:A:136:GLN:H 6 0.07 (1,603) 1:A:58:ASP:H 1:A:81:VAL:H 12 0.07 (1,591) 1:A:171:LEU:H 1:A:188:ILE:H 6 0.07 | | 1:A:113:LEU:H | 1:A:114:TYR:H | 10 | |
| (1,635) 1:A:113:LEU:H 1:A:114:TYR:H 17 0.07 (1,628) 1:A:145:LYS:H 1:A:147:LEU:H 10 0.07 (1,623) 1:A:133:ALA:H 1:A:136:GLN:H 6 0.07 (1,603) 1:A:58:ASP:H 1:A:81:VAL:H 12 0.07 (1,591) 1:A:171:LEU:H 1:A:188:ILE:H 6 0.07 | , | 1:A:113:LEU:H | 1:A:114:TYR:H | | |
| (1,628) 1:A:145:LYS:H 1:A:147:LEU:H 10 0.07 (1,623) 1:A:133:ALA:H 1:A:136:GLN:H 6 0.07 (1,603) 1:A:58:ASP:H 1:A:81:VAL:H 12 0.07 (1,591) 1:A:171:LEU:H 1:A:188:ILE:H 6 0.07 | | 1:A:113:LEU:H | 1:A:114:TYR:H | 17 | 0.07 |
| (1,623) 1:A:133:ALA:H 1:A:136:GLN:H 6 0.07 (1,603) 1:A:58:ASP:H 1:A:81:VAL:H 12 0.07 (1,591) 1:A:171:LEU:H 1:A:188:ILE:H 6 0.07 | ` ' | 1:A:145:LYS:H | 1:A:147:LEU:H | 10 | 0.07 |
| (1,603) 1:A:58:ASP:H 1:A:81:VAL:H 12 0.07 (1,591) 1:A:171:LEU:H 1:A:188:ILE:H 6 0.07 | | 1:A:133:ALA:H | 1:A:136:GLN:H | | 0.07 |
| (1,591) 1:A:171:LEU:H 1:A:188:ILE:H 6 0.07 | | | 1:A:81:VAL:H | 12 | 0.07 |
| | · · / | | | | |
| | (1,579) | 1:A:169:ASN:H | 1:A:189:GLN:H | 18 | 0.07 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,574) | 1:A:36:LEU:HD11 | 1:A:85:LEU:HD21 | 11 | 0.07 |
| (1,574) | 1:A:36:LEU:HD11 | 1:A:85:LEU:HD22 | 11 | 0.07 |
| (1,574) | 1:A:36:LEU:HD11 | 1:A:85:LEU:HD23 | 11 | 0.07 |
| (1,574) | 1:A:36:LEU:HD12 | 1:A:85:LEU:HD21 | 11 | 0.07 |
| (1,574) | 1:A:36:LEU:HD12 | 1:A:85:LEU:HD22 | 11 | 0.07 |
| (1,574) | 1:A:36:LEU:HD12 | 1:A:85:LEU:HD23 | 11 | 0.07 |
| (1,574) | 1:A:36:LEU:HD13 | 1:A:85:LEU:HD21 | 11 | 0.07 |
| (1,574) | 1:A:36:LEU:HD13 | 1:A:85:LEU:HD22 | 11 | 0.07 |
| (1,574) | 1:A:36:LEU:HD13 | 1:A:85:LEU:HD23 | 11 | 0.07 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:85:LEU:HD11 | 5 | 0.07 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:85:LEU:HD12 | 5 | 0.07 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:85:LEU:HD13 | 5 | 0.07 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:85:LEU:HD11 | 5 | 0.07 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:85:LEU:HD12 | 5 | 0.07 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:85:LEU:HD13 | 5 | 0.07 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:85:LEU:HD11 | 5 | 0.07 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:85:LEU:HD12 | 5 | 0.07 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:85:LEU:HD13 | 5 | 0.07 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:85:LEU:HD11 | 8 | 0.07 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:85:LEU:HD12 | 8 | 0.07 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:85:LEU:HD13 | 8 | 0.07 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:85:LEU:HD11 | 8 | 0.07 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:85:LEU:HD12 | 8 | 0.07 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:85:LEU:HD13 | 8 | 0.07 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:85:LEU:HD11 | 8 | 0.07 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:85:LEU:HD12 | 8 | 0.07 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:85:LEU:HD13 | 8 | 0.07 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:85:LEU:HD11 | 15 | 0.07 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:85:LEU:HD12 | 15 | 0.07 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:85:LEU:HD13 | 15 | 0.07 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:85:LEU:HD11 | 15 | 0.07 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:85:LEU:HD12 | 15 | 0.07 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:85:LEU:HD13 | 15 | 0.07 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:85:LEU:HD11 | 15 | 0.07 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:85:LEU:HD12 | 15 | 0.07 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:85:LEU:HD13 | 15 | 0.07 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD11 | 1:A:54:VAL:HG21 | 8 | 0.07 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD11 | 1:A:54:VAL:HG22 | 8 | 0.07 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD11 | 1:A:54:VAL:HG23 | 8 | 0.07 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD12 | 1:A:54:VAL:HG21 | 8 | 0.07 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD12 | 1:A:54:VAL:HG22 | 8 | 0.07 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD12 | 1:A:54:VAL:HG23 | 8 | 0.07 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD13 | 1:A:54:VAL:HG21 | 8 | 0.07 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD13 | 1:A:54:VAL:HG22 | 8 | 0.07 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD13 | 1:A:54:VAL:HG23 | 8 | 0.07 |
| (1,560) | 1:A:47:LEU:HD21 | 1:A:50:LEU:HD21 | 4 | 0.07 |
| (1,560) | 1:A:47:LEU:HD21 | 1:A:50:LEU:HD22 | 4 | 0.07 |
| (1,560) | 1:A:47:LEU:HD21 | 1:A:50:LEU:HD23 | 4 | 0.07 |
| (1,560) | 1:A:47:LEU:HD22 | 1:A:50:LEU:HD21 | 4 | 0.07 |
| (1,560) | 1:A:47:LEU:HD22 | 1:A:50:LEU:HD22 | 4 | 0.07 |
| (1,560) | 1:A:47:LEU:HD22 | 1:A:50:LEU:HD23 | 4 | 0.07 |
| (1,560) | 1:A:47:LEU:HD23 | 1:A:50:LEU:HD21 | 4 | 0.07 |
| (1,560) | 1:A:47:LEU:HD23 | 1:A:50:LEU:HD22 | 4 | 0.07 |
| (1,560) | 1:A:47:LEU:HD23 | 1:A:50:LEU:HD23 | 4 | 0.07 |
| (1,558) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:109:LEU:HD11 | 1 | 0.07 |
| (1,558) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:109:LEU:HD12 | 1 | 0.07 |
| (1,558) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:109:LEU:HD13 | 1 | 0.07 |
| (1,558) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:109:LEU:HD11 | 1 | 0.07 |
| (1,558) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:109:LEU:HD12 | 1 | 0.07 |
| (1,558) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:109:LEU:HD13 | 1 | 0.07 |
| (1,558) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:109:LEU:HD11 | 1 | 0.07 |
| (1,558) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:109:LEU:HD12 | 1 | 0.07 |
| (1,558) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:109:LEU:HD13 | 1 | 0.07 |
| (1,558) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:109:LEU:HD11 | 11 | 0.07 |
| (1,558) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:109:LEU:HD12 | 11 | 0.07 |
| (1,558) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:109:LEU:HD13 | 11 | 0.07 |
| (1,558) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:109:LEU:HD11 | 11 | 0.07 |
| (1,558) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:109:LEU:HD12 | 11 | 0.07 |
| (1,558) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:109:LEU:HD13 | 11 | 0.07 |
| (1,558) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:109:LEU:HD11 | 11 | 0.07 |
| (1,558) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:109:LEU:HD12 | 11 | 0.07 |
| (1,558) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:109:LEU:HD13 | 11 | 0.07 |
| (1,552) | 1:A:24:VAL:HG11 | 1:A:126:VAL:HG11 | 3 | 0.07 |
| (1,552) | 1:A:24:VAL:HG11 | 1:A:126:VAL:HG12 | 3 | 0.07 |
| (1,552) | 1:A:24:VAL:HG11 | 1:A:126:VAL:HG13 | 3 | 0.07 |
| (1,552) | 1:A:24:VAL:HG12 | 1:A:126:VAL:HG11 | 3 | 0.07 |
| (1,552) | 1:A:24:VAL:HG12 | 1:A:126:VAL:HG12 | 3 | 0.07 |
| (1,552) | 1:A:24:VAL:HG12 | 1:A:126:VAL:HG13 | 3 | 0.07 |
| (1,552) | 1:A:24:VAL:HG13 | 1:A:126:VAL:HG11 | 3 | 0.07 |
| (1,552) | 1:A:24:VAL:HG13 | 1:A:126:VAL:HG12 | 3 | 0.07 |
| (1,552) | 1:A:24:VAL:HG13 | 1:A:126:VAL:HG13 | 3 | 0.07 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD21 | 1:A:81:VAL:HG11 | 15 | 0.07 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD21 | 1:A:81:VAL:HG12 | 15 | 0.07 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD21 | 1:A:81:VAL:HG13 | 15 | 0.07 |



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

| (1,547) 1:A:36:LEU:HD22 1:A:81:VAL:HG11 15 0.07 (1,547) 1:A:36:LEU:HD22 1:A:81:VAL:HG12 15 0.07 (1,547) 1:A:36:LEU:HD22 1:A:81:VAL:HG11 15 0.07 (1,547) 1:A:36:LEU:HD23 1:A:81:VAL:HG11 15 0.07 (1,547) 1:A:36:LEU:HD23 1:A:81:VAL:HG13 15 0.07 (1,543) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:156:LEU:HD11 9 0.07 (1,543) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:156:LEU:HD12 9 0.07 (1,543) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:156:LEU:HD13 9 0.07 (1,543) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:156:LEU:HD11 9 0.07 (1,543) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:156:LEU:HD12 9 0.07 (1,543) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:156:LEU:HD11 9 0.07 (1,543) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:156:LEU:HD13 9 0.07 (1,543) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:166:LEU:HD13 9 0.07 (1,543) 1:A:174:LYS:H< | Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,547) 1:A:36:LEU:HD22 1:A:81:VAL:HG13 15 0.07 (1,547) 1:A:36:LEU:HD23 1:A:81:VAL:HG11 15 0.07 (1,547) 1:A:36:LEU:HD23 1:A:81:VAL:HG13 15 0.07 (1,547) 1:A:36:LEU:HD23 1:A:81:VAL:HG13 15 0.07 (1,547) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:156:LEU:HD11 9 0.07 (1,543) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:156:LEU:HD12 9 0.07 (1,543) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:156:LEU:HD13 9 0.07 (1,543) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:156:LEU:HD13 9 0.07 (1,543) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:156:LEU:HD13 9 0.07 (1,543) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:156:LEU:HD11 9 0.07 (1,543) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:156:LEU:HD13 9 0.07 (1,543) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:156:LEU:HD13 9 0.07 (1,543) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:156:LEU:HD13 9 0.07 (1,543) 1:A:129:LEU:H | (1,547) | 1:A:36:LEU:HD22 | 1:A:81:VAL:HG11 | 15 | 0.07 |
| (1,547) 1:A:36:LEU:HD23 1:A:81:VAL:HG11 15 0.07 (1,547) 1:A:36:LEU:HD23 1:A:81:VAL:HG12 15 0.07 (1,547) 1:A:36:LEU:HD23 1:A:81:VAL:HG13 15 0.07 (1,543) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:156:LEU:HD11 9 0.07 (1,543) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:156:LEU:HD12 9 0.07 (1,543) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:156:LEU:HD11 9 0.07 (1,543) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:156:LEU:HD12 9 0.07 (1,543) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:156:LEU:HD13 9 0.07 (1,543) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:156:LEU:HD11 9 0.07 (1,543) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:156:LEU:HD11 9 0.07 (1,543) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:156:LEU:HD13 9 0.07 (1,543) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:156:LEU:HD13 9 0.07 (1,543) 1:A:1429:LEU:HD13 1:A:156:LEU:HD13 9 0.07 (1,543) 1:A:1429:LE | (1,547) | 1:A:36:LEU:HD22 | 1:A:81:VAL:HG12 | 15 | 0.07 |
| (1,547) 1:A:36:LEU:HD23 1:A:81:VAL:HG12 15 0.07 (1,547) 1:A:36:LEU:HD23 1:A:81:VAL:HG13 15 0.07 (1,548) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:156:LEU:HD11 9 0.07 (1,543) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:156:LEU:HD12 9 0.07 (1,543) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:156:LEU:HD13 9 0.07 (1,543) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:156:LEU:HD13 9 0.07 (1,543) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:156:LEU:HD11 9 0.07 (1,543) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:156:LEU:HD12 9 0.07 (1,543) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:156:LEU:HD13 9 0.07 (1,543) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:156:LEU:HD13 9 0.07 (1,543) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:156:LEU:HD13 9 0.07 (1,543) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:156:LEU:HD13 9 0.07 (1,543) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:156:LEU:HD11 9 0.07 (1,543) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:156:LEU:HD12 9 0.07 (1,543) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:156:LEU:HD13 9 0.07 (1,535) 1:A:74:LYS:H 1:A:76:VAL:HG11 14 0.07 (1,535) 1:A:74:LYS:H 1:A:76:VAL:HG11 14 0.07 (1,535) 1:A:74:LYS:H 1:A:76:VAL:HG12 14 0.07 (1,535) 1:A:74:LYS:H 1:A:76:VAL:HG12 14 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD11 1:A:99:VAL:HG22 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD11 1:A:99:VAL:HG22 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD11 1:A:99:VAL:HG23 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD11 1:A:99:VAL:HG23 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD12 1:A:99:VAL:HG23 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD12 1:A:99:VAL:HG21 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD12 1:A:99:VAL:HG23 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD12 1:A:99:VAL:HG23 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD12 1:A:99:VAL:HG23 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD11 1:A:99:VAL:HG21 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD13 1:A:99:VAL:HG23 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD13 1:A:99:VAL:HG23 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD11 1:A:99:VAL:HG23 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD13 1:A:199:VAL:HG23 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD13 1:A:199:VAL:HG23 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD13 1:A:199:VAL:HG23 7 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD11 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD13 | (1,547) | 1:A:36:LEU:HD22 | 1:A:81:VAL:HG13 | 15 | 0.07 |
| (1,547) 1:A:36:LEU:HD23 1:A:81:VAL:HG13 15 0.07 (1,543) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:156:LEU:HD11 9 0.07 (1,543) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:156:LEU:HD12 9 0.07 (1,543) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:156:LEU:HD11 9 0.07 (1,543) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:156:LEU:HD11 9 0.07 (1,543) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:156:LEU:HD13 9 0.07 (1,543) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:156:LEU:HD14 9 0.07 (1,543) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:156:LEU:HD12 9 0.07 (1,543) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:156:LEU:HD12 9 0.07 (1,543) 1:A:1429:LEU:HD13 1:A:156:LEU:HD13 9 0.07 (1,543) 1:A:1429:LEU:HD13 1:A:156:LEU:HD12 9 0.07 (1,543) 1:A:1429:LEU:HD13 1:A:156:LEU:HD13 9 0.07 (1,543) 1:A:1429:LEU:HD13 1:A:156:LEU:HD13 9 0.07 (1,543) 1:A:14 | (1,547) | 1:A:36:LEU:HD23 | 1:A:81:VAL:HG11 | 15 | 0.07 |
| (1,543) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:156:LEU:HD11 9 0.07 (1,543) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:156:LEU:HD12 9 0.07 (1,543) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:156:LEU:HD13 9 0.07 (1,543) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:156:LEU:HD11 9 0.07 (1,543) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:156:LEU:HD13 9 0.07 (1,543) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:156:LEU:HD13 9 0.07 (1,543) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:156:LEU:HD12 9 0.07 (1,543) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:156:LEU:HD12 9 0.07 (1,543) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:156:LEU:HD13 9 0.07 (1,543) 1:A:14:LYS:H 1:A:76:VAL:HG11 14 0.07 (1,543) 1:A:14:LYS:H 1:A:76:VAL:HG11 14 0.07 (1,543) 1:A:14:LYS:H 1:A:76:VAL:HG12 14 0.07 (1,535) 1:A:74:LYS:H 1:A:76:VAL:HG12 14 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD11 | (1,547) | 1:A:36:LEU:HD23 | 1:A:81:VAL:HG12 | 15 | 0.07 |
| (1,543) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:156:LEU:HD13 9 0.07 (1,543) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:156:LEU:HD13 9 0.07 (1,543) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:156:LEU:HD12 9 0.07 (1,543) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:156:LEU:HD12 9 0.07 (1,543) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:156:LEU:HD11 9 0.07 (1,543) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:156:LEU:HD12 9 0.07 (1,543) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:156:LEU:HD13 9 0.07 (1,543) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:156:LEU:HD13 9 0.07 (1,543) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:16:VAL:HG11 14 0.07 (1,543) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:16:VAL:HG11 14 0.07 (1,543) 1:A:14:VS:H 1:A:76:VAL:HG11 14 0.07 (1,543) 1:A:14:LSU:HD13 1:A:76:VAL:HG12 14 0.07 (1,543) 1:A:14:LYS:H 1:A:76:VAL:HG12 14 0.07 (1,519) 1:A:121:LEU:HD11 <td>(1,547)</td> <td>1:A:36:LEU:HD23</td> <td>1:A:81:VAL:HG13</td> <td>15</td> <td>0.07</td> | (1,547) | 1:A:36:LEU:HD23 | 1:A:81:VAL:HG13 | 15 | 0.07 |
| (1,543) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:156:LEU:HD13 9 0.07 (1,543) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:156:LEU:HD11 9 0.07 (1,543) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:156:LEU:HD13 9 0.07 (1,543) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:156:LEU:HD11 9 0.07 (1,543) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:156:LEU:HD11 9 0.07 (1,543) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:156:LEU:HD11 9 0.07 (1,543) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:156:LEU:HD13 9 0.07 (1,543) 1:A:14:LYS:H 1:A:76:VAL:HG11 14 0.07 (1,553) 1:A:74:LYS:H 1:A:76:VAL:HG13 14 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD11 1:A:79:VAL:HG21 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD12 <td>(1,543)</td> <td>1:A:129:LEU:HD11</td> <td>1:A:156:LEU:HD11</td> <td>9</td> <td>0.07</td> | (1,543) | 1:A:129:LEU:HD11 | 1:A:156:LEU:HD11 | 9 | 0.07 |
| (1,543) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:156:LEU:HD11 9 0.07 (1,543) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:156:LEU:HD12 9 0.07 (1,543) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:156:LEU:HD13 9 0.07 (1,543) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:156:LEU:HD11 9 0.07 (1,543) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:156:LEU:HD12 9 0.07 (1,543) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:156:LEU:HD12 9 0.07 (1,543) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:156:LEU:HD12 9 0.07 (1,543) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:156:LEU:HD13 9 0.07 (1,535) 1:A:74:LYS:H 1:A:76:VAL:HG11 14 0.07 (1,535) 1:A:74:LYS:H 1:A:76:VAL:HG12 14 0.07 (1,535) 1:A:74:LYS:H 1:A:76:VAL:HG12 14 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD11 1:A:99:VAL:HG21 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD11 1:A:99:VAL:HG22 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD11 1:A:99:VAL:HG22 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD12 1:A:99:VAL:HG23 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD12 1:A:99:VAL:HG22 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD12 1:A:99:VAL:HG22 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD13 1:A:99:VAL:HG22 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD13 1:A:99:VAL:HG23 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD11 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD11 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD13 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD13 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD11 1 0.07 | (1,543) | 1:A:129:LEU:HD11 | 1:A:156:LEU:HD12 | 9 | 0.07 |
| (1,543) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:156:LEU:HD12 9 0.07 (1,543) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:156:LEU:HD13 9 0.07 (1,543) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:156:LEU:HD11 9 0.07 (1,543) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:156:LEU:HD12 9 0.07 (1,543) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:156:LEU:HD13 9 0.07 (1,543) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:156:LEU:HD13 9 0.07 (1,535) 1:A:74:LYS:H 1:A:76:VAL:HG11 14 0.07 (1,535) 1:A:74:LYS:H 1:A:76:VAL:HG11 14 0.07 (1,535) 1:A:74:LYS:H 1:A:76:VAL:HG13 14 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD11 1:A:99:VAL:HG21 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD11 1:A:99:VAL:HG22 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD11 1:A:99:VAL:HG23 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD12 1:A:99:VAL:HG21 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD12 1:A:99:VAL:HG21 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD12 1:A:99:VAL:HG21 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD13 1:A:99:VAL:HG23 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD13 1:A:99:VAL:HG23 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD13 1:A:99:VAL:HG23 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD13 1:A:99:VAL:HG23 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD13 1:A:99:VAL:HG21 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD13 1:A:99:VAL:HG21 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD13 1:A:99:VAL:HG21 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD13 1:A:99:VAL:HG21 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD11 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD11 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD13 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD13 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD11 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD11 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD11 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD11 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD11 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD11 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD11 1 2 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD11 1 2 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD11 1 12 0.07 | (1,543) | 1:A:129:LEU:HD11 | 1:A:156:LEU:HD13 | 9 | 0.07 |
| (1,543) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:156:LEU:HD13 9 0.07 (1,543) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:156:LEU:HD11 9 0.07 (1,543) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:156:LEU:HD13 9 0.07 (1,543) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:156:LEU:HD13 9 0.07 (1,543) 1:A:14:LYS:H 1:A:76:VAL:HG11 14 0.07 (1,535) 1:A:74:LYS:H 1:A:76:VAL:HG12 14 0.07 (1,535) 1:A:74:LYS:H 1:A:76:VAL:HG13 14 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD11 1:A:99:VAL:HG22 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD11 1:A:99:VAL:HG22 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD12 1:A:99:VAL:HG23 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD12 1:A:99:VAL:HG22 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD13 1:A:99:VAL:HG23 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD13 1:A:99:VAL:HG22 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD13 | (1,543) | 1:A:129:LEU:HD12 | 1:A:156:LEU:HD11 | 9 | 0.07 |
| (1,543) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:156:LEU:HD11 9 0.07 (1,543) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:156:LEU:HD12 9 0.07 (1,543) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:156:LEU:HD13 9 0.07 (1,535) 1:A:74:LYS:H 1:A:76:VAL:HG11 14 0.07 (1,535) 1:A:74:LYS:H 1:A:76:VAL:HG12 14 0.07 (1,535) 1:A:74:LYS:H 1:A:76:VAL:HG13 14 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD11 1:A:99:VAL:HG21 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD11 1:A:99:VAL:HG22 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD11 1:A:99:VAL:HG23 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD12 1:A:99:VAL:HG23 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD12 1:A:99:VAL:HG23 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD13 1:A:99:VAL:HG22 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD13 1:A:99:VAL:HG22 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD13 1: | (1,543) | 1:A:129:LEU:HD12 | 1:A:156:LEU:HD12 | 9 | 0.07 |
| (1,543) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:156:LEU:HD13 9 0.07 (1,543) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:156:LEU:HD13 9 0.07 (1,535) 1:A:74:LYS:H 1:A:76:VAL:HG11 14 0.07 (1,535) 1:A:74:LYS:H 1:A:76:VAL:HG13 14 0.07 (1,535) 1:A:74:LYS:H 1:A:76:VAL:HG13 14 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD11 1:A:99:VAL:HG21 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD11 1:A:99:VAL:HG22 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD11 1:A:99:VAL:HG23 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD12 1:A:99:VAL:HG22 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD12 1:A:99:VAL:HG23 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD13 1:A:99:VAL:HG21 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD13 1:A:99:VAL:HG22 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD13 1:A:99:VAL:HG22 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD13 1:A: | (1,543) | 1:A:129:LEU:HD12 | 1:A:156:LEU:HD13 | 9 | 0.07 |
| (1,543) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:156:LEU:HD13 9 0.07 (1,535) 1:A:74:LYS:H 1:A:76:VAL:HG11 14 0.07 (1,535) 1:A:74:LYS:H 1:A:76:VAL:HG12 14 0.07 (1,535) 1:A:74:LYS:H 1:A:76:VAL:HG13 14 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD11 1:A:99:VAL:HG21 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD11 1:A:99:VAL:HG22 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD11 1:A:99:VAL:HG23 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD12 1:A:99:VAL:HG21 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD12 1:A:99:VAL:HG22 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD13 1:A:99:VAL:HG23 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD13 1:A:99:VAL:HG22 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD13 1:A:99:VAL:HG23 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD13 1:A:99:VAL:HG23 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD13 1:A:17 | (1,543) | 1:A:129:LEU:HD13 | 1:A:156:LEU:HD11 | 9 | 0.07 |
| (1,543) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:156:LEU:HD13 9 0.07 (1,535) 1:A:74:LYS:H 1:A:76:VAL:HG11 14 0.07 (1,535) 1:A:74:LYS:H 1:A:76:VAL:HG12 14 0.07 (1,535) 1:A:74:LYS:H 1:A:76:VAL:HG13 14 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD11 1:A:99:VAL:HG21 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD11 1:A:99:VAL:HG22 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD12 1:A:99:VAL:HG21 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD12 1:A:99:VAL:HG21 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD12 1:A:99:VAL:HG22 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD13 1:A:99:VAL:HG23 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD13 1:A:99:VAL:HG22 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD13 1:A:99:VAL:HG23 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD13 1:A:121:LEU:HD11 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A: | (1,543) | 1:A:129:LEU:HD13 | 1:A:156:LEU:HD12 | 9 | 0.07 |
| (1,535) 1:A:74:LYS:H 1:A:76:VAL:HG12 14 0.07 (1,535) 1:A:74:LYS:H 1:A:76:VAL:HG13 14 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD11 1:A:99:VAL:HG21 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD11 1:A:99:VAL:HG22 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD11 1:A:99:VAL:HG23 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD12 1:A:99:VAL:HG21 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD12 1:A:99:VAL:HG22 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD13 1:A:99:VAL:HG23 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD13 1:A:99:VAL:HG22 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD13 1:A:99:VAL:HG22 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD13 1:A:99:VAL:HG22 7 0.07 (1,519) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD11 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD12 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1 | · · / | 1:A:129:LEU:HD13 | 1:A:156:LEU:HD13 | 9 | 0.07 |
| (1,535) 1:A:74:LYS:H 1:A:76:VAL:HG13 14 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD11 1:A:99:VAL:HG21 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD11 1:A:99:VAL:HG22 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD12 1:A:99:VAL:HG23 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD12 1:A:99:VAL:HG22 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD12 1:A:99:VAL:HG23 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD13 1:A:99:VAL:HG21 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD13 1:A:99:VAL:HG21 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD13 1:A:99:VAL:HG22 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD13 1:A:99:VAL:HG23 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD13 1:A:99:VAL:HG23 7 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD11 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD12 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 <td< td=""><td> /</td><td>1:A:74:LYS:H</td><td>1:A:76:VAL:HG11</td><td>14</td><td>0.07</td></td<> | / | 1:A:74:LYS:H | 1:A:76:VAL:HG11 | 14 | 0.07 |
| (1,535) 1:A:74:LYS:H 1:A:76:VAL:HG13 14 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD11 1:A:99:VAL:HG21 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD11 1:A:99:VAL:HG22 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD12 1:A:99:VAL:HG23 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD12 1:A:99:VAL:HG22 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD13 1:A:99:VAL:HG23 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD13 1:A:99:VAL:HG21 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD13 1:A:99:VAL:HG22 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD13 1:A:99:VAL:HG22 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD13 1:A:99:VAL:HG23 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD13 1:A:99:VAL:HG23 7 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD11 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD12 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 <td< td=""><td>(1,535)</td><td>1:A:74:LYS:H</td><td>1:A:76:VAL:HG12</td><td>14</td><td>0.07</td></td<> | (1,535) | 1:A:74:LYS:H | 1:A:76:VAL:HG12 | 14 | 0.07 |
| (1,519) 1:A:21:LEU:HD11 1:A:99:VAL:HG21 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD11 1:A:99:VAL:HG22 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD11 1:A:99:VAL:HG23 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD12 1:A:99:VAL:HG21 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD12 1:A:99:VAL:HG22 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD13 1:A:99:VAL:HG23 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD13 1:A:99:VAL:HG22 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD13 1:A:99:VAL:HG22 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD13 1:A:99:VAL:HG23 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD13 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD11 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD13 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD13 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD13 | _ ` ' / | 1:A:74:LYS:H | 1:A:76:VAL:HG13 | 14 | 0.07 |
| (1,519) 1:A:21:LEU:HD11 1:A:99:VAL:HG22 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD11 1:A:99:VAL:HG23 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD12 1:A:99:VAL:HG21 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD12 1:A:99:VAL:HG22 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD12 1:A:99:VAL:HG23 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD13 1:A:99:VAL:HG21 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD13 1:A:99:VAL:HG22 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD13 1:A:99:VAL:HG22 7 0.07 (1,519) 1:A:17:VAL:HG11 1:A:199:VAL:HG23 7 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD11 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD13 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD11 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD13 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 | | 1:A:21:LEU:HD11 | 1:A:99:VAL:HG21 | 7 | 0.07 |
| (1,519) 1:A:21:LEU:HD12 1:A:99:VAL:HG21 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD12 1:A:99:VAL:HG22 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD12 1:A:99:VAL:HG23 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD13 1:A:99:VAL:HG21 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD13 1:A:99:VAL:HG22 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD13 1:A:99:VAL:HG23 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD13 1:A:99:VAL:HG23 7 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD11 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD13 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD12 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD13 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD11 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD13 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 | / | 1:A:21:LEU:HD11 | 1:A:99:VAL:HG22 | 7 | 0.07 |
| (1,519) 1:A:21:LEU:HD12 1:A:99:VAL:HG22 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD12 1:A:99:VAL:HG23 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD13 1:A:99:VAL:HG21 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD13 1:A:99:VAL:HG22 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD13 1:A:99:VAL:HG23 7 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD11 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD12 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD11 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD12 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD13 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD11 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD12 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD13 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 <td>(1,519)</td> <td>1:A:21:LEU:HD11</td> <td>1:A:99:VAL:HG23</td> <td>7</td> <td>0.07</td> | (1,519) | 1:A:21:LEU:HD11 | 1:A:99:VAL:HG23 | 7 | 0.07 |
| (1,519) 1:A:21:LEU:HD12 1:A:99:VAL:HG22 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD12 1:A:99:VAL:HG23 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD13 1:A:99:VAL:HG21 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD13 1:A:99:VAL:HG22 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD13 1:A:99:VAL:HG23 7 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD11 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD12 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD13 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD12 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD13 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD11 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD13 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD13 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 <td>(1,519)</td> <td>1:A:21:LEU:HD12</td> <td>1:A:99:VAL:HG21</td> <td>7</td> <td>0.07</td> | (1,519) | 1:A:21:LEU:HD12 | 1:A:99:VAL:HG21 | 7 | 0.07 |
| (1,519) 1:A:21:LEU:HD13 1:A:99:VAL:HG21 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD13 1:A:99:VAL:HG22 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD13 1:A:99:VAL:HG23 7 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD11 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD12 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD13 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD12 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD13 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD11 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD12 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD13 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD11 12 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD13 12 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:H | . , , | 1:A:21:LEU:HD12 | 1:A:99:VAL:HG22 | 7 | 0.07 |
| (1,519) 1:A:21:LEU:HD13 1:A:99:VAL:HG21 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD13 1:A:99:VAL:HG22 7 0.07 (1,519) 1:A:21:LEU:HD13 1:A:99:VAL:HG23 7 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD11 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD12 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD13 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD12 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD13 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD11 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD12 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD13 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD11 12 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD13 12 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:H | (' / | 1:A:21:LEU:HD12 | 1:A:99:VAL:HG23 | 7 | 0.07 |
| (1,519) 1:A:21:LEU:HD13 1:A:99:VAL:HG23 7 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD11 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD12 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD13 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD11 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD12 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD13 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD12 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD13 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD11 12 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD13 12 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD13 12 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD11 12 0.07 (1,518) 1:A:117 | (' / | 1:A:21:LEU:HD13 | 1:A:99:VAL:HG21 | 7 | 0.07 |
| (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD11 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD12 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD13 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD11 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD12 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD13 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD12 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD13 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD11 12 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD12 12 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD13 12 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD11 12 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD11 12 0.07 | (1,519) | 1:A:21:LEU:HD13 | 1:A:99:VAL:HG22 | 7 | 0.07 |
| (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD12 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD13 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD11 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD12 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD13 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD11 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD13 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD11 12 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD12 12 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD13 12 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD11 12 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD11 12 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD12 12 0.07 | (' / | 1:A:21:LEU:HD13 | 1:A:99:VAL:HG23 | 7 | 0.07 |
| (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD12 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD13 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD11 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD12 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD13 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD11 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD12 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD13 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD11 12 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD13 12 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD11 12 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD11 12 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD11 12 0.07 | (1,518) | 1:A:117:VAL:HG11 | 1:A:121:LEU:HD11 | 8 | 0.07 |
| (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD11 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD12 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD13 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD11 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD12 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD13 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD11 12 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD13 12 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD11 12 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD11 12 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD11 12 0.07 | | 1:A:117:VAL:HG11 | 1:A:121:LEU:HD12 | 8 | 0.07 |
| (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD11 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD12 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD13 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD11 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD12 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD13 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD11 12 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD13 12 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD11 12 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD11 12 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD11 12 0.07 | (1,518) | 1:A:117:VAL:HG11 | 1:A:121:LEU:HD13 | 8 | 0.07 |
| (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD13 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD11 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD12 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD13 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD11 12 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD12 12 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD13 12 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD11 12 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD11 12 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD12 12 0.07 | | 1:A:117:VAL:HG12 | 1:A:121:LEU:HD11 | 8 | 0.07 |
| (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD11 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD12 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD13 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD11 12 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD12 12 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD13 12 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD11 12 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD12 12 0.07 | (1,518) | 1:A:117:VAL:HG12 | 1:A:121:LEU:HD12 | 8 | 0.07 |
| (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD11 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD12 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD13 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD11 12 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD12 12 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD13 12 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD11 12 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD12 12 0.07 | , | 1:A:117:VAL:HG12 | 1:A:121:LEU:HD13 | 8 | |
| (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD12 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD13 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD11 12 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD12 12 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD13 12 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD11 12 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD12 12 0.07 | | 1:A:117:VAL:HG13 | 1:A:121:LEU:HD11 | | |
| (1,518) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:121:LEU:HD13 8 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD11 12 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD12 12 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD13 12 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD11 12 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD12 12 0.07 | | | 1:A:121:LEU:HD12 | | |
| (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD11 12 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD12 12 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD13 12 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD11 12 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD12 12 0.07 | | | | | |
| (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD12 12 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD13 12 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD11 12 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD12 12 0.07 | | | | | |
| (1,518) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:121:LEU:HD13 12 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD11 12 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD12 12 0.07 | | | | | |
| (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD11 12 0.07 (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD12 12 0.07 | | | | | |
| (1,518) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:121:LEU:HD12 12 0.07 | | | | | |
| | | | | | |
| | (1,518) | 1:A:117:VAL:HG12 | 1:A:121:LEU:HD13 | 12 | 0.07 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,518) | 1:A:117:VAL:HG13 | 1:A:121:LEU:HD11 | 12 | 0.07 |
| (1,518) | 1:A:117:VAL:HG13 | 1:A:121:LEU:HD12 | 12 | 0.07 |
| (1,518) | 1:A:117:VAL:HG13 | 1:A:121:LEU:HD13 | 12 | 0.07 |
| (1,502) | 1:A:160:LEU:HD11 | 1:A:163:LEU:HD21 | 20 | 0.07 |
| (1,502) | 1:A:160:LEU:HD11 | 1:A:163:LEU:HD22 | 20 | 0.07 |
| (1,502) | 1:A:160:LEU:HD11 | 1:A:163:LEU:HD23 | 20 | 0.07 |
| (1,502) | 1:A:160:LEU:HD12 | 1:A:163:LEU:HD21 | 20 | 0.07 |
| (1,502) | 1:A:160:LEU:HD12 | 1:A:163:LEU:HD22 | 20 | 0.07 |
| (1,502) | 1:A:160:LEU:HD12 | 1:A:163:LEU:HD23 | 20 | 0.07 |
| (1,502) | 1:A:160:LEU:HD13 | 1:A:163:LEU:HD21 | 20 | 0.07 |
| (1,502) | 1:A:160:LEU:HD13 | 1:A:163:LEU:HD22 | 20 | 0.07 |
| (1,502) | 1:A:160:LEU:HD13 | 1:A:163:LEU:HD23 | 20 | 0.07 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:109:LEU:HD21 | 2 | 0.07 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:109:LEU:HD22 | 2 | 0.07 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:109:LEU:HD23 | 2 | 0.07 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:109:LEU:HD21 | 2 | 0.07 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:109:LEU:HD22 | 2 | 0.07 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:109:LEU:HD23 | 2 | 0.07 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:109:LEU:HD21 | 2 | 0.07 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:109:LEU:HD22 | 2 | 0.07 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:109:LEU:HD23 | 2 | 0.07 |
| (1,480) | 1:A:57:VAL:HG11 | 1:A:81:VAL:HG21 | 11 | 0.07 |
| (1,480) | 1:A:57:VAL:HG11 | 1:A:81:VAL:HG22 | 11 | 0.07 |
| (1,480) | 1:A:57:VAL:HG11 | 1:A:81:VAL:HG23 | 11 | 0.07 |
| (1,480) | 1:A:57:VAL:HG12 | 1:A:81:VAL:HG21 | 11 | 0.07 |
| (1,480) | 1:A:57:VAL:HG12 | 1:A:81:VAL:HG22 | 11 | 0.07 |
| (1,480) | 1:A:57:VAL:HG12 | 1:A:81:VAL:HG23 | 11 | 0.07 |
| (1,480) | 1:A:57:VAL:HG13 | 1:A:81:VAL:HG21 | 11 | 0.07 |
| (1,480) | 1:A:57:VAL:HG13 | 1:A:81:VAL:HG22 | 11 | 0.07 |
| (1,480) | 1:A:57:VAL:HG13 | 1:A:81:VAL:HG23 | 11 | 0.07 |
| (1,480) | 1:A:57:VAL:HG11 | 1:A:81:VAL:HG21 | 15 | 0.07 |
| (1,480) | 1:A:57:VAL:HG11 | 1:A:81:VAL:HG22 | 15 | 0.07 |
| (1,480) | 1:A:57:VAL:HG11 | 1:A:81:VAL:HG23 | 15 | 0.07 |
| (1,480) | 1:A:57:VAL:HG12 | 1:A:81:VAL:HG21 | 15 | 0.07 |
| (1,480) | 1:A:57:VAL:HG12 | 1:A:81:VAL:HG22 | 15 | 0.07 |
| (1,480) | 1:A:57:VAL:HG12 | 1:A:81:VAL:HG23 | 15 | 0.07 |
| (1,480) | 1:A:57:VAL:HG13 | 1:A:81:VAL:HG21 | 15 | 0.07 |
| (1,480) | 1:A:57:VAL:HG13 | 1:A:81:VAL:HG22 | 15 | 0.07 |
| (1,480) | 1:A:57:VAL:HG13 | 1:A:81:VAL:HG23 | 15 | 0.07 |
| (1,478) | 1:A:81:VAL:HG21 | 1:A:82:GLN:H | 5 | 0.07 |
| (1,478) | 1:A:81:VAL:HG22 | 1:A:82:GLN:H | 5 | 0.07 |
| (1,478) | 1:A:81:VAL:HG23 | 1:A:82:GLN:H | 5 | 0.07 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,467) | 1:A:62:VAL:HG11 | 1:A:63:GLY:H | 18 | 0.07 |
| (1,467) | 1:A:62:VAL:HG12 | 1:A:63:GLY:H | 18 | 0.07 |
| (1,467) | 1:A:62:VAL:HG13 | 1:A:63:GLY:H | 18 | 0.07 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD11 | 1:A:117:VAL:HG11 | 1 | 0.07 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD11 | 1:A:117:VAL:HG12 | 1 | 0.07 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD11 | 1:A:117:VAL:HG13 | 1 | 0.07 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD12 | 1:A:117:VAL:HG11 | 1 | 0.07 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD12 | 1:A:117:VAL:HG12 | 1 | 0.07 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD12 | 1:A:117:VAL:HG13 | 1 | 0.07 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD13 | 1:A:117:VAL:HG11 | 1 | 0.07 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD13 | 1:A:117:VAL:HG12 | 1 | 0.07 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD13 | 1:A:117:VAL:HG13 | 1 | 0.07 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD11 | 1:A:117:VAL:HG11 | 3 | 0.07 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD11 | 1:A:117:VAL:HG12 | 3 | 0.07 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD11 | 1:A:117:VAL:HG13 | 3 | 0.07 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD12 | 1:A:117:VAL:HG11 | 3 | 0.07 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD12 | 1:A:117:VAL:HG12 | 3 | 0.07 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD12 | 1:A:117:VAL:HG13 | 3 | 0.07 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD13 | 1:A:117:VAL:HG11 | 3 | 0.07 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD13 | 1:A:117:VAL:HG12 | 3 | 0.07 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD13 | 1:A:117:VAL:HG13 | 3 | 0.07 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD11 | 1:A:117:VAL:HG11 | 12 | 0.07 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD11 | 1:A:117:VAL:HG12 | 12 | 0.07 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD11 | 1:A:117:VAL:HG13 | 12 | 0.07 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD12 | 1:A:117:VAL:HG11 | 12 | 0.07 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD12 | 1:A:117:VAL:HG12 | 12 | 0.07 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD12 | 1:A:117:VAL:HG13 | 12 | 0.07 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD13 | 1:A:117:VAL:HG11 | 12 | 0.07 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD13 | | 12 | 0.07 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD13 | 1:A:117:VAL:HG13 | 12 | 0.07 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD11 | 1:A:117:VAL:HG11 | 13 | 0.07 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD11 | 1:A:117:VAL:HG12 | 13 | 0.07 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD11 | 1:A:117:VAL:HG13 | 13 | 0.07 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD12 | 1:A:117:VAL:HG11 | 13 | 0.07 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD12 | 1:A:117:VAL:HG12 | 13 | 0.07 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD12 | 1:A:117:VAL:HG13 | 13 | 0.07 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD13 | 1:A:117:VAL:HG11 | 13 | 0.07 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD13 | 1:A:117:VAL:HG12 | 13 | 0.07 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD13 | 1:A:117:VAL:HG13 | 13 | 0.07 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD11 | 1:A:117:VAL:HG11 | 15 | 0.07 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD11 | 1:A:117:VAL:HG12 | 15 | 0.07 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD11 | 1:A:117:VAL:HG13 | 15 | 0.07 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD12 | 1:A:117:VAL:HG11 | 15 | 0.07 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD12 | 1:A:117:VAL:HG12 | 15 | 0.07 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD12 | 1:A:117:VAL:HG13 | 15 | 0.07 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD13 | 1:A:117:VAL:HG11 | 15 | 0.07 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD13 | 1:A:117:VAL:HG12 | 15 | 0.07 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD13 | 1:A:117:VAL:HG13 | 15 | 0.07 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD11 | 1:A:117:VAL:HG11 | 19 | 0.07 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD11 | 1:A:117:VAL:HG12 | 19 | 0.07 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD11 | 1:A:117:VAL:HG13 | 19 | 0.07 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD12 | 1:A:117:VAL:HG11 | 19 | 0.07 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD12 | 1:A:117:VAL:HG12 | 19 | 0.07 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD12 | 1:A:117:VAL:HG13 | 19 | 0.07 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD13 | 1:A:117:VAL:HG11 | 19 | 0.07 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD13 | 1:A:117:VAL:HG12 | 19 | 0.07 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD13 | 1:A:117:VAL:HG13 | 19 | 0.07 |
| (1,462) | 1:A:129:LEU:HD11 | 1:A:153:LEU:HD21 | 10 | 0.07 |
| (1,462) | 1:A:129:LEU:HD11 | 1:A:153:LEU:HD22 | 10 | 0.07 |
| (1,462) | 1:A:129:LEU:HD11 | 1:A:153:LEU:HD23 | 10 | 0.07 |
| (1,462) | 1:A:129:LEU:HD12 | 1:A:153:LEU:HD21 | 10 | 0.07 |
| (1,462) | 1:A:129:LEU:HD12 | 1:A:153:LEU:HD22 | 10 | 0.07 |
| (1,462) | 1:A:129:LEU:HD12 | 1:A:153:LEU:HD23 | 10 | 0.07 |
| (1,462) | 1:A:129:LEU:HD13 | 1:A:153:LEU:HD21 | 10 | 0.07 |
| (1,462) | 1:A:129:LEU:HD13 | 1:A:153:LEU:HD22 | 10 | 0.07 |
| (1,462) | 1:A:129:LEU:HD13 | 1:A:153:LEU:HD23 | 10 | 0.07 |
| (1,455) | 1:A:121:LEU:HD21 | 1:A:160:LEU:HD21 | 18 | 0.07 |
| (1,455) | 1:A:121:LEU:HD21 | 1:A:160:LEU:HD22 | 18 | 0.07 |
| (1,455) | 1:A:121:LEU:HD21 | 1:A:160:LEU:HD23 | 18 | 0.07 |
| (1,455) | 1:A:121:LEU:HD22 | 1:A:160:LEU:HD21 | 18 | 0.07 |
| (1,455) | 1:A:121:LEU:HD22 | 1:A:160:LEU:HD22 | 18 | 0.07 |
| (1,455) | 1:A:121:LEU:HD22 | 1:A:160:LEU:HD23 | 18 | 0.07 |
| (1,455) | 1:A:121:LEU:HD23 | 1:A:160:LEU:HD21 | 18 | 0.07 |
| (1,455) | 1:A:121:LEU:HD23 | 1:A:160:LEU:HD22 | 18 | 0.07 |
| (1,455) | 1:A:121:LEU:HD23 | 1:A:160:LEU:HD23 | 18 | 0.07 |
| (1,453) | 1:A:118:TYR:H | 1:A:121:LEU:HD21 | 20 | 0.07 |
| (1,453) | 1:A:118:TYR:H | 1:A:121:LEU:HD22 | 20 | 0.07 |
| (1,453) | 1:A:118:TYR:H | 1:A:121:LEU:HD23 | 20 | 0.07 |
| (1,446) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:36:LEU:HD21 | 12 | 0.07 |
| (1,446) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:36:LEU:HD22 | 12 | 0.07 |
| (1,446) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:36:LEU:HD23 | 12 | 0.07 |
| (1,446) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:36:LEU:HD21 | 12 | 0.07 |
| (1,446) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:36:LEU:HD22 | 12 | 0.07 |
| (1,446) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:36:LEU:HD23 | 12 | 0.07 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|-----------------|
| (1,446) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:36:LEU:HD21 | 12 | 0.07 |
| (1,446) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:36:LEU:HD22 | 12 | 0.07 |
| (1,446) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:36:LEU:HD23 | 12 | 0.07 |
| (1,443) | 1:A:153:LEU:HD21 | 1:A:190:LEU:HD21 | 11 | 0.07 |
| (1,443) | 1:A:153:LEU:HD21 | 1:A:190:LEU:HD22 | 11 | 0.07 |
| (1,443) | 1:A:153:LEU:HD21 | 1:A:190:LEU:HD23 | 11 | 0.07 |
| (1,443) | 1:A:153:LEU:HD22 | 1:A:190:LEU:HD21 | 11 | 0.07 |
| (1,443) | 1:A:153:LEU:HD22 | 1:A:190:LEU:HD22 | 11 | 0.07 |
| (1,443) | 1:A:153:LEU:HD22 | 1:A:190:LEU:HD23 | 11 | 0.07 |
| (1,443) | 1:A:153:LEU:HD23 | 1:A:190:LEU:HD21 | 11 | 0.07 |
| (1,443) | 1:A:153:LEU:HD23 | 1:A:190:LEU:HD22 | 11 | 0.07 |
| (1,443) | 1:A:153:LEU:HD23 | 1:A:190:LEU:HD23 | 11 | 0.07 |
| (1,433) | 1:A:54:VAL:HG11 | 1:A:99:VAL:HG11 | 4 | 0.07 |
| (1,433) | 1:A:54:VAL:HG11 | 1:A:99:VAL:HG12 | 4 | 0.07 |
| (1,433) | 1:A:54:VAL:HG11 | 1:A:99:VAL:HG13 | 4 | 0.07 |
| (1,433) | 1:A:54:VAL:HG12 | 1:A:99:VAL:HG11 | 4 | 0.07 |
| (1,433) | 1:A:54:VAL:HG12 | 1:A:99:VAL:HG12 | 4 | 0.07 |
| (1,433) | 1:A:54:VAL:HG12 | 1:A:99:VAL:HG13 | 4 | 0.07 |
| (1,433) | 1:A:54:VAL:HG13 | 1:A:99:VAL:HG11 | 4 | 0.07 |
| (1,433) | 1:A:54:VAL:HG13 | 1:A:99:VAL:HG12 | 4 | 0.07 |
| (1,433) | 1:A:54:VAL:HG13 | 1:A:99:VAL:HG13 | 4 | 0.07 |
| (1,424) | 1:A:128:ILE:HD11 | 1:A:191:LEU:HD21 | 7 | 0.07 |
| (1,424) | 1:A:128:ILE:HD11 | 1:A:191:LEU:HD22 | 7 | 0.07 |
| (1,424) | 1:A:128:ILE:HD11 | 1:A:191:LEU:HD23 | 7 | 0.07 |
| (1,424) | 1:A:128:ILE:HD12 | 1:A:191:LEU:HD21 | 7 | 0.07 |
| (1,424) | 1:A:128:ILE:HD12 | 1:A:191:LEU:HD22 | 7 | 0.07 |
| (1,424) | 1:A:128:ILE:HD12 | 1:A:191:LEU:HD23 | 7 | 0.07 |
| (1,424) | 1:A:128:ILE:HD13 | 1:A:191:LEU:HD21 | 7 | 0.07 |
| (1,424) | 1:A:128:ILE:HD13 | 1:A:191:LEU:HD22 | 7 | 0.07 |
| (1,424) | 1:A:128:ILE:HD13 | 1:A:191:LEU:HD23 | 7 | 0.07 |
| (1,420) | 1:A:171:LEU:H | 1:A:171:LEU:HD21 | 3 | 0.07 |
| (1,420) | 1:A:171:LEU:H | 1:A:171:LEU:HD22 | 3 | 0.07 |
| (1,420) | 1:A:171:LEU:H | 1:A:171:LEU:HD23 | 3 | 0.07 |
| (1,420) | 1:A:171:LEU:H | 1:A:171:LEU:HD21 | 4 | 0.07 |
| (1,420) | 1:A:171:LEU:H | 1:A:171:LEU:HD22 | 4 | 0.07 |
| (1,420) | 1:A:171:LEU:H | 1:A:171:LEU:HD23 | 4 | 0.07 |
| (1,419) | 1:A:169:ASN:H | 1:A:171:LEU:HD21 | 7 | 0.07 |
| (1,419) | 1:A:169:ASN:H | 1:A:171:LEU:HD22 | 7 | 0.07 |
| (1,419) | 1:A:169:ASN:H | 1:A:171:LEU:HD23 | 7 | 0.07 |
| (1,419) | 1:A:169:ASN:H | 1:A:171:LEU:HD21 | 17 | 0.07 |
| (1,419) | 1:A:169:ASN:H | 1:A:171:LEU:HD22 | 17 | 0.07 |
| (1,419) | 1:A:169:ASN:H | 1:A:171:LEU:HD23 | 17 | 0.07 |
| (-,) | | | | od on nort nage |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD21 | 1:A:195:LEU:HD21 | 9 | 0.07 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD21 | 1:A:195:LEU:HD22 | 9 | 0.07 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD21 | 1:A:195:LEU:HD23 | 9 | 0.07 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD22 | 1:A:195:LEU:HD21 | 9 | 0.07 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD22 | 1:A:195:LEU:HD22 | 9 | 0.07 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD22 | 1:A:195:LEU:HD23 | 9 | 0.07 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD23 | 1:A:195:LEU:HD21 | 9 | 0.07 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD23 | 1:A:195:LEU:HD22 | 9 | 0.07 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD23 | 1:A:195:LEU:HD23 | 9 | 0.07 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD21 | 1:A:195:LEU:HD21 | 10 | 0.07 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD21 | 1:A:195:LEU:HD22 | 10 | 0.07 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD21 | 1:A:195:LEU:HD23 | 10 | 0.07 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD22 | 1:A:195:LEU:HD21 | 10 | 0.07 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD22 | 1:A:195:LEU:HD22 | 10 | 0.07 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD22 | 1:A:195:LEU:HD23 | 10 | 0.07 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD23 | 1:A:195:LEU:HD21 | 10 | 0.07 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD23 | 1:A:195:LEU:HD22 | 10 | 0.07 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD23 | 1:A:195:LEU:HD23 | 10 | 0.07 |
| (1,407) | 1:A:126:VAL:HG11 | 1:A:163:LEU:HD21 | 7 | 0.07 |
| (1,407) | 1:A:126:VAL:HG11 | 1:A:163:LEU:HD22 | 7 | 0.07 |
| (1,407) | 1:A:126:VAL:HG11 | 1:A:163:LEU:HD23 | 7 | 0.07 |
| (1,407) | 1:A:126:VAL:HG12 | 1:A:163:LEU:HD21 | 7 | 0.07 |
| (1,407) | 1:A:126:VAL:HG12 | 1:A:163:LEU:HD22 | 7 | 0.07 |
| (1,407) | 1:A:126:VAL:HG12 | 1:A:163:LEU:HD23 | 7 | 0.07 |
| (1,407) | 1:A:126:VAL:HG13 | 1:A:163:LEU:HD21 | 7 | 0.07 |
| (1,407) | 1:A:126:VAL:HG13 | 1:A:163:LEU:HD22 | 7 | 0.07 |
| (1,407) | 1:A:126:VAL:HG13 | 1:A:163:LEU:HD23 | 7 | 0.07 |
| (1,399) | 1:A:34:LEU:H | 1:A:99:VAL:HG21 | 12 | 0.07 |
| (1,399) | 1:A:34:LEU:H | 1:A:99:VAL:HG22 | 12 | 0.07 |
| (1,399) | 1:A:34:LEU:H | 1:A:99:VAL:HG23 | 12 | 0.07 |
| (1,399) | 1:A:34:LEU:H | 1:A:99:VAL:HG21 | 13 | 0.07 |
| (1,399) | 1:A:34:LEU:H | 1:A:99:VAL:HG22 | 13 | 0.07 |
| (1,399) | 1:A:34:LEU:H | 1:A:99:VAL:HG23 | 13 | 0.07 |
| (1,398) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:36:LEU:HD21 | 7 | 0.07 |
| (1,398) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:36:LEU:HD22 | 7 | 0.07 |
| (1,398) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:36:LEU:HD23 | 7 | 0.07 |
| (1,398) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:36:LEU:HD21 | 7 | 0.07 |
| (1,398) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:36:LEU:HD22 | 7 | 0.07 |
| (1,398) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:36:LEU:HD23 | 7 | 0.07 |
| (1,398) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:36:LEU:HD21 | 7 | 0.07 |
| (1,398) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:36:LEU:HD22 | 7 | 0.07 |
| (1,398) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:36:LEU:HD23 | 7 | 0.07 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,392) | 1:A:63:GLY:H | 1:A:64:LEU:HD21 | 7 | 0.07 |
| (1,392) | 1:A:63:GLY:H | 1:A:64:LEU:HD22 | 7 | 0.07 |
| (1,392) | 1:A:63:GLY:H | 1:A:64:LEU:HD23 | 7 | 0.07 |
| (1,392) | 1:A:63:GLY:H | 1:A:64:LEU:HD21 | 20 | 0.07 |
| (1,392) | 1:A:63:GLY:H | 1:A:64:LEU:HD22 | 20 | 0.07 |
| (1,392) | 1:A:63:GLY:H | 1:A:64:LEU:HD23 | 20 | 0.07 |
| (1,382) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:167:ILE:HD11 | 1 | 0.07 |
| (1,382) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:167:ILE:HD12 | 1 | 0.07 |
| (1,382) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:167:ILE:HD13 | 1 | 0.07 |
| (1,382) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:167:ILE:HD11 | 13 | 0.07 |
| (1,382) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:167:ILE:HD12 | 13 | 0.07 |
| (1,382) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:167:ILE:HD13 | 13 | 0.07 |
| (1,382) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:167:ILE:HD11 | 15 | 0.07 |
| (1,382) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:167:ILE:HD12 | 15 | 0.07 |
| (1,382) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:167:ILE:HD13 | 15 | 0.07 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD11 | 1:A:190:LEU:HD11 | 8 | 0.07 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD11 | 1:A:190:LEU:HD12 | 8 | 0.07 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD11 | 1:A:190:LEU:HD13 | 8 | 0.07 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD12 | 1:A:190:LEU:HD11 | 8 | 0.07 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD12 | 1:A:190:LEU:HD12 | 8 | 0.07 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD12 | 1:A:190:LEU:HD13 | 8 | 0.07 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD13 | 1:A:190:LEU:HD11 | 8 | 0.07 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD13 | 1:A:190:LEU:HD12 | 8 | 0.07 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD13 | 1:A:190:LEU:HD13 | 8 | 0.07 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD11 | 1:A:190:LEU:HD11 | 13 | 0.07 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD11 | 1:A:190:LEU:HD12 | 13 | 0.07 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD11 | 1:A:190:LEU:HD13 | 13 | 0.07 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD12 | 1:A:190:LEU:HD11 | 13 | 0.07 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD12 | 1:A:190:LEU:HD12 | 13 | 0.07 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD12 | 1:A:190:LEU:HD13 | 13 | 0.07 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD13 | 1:A:190:LEU:HD11 | 13 | 0.07 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD13 | 1:A:190:LEU:HD12 | 13 | 0.07 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD13 | 1:A:190:LEU:HD13 | 13 | 0.07 |
| (1,377) | 1:A:33:ILE:HD11 | 1:A:47:LEU:HD21 | 12 | 0.07 |
| (1,377) | 1:A:33:ILE:HD11 | 1:A:47:LEU:HD22 | 12 | 0.07 |
| (1,377) | 1:A:33:ILE:HD11 | 1:A:47:LEU:HD23 | 12 | 0.07 |
| (1,377) | 1:A:33:ILE:HD12 | 1:A:47:LEU:HD21 | 12 | 0.07 |
| (1,377) | 1:A:33:ILE:HD12 | 1:A:47:LEU:HD22 | 12 | 0.07 |
| (1,377) | 1:A:33:ILE:HD12 | 1:A:47:LEU:HD23 | 12 | 0.07 |
| (1,377) | 1:A:33:ILE:HD13 | 1:A:47:LEU:HD21 | 12 | 0.07 |
| (1,377) | 1:A:33:ILE:HD13 | 1:A:47:LEU:HD22 | 12 | 0.07 |
| (1,377) | 1:A:33:ILE:HD13 | 1:A:47:LEU:HD23 | 12 | 0.07 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,361) | 1:A:72:GLN:H | 1:A:78:ILE:HD11 | 10 | 0.07 |
| (1,361) | 1:A:72:GLN:H | 1:A:78:ILE:HD12 | 10 | 0.07 |
| (1,361) | 1:A:72:GLN:H | 1:A:78:ILE:HD13 | 10 | 0.07 |
| (1,358) | 1:A:90:ILE:HD11 | 1:A:113:LEU:HD11 | 18 | 0.07 |
| (1,358) | 1:A:90:ILE:HD11 | 1:A:113:LEU:HD12 | 18 | 0.07 |
| (1,358) | 1:A:90:ILE:HD11 | 1:A:113:LEU:HD13 | 18 | 0.07 |
| (1,358) | 1:A:90:ILE:HD12 | 1:A:113:LEU:HD11 | 18 | 0.07 |
| (1,358) | 1:A:90:ILE:HD12 | 1:A:113:LEU:HD12 | 18 | 0.07 |
| (1,358) | 1:A:90:ILE:HD12 | 1:A:113:LEU:HD13 | 18 | 0.07 |
| (1,358) | 1:A:90:ILE:HD13 | 1:A:113:LEU:HD11 | 18 | 0.07 |
| (1,358) | 1:A:90:ILE:HD13 | 1:A:113:LEU:HD12 | 18 | 0.07 |
| (1,358) | 1:A:90:ILE:HD13 | 1:A:113:LEU:HD13 | 18 | 0.07 |
| (1,334) | 1:A:90:ILE:H | 1:A:91:VAL:HG21 | 11 | 0.07 |
| (1,334) | 1:A:90:ILE:H | 1:A:91:VAL:HG22 | 11 | 0.07 |
| (1,334) | 1:A:90:ILE:H | 1:A:91:VAL:HG23 | 11 | 0.07 |
| (1,326) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:80:THR:H | 16 | 0.07 |
| (1,326) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:80:THR:H | 16 | 0.07 |
| (1,326) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:80:THR:H | 16 | 0.07 |
| (1,295) | 1:A:153:LEU:H | 1:A:190:LEU:HD21 | 15 | 0.07 |
| (1,295) | 1:A:153:LEU:H | 1:A:190:LEU:HD22 | 15 | 0.07 |
| (1,295) | 1:A:153:LEU:H | 1:A:190:LEU:HD23 | 15 | 0.07 |
| (1,286) | 1:A:125:GLY:H | 1:A:194:LYS:H | 17 | 0.07 |
| (1,265) | 1:A:72:GLN:H | 1:A:76:VAL:HG21 | 13 | 0.07 |
| (1,265) | 1:A:72:GLN:H | 1:A:76:VAL:HG22 | 13 | 0.07 |
| (1,265) | 1:A:72:GLN:H | 1:A:76:VAL:HG23 | 13 | 0.07 |
| (1,264) | 1:A:30:GLN:H | 1:A:33:ILE:HD11 | 7 | 0.07 |
| (1,264) | 1:A:30:GLN:H | 1:A:33:ILE:HD12 | 7 | 0.07 |
| (1,264) | 1:A:30:GLN:H | 1:A:33:ILE:HD13 | 7 | 0.07 |
| (1,260) | 1:A:171:LEU:HD21 | 1:A:189:GLN:H | 16 | 0.07 |
| (1,260) | 1:A:171:LEU:HD22 | 1:A:189:GLN:H | 16 | 0.07 |
| (1,260) | 1:A:171:LEU:HD23 | 1:A:189:GLN:H | 16 | 0.07 |
| (1,260) | 1:A:171:LEU:HD21 | 1:A:189:GLN:H | 20 | 0.07 |
| (1,260) | 1:A:171:LEU:HD22 | 1:A:189:GLN:H | 20 | 0.07 |
| (1,260) | 1:A:171:LEU:HD23 | 1:A:189:GLN:H | 20 | 0.07 |
| (1,259) | 1:A:71:ALA:H | 1:A:78:ILE:HD11 | 1 | 0.07 |
| (1,259) | 1:A:71:ALA:H | 1:A:78:ILE:HD12 | 1 | 0.07 |
| (1,259) | 1:A:71:ALA:H | 1:A:78:ILE:HD13 | 1 | 0.07 |
| (1,254) | 1:A:57:VAL:HG11 | 1:A:83:SER:H | 6 | 0.07 |
| (1,254) | 1:A:57:VAL:HG12 | 1:A:83:SER:H | 6 | 0.07 |
| (1,254) | 1:A:57:VAL:HG13 | 1:A:83:SER:H | 6 | 0.07 |
| (1,254) | 1:A:57:VAL:HG11 | 1:A:83:SER:H | 18 | 0.07 |
| (1,254) | 1:A:57:VAL:HG12 | 1:A:83:SER:H | 18 | 0.07 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|-----------------|------------------|-------|---------------|
| (1,254) | 1:A:57:VAL:HG13 | 1:A:83:SER:H | 18 | 0.07 |
| (1,230) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:150:LEU:HD21 | 12 | 0.07 |
| (1,230) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:150:LEU:HD22 | 12 | 0.07 |
| (1,230) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:150:LEU:HD23 | 12 | 0.07 |
| (1,229) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:147:LEU:HD21 | 10 | 0.07 |
| (1,229) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:147:LEU:HD22 | 10 | 0.07 |
| (1,229) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:147:LEU:HD23 | 10 | 0.07 |
| (1,229) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:147:LEU:HD21 | 19 | 0.07 |
| (1,229) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:147:LEU:HD22 | 19 | 0.07 |
| (1,229) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:147:LEU:HD23 | 19 | 0.07 |
| (1,211) | 1:A:85:LEU:H | 1:A:88:PHE:H | 9 | 0.07 |
| (1,207) | 1:A:60:SER:H | 1:A:64:LEU:HD11 | 11 | 0.07 |
| (1,207) | 1:A:60:SER:H | 1:A:64:LEU:HD12 | 11 | 0.07 |
| (1,207) | 1:A:60:SER:H | 1:A:64:LEU:HD13 | 11 | 0.07 |
| (1,207) | 1:A:60:SER:H | 1:A:64:LEU:HD11 | 12 | 0.07 |
| (1,207) | 1:A:60:SER:H | 1:A:64:LEU:HD12 | 12 | 0.07 |
| (1,207) | 1:A:60:SER:H | 1:A:64:LEU:HD13 | 12 | 0.07 |
| (1,207) | 1:A:60:SER:H | 1:A:64:LEU:HD11 | 14 | 0.07 |
| (1,207) | 1:A:60:SER:H | 1:A:64:LEU:HD12 | 14 | 0.07 |
| (1,207) | 1:A:60:SER:H | 1:A:64:LEU:HD13 | 14 | 0.07 |
| (1,206) | 1:A:60:SER:H | 1:A:62:VAL:HG21 | 3 | 0.07 |
| (1,206) | 1:A:60:SER:H | 1:A:62:VAL:HG22 | 3 | 0.07 |
| (1,206) | 1:A:60:SER:H | 1:A:62:VAL:HG23 | 3 | 0.07 |
| (1,206) | 1:A:60:SER:H | 1:A:62:VAL:HG21 | 12 | 0.07 |
| (1,206) | 1:A:60:SER:H | 1:A:62:VAL:HG22 | 12 | 0.07 |
| (1,206) | 1:A:60:SER:H | 1:A:62:VAL:HG23 | 12 | 0.07 |
| (1,205) | 1:A:24:VAL:HG11 | 1:A:192:GLY:H | 6 | 0.07 |
| (1,205) | 1:A:24:VAL:HG12 | 1:A:192:GLY:H | 6 | 0.07 |
| (1,205) | 1:A:24:VAL:HG13 | 1:A:192:GLY:H | 6 | 0.07 |
| (1,174) | 1:A:61:SER:H | 1:A:62:VAL:HG11 | 7 | 0.07 |
| (1,174) | 1:A:61:SER:H | 1:A:62:VAL:HG12 | 7 | 0.07 |
| (1,174) | 1:A:61:SER:H | 1:A:62:VAL:HG13 | 7 | 0.07 |
| (1,174) | 1:A:61:SER:H | 1:A:62:VAL:HG11 | 8 | 0.07 |
| (1,174) | 1:A:61:SER:H | 1:A:62:VAL:HG12 | 8 | 0.07 |
| (1,174) | 1:A:61:SER:H | 1:A:62:VAL:HG13 | 8 | 0.07 |
| (1,174) | 1:A:61:SER:H | 1:A:62:VAL:HG11 | 12 | 0.07 |
| (1,174) | 1:A:61:SER:H | 1:A:62:VAL:HG12 | 12 | 0.07 |
| (1,174) | 1:A:61:SER:H | 1:A:62:VAL:HG13 | 12 | 0.07 |
| (1,163) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:81:VAL:H | 17 | 0.07 |
| (1,163) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:81:VAL:H | 17 | 0.07 |
| (1,163) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:81:VAL:H | 17 | 0.07 |
| (1,158) | 1:A:163:LEU:H | 1:A:195:LEU:HD21 | 19 | 0.07 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,158) | 1:A:163:LEU:H | 1:A:195:LEU:HD22 | 19 | 0.07 |
| (1,158) | 1:A:163:LEU:H | 1:A:195:LEU:HD23 | 19 | 0.07 |
| (1,155) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:57:VAL:H | 4 | 0.07 |
| (1,155) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:57:VAL:H | 4 | 0.07 |
| (1,155) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:57:VAL:H | 4 | 0.07 |
| (1,155) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:57:VAL:H | 16 | 0.07 |
| (1,155) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:57:VAL:H | 16 | 0.07 |
| (1,155) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:57:VAL:H | 16 | 0.07 |
| (1,155) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:57:VAL:H | 17 | 0.07 |
| (1,155) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:57:VAL:H | 17 | 0.07 |
| (1,155) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:57:VAL:H | 17 | 0.07 |
| (1,153) | 1:A:57:VAL:H | 1:A:81:VAL:HG21 | 3 | 0.07 |
| (1,153) | 1:A:57:VAL:H | 1:A:81:VAL:HG22 | 3 | 0.07 |
| (1,153) | 1:A:57:VAL:H | 1:A:81:VAL:HG23 | 3 | 0.07 |
| (1,153) | 1:A:57:VAL:H | 1:A:81:VAL:HG21 | 19 | 0.07 |
| (1,153) | 1:A:57:VAL:H | 1:A:81:VAL:HG22 | 19 | 0.07 |
| (1,153) | 1:A:57:VAL:H | 1:A:81:VAL:HG23 | 19 | 0.07 |
| (1,1121) | 1:A:169:ASN:H | 1:A:189:GLN:O | 9 | 0.07 |
| (1,1121) | 1:A:169:ASN:H | 1:A:189:GLN:O | 14 | 0.07 |
| (1,1117) | 1:A:167:ILE:H | 1:A:191:LEU:O | 17 | 0.07 |
| (1,1105) | 1:A:102:PHE:H | 1:A:128:ILE:O | 6 | 0.07 |
| (1,1099) | 1:A:124:GLY:O | 1:A:98:ILE:H | 4 | 0.07 |
| (1,1098) | 1:A:124:GLY:O | 1:A:98:ILE:N | 12 | 0.07 |
| (1,1074) | 1:A:110:ARG:O | 1:A:114:TYR:H | 20 | 0.07 |
| (1,1046) | 1:A:46:PHE:O | 1:A:50:LEU:H | 6 | 0.07 |
| (1,1046) | 1:A:46:PHE:O | 1:A:50:LEU:H | 20 | 0.07 |
| (1,1042) | 1:A:44:ALA:O | 1:A:48:ALA:H | 10 | 0.07 |
| (1,1036) | 1:A:24:VAL:O | 1:A:28:ILE:H | 17 | 0.07 |
| (1,1034) | 1:A:23:SER:O | 1:A:27:GLN:H | 17 | 0.07 |
| (1,1026) | 1:A:95:TRP:HE1 | 1:A:91:VAL:H | 1 | 0.07 |
| (1,1017) | 1:A:101:ILE:HA | 1:A:128:ILE:H | 15 | 0.07 |
| (1,1017) | 1:A:101:ILE:HA | 1:A:128:ILE:H | 16 | 0.07 |
| (1,1016) | 1:A:165:TRP:HZ3 | 1:A:127:PHE:HZ | 16 | 0.07 |
| (1,994) | 1:A:79:THR:H | 1:A:54:VAL:H | 8 | 0.06 |
| (1,989) | 1:A:163:LEU:HD11 | 1:A:165:TRP:HE1 | 15 | 0.06 |
| (1,989) | 1:A:163:LEU:HD12 | 1:A:165:TRP:HE1 | 15 | 0.06 |
| (1,989) | 1:A:163:LEU:HD13 | 1:A:165:TRP:HE1 | 15 | 0.06 |
| (1,988) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:H | 14 | 0.06 |
| (1,988) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:H | 14 | 0.06 |
| (1,988) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:H | 14 | 0.06 |
| (1,988) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:H | 18 | 0.06 |
| (1,988) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:H | 18 | 0.06 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,988) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:H | 18 | 0.06 |
| (1,988) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:H | 19 | 0.06 |
| (1,988) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:H | 19 | 0.06 |
| (1,988) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:H | 19 | 0.06 |
| (1,972) | 1:A:85:LEU:HD21 | 1:A:89:ASP:H | 8 | 0.06 |
| (1,972) | 1:A:85:LEU:HD22 | 1:A:89:ASP:H | 8 | 0.06 |
| (1,972) | 1:A:85:LEU:HD23 | 1:A:89:ASP:H | 8 | 0.06 |
| (1,963) | 1:A:117:VAL:HG11 | 1:A:120:GLY:H | 2 | 0.06 |
| (1,963) | 1:A:117:VAL:HG12 | 1:A:120:GLY:H | 2 | 0.06 |
| (1,963) | 1:A:117:VAL:HG13 | 1:A:120:GLY:H | 2 | 0.06 |
| (1,963) | 1:A:117:VAL:HG11 | 1:A:120:GLY:H | 8 | 0.06 |
| (1,963) | 1:A:117:VAL:HG12 | 1:A:120:GLY:H | 8 | 0.06 |
| (1,963) | 1:A:117:VAL:HG13 | 1:A:120:GLY:H | 8 | 0.06 |
| (1,962) | 1:A:26:ASN:H | 1:A:28:ILE:HD11 | 10 | 0.06 |
| (1,962) | 1:A:26:ASN:H | 1:A:28:ILE:HD12 | 10 | 0.06 |
| (1,962) | 1:A:26:ASN:H | 1:A:28:ILE:HD13 | 10 | 0.06 |
| (1,960) | 1:A:160:LEU:HD21 | 1:A:162:SER:H | 19 | 0.06 |
| (1,960) | 1:A:160:LEU:HD22 | 1:A:162:SER:H | 19 | 0.06 |
| (1,960) | 1:A:160:LEU:HD23 | 1:A:162:SER:H | 19 | 0.06 |
| (1,954) | 1:A:70:LEU:H | 1:A:78:ILE:HD11 | 3 | 0.06 |
| (1,954) | 1:A:70:LEU:H | 1:A:78:ILE:HD12 | 3 | 0.06 |
| (1,954) | 1:A:70:LEU:H | 1:A:78:ILE:HD13 | 3 | 0.06 |
| (1,942) | 1:A:49:SER:H | 1:A:50:LEU:HD21 | 1 | 0.06 |
| (1,942) | 1:A:49:SER:H | 1:A:50:LEU:HD22 | 1 | 0.06 |
| (1,942) | 1:A:49:SER:H | 1:A:50:LEU:HD23 | 1 | 0.06 |
| (1,937) | 1:A:167:ILE:H | 1:A:191:LEU:HD21 | 1 | 0.06 |
| (1,937) | 1:A:167:ILE:H | 1:A:191:LEU:HD22 | 1 | 0.06 |
| (1,937) | 1:A:167:ILE:H | 1:A:191:LEU:HD23 | 1 | 0.06 |
| (1,932) | 1:A:172:GLU:H | 1:A:187:LEU:HD11 | 15 | 0.06 |
| (1,932) | 1:A:172:GLU:H | 1:A:187:LEU:HD12 | 15 | 0.06 |
| (1,932) | 1:A:172:GLU:H | 1:A:187:LEU:HD13 | 15 | 0.06 |
| (1,932) | 1:A:172:GLU:H | 1:A:187:LEU:HD11 | 18 | 0.06 |
| (1,932) | 1:A:172:GLU:H | 1:A:187:LEU:HD12 | 18 | 0.06 |
| (1,932) | 1:A:172:GLU:H | 1:A:187:LEU:HD13 | 18 | 0.06 |
| (1,931) | 1:A:73:GLU:H | 1:A:76:VAL:HG21 | 3 | 0.06 |
| (1,931) | 1:A:73:GLU:H | 1:A:76:VAL:HG22 | 3 | 0.06 |
| (1,931) | 1:A:73:GLU:H | 1:A:76:VAL:HG23 | 3 | 0.06 |
| (1,921) | 1:A:164:ASN:H | 1:A:195:LEU:HD11 | 4 | 0.06 |
| (1,921) | 1:A:164:ASN:H | 1:A:195:LEU:HD12 | 4 | 0.06 |
| (1,921) | 1:A:164:ASN:H | 1:A:195:LEU:HD13 | 4 | 0.06 |
| (1,911) | 1:A:56:ALA:H | 1:A:64:LEU:HD11 | 5 | 0.06 |
| | | | | |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,911) | 1:A:56:ALA:H | 1:A:64:LEU:HD13 | 5 | 0.06 |
| (1,91) | 1:A:112:GLN:H | 1:A:114:TYR:H | 15 | 0.06 |
| (1,91) | 1:A:112:GLN:H | 1:A:114:TYR:H | 18 | 0.06 |
| (1,900) | 1:A:153:LEU:H | 1:A:190:LEU:HD11 | 19 | 0.06 |
| (1,900) | 1:A:153:LEU:H | 1:A:190:LEU:HD12 | 19 | 0.06 |
| (1,900) | 1:A:153:LEU:H | 1:A:190:LEU:HD13 | 19 | 0.06 |
| (1,897) | 1:A:163:LEU:HD21 | 1:A:193:GLN:H | 8 | 0.06 |
| (1,897) | 1:A:163:LEU:HD22 | 1:A:193:GLN:H | 8 | 0.06 |
| (1,897) | 1:A:163:LEU:HD23 | 1:A:193:GLN:H | 8 | 0.06 |
| (1,897) | 1:A:163:LEU:HD21 | 1:A:193:GLN:H | 13 | 0.06 |
| (1,897) | 1:A:163:LEU:HD22 | 1:A:193:GLN:H | 13 | 0.06 |
| (1,897) | 1:A:163:LEU:HD23 | 1:A:193:GLN:H | 13 | 0.06 |
| (1,893) | 1:A:129:LEU:H | 1:A:129:LEU:HD21 | 13 | 0.06 |
| (1,893) | 1:A:129:LEU:H | 1:A:129:LEU:HD22 | 13 | 0.06 |
| (1,893) | 1:A:129:LEU:H | 1:A:129:LEU:HD23 | 13 | 0.06 |
| (1,885) | 1:A:50:LEU:H | 1:A:54:VAL:HG21 | 18 | 0.06 |
| (1,885) | 1:A:50:LEU:H | 1:A:54:VAL:HG22 | 18 | 0.06 |
| (1,885) | 1:A:50:LEU:H | 1:A:54:VAL:HG23 | 18 | 0.06 |
| (1,881) | 1:A:78:ILE:HD11 | 1:A:79:THR:H | 13 | 0.06 |
| (1,881) | 1:A:78:ILE:HD12 | 1:A:79:THR:H | 13 | 0.06 |
| (1,881) | 1:A:78:ILE:HD13 | 1:A:79:THR:H | 13 | 0.06 |
| (1,854) | 1:A:131:GLY:H | 1:A:153:LEU:HD21 | 12 | 0.06 |
| (1,854) | 1:A:131:GLY:H | 1:A:153:LEU:HD22 | 12 | 0.06 |
| (1,854) | 1:A:131:GLY:H | 1:A:153:LEU:HD23 | 12 | 0.06 |
| (1,823) | 1:A:23:SER:H | 1:A:24:VAL:HG21 | 15 | 0.06 |
| (1,823) | 1:A:23:SER:H | 1:A:24:VAL:HG22 | 15 | 0.06 |
| (1,823) | 1:A:23:SER:H | 1:A:24:VAL:HG23 | 15 | 0.06 |
| (1,809) | 1:A:91:VAL:HG11 | 1:A:92:ALA:H | 4 | 0.06 |
| (1,809) | 1:A:91:VAL:HG12 | 1:A:92:ALA:H | 4 | 0.06 |
| (1,809) | 1:A:91:VAL:HG13 | 1:A:92:ALA:H | 4 | 0.06 |
| (1,798) | 1:A:86:ALA:H | 1:A:109:LEU:HD11 | 17 | 0.06 |
| (1,798) | 1:A:86:ALA:H | 1:A:109:LEU:HD12 | 17 | 0.06 |
| (1,798) | 1:A:86:ALA:H | 1:A:109:LEU:HD13 | 17 | 0.06 |
| (1,79) | 1:A:175:LEU:HD21 | 1:A:185:ALA:H | 18 | 0.06 |
| (1,79) | 1:A:175:LEU:HD22 | 1:A:185:ALA:H | 18 | 0.06 |
| (1,79) | 1:A:175:LEU:HD23 | 1:A:185:ALA:H | 18 | 0.06 |
| (1,781) | 1:A:126:VAL:HG11 | 1:A:194:LYS:H | 7 | 0.06 |
| (1,781) | 1:A:126:VAL:HG12 | 1:A:194:LYS:H | 7 | 0.06 |
| (1,781) | 1:A:126:VAL:HG13 | 1:A:194:LYS:H | 7 | 0.06 |
| (1,781) | 1:A:126:VAL:HG11 | 1:A:194:LYS:H | 11 | 0.06 |
| (1,781) | 1:A:126:VAL:HG12 | 1:A:194:LYS:H | 11 | 0.06 |
| (1,781) | 1:A:126:VAL:HG13 | 1:A:194:LYS:H | 11 | 0.06 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,777) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:83:SER:H | 10 | 0.06 |
| (1,777) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:83:SER:H | 10 | 0.06 |
| (1,777) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:83:SER:H | 10 | 0.06 |
| (1,776) | 1:A:153:LEU:HD11 | 1:A:190:LEU:HD11 | 9 | 0.06 |
| (1,776) | 1:A:153:LEU:HD11 | 1:A:190:LEU:HD12 | 9 | 0.06 |
| (1,776) | 1:A:153:LEU:HD11 | 1:A:190:LEU:HD13 | 9 | 0.06 |
| (1,776) | 1:A:153:LEU:HD12 | 1:A:190:LEU:HD11 | 9 | 0.06 |
| (1,776) | 1:A:153:LEU:HD12 | 1:A:190:LEU:HD12 | 9 | 0.06 |
| (1,776) | 1:A:153:LEU:HD12 | 1:A:190:LEU:HD13 | 9 | 0.06 |
| (1,776) | 1:A:153:LEU:HD13 | 1:A:190:LEU:HD11 | 9 | 0.06 |
| (1,776) | 1:A:153:LEU:HD13 | 1:A:190:LEU:HD12 | 9 | 0.06 |
| (1,776) | 1:A:153:LEU:HD13 | 1:A:190:LEU:HD13 | 9 | 0.06 |
| (1,776) | 1:A:153:LEU:HD11 | 1:A:190:LEU:HD11 | 11 | 0.06 |
| (1,776) | 1:A:153:LEU:HD11 | 1:A:190:LEU:HD12 | 11 | 0.06 |
| (1,776) | 1:A:153:LEU:HD11 | 1:A:190:LEU:HD13 | 11 | 0.06 |
| (1,776) | 1:A:153:LEU:HD12 | 1:A:190:LEU:HD11 | 11 | 0.06 |
| (1,776) | 1:A:153:LEU:HD12 | 1:A:190:LEU:HD12 | 11 | 0.06 |
| (1,776) | 1:A:153:LEU:HD12 | 1:A:190:LEU:HD13 | 11 | 0.06 |
| (1,776) | 1:A:153:LEU:HD13 | 1:A:190:LEU:HD11 | 11 | 0.06 |
| (1,776) | 1:A:153:LEU:HD13 | 1:A:190:LEU:HD12 | 11 | 0.06 |
| (1,776) | 1:A:153:LEU:HD13 | 1:A:190:LEU:HD13 | 11 | 0.06 |
| (1,776) | 1:A:153:LEU:HD11 | 1:A:190:LEU:HD11 | 13 | 0.06 |
| (1,776) | 1:A:153:LEU:HD11 | 1:A:190:LEU:HD12 | 13 | 0.06 |
| (1,776) | 1:A:153:LEU:HD11 | 1:A:190:LEU:HD13 | 13 | 0.06 |
| (1,776) | 1:A:153:LEU:HD12 | 1:A:190:LEU:HD11 | 13 | 0.06 |
| (1,776) | 1:A:153:LEU:HD12 | 1:A:190:LEU:HD12 | 13 | 0.06 |
| (1,776) | 1:A:153:LEU:HD12 | 1:A:190:LEU:HD13 | 13 | 0.06 |
| (1,776) | 1:A:153:LEU:HD13 | 1:A:190:LEU:HD11 | 13 | 0.06 |
| (1,776) | 1:A:153:LEU:HD13 | 1:A:190:LEU:HD12 | 13 | 0.06 |
| (1,776) | 1:A:153:LEU:HD13 | 1:A:190:LEU:HD13 | 13 | 0.06 |
| (1,773) | 1:A:126:VAL:HG21 | 1:A:166:LEU:HD11 | 1 | 0.06 |
| (1,773) | 1:A:126:VAL:HG21 | 1:A:166:LEU:HD12 | 1 | 0.06 |
| (1,773) | 1:A:126:VAL:HG21 | 1:A:166:LEU:HD13 | 1 | 0.06 |
| (1,773) | 1:A:126:VAL:HG22 | 1:A:166:LEU:HD11 | 1 | 0.06 |
| (1,773) | 1:A:126:VAL:HG22 | 1:A:166:LEU:HD12 | 1 | 0.06 |
| (1,773) | 1:A:126:VAL:HG22 | 1:A:166:LEU:HD13 | 1 | 0.06 |
| (1,773) | 1:A:126:VAL:HG23 | 1:A:166:LEU:HD11 | 1 | 0.06 |
| (1,773) | 1:A:126:VAL:HG23 | 1:A:166:LEU:HD12 | 1 | 0.06 |
| (1,773) | 1:A:126:VAL:HG23 | 1:A:166:LEU:HD13 | 1 | 0.06 |
| (1,773) | 1:A:126:VAL:HG21 | 1:A:166:LEU:HD11 | 6 | 0.06 |
| (1,773) | 1:A:126:VAL:HG21 | 1:A:166:LEU:HD12 | 6 | 0.06 |
| (1,773) | 1:A:126:VAL:HG21 | 1:A:166:LEU:HD13 | 6 | 0.06 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,773) | 1:A:126:VAL:HG22 | 1:A:166:LEU:HD11 | 6 | 0.06 |
| (1,773) | 1:A:126:VAL:HG22 | 1:A:166:LEU:HD12 | 6 | 0.06 |
| (1,773) | 1:A:126:VAL:HG22 | 1:A:166:LEU:HD13 | 6 | 0.06 |
| (1,773) | 1:A:126:VAL:HG23 | 1:A:166:LEU:HD11 | 6 | 0.06 |
| (1,773) | 1:A:126:VAL:HG23 | 1:A:166:LEU:HD12 | 6 | 0.06 |
| (1,773) | 1:A:126:VAL:HG23 | 1:A:166:LEU:HD13 | 6 | 0.06 |
| (1,769) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:121:LEU:HD11 | 20 | 0.06 |
| (1,769) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:121:LEU:HD12 | 20 | 0.06 |
| (1,769) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:121:LEU:HD13 | 20 | 0.06 |
| (1,769) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:121:LEU:HD11 | 20 | 0.06 |
| (1,769) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:121:LEU:HD12 | 20 | 0.06 |
| (1,769) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:121:LEU:HD13 | 20 | 0.06 |
| (1,769) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:121:LEU:HD11 | 20 | 0.06 |
| (1,769) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:121:LEU:HD12 | 20 | 0.06 |
| (1,769) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:121:LEU:HD13 | 20 | 0.06 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD21 | 1:A:99:VAL:HG21 | 10 | 0.06 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD21 | 1:A:99:VAL:HG22 | 10 | 0.06 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD21 | 1:A:99:VAL:HG23 | 10 | 0.06 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD22 | 1:A:99:VAL:HG21 | 10 | 0.06 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD22 | 1:A:99:VAL:HG22 | 10 | 0.06 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD22 | 1:A:99:VAL:HG23 | 10 | 0.06 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD23 | 1:A:99:VAL:HG21 | 10 | 0.06 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD23 | 1:A:99:VAL:HG22 | 10 | 0.06 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD23 | 1:A:99:VAL:HG23 | 10 | 0.06 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD21 | 1:A:99:VAL:HG21 | 15 | 0.06 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD21 | 1:A:99:VAL:HG22 | 15 | 0.06 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD21 | 1:A:99:VAL:HG23 | 15 | 0.06 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD22 | 1:A:99:VAL:HG21 | 15 | 0.06 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD22 | 1:A:99:VAL:HG22 | 15 | 0.06 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD22 | 1:A:99:VAL:HG23 | 15 | 0.06 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD23 | 1:A:99:VAL:HG21 | 15 | 0.06 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD23 | 1:A:99:VAL:HG22 | 15 | 0.06 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD23 | 1:A:99:VAL:HG23 | 15 | 0.06 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD11 | 12 | 0.06 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD12 | 12 | 0.06 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD13 | 12 | 0.06 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD11 | 12 | 0.06 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD12 | 12 | 0.06 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD13 | 12 | 0.06 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD11 | 12 | 0.06 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD12 | 12 | 0.06 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD13 | 12 | 0.06 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,690) | 1:A:36:LEU:HD11 | 1:A:105:LEU:HD21 | 15 | 0.06 |
| (1,690) | 1:A:36:LEU:HD11 | 1:A:105:LEU:HD22 | 15 | 0.06 |
| (1,690) | 1:A:36:LEU:HD11 | 1:A:105:LEU:HD23 | 15 | 0.06 |
| (1,690) | 1:A:36:LEU:HD12 | 1:A:105:LEU:HD21 | 15 | 0.06 |
| (1,690) | 1:A:36:LEU:HD12 | 1:A:105:LEU:HD22 | 15 | 0.06 |
| (1,690) | 1:A:36:LEU:HD12 | 1:A:105:LEU:HD23 | 15 | 0.06 |
| (1,690) | 1:A:36:LEU:HD13 | 1:A:105:LEU:HD21 | 15 | 0.06 |
| (1,690) | 1:A:36:LEU:HD13 | 1:A:105:LEU:HD22 | 15 | 0.06 |
| (1,690) | 1:A:36:LEU:HD13 | 1:A:105:LEU:HD23 | 15 | 0.06 |
| (1,679) | 1:A:171:LEU:HD11 | 1:A:187:LEU:HD11 | 1 | 0.06 |
| (1,679) | 1:A:171:LEU:HD11 | 1:A:187:LEU:HD12 | 1 | 0.06 |
| (1,679) | 1:A:171:LEU:HD11 | 1:A:187:LEU:HD13 | 1 | 0.06 |
| (1,679) | 1:A:171:LEU:HD12 | 1:A:187:LEU:HD11 | 1 | 0.06 |
| (1,679) | 1:A:171:LEU:HD12 | 1:A:187:LEU:HD12 | 1 | 0.06 |
| (1,679) | 1:A:171:LEU:HD12 | 1:A:187:LEU:HD13 | 1 | 0.06 |
| (1,679) | 1:A:171:LEU:HD13 | 1:A:187:LEU:HD11 | 1 | 0.06 |
| (1,679) | 1:A:171:LEU:HD13 | 1:A:187:LEU:HD12 | 1 | 0.06 |
| (1,679) | 1:A:171:LEU:HD13 | 1:A:187:LEU:HD13 | 1 | 0.06 |
| (1,673) | 1:A:36:LEU:HD21 | 1:A:90:ILE:HD11 | 14 | 0.06 |
| (1,673) | 1:A:36:LEU:HD21 | 1:A:90:ILE:HD12 | 14 | 0.06 |
| (1,673) | 1:A:36:LEU:HD21 | 1:A:90:ILE:HD13 | 14 | 0.06 |
| (1,673) | 1:A:36:LEU:HD22 | 1:A:90:ILE:HD11 | 14 | 0.06 |
| (1,673) | 1:A:36:LEU:HD22 | 1:A:90:ILE:HD12 | 14 | 0.06 |
| (1,673) | 1:A:36:LEU:HD22 | 1:A:90:ILE:HD13 | 14 | 0.06 |
| (1,673) | 1:A:36:LEU:HD23 | 1:A:90:ILE:HD11 | 14 | 0.06 |
| (1,673) | 1:A:36:LEU:HD23 | 1:A:90:ILE:HD12 | 14 | 0.06 |
| (1,673) | 1:A:36:LEU:HD23 | 1:A:90:ILE:HD13 | 14 | 0.06 |
| (1,665) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:121:LEU:HD21 | 20 | 0.06 |
| (1,665) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:121:LEU:HD22 | 20 | 0.06 |
| (1,665) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:121:LEU:HD23 | 20 | 0.06 |
| (1,665) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:121:LEU:HD21 | 20 | 0.06 |
| (1,665) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:121:LEU:HD22 | 20 | 0.06 |
| (1,665) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:121:LEU:HD23 | 20 | 0.06 |
| (1,665) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:121:LEU:HD21 | 20 | 0.06 |
| (1,665) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:121:LEU:HD22 | 20 | 0.06 |
| (1,665) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:121:LEU:HD23 | 20 | 0.06 |
| (1,635) | 1:A:113:LEU:H | 1:A:114:TYR:H | 3 | 0.06 |
| (1,635) | 1:A:113:LEU:H | 1:A:114:TYR:H | 4 | 0.06 |
| (1,635) | 1:A:113:LEU:H | 1:A:114:TYR:H | 9 | 0.06 |
| (1,635) | 1:A:113:LEU:H | 1:A:114:TYR:H | 16 | 0.06 |
| (1,635) | 1:A:113:LEU:H | 1:A:114:TYR:H | 18 | 0.06 |
| (1,625) | 1:A:135:GLU:H | 1:A:137:LEU:H | 19 | 0.06 |



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

| (1,624) 1:A:133:ALA:H 1:A:137:LEU:H 20 0.06 (1,526) 1:A:133:ALA:H 1:A:137:LEU:H 17 0.06 (1,596) 1:A:164:ASN:H 1:A:195:LEU:H 4 0.06 (1,573) 1:A:169:ASN:H 1:A:155:THR:H 10 0.06 (1,574) 1:A:36:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD21 13 0.06 (1,574) 1:A:36:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD22 13 0.06 (1,574) 1:A:36:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD22 13 0.06 (1,574) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD22 13 0.06 (1,574) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD22 13 0.06 (1,574) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD23 13 0.06 (1,574) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD23 3 0.06 (1,574) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 3 0.06 (1,574) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 13 0.06 (1,574) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:85:L | Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|--|---------|------------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,596) 1:A:164:ASN:H 1:A:155:LEU:H 4 0.06 (1,593) 1:A:152:LYS:H 1:A:155:THR:H 10 0.06 (1,579) 1:A:169:ASN:H 1:A:155:THR:H 10 0.06 (1,574) 1:A:36:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD21 13 0.06 (1,574) 1:A:36:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD22 13 0.06 (1,574) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD23 13 0.06 (1,574) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD21 13 0.06 (1,574) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD22 13 0.06 (1,574) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD22 13 0.06 (1,574) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD22 13 0.06 (1,574) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD22 13 0.06 (1,574) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD22 13 0.06 (1,574) 1:A:37:LEU:HD21 1:A:45:LYS:H 14 0.06 (1,575) 1:A:137:LEU:HD21 1:A: | (1,624) | 1:A:133:ALA:H | 1:A:135:GLU:H | 20 | 0.06 |
| (1,579) 1:A:169:ASN:H 1:A:189:GLN:H 14 0.06 (1,574) 1:A:36:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD21 13 0.06 (1,574) 1:A:36:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD22 13 0.06 (1,574) 1:A:36:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 13 0.06 (1,574) 1:A:36:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 13 0.06 (1,574) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD21 13 0.06 (1,574) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD22 13 0.06 (1,574) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD23 13 0.06 (1,574) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 13 0.06 (1,574) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD22 13 0.06 (1,574) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD22 13 0.06 (1,574) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 13 0.06 (1,576) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:145:LYS:H 14 0.06 (1,570) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:145:LYS:H 14 0.06 (1,570) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:145:LYS:H 14 0.06 (1,570) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:145:LYS:H 14 0.06 (1,567) 1:A:70:LEU:HD11 1:A:74:LYS:H 14 0.06 (1,567) 1:A:70:LEU:HD11 1:A:74:LYS:H 14 0.06 (1,567) 1:A:70:LEU:HD11 1:A:74:LYS:H 14 0.06 (1,567) 1:A:70:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG21 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG21 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG21 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG21 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG21 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG21 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG21 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG21 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG21 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG22 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG21 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG22 19 0.06 (1,563) 1:A:5 | (1,622) | 1:A:133:ALA:H | 1:A:137:LEU:H | 17 | 0.06 |
| (1,579) 1:A:169:ASN:H 1:A:189:GLN:H 14 0.06 (1,574) 1:A:36:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD21 13 0.06 (1,574) 1:A:36:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD22 13 0.06 (1,574) 1:A:36:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD22 13 0.06 (1,574) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD21 13 0.06 (1,574) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD21 13 0.06 (1,574) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD22 13 0.06 (1,574) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD22 13 0.06 (1,574) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD23 13 0.06 (1,574) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 13 0.06 (1,574) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 13 0.06 (1,574) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD21 13 0.06 (1,574) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD21 13 0.06 (1,574) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 13 0.06 (1,574) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 13 0.06 (1,574) 1:A:37:LEU:HD21 1:A:45:LYS:H 14 0.06 (1,570) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:145:LYS:H 14 0.06 (1,570) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:145:LYS:H 14 0.06 (1,570) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:145:LYS:H 14 0.06 (1,567) 1:A:70:LEU:HD12 1:A:74:LYS:H 14 0.06 (1,567) 1:A:70:LEU:HD11 1:A:74:LYS:H 14 0.06 (1,567) 1:A:70:LEU:HD11 1:A:74:LYS:H 14 0.06 (1,567) 1:A:70:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG21 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG22 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG22 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG21 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG22 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG22 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG21 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG21 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LE | (1,596) | 1:A:164:ASN:H | 1:A:195:LEU:H | 4 | 0.06 |
| (1,574) 1:A:36:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD21 13 0.06 (1,574) 1:A:36:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD22 13 0.06 (1,574) 1:A:36:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 13 0.06 (1,574) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD22 13 0.06 (1,574) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD23 13 0.06 (1,574) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 13 0.06 (1,574) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD21 13 0.06 (1,574) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD22 13 0.06 (1,574) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 13 0.06 (1,574) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 13 0.06 (1,574) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 13 0.06 (1,570) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:145:LYS:H 14 0.06 (1,570) 1:A:157:LEU:HD12 1:A:145:LYS:H 14 0.06 (1,567) 1:A:70:LEU:HD13 | (1,593) | 1:A:152:LYS:H | 1:A:155:THR:H | 10 | 0.06 |
| (1,574) 1:A:36:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD22 13 0.06 (1,574) 1:A:36:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 13 0.06 (1,574) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD21 13 0.06 (1,574) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD22 13 0.06 (1,574) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD21 13 0.06 (1,574) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD21 13 0.06 (1,574) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD22 13 0.06 (1,574) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD22 13 0.06 (1,574) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 13 0.06 (1,570) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:145:LYS:H 14 0.06 (1,567) 1:A:172:LEU:HD23 1:A:145:LYS:H 14 0.06 (1,567) 1:A:70:LEU:HD11 1:A:74:LYS:H 14 0.06 (1,567) 1:A:70:LEU:HD12 1:A:74:LYS:H 14 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 < | (1,579) | 1:A:169:ASN:H | 1:A:189:GLN:H | 14 | 0.06 |
| (1,574) 1:A:36:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 13 0.06 (1,574) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD21 13 0.06 (1,574) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD23 13 0.06 (1,574) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 13 0.06 (1,574) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD22 13 0.06 (1,574) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD22 13 0.06 (1,574) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 13 0.06 (1,570) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:145:LYS:H 14 0.06 (1,570) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:145:LYS:H 14 0.06 (1,567) 1:A:70:LEU:HD13 1:A:74:LYS:H 14 0.06 (1,567) 1:A:70:LEU:HD11 1:A:74:LYS:H 14 0.06 (1,567) 1:A:70:LEU:HD13 1:A:74:LYS:H 14 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG21 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1 | (1,574) | 1:A:36:LEU:HD11 | 1:A:85:LEU:HD21 | 13 | 0.06 |
| (1,574) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD21 13 0.06 (1,574) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD22 13 0.06 (1,574) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD23 13 0.06 (1,574) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD21 13 0.06 (1,574) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD22 13 0.06 (1,574) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD22 13 0.06 (1,574) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD22 13 0.06 (1,570) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:145:LYS:H 14 0.06 (1,570) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:145:LYS:H 14 0.06 (1,570) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:145:LYS:H 14 0.06 (1,570) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:145:LYS:H 14 0.06 (1,567) 1:A:70:LEU:HD11 1:A:74:LYS:H 14 0.06 (1,567) 1:A:70:LEU:HD12 1:A:74:LYS:H 14 0.06 (1,567) 1:A:70:LEU:HD12 1:A:74:LYS:H 14 0.06 (1,567) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG21 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG22 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG22 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG22 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG23 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG23 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG21 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG21 19 0.06 (1,563) 1:A | (1,574) | 1:A:36:LEU:HD11 | 1:A:85:LEU:HD22 | 13 | 0.06 |
| (1,574) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD22 13 0.06 (1,574) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 13 0.06 (1,574) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD21 13 0.06 (1,574) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD22 13 0.06 (1,574) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD22 13 0.06 (1,570) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 13 0.06 (1,570) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:145:LYS:H 14 0.06 (1,570) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:145:LYS:H 14 0.06 (1,570) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:145:LYS:H 14 0.06 (1,570) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:145:LYS:H 14 0.06 (1,570) 1:A:70:LEU:HD12 1:A:145:LYS:H 14 0.06 (1,567) 1:A:70:LEU:HD11 1:A:74:LYS:H 14 0.06 (1,567) 1:A:70:LEU:HD12 1:A:74:LYS:H 14 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG21 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG21 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG23 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG23 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG23 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG21 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG21 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG21 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG21 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG21 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG22 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG21 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG21 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG21 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG21 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG21 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG21 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG21 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG21 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG21 19 0.06 (1,566) 1:A:47:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG23 19 0.06 (1,566) 1:A:47:LEU:HD14 1:A:54:VAL:HG23 19 0.06 (1,566) 1:A | (1,574) | 1:A:36:LEU:HD11 | 1:A:85:LEU:HD23 | 13 | 0.06 |
| (1,574) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD23 13 0.06 (1,574) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD21 13 0.06 (1,574) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD22 13 0.06 (1,574) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 13 0.06 (1,570) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:145:LYS:H 14 0.06 (1,570) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:145:LYS:H 14 0.06 (1,570) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:145:LYS:H 14 0.06 (1,567) 1:A:70:LEU:HD12 1:A:74:LYS:H 14 0.06 (1,567) 1:A:70:LEU:HD11 1:A:74:LYS:H 14 0.06 (1,567) 1:A:70:LEU:HD12 1:A:74:LYS:H 14 0.06 (1,567) 1:A:70:LEU:HD13 1:A:74:LYS:H 14 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG21 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG22 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54 | (1,574) | 1:A:36:LEU:HD12 | 1:A:85:LEU:HD21 | 13 | 0.06 |
| (1,574) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD21 13 0.06 (1,574) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD22 13 0.06 (1,574) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 13 0.06 (1,570) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:145:LYS:H 14 0.06 (1,570) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:145:LYS:H 14 0.06 (1,567) 1:A:70:LEU:HD123 1:A:145:LYS:H 14 0.06 (1,567) 1:A:70:LEU:HD11 1:A:74:LYS:H 14 0.06 (1,567) 1:A:70:LEU:HD12 1:A:74:LYS:H 14 0.06 (1,567) 1:A:70:LEU:HD12 1:A:74:LYS:H 14 0.06 (1,567) 1:A:70:LEU:HD13 1:A:74:LYS:H 14 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG21 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG22 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG22 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54: | (1,574) | 1:A:36:LEU:HD12 | 1:A:85:LEU:HD22 | 13 | 0.06 |
| (1,574) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD22 13 0.06 (1,574) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 13 0.06 (1,570) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:145:LYS:H 14 0.06 (1,570) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:145:LYS:H 14 0.06 (1,570) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:145:LYS:H 14 0.06 (1,567) 1:A:70:LEU:HD11 1:A:74:LYS:H 14 0.06 (1,567) 1:A:70:LEU:HD11 1:A:74:LYS:H 14 0.06 (1,567) 1:A:70:LEU:HD12 1:A:74:LYS:H 14 0.06 (1,567) 1:A:70:LEU:HD13 1:A:74:LYS:H 14 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG21 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG22 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG21 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG22 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:V | (1,574) | 1:A:36:LEU:HD12 | 1:A:85:LEU:HD23 | 13 | 0.06 |
| (1,574) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 13 0.06 (1,570) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:145:LYS:H 14 0.06 (1,570) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:145:LYS:H 14 0.06 (1,570) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:145:LYS:H 14 0.06 (1,567) 1:A:70:LEU:HD11 1:A:74:LYS:H 14 0.06 (1,567) 1:A:70:LEU:HD12 1:A:74:LYS:H 14 0.06 (1,567) 1:A:70:LEU:HD13 1:A:74:LYS:H 14 0.06 (1,567) 1:A:70:LEU:HD13 1:A:74:LYS:H 14 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG21 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG23 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG21 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG23 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG21 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VA | (1,574) | 1:A:36:LEU:HD13 | 1:A:85:LEU:HD21 | 13 | 0.06 |
| (1,570) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:145:LYS:H 14 0.06 (1,570) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:145:LYS:H 14 0.06 (1,570) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:145:LYS:H 14 0.06 (1,567) 1:A:70:LEU:HD11 1:A:74:LYS:H 14 0.06 (1,567) 1:A:70:LEU:HD12 1:A:74:LYS:H 14 0.06 (1,567) 1:A:70:LEU:HD13 1:A:74:LYS:H 14 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG21 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG22 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG23 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG21 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG22 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG23 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG23 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:V | (1,574) | 1:A:36:LEU:HD13 | 1:A:85:LEU:HD22 | 13 | 0.06 |
| (1,570) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:145:LYS:H 14 0.06 (1,570) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:145:LYS:H 14 0.06 (1,570) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:145:LYS:H 14 0.06 (1,567) 1:A:70:LEU:HD11 1:A:74:LYS:H 14 0.06 (1,567) 1:A:70:LEU:HD12 1:A:74:LYS:H 14 0.06 (1,567) 1:A:70:LEU:HD13 1:A:74:LYS:H 14 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG21 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG22 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG23 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG21 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG22 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG23 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG21 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:V | (1,574) | 1:A:36:LEU:HD13 | 1:A:85:LEU:HD23 | 13 | 0.06 |
| (1,570) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:145:LYS:H 14 0.06 (1,570) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:145:LYS:H 14 0.06 (1,567) 1:A:70:LEU:HD11 1:A:74:LYS:H 14 0.06 (1,567) 1:A:70:LEU:HD12 1:A:74:LYS:H 14 0.06 (1,567) 1:A:70:LEU:HD13 1:A:74:LYS:H 14 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG21 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG22 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG23 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG21 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG23 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG21 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG21 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG22 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:V | · · / | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:145:LYS:H | 14 | 0.06 |
| (1,567) 1:A:70:LEU:HD11 1:A:74:LYS:H 14 0.06 (1,567) 1:A:70:LEU:HD12 1:A:74:LYS:H 14 0.06 (1,567) 1:A:70:LEU:HD13 1:A:74:LYS:H 14 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG21 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG22 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG23 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG21 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG22 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG23 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG21 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG22 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG23 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG21 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54: | , , | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:145:LYS:H | 14 | 0.06 |
| (1,567) 1:A:70:LEU:HD11 1:A:74:LYS:H 14 0.06 (1,567) 1:A:70:LEU:HD12 1:A:74:LYS:H 14 0.06 (1,567) 1:A:70:LEU:HD13 1:A:74:LYS:H 14 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG21 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG22 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG23 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG21 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG22 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG23 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG21 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG22 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG23 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG23 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:V | (1,570) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:145:LYS:H | 14 | 0.06 |
| (1,567) 1:A:70:LEU:HD13 1:A:74:LYS:H 14 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG21 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG22 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG23 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG21 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG22 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG23 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG21 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG23 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG23 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG21 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG22 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG23 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1 | (1,567) | 1:A:70:LEU:HD11 | 1:A:74:LYS:H | 14 | 0.06 |
| (1,567) 1:A:70:LEU:HD13 1:A:74:LYS:H 14 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG21 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG22 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG23 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG21 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG22 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG23 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG21 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG23 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG23 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG21 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG23 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG23 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1 | (1,567) | 1:A:70:LEU:HD12 | 1:A:74:LYS:H | 14 | 0.06 |
| (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG22 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG23 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG21 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG22 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG23 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG21 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG22 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG23 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG21 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG22 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG23 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG21 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG22 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 < | · ' ' | 1:A:70:LEU:HD13 | 1:A:74:LYS:H | 14 | 0.06 |
| (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG23 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG21 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG22 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG23 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG21 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG22 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG23 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG21 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG22 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG23 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG21 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG22 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG23 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 | (1,563) | 1:A:50:LEU:HD11 | 1:A:54:VAL:HG21 | 3 | 0.06 |
| (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG21 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG22 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG23 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG21 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG22 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG23 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG21 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG22 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG23 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG21 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG22 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG23 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG21 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 | (1,563) | 1:A:50:LEU:HD11 | 1:A:54:VAL:HG22 | 3 | 0.06 |
| (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG22 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG23 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG21 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG22 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG23 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG21 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG22 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG23 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG22 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG23 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG21 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG22 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG22 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 | (1,563) | 1:A:50:LEU:HD11 | 1:A:54:VAL:HG23 | 3 | 0.06 |
| (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG23 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG21 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG22 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG23 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG21 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG22 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG23 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG21 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG22 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG23 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG21 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG23 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG23 19 0.06 (1,560) 1:A:47:LEU:HD21 1:A:50:LEU:HD21 15 0.06 (1,560) 1:A:47:L | (1,563) | 1:A:50:LEU:HD12 | 1:A:54:VAL:HG21 | 3 | 0.06 |
| (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG21 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG22 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG23 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG21 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG22 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG23 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG21 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG22 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG23 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG21 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG22 19 0.06 (1,563) 1:A:47:LEU:HD21 1:A:50:LEU:HD21 15 0.06 (1,560) 1:A:47:LEU:HD21 1:A:50:LEU:HD23 15 0.06 (1,560) 1:A:47:LEU:HD21 | (1,563) | 1:A:50:LEU:HD12 | 1:A:54:VAL:HG22 | 3 | 0.06 |
| (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG22 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG23 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG21 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG22 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG23 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG21 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG22 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG21 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG21 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG22 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG23 19 0.06 (1,560) 1:A:47:LEU:HD21 1:A:50:LEU:HD21 15 0.06 (1,560) 1:A:47:LEU:HD21 1:A:50:LEU:HD23 15 0.06 | (1,563) | 1:A:50:LEU:HD12 | 1:A:54:VAL:HG23 | 3 | 0.06 |
| (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG23 3 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG21 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG22 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG23 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG21 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG22 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG23 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG21 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG22 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG23 19 0.06 (1,560) 1:A:47:LEU:HD21 1:A:50:LEU:HD21 15 0.06 (1,560) 1:A:47:LEU:HD21 1:A:50:LEU:HD23 15 0.06 (1,560) 1:A:47:LEU:HD21 1:A:50:LEU:HD23 15 0.06 | (1,563) | 1:A:50:LEU:HD13 | 1:A:54:VAL:HG21 | 3 | 0.06 |
| (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG21 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG22 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG23 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG21 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG23 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG23 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG22 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG23 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG23 19 0.06 (1,560) 1:A:47:LEU:HD21 1:A:50:LEU:HD21 15 0.06 (1,560) 1:A:47:LEU:HD21 1:A:50:LEU:HD22 15 0.06 (1,560) 1:A:47:LEU:HD21 1:A:50:LEU:HD23 15 0.06 | (1,563) | 1:A:50:LEU:HD13 | 1:A:54:VAL:HG22 | 3 | 0.06 |
| (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG22 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG23 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG21 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG22 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG23 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG21 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG22 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG23 19 0.06 (1,560) 1:A:47:LEU:HD21 1:A:50:LEU:HD21 15 0.06 (1,560) 1:A:47:LEU:HD21 1:A:50:LEU:HD22 15 0.06 (1,560) 1:A:47:LEU:HD21 1:A:50:LEU:HD23 15 0.06 | (1,563) | 1:A:50:LEU:HD13 | 1:A:54:VAL:HG23 | 3 | 0.06 |
| (1,563) 1:A:50:LEU:HD11 1:A:54:VAL:HG23 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG21 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG22 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG23 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG21 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG22 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG23 19 0.06 (1,560) 1:A:47:LEU:HD21 1:A:50:LEU:HD21 15 0.06 (1,560) 1:A:47:LEU:HD21 1:A:50:LEU:HD22 15 0.06 (1,560) 1:A:47:LEU:HD21 1:A:50:LEU:HD23 15 0.06 | (1,563) | 1:A:50:LEU:HD11 | 1:A:54:VAL:HG21 | 19 | 0.06 |
| (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG21 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG22 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG23 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG21 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG22 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG23 19 0.06 (1,560) 1:A:47:LEU:HD21 1:A:50:LEU:HD21 15 0.06 (1,560) 1:A:47:LEU:HD21 1:A:50:LEU:HD22 15 0.06 (1,560) 1:A:47:LEU:HD21 1:A:50:LEU:HD23 15 0.06 | (1,563) | 1:A:50:LEU:HD11 | 1:A:54:VAL:HG22 | 19 | 0.06 |
| (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG22 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG23 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG21 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG22 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG23 19 0.06 (1,560) 1:A:47:LEU:HD21 1:A:50:LEU:HD21 15 0.06 (1,560) 1:A:47:LEU:HD21 1:A:50:LEU:HD22 15 0.06 (1,560) 1:A:47:LEU:HD21 1:A:50:LEU:HD23 15 0.06 | , , , | 1:A:50:LEU:HD11 | 1:A:54:VAL:HG23 | 19 | 0.06 |
| (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG23 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG21 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG22 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG23 19 0.06 (1,560) 1:A:47:LEU:HD21 1:A:50:LEU:HD21 15 0.06 (1,560) 1:A:47:LEU:HD21 1:A:50:LEU:HD22 15 0.06 (1,560) 1:A:47:LEU:HD21 1:A:50:LEU:HD23 15 0.06 | (1,563) | 1:A:50:LEU:HD12 | 1:A:54:VAL:HG21 | 19 | 0.06 |
| (1,563) 1:A:50:LEU:HD12 1:A:54:VAL:HG23 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG21 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG22 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG23 19 0.06 (1,560) 1:A:47:LEU:HD21 1:A:50:LEU:HD21 15 0.06 (1,560) 1:A:47:LEU:HD21 1:A:50:LEU:HD22 15 0.06 (1,560) 1:A:47:LEU:HD21 1:A:50:LEU:HD23 15 0.06 | · · / | 1:A:50:LEU:HD12 | 1:A:54:VAL:HG22 | 19 | 0.06 |
| (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG22 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG23 19 0.06 (1,560) 1:A:47:LEU:HD21 1:A:50:LEU:HD21 15 0.06 (1,560) 1:A:47:LEU:HD21 1:A:50:LEU:HD22 15 0.06 (1,560) 1:A:47:LEU:HD21 1:A:50:LEU:HD23 15 0.06 | (' | 1:A:50:LEU:HD12 | 1:A:54:VAL:HG23 | 19 | 0.06 |
| (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG22 19 0.06 (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG23 19 0.06 (1,560) 1:A:47:LEU:HD21 1:A:50:LEU:HD21 15 0.06 (1,560) 1:A:47:LEU:HD21 1:A:50:LEU:HD22 15 0.06 (1,560) 1:A:47:LEU:HD21 1:A:50:LEU:HD23 15 0.06 | (1,563) | 1:A:50:LEU:HD13 | 1:A:54:VAL:HG21 | 19 | 0.06 |
| (1,563) 1:A:50:LEU:HD13 1:A:54:VAL:HG23 19 0.06 (1,560) 1:A:47:LEU:HD21 1:A:50:LEU:HD21 15 0.06 (1,560) 1:A:47:LEU:HD21 1:A:50:LEU:HD22 15 0.06 (1,560) 1:A:47:LEU:HD21 1:A:50:LEU:HD23 15 0.06 | (1,563) | 1:A:50:LEU:HD13 | 1:A:54:VAL:HG22 | 19 | 0.06 |
| (1,560) 1:A:47:LEU:HD21 1:A:50:LEU:HD21 15 0.06 (1,560) 1:A:47:LEU:HD21 1:A:50:LEU:HD22 15 0.06 (1,560) 1:A:47:LEU:HD21 1:A:50:LEU:HD23 15 0.06 | | 1:A:50:LEU:HD13 | 1:A:54:VAL:HG23 | 19 | 0.06 |
| (1,560) 1:A:47:LEU:HD21 1:A:50:LEU:HD22 15 0.06 (1,560) 1:A:47:LEU:HD21 1:A:50:LEU:HD23 15 0.06 | | 1:A:47:LEU:HD21 | 1:A:50:LEU:HD21 | 15 | 0.06 |
| (1,560) 1:A:47:LEU:HD21 1:A:50:LEU:HD23 15 0.06 | | 1:A:47:LEU:HD21 | 1:A:50:LEU:HD22 | 15 | 0.06 |
| | · · / | 1:A:47:LEU:HD21 | 1:A:50:LEU:HD23 | 15 | 0.06 |
| | (1,560) | | 1:A:50:LEU:HD21 | 15 | 0.06 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,560) | 1:A:47:LEU:HD22 | 1:A:50:LEU:HD22 | 15 | 0.06 |
| (1,560) | 1:A:47:LEU:HD22 | 1:A:50:LEU:HD23 | 15 | 0.06 |
| (1,560) | 1:A:47:LEU:HD23 | 1:A:50:LEU:HD21 | 15 | 0.06 |
| (1,560) | 1:A:47:LEU:HD23 | 1:A:50:LEU:HD22 | 15 | 0.06 |
| (1,560) | 1:A:47:LEU:HD23 | 1:A:50:LEU:HD23 | 15 | 0.06 |
| (1,558) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:109:LEU:HD11 | 18 | 0.06 |
| (1,558) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:109:LEU:HD12 | 18 | 0.06 |
| (1,558) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:109:LEU:HD13 | 18 | 0.06 |
| (1,558) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:109:LEU:HD11 | 18 | 0.06 |
| (1,558) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:109:LEU:HD12 | 18 | 0.06 |
| (1,558) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:109:LEU:HD13 | 18 | 0.06 |
| (1,558) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:109:LEU:HD11 | 18 | 0.06 |
| (1,558) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:109:LEU:HD12 | 18 | 0.06 |
| (1,558) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:109:LEU:HD13 | 18 | 0.06 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD21 | 1:A:81:VAL:HG11 | 8 | 0.06 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD21 | 1:A:81:VAL:HG12 | 8 | 0.06 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD21 | 1:A:81:VAL:HG13 | 8 | 0.06 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD22 | 1:A:81:VAL:HG11 | 8 | 0.06 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD22 | 1:A:81:VAL:HG12 | 8 | 0.06 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD22 | 1:A:81:VAL:HG13 | 8 | 0.06 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD23 | 1:A:81:VAL:HG11 | 8 | 0.06 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD23 | 1:A:81:VAL:HG12 | 8 | 0.06 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD23 | 1:A:81:VAL:HG13 | 8 | 0.06 |
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD11 | 1:A:163:LEU:HD21 | 12 | 0.06 |
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD11 | 1:A:163:LEU:HD22 | 12 | 0.06 |
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD11 | 1:A:163:LEU:HD23 | 12 | 0.06 |
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD12 | 1:A:163:LEU:HD21 | 12 | 0.06 |
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD12 | 1:A:163:LEU:HD22 | 12 | 0.06 |
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD12 | 1:A:163:LEU:HD23 | 12 | 0.06 |
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD13 | 1:A:163:LEU:HD21 | 12 | 0.06 |
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD13 | 1:A:163:LEU:HD22 | 12 | 0.06 |
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD13 | 1:A:163:LEU:HD23 | 12 | 0.06 |
| (1,543) | 1:A:129:LEU:HD11 | 1:A:156:LEU:HD11 | 3 | 0.06 |
| (1,543) | 1:A:129:LEU:HD11 | 1:A:156:LEU:HD12 | 3 | 0.06 |
| (1,543) | 1:A:129:LEU:HD11 | 1:A:156:LEU:HD13 | 3 | 0.06 |
| (1,543) | 1:A:129:LEU:HD12 | 1:A:156:LEU:HD11 | 3 | 0.06 |
| (1,543) | 1:A:129:LEU:HD12 | 1:A:156:LEU:HD12 | 3 | 0.06 |
| (1,543) | 1:A:129:LEU:HD12 | 1:A:156:LEU:HD13 | 3 | 0.06 |
| (1,543) | 1:A:129:LEU:HD13 | 1:A:156:LEU:HD11 | 3 | 0.06 |
| (1,543) | 1:A:129:LEU:HD13 | 1:A:156:LEU:HD12 | 3 | 0.06 |
| (1,543) | 1:A:129:LEU:HD13 | 1:A:156:LEU:HD13 | 3 | 0.06 |
| (1,543) | 1:A:129:LEU:HD11 | 1:A:156:LEU:HD11 | 12 | 0.06 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,543) | 1:A:129:LEU:HD11 | 1:A:156:LEU:HD12 | 12 | 0.06 |
| (1,543) | 1:A:129:LEU:HD11 | 1:A:156:LEU:HD13 | 12 | 0.06 |
| (1,543) | 1:A:129:LEU:HD12 | 1:A:156:LEU:HD11 | 12 | 0.06 |
| (1,543) | 1:A:129:LEU:HD12 | 1:A:156:LEU:HD12 | 12 | 0.06 |
| (1,543) | 1:A:129:LEU:HD12 | 1:A:156:LEU:HD13 | 12 | 0.06 |
| (1,543) | 1:A:129:LEU:HD13 | 1:A:156:LEU:HD11 | 12 | 0.06 |
| (1,543) | 1:A:129:LEU:HD13 | 1:A:156:LEU:HD12 | 12 | 0.06 |
| (1,543) | 1:A:129:LEU:HD13 | 1:A:156:LEU:HD13 | 12 | 0.06 |
| (1,535) | 1:A:74:LYS:H | 1:A:76:VAL:HG11 | 1 | 0.06 |
| (1,535) | 1:A:74:LYS:H | 1:A:76:VAL:HG12 | 1 | 0.06 |
| (1,535) | 1:A:74:LYS:H | 1:A:76:VAL:HG13 | 1 | 0.06 |
| (1,535) | 1:A:74:LYS:H | 1:A:76:VAL:HG11 | 3 | 0.06 |
| (1,535) | 1:A:74:LYS:H | 1:A:76:VAL:HG12 | 3 | 0.06 |
| (1,535) | 1:A:74:LYS:H | 1:A:76:VAL:HG13 | 3 | 0.06 |
| (1,535) | 1:A:74:LYS:H | 1:A:76:VAL:HG11 | 16 | 0.06 |
| (1,535) | 1:A:74:LYS:H | 1:A:76:VAL:HG12 | 16 | 0.06 |
| (1,535) | 1:A:74:LYS:H | 1:A:76:VAL:HG13 | 16 | 0.06 |
| (1,532) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:113:LEU:HD11 | 16 | 0.06 |
| (1,532) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:113:LEU:HD12 | 16 | 0.06 |
| (1,532) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:113:LEU:HD13 | 16 | 0.06 |
| (1,532) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:113:LEU:HD11 | 16 | 0.06 |
| (1,532) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:113:LEU:HD12 | 16 | 0.06 |
| (1,532) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:113:LEU:HD13 | 16 | 0.06 |
| (1,532) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:113:LEU:HD11 | 16 | 0.06 |
| (1,532) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:113:LEU:HD12 | 16 | 0.06 |
| (1,532) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:113:LEU:HD13 | 16 | 0.06 |
| (1,518) | 1:A:117:VAL:HG11 | 1:A:121:LEU:HD11 | 5 | 0.06 |
| (1,518) | 1:A:117:VAL:HG11 | 1:A:121:LEU:HD12 | 5 | 0.06 |
| (1,518) | 1:A:117:VAL:HG11 | 1:A:121:LEU:HD13 | 5 | 0.06 |
| (1,518) | 1:A:117:VAL:HG12 | 1:A:121:LEU:HD11 | 5 | 0.06 |
| (1,518) | 1:A:117:VAL:HG12 | 1:A:121:LEU:HD12 | 5 | 0.06 |
| (1,518) | 1:A:117:VAL:HG12 | 1:A:121:LEU:HD13 | 5 | 0.06 |
| (1,518) | 1:A:117:VAL:HG13 | 1:A:121:LEU:HD11 | 5 | 0.06 |
| (1,518) | 1:A:117:VAL:HG13 | 1:A:121:LEU:HD12 | 5 | 0.06 |
| (1,518) | 1:A:117:VAL:HG13 | 1:A:121:LEU:HD13 | 5 | 0.06 |
| (1,511) | 1:A:145:LYS:H | 1:A:149:LEU:HD21 | 10 | 0.06 |
| (1,511) | 1:A:145:LYS:H | 1:A:149:LEU:HD22 | 10 | 0.06 |
| (1,511) | 1:A:145:LYS:H | 1:A:149:LEU:HD23 | 10 | 0.06 |
| (1,508) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:85:LEU:HD21 | 4 | 0.06 |
| (1,508) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:85:LEU:HD22 | 4 | 0.06 |
| (1,508) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:85:LEU:HD23 | 4 | 0.06 |
| | l . | | | |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,508) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:85:LEU:HD22 | 4 | 0.06 |
| (1,508) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:85:LEU:HD23 | 4 | 0.06 |
| (1,508) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:85:LEU:HD21 | 4 | 0.06 |
| (1,508) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:85:LEU:HD22 | 4 | 0.06 |
| (1,508) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:85:LEU:HD23 | 4 | 0.06 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD21 | 1:A:160:LEU:HD11 | 6 | 0.06 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD21 | 1:A:160:LEU:HD12 | 6 | 0.06 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD21 | 1:A:160:LEU:HD13 | 6 | 0.06 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD22 | 1:A:160:LEU:HD11 | 6 | 0.06 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD22 | 1:A:160:LEU:HD12 | 6 | 0.06 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD22 | 1:A:160:LEU:HD13 | 6 | 0.06 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD23 | 1:A:160:LEU:HD11 | 6 | 0.06 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD23 | 1:A:160:LEU:HD12 | 6 | 0.06 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD23 | 1:A:160:LEU:HD13 | 6 | 0.06 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD21 | 1:A:160:LEU:HD11 | 10 | 0.06 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD21 | 1:A:160:LEU:HD12 | 10 | 0.06 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD21 | 1:A:160:LEU:HD13 | 10 | 0.06 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD22 | 1:A:160:LEU:HD11 | 10 | 0.06 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD22 | 1:A:160:LEU:HD12 | 10 | 0.06 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD22 | 1:A:160:LEU:HD13 | 10 | 0.06 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD23 | 1:A:160:LEU:HD11 | 10 | 0.06 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD23 | 1:A:160:LEU:HD12 | 10 | 0.06 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD23 | 1:A:160:LEU:HD13 | 10 | 0.06 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD21 | 1:A:160:LEU:HD11 | 11 | 0.06 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD21 | 1:A:160:LEU:HD12 | 11 | 0.06 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD21 | 1:A:160:LEU:HD13 | 11 | 0.06 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD22 | 1:A:160:LEU:HD11 | 11 | 0.06 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD22 | 1:A:160:LEU:HD12 | 11 | 0.06 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD22 | 1:A:160:LEU:HD13 | 11 | 0.06 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD23 | 1:A:160:LEU:HD11 | 11 | 0.06 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD23 | 1:A:160:LEU:HD12 | 11 | 0.06 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD23 | 1:A:160:LEU:HD13 | 11 | 0.06 |
| (1,480) | 1:A:57:VAL:HG11 | 1:A:81:VAL:HG21 | 2 | 0.06 |
| (1,480) | 1:A:57:VAL:HG11 | 1:A:81:VAL:HG22 | 2 | 0.06 |
| (1,480) | 1:A:57:VAL:HG11 | 1:A:81:VAL:HG23 | 2 | 0.06 |
| (1,480) | 1:A:57:VAL:HG12 | 1:A:81:VAL:HG21 | 2 | 0.06 |
| (1,480) | 1:A:57:VAL:HG12 | 1:A:81:VAL:HG22 | 2 | 0.06 |
| (1,480) | 1:A:57:VAL:HG12 | 1:A:81:VAL:HG23 | 2 | 0.06 |
| (1,480) | 1:A:57:VAL:HG13 | 1:A:81:VAL:HG21 | 2 | 0.06 |
| (1,480) | 1:A:57:VAL:HG13 | 1:A:81:VAL:HG22 | 2 | 0.06 |
| (1,480) | 1:A:57:VAL:HG13 | 1:A:81:VAL:HG23 | 2 | 0.06 |
| (1,467) | 1:A:62:VAL:HG11 | 1:A:63:GLY:H | 14 | 0.06 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,467) | 1:A:62:VAL:HG12 | 1:A:63:GLY:H | 14 | 0.06 |
| (1,467) | 1:A:62:VAL:HG13 | 1:A:63:GLY:H | 14 | 0.06 |
| (1,467) | 1:A:62:VAL:HG11 | 1:A:63:GLY:H | 16 | 0.06 |
| (1,467) | 1:A:62:VAL:HG12 | 1:A:63:GLY:H | 16 | 0.06 |
| (1,467) | 1:A:62:VAL:HG13 | 1:A:63:GLY:H | 16 | 0.06 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD11 | 1:A:117:VAL:HG11 | 4 | 0.06 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD11 | 1:A:117:VAL:HG12 | 4 | 0.06 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD11 | 1:A:117:VAL:HG13 | 4 | 0.06 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD12 | 1:A:117:VAL:HG11 | 4 | 0.06 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD12 | 1:A:117:VAL:HG12 | 4 | 0.06 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD12 | 1:A:117:VAL:HG13 | 4 | 0.06 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD13 | 1:A:117:VAL:HG11 | 4 | 0.06 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD13 | 1:A:117:VAL:HG12 | 4 | 0.06 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD13 | 1:A:117:VAL:HG13 | 4 | 0.06 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD11 | 1:A:117:VAL:HG11 | 18 | 0.06 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD11 | 1:A:117:VAL:HG12 | 18 | 0.06 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD11 | 1:A:117:VAL:HG13 | 18 | 0.06 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD12 | 1:A:117:VAL:HG11 | 18 | 0.06 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD12 | 1:A:117:VAL:HG12 | 18 | 0.06 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD12 | 1:A:117:VAL:HG13 | 18 | 0.06 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD13 | 1:A:117:VAL:HG11 | 18 | 0.06 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD13 | 1:A:117:VAL:HG12 | 18 | 0.06 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD13 | 1:A:117:VAL:HG13 | 18 | 0.06 |
| (1,455) | 1:A:121:LEU:HD21 | 1:A:160:LEU:HD21 | 10 | 0.06 |
| (1,455) | 1:A:121:LEU:HD21 | 1:A:160:LEU:HD22 | 10 | 0.06 |
| (1,455) | 1:A:121:LEU:HD21 | 1:A:160:LEU:HD23 | 10 | 0.06 |
| (1,455) | 1:A:121:LEU:HD22 | 1:A:160:LEU:HD21 | 10 | 0.06 |
| (1,455) | 1:A:121:LEU:HD22 | 1:A:160:LEU:HD22 | 10 | 0.06 |
| (1,455) | 1:A:121:LEU:HD22 | 1:A:160:LEU:HD23 | 10 | 0.06 |
| (1,455) | 1:A:121:LEU:HD23 | 1:A:160:LEU:HD21 | 10 | 0.06 |
| (1,455) | 1:A:121:LEU:HD23 | 1:A:160:LEU:HD22 | 10 | 0.06 |
| (1,455) | 1:A:121:LEU:HD23 | 1:A:160:LEU:HD23 | 10 | 0.06 |
| (1,453) | 1:A:118:TYR:H | 1:A:121:LEU:HD21 | 16 | 0.06 |
| (1,453) | 1:A:118:TYR:H | 1:A:121:LEU:HD22 | 16 | 0.06 |
| (1,453) | 1:A:118:TYR:H | 1:A:121:LEU:HD23 | 16 | 0.06 |
| (1,407) | 1:A:126:VAL:HG11 | 1:A:163:LEU:HD21 | 12 | 0.06 |
| (1,407) | 1:A:126:VAL:HG11 | 1:A:163:LEU:HD22 | 12 | 0.06 |
| (1,407) | 1:A:126:VAL:HG11 | 1:A:163:LEU:HD23 | 12 | 0.06 |
| (1,407) | 1:A:126:VAL:HG12 | 1:A:163:LEU:HD21 | 12 | 0.06 |
| (1,407) | 1:A:126:VAL:HG12 | 1:A:163:LEU:HD22 | 12 | 0.06 |
| (1,407) | 1:A:126:VAL:HG12 | 1:A:163:LEU:HD23 | 12 | 0.06 |
| (1,407) | 1:A:126:VAL:HG13 | 1:A:163:LEU:HD21 | 12 | 0.06 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,407) | 1:A:126:VAL:HG13 | 1:A:163:LEU:HD22 | 12 | 0.06 |
| (1,407) | 1:A:126:VAL:HG13 | 1:A:163:LEU:HD23 | 12 | 0.06 |
| (1,407) | 1:A:126:VAL:HG11 | 1:A:163:LEU:HD21 | 14 | 0.06 |
| (1,407) | 1:A:126:VAL:HG11 | 1:A:163:LEU:HD22 | 14 | 0.06 |
| (1,407) | 1:A:126:VAL:HG11 | 1:A:163:LEU:HD23 | 14 | 0.06 |
| (1,407) | 1:A:126:VAL:HG12 | 1:A:163:LEU:HD21 | 14 | 0.06 |
| (1,407) | 1:A:126:VAL:HG12 | 1:A:163:LEU:HD22 | 14 | 0.06 |
| (1,407) | 1:A:126:VAL:HG12 | 1:A:163:LEU:HD23 | 14 | 0.06 |
| (1,407) | 1:A:126:VAL:HG13 | 1:A:163:LEU:HD21 | 14 | 0.06 |
| (1,407) | 1:A:126:VAL:HG13 | 1:A:163:LEU:HD22 | 14 | 0.06 |
| (1,407) | 1:A:126:VAL:HG13 | 1:A:163:LEU:HD23 | 14 | 0.06 |
| (1,399) | 1:A:34:LEU:H | 1:A:99:VAL:HG21 | 6 | 0.06 |
| (1,399) | 1:A:34:LEU:H | 1:A:99:VAL:HG22 | 6 | 0.06 |
| (1,399) | 1:A:34:LEU:H | 1:A:99:VAL:HG23 | 6 | 0.06 |
| (1,399) | 1:A:34:LEU:H | 1:A:99:VAL:HG21 | 19 | 0.06 |
| (1,399) | 1:A:34:LEU:H | 1:A:99:VAL:HG22 | 19 | 0.06 |
| (1,399) | 1:A:34:LEU:H | 1:A:99:VAL:HG23 | 19 | 0.06 |
| (1,398) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:36:LEU:HD21 | 4 | 0.06 |
| (1,398) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:36:LEU:HD22 | 4 | 0.06 |
| (1,398) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:36:LEU:HD23 | 4 | 0.06 |
| (1,398) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:36:LEU:HD21 | 4 | 0.06 |
| (1,398) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:36:LEU:HD22 | 4 | 0.06 |
| (1,398) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:36:LEU:HD23 | 4 | 0.06 |
| (1,398) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:36:LEU:HD21 | 4 | 0.06 |
| (1,398) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:36:LEU:HD22 | 4 | 0.06 |
| (1,398) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:36:LEU:HD23 | 4 | 0.06 |
| (1,392) | 1:A:63:GLY:H | 1:A:64:LEU:HD21 | 4 | 0.06 |
| (1,392) | 1:A:63:GLY:H | 1:A:64:LEU:HD22 | 4 | 0.06 |
| (1,392) | 1:A:63:GLY:H | 1:A:64:LEU:HD23 | 4 | 0.06 |
| (1,390) | 1:A:47:LEU:H | 1:A:50:LEU:HD21 | 10 | 0.06 |
| (1,390) | 1:A:47:LEU:H | 1:A:50:LEU:HD22 | 10 | 0.06 |
| (1,390) | 1:A:47:LEU:H | 1:A:50:LEU:HD23 | 10 | 0.06 |
| (1,390) | 1:A:47:LEU:H | 1:A:50:LEU:HD21 | 18 | 0.06 |
| (1,390) | 1:A:47:LEU:H | 1:A:50:LEU:HD22 | 18 | 0.06 |
| (1,390) | 1:A:47:LEU:H | 1:A:50:LEU:HD23 | 18 | 0.06 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD11 | 1:A:190:LEU:HD11 | 11 | 0.06 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD11 | 1:A:190:LEU:HD12 | 11 | 0.06 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD11 | 1:A:190:LEU:HD13 | 11 | 0.06 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD12 | 1:A:190:LEU:HD11 | 11 | 0.06 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD12 | 1:A:190:LEU:HD12 | 11 | 0.06 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD12 | 1:A:190:LEU:HD13 | 11 | 0.06 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD13 | 1:A:190:LEU:HD11 | 11 | 0.06 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD13 | 1:A:190:LEU:HD12 | 11 | 0.06 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD13 | 1:A:190:LEU:HD13 | 11 | 0.06 |
| (1,377) | 1:A:33:ILE:HD11 | 1:A:47:LEU:HD21 | 13 | 0.06 |
| (1,377) | 1:A:33:ILE:HD11 | 1:A:47:LEU:HD22 | 13 | 0.06 |
| (1,377) | 1:A:33:ILE:HD11 | 1:A:47:LEU:HD23 | 13 | 0.06 |
| (1,377) | 1:A:33:ILE:HD12 | 1:A:47:LEU:HD21 | 13 | 0.06 |
| (1,377) | 1:A:33:ILE:HD12 | 1:A:47:LEU:HD22 | 13 | 0.06 |
| (1,377) | 1:A:33:ILE:HD12 | 1:A:47:LEU:HD23 | 13 | 0.06 |
| (1,377) | 1:A:33:ILE:HD13 | 1:A:47:LEU:HD21 | 13 | 0.06 |
| (1,377) | 1:A:33:ILE:HD13 | 1:A:47:LEU:HD22 | 13 | 0.06 |
| (1,377) | 1:A:33:ILE:HD13 | 1:A:47:LEU:HD23 | 13 | 0.06 |
| (1,376) | 1:A:33:ILE:HD11 | 1:A:50:LEU:HD11 | 6 | 0.06 |
| (1,376) | 1:A:33:ILE:HD11 | 1:A:50:LEU:HD12 | 6 | 0.06 |
| (1,376) | 1:A:33:ILE:HD11 | 1:A:50:LEU:HD13 | 6 | 0.06 |
| (1,376) | 1:A:33:ILE:HD12 | 1:A:50:LEU:HD11 | 6 | 0.06 |
| (1,376) | 1:A:33:ILE:HD12 | 1:A:50:LEU:HD12 | 6 | 0.06 |
| (1,376) | 1:A:33:ILE:HD12 | 1:A:50:LEU:HD13 | 6 | 0.06 |
| (1,376) | 1:A:33:ILE:HD13 | 1:A:50:LEU:HD11 | 6 | 0.06 |
| (1,376) | 1:A:33:ILE:HD13 | 1:A:50:LEU:HD12 | 6 | 0.06 |
| (1,376) | 1:A:33:ILE:HD13 | 1:A:50:LEU:HD13 | 6 | 0.06 |
| (1,346) | 1:A:175:LEU:HD21 | 1:A:184:LYS:H | 6 | 0.06 |
| (1,346) | 1:A:175:LEU:HD22 | 1:A:184:LYS:H | 6 | 0.06 |
| (1,346) | 1:A:175:LEU:HD23 | 1:A:184:LYS:H | 6 | 0.06 |
| (1,338) | 1:A:48:ALA:H | 1:A:54:VAL:HG11 | 9 | 0.06 |
| (1,338) | 1:A:48:ALA:H | 1:A:54:VAL:HG12 | 9 | 0.06 |
| (1,338) | 1:A:48:ALA:H | 1:A:54:VAL:HG13 | 9 | 0.06 |
| (1,308) | 1:A:159:GLU:H | 1:A:165:TRP:HE1 | 5 | 0.06 |
| (1,286) | 1:A:125:GLY:H | 1:A:194:LYS:H | 6 | 0.06 |
| (1,284) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:113:LEU:H | 16 | 0.06 |
| (1,284) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:113:LEU:H | 16 | 0.06 |
| (1,284) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:113:LEU:H | 16 | 0.06 |
| (1,275) | 1:A:90:ILE:H | 1:A:95:TRP:HE1 | 18 | 0.06 |
| (1,264) | 1:A:30:GLN:H | 1:A:33:ILE:HD11 | 10 | 0.06 |
| (1,264) | 1:A:30:GLN:H | 1:A:33:ILE:HD12 | 10 | 0.06 |
| (1,264) | 1:A:30:GLN:H | 1:A:33:ILE:HD13 | 10 | 0.06 |
| (1,263) | 1:A:163:LEU:HD11 | 1:A:164:ASN:H | 3 | 0.06 |
| (1,263) | 1:A:163:LEU:HD12 | 1:A:164:ASN:H | 3 | 0.06 |
| (1,263) | 1:A:163:LEU:HD13 | 1:A:164:ASN:H | 3 | 0.06 |
| (1,261) | 1:A:135:GLU:H | 1:A:147:LEU:HD21 | 17 | 0.06 |
| (1,261) | 1:A:135:GLU:H | 1:A:147:LEU:HD22 | 17 | 0.06 |
| (1,261) | 1:A:135:GLU:H | 1:A:147:LEU:HD23 | 17 | 0.06 |
| (1,260) | 1:A:171:LEU:HD21 | 1:A:189:GLN:H | 2 | 0.06 |



Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,260) | 1:A:171:LEU:HD22 | 1:A:189:GLN:H | 2 | 0.06 |
| (1,260) | 1:A:171:LEU:HD23 | 1:A:189:GLN:H | 2 | 0.06 |
| (1,259) | 1:A:71:ALA:H | 1:A:78:ILE:HD11 | 12 | 0.06 |
| (1,259) | 1:A:71:ALA:H | 1:A:78:ILE:HD12 | 12 | 0.06 |
| (1,259) | 1:A:71:ALA:H | 1:A:78:ILE:HD13 | 12 | 0.06 |
| (1,259) | 1:A:71:ALA:H | 1:A:78:ILE:HD11 | 17 | 0.06 |
| (1,259) | 1:A:71:ALA:H | 1:A:78:ILE:HD12 | 17 | 0.06 |
| (1,259) | 1:A:71:ALA:H | 1:A:78:ILE:HD13 | 17 | 0.06 |
| (1,250) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:84:ASN:H | 3 | 0.06 |
| (1,250) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:84:ASN:H | 3 | 0.06 |
| (1,250) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:84:ASN:H | 3 | 0.06 |
| (1,246) | 1:A:156:LEU:H | 1:A:190:LEU:HD21 | 1 | 0.06 |
| (1,246) | 1:A:156:LEU:H | 1:A:190:LEU:HD22 | 1 | 0.06 |
| (1,246) | 1:A:156:LEU:H | 1:A:190:LEU:HD23 | 1 | 0.06 |
| (1,236) | 1:A:21:LEU:HD11 | 1:A:25:ALA:H | 1 | 0.06 |
| (1,236) | 1:A:21:LEU:HD12 | 1:A:25:ALA:H | 1 | 0.06 |
| (1,236) | 1:A:21:LEU:HD13 | 1:A:25:ALA:H | 1 | 0.06 |
| (1,236) | 1:A:21:LEU:HD11 | 1:A:25:ALA:H | 10 | 0.06 |
| (1,236) | 1:A:21:LEU:HD12 | 1:A:25:ALA:H | 10 | 0.06 |
| (1,236) | 1:A:21:LEU:HD13 | 1:A:25:ALA:H | 10 | 0.06 |
| (1,233) | 1:A:54:VAL:HG11 | 1:A:55:THR:H | 20 | 0.06 |
| (1,233) | 1:A:54:VAL:HG12 | 1:A:55:THR:H | 20 | 0.06 |
| (1,233) | 1:A:54:VAL:HG13 | 1:A:55:THR:H | 20 | 0.06 |
| (1,230) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:150:LEU:HD21 | 2 | 0.06 |
| (1,230) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:150:LEU:HD22 | 2 | 0.06 |
| (1,230) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:150:LEU:HD23 | 2 | 0.06 |
| (1,229) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:147:LEU:HD21 | 12 | 0.06 |
| (1,229) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:147:LEU:HD22 | 12 | 0.06 |
| (1,229) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:147:LEU:HD23 | 12 | 0.06 |
| (1,221) | 1:A:160:LEU:HD21 | 1:A:165:TRP:HE1 | 9 | 0.06 |
| (1,221) | 1:A:160:LEU:HD22 | 1:A:165:TRP:HE1 | 9 | 0.06 |
| (1,221) | 1:A:160:LEU:HD23 | 1:A:165:TRP:HE1 | 9 | 0.06 |
| (1,221) | 1:A:160:LEU:HD21 | 1:A:165:TRP:HE1 | 11 | 0.06 |
| (1,221) | 1:A:160:LEU:HD22 | 1:A:165:TRP:HE1 | 11 | 0.06 |
| (1,221) | 1:A:160:LEU:HD23 | 1:A:165:TRP:HE1 | 11 | 0.06 |
| (1,212) | 1:A:86:ALA:H | 1:A:88:PHE:H | 5 | 0.06 |
| (1,207) | 1:A:60:SER:H | 1:A:64:LEU:HD11 | 7 | 0.06 |
| (1,207) | 1:A:60:SER:H | 1:A:64:LEU:HD12 | 7 | 0.06 |
| (1,207) | 1:A:60:SER:H | 1:A:64:LEU:HD13 | 7 | 0.06 |
| (1,201) | 1:A:157:GLN:H | 1:A:190:LEU:HD21 | 1 | 0.06 |
| (1,201) | 1:A:157:GLN:H | 1:A:190:LEU:HD22 | 1 | 0.06 |
| (1,201) | 1:A:157:GLN:H | 1:A:190:LEU:HD23 | 1 | 0.06 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,201) | 1:A:157:GLN:H | 1:A:190:LEU:HD21 | 15 | 0.06 |
| (1,201) | 1:A:157:GLN:H | 1:A:190:LEU:HD22 | 15 | 0.06 |
| (1,201) | 1:A:157:GLN:H | 1:A:190:LEU:HD23 | 15 | 0.06 |
| (1,2) | 1:A:60:SER:H | 1:A:62:VAL:H | 17 | 0.06 |
| (1,176) | 1:A:186:ALA:H | 1:A:187:LEU:HD21 | 19 | 0.06 |
| (1,176) | 1:A:186:ALA:H | 1:A:187:LEU:HD22 | 19 | 0.06 |
| (1,176) | 1:A:186:ALA:H | 1:A:187:LEU:HD23 | 19 | 0.06 |
| (1,174) | 1:A:61:SER:H | 1:A:62:VAL:HG11 | 13 | 0.06 |
| (1,174) | 1:A:61:SER:H | 1:A:62:VAL:HG12 | 13 | 0.06 |
| (1,174) | 1:A:61:SER:H | 1:A:62:VAL:HG13 | 13 | 0.06 |
| (1,174) | 1:A:61:SER:H | 1:A:62:VAL:HG11 | 19 | 0.06 |
| (1,174) | 1:A:61:SER:H | 1:A:62:VAL:HG12 | 19 | 0.06 |
| (1,174) | 1:A:61:SER:H | 1:A:62:VAL:HG13 | 19 | 0.06 |
| (1,166) | 1:A:137:LEU:H | 1:A:137:LEU:HD21 | 7 | 0.06 |
| (1,166) | 1:A:137:LEU:H | 1:A:137:LEU:HD22 | 7 | 0.06 |
| (1,166) | 1:A:137:LEU:H | 1:A:137:LEU:HD23 | 7 | 0.06 |
| (1,153) | 1:A:57:VAL:H | 1:A:81:VAL:HG21 | 12 | 0.06 |
| (1,153) | 1:A:57:VAL:H | 1:A:81:VAL:HG22 | 12 | 0.06 |
| (1,153) | 1:A:57:VAL:H | 1:A:81:VAL:HG23 | 12 | 0.06 |
| (1,152) | 1:A:37:ALA:H | 1:A:57:VAL:H | 2 | 0.06 |
| (1,123) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:128:ILE:HD11 | 7 | 0.06 |
| (1,123) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:128:ILE:HD12 | 7 | 0.06 |
| (1,123) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:128:ILE:HD13 | 7 | 0.06 |
| (1,1113) | 1:A:127:PHE:H | 1:A:192:GLY:O | 5 | 0.06 |
| (1,1098) | 1:A:124:GLY:O | 1:A:98:ILE:N | 16 | 0.06 |
| (1,1097) | 1:A:32:LYS:O | 1:A:96:GLU:H | 3 | 0.06 |
| (1,1085) | 1:A:154:GLU:O | 1:A:158:SER:N | 2 | 0.06 |
| (1,1085) | 1:A:154:GLU:O | 1:A:158:SER:N | 13 | 0.06 |
| (1,1085) | 1:A:154:GLU:O | 1:A:158:SER:N | 15 | 0.06 |
| (1,1042) | 1:A:44:ALA:O | 1:A:48:ALA:H | 4 | 0.06 |
| (1,1036) | 1:A:24:VAL:O | 1:A:28:ILE:H | 8 | 0.06 |
| (1,1017) | 1:A:101:ILE:HA | 1:A:128:ILE:H | 10 | 0.06 |
| (1,1017) | 1:A:101:ILE:HA | 1:A:128:ILE:H | 12 | 0.06 |
| (1,1016) | 1:A:165:TRP:HZ3 | 1:A:127:PHE:HZ | 5 | 0.06 |
| (1,1016) | 1:A:165:TRP:HZ3 | 1:A:127:PHE:HZ | 20 | 0.06 |
| (1,1003) | 1:A:59:GLN:H | 1:A:37:ALA:H | 13 | 0.06 |
| (1,1000) | 1:A:55:THR:H | 1:A:35:CYS:H | 11 | 0.06 |
| (1,993) | 1:A:36:LEU:H | 1:A:99:VAL:H | 7 | 0.05 |
| (1,993) | 1:A:36:LEU:H | 1:A:99:VAL:H | 16 | 0.05 |
| (1,989) | 1:A:163:LEU:HD11 | 1:A:165:TRP:HE1 | 9 | 0.05 |
| (1,989) | 1:A:163:LEU:HD12 | 1:A:165:TRP:HE1 | 9 | 0.05 |
| (1,989) | 1:A:163:LEU:HD13 | 1:A:165:TRP:HE1 | 9 | 0.05 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,965) | 1:A:109:LEU:HD21 | 1:A:112:GLN:H | 19 | 0.05 |
| (1,965) | 1:A:109:LEU:HD22 | 1:A:112:GLN:H | 19 | 0.05 |
| (1,965) | 1:A:109:LEU:HD23 | 1:A:112:GLN:H | 19 | 0.05 |
| (1,963) | 1:A:117:VAL:HG11 | 1:A:120:GLY:H | 5 | 0.05 |
| (1,963) | 1:A:117:VAL:HG12 | 1:A:120:GLY:H | 5 | 0.05 |
| (1,963) | 1:A:117:VAL:HG13 | 1:A:120:GLY:H | 5 | 0.05 |
| (1,955) | 1:A:173:ARG:H | 1:A:187:LEU:HD21 | 8 | 0.05 |
| (1,955) | 1:A:173:ARG:H | 1:A:187:LEU:HD22 | 8 | 0.05 |
| (1,955) | 1:A:173:ARG:H | 1:A:187:LEU:HD23 | 8 | 0.05 |
| (1,942) | 1:A:49:SER:H | 1:A:50:LEU:HD21 | 2 | 0.05 |
| (1,942) | 1:A:49:SER:H | 1:A:50:LEU:HD22 | 2 | 0.05 |
| (1,942) | 1:A:49:SER:H | 1:A:50:LEU:HD23 | 2 | 0.05 |
| (1,934) | 1:A:137:LEU:HD11 | 1:A:145:LYS:H | 18 | 0.05 |
| (1,934) | 1:A:137:LEU:HD12 | 1:A:145:LYS:H | 18 | 0.05 |
| (1,934) | 1:A:137:LEU:HD13 | 1:A:145:LYS:H | 18 | 0.05 |
| (1,931) | 1:A:73:GLU:H | 1:A:76:VAL:HG21 | 12 | 0.05 |
| (1,931) | 1:A:73:GLU:H | 1:A:76:VAL:HG22 | 12 | 0.05 |
| (1,931) | 1:A:73:GLU:H | 1:A:76:VAL:HG23 | 12 | 0.05 |
| (1,927) | 1:A:76:VAL:HG21 | 1:A:77:LYS:H | 13 | 0.05 |
| (1,927) | 1:A:76:VAL:HG22 | 1:A:77:LYS:H | 13 | 0.05 |
| (1,927) | 1:A:76:VAL:HG23 | 1:A:77:LYS:H | 13 | 0.05 |
| (1,922) | 1:A:164:ASN:H | 1:A:195:LEU:HD21 | 8 | 0.05 |
| (1,922) | 1:A:164:ASN:H | 1:A:195:LEU:HD22 | 8 | 0.05 |
| (1,922) | 1:A:164:ASN:H | 1:A:195:LEU:HD23 | 8 | 0.05 |
| (1,912) | 1:A:56:ALA:H | 1:A:81:VAL:HG21 | 9 | 0.05 |
| (1,912) | 1:A:56:ALA:H | 1:A:81:VAL:HG22 | 9 | 0.05 |
| (1,912) | 1:A:56:ALA:H | 1:A:81:VAL:HG23 | 9 | 0.05 |
| (1,911) | 1:A:56:ALA:H | 1:A:64:LEU:HD11 | 8 | 0.05 |
| (1,911) | 1:A:56:ALA:H | 1:A:64:LEU:HD12 | 8 | 0.05 |
| (1,911) | 1:A:56:ALA:H | 1:A:64:LEU:HD13 | 8 | 0.05 |
| (1,910) | 1:A:81:VAL:HG11 | 1:A:82:GLN:H | 3 | 0.05 |
| (1,910) | 1:A:81:VAL:HG12 | 1:A:82:GLN:H | 3 | 0.05 |
| (1,910) | 1:A:81:VAL:HG13 | 1:A:82:GLN:H | 3 | 0.05 |
| (1,91) | 1:A:112:GLN:H | 1:A:114:TYR:H | 17 | 0.05 |
| (1,907) | 1:A:33:ILE:H | 1:A:54:VAL:HG21 | 19 | 0.05 |
| (1,907) | 1:A:33:ILE:H | 1:A:54:VAL:HG22 | 19 | 0.05 |
| (1,907) | 1:A:33:ILE:H | 1:A:54:VAL:HG23 | 19 | 0.05 |
| (1,902) | 1:A:153:LEU:HD11 | 1:A:169:ASN:H | 1 | 0.05 |
| (1,902) | 1:A:153:LEU:HD12 | 1:A:169:ASN:H | 1 | 0.05 |
| (1,902) | 1:A:153:LEU:HD13 | 1:A:169:ASN:H | 1 | 0.05 |
| (1,902) | 1:A:153:LEU:HD11 | 1:A:169:ASN:H | 13 | 0.05 |
| (1,902) | 1:A:153:LEU:HD12 | 1:A:169:ASN:H | 13 | 0.05 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,902) | 1:A:153:LEU:HD13 | 1:A:169:ASN:H | 13 | 0.05 |
| (1,900) | 1:A:153:LEU:H | 1:A:190:LEU:HD11 | 11 | 0.05 |
| (1,900) | 1:A:153:LEU:H | 1:A:190:LEU:HD12 | 11 | 0.05 |
| (1,900) | 1:A:153:LEU:H | 1:A:190:LEU:HD13 | 11 | 0.05 |
| (1,897) | 1:A:163:LEU:HD21 | 1:A:193:GLN:H | 9 | 0.05 |
| (1,897) | 1:A:163:LEU:HD22 | 1:A:193:GLN:H | 9 | 0.05 |
| (1,897) | 1:A:163:LEU:HD23 | 1:A:193:GLN:H | 9 | 0.05 |
| (1,891) | 1:A:125:GLY:H | 1:A:163:LEU:HD21 | 11 | 0.05 |
| (1,891) | 1:A:125:GLY:H | 1:A:163:LEU:HD22 | 11 | 0.05 |
| (1,891) | 1:A:125:GLY:H | 1:A:163:LEU:HD23 | 11 | 0.05 |
| (1,885) | 1:A:50:LEU:H | 1:A:54:VAL:HG21 | 10 | 0.05 |
| (1,885) | 1:A:50:LEU:H | 1:A:54:VAL:HG22 | 10 | 0.05 |
| (1,885) | 1:A:50:LEU:H | 1:A:54:VAL:HG23 | 10 | 0.05 |
| (1,854) | 1:A:131:GLY:H | 1:A:153:LEU:HD21 | 7 | 0.05 |
| (1,854) | 1:A:131:GLY:H | 1:A:153:LEU:HD22 | 7 | 0.05 |
| (1,854) | 1:A:131:GLY:H | 1:A:153:LEU:HD23 | 7 | 0.05 |
| (1,840) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:121:LEU:H | 9 | 0.05 |
| (1,840) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:121:LEU:H | 9 | 0.05 |
| (1,840) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:121:LEU:H | 9 | 0.05 |
| (1,824) | 1:A:24:VAL:HG21 | 1:A:26:ASN:H | 5 | 0.05 |
| (1,824) | 1:A:24:VAL:HG22 | 1:A:26:ASN:H | 5 | 0.05 |
| (1,824) | 1:A:24:VAL:HG23 | 1:A:26:ASN:H | 5 | 0.05 |
| (1,824) | 1:A:24:VAL:HG21 | 1:A:26:ASN:H | 10 | 0.05 |
| (1,824) | 1:A:24:VAL:HG22 | 1:A:26:ASN:H | 10 | 0.05 |
| (1,824) | 1:A:24:VAL:HG23 | 1:A:26:ASN:H | 10 | 0.05 |
| (1,822) | 1:A:90:ILE:HD11 | 1:A:116:LYS:H | 16 | 0.05 |
| (1,822) | 1:A:90:ILE:HD12 | 1:A:116:LYS:H | 16 | 0.05 |
| (1,822) | 1:A:90:ILE:HD13 | 1:A:116:LYS:H | 16 | 0.05 |
| (1,814) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:150:LEU:HD11 | 19 | 0.05 |
| (1,814) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:150:LEU:HD12 | 19 | 0.05 |
| (1,814) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:150:LEU:HD13 | 19 | 0.05 |
| (1,812) | 1:A:130:GLU:H | 1:A:156:LEU:HD11 | 7 | 0.05 |
| (1,812) | 1:A:130:GLU:H | 1:A:156:LEU:HD12 | 7 | 0.05 |
| (1,812) | 1:A:130:GLU:H | 1:A:156:LEU:HD13 | 7 | 0.05 |
| (1,811) | 1:A:146:ASP:H | 1:A:147:LEU:HD11 | 12 | 0.05 |
| (1,811) | 1:A:146:ASP:H | 1:A:147:LEU:HD12 | 12 | 0.05 |
| (1,811) | 1:A:146:ASP:H | 1:A:147:LEU:HD13 | 12 | 0.05 |
| (1,810) | 1:A:136:GLN:H | 1:A:147:LEU:HD11 | 5 | 0.05 |
| (1,810) | 1:A:136:GLN:H | 1:A:147:LEU:HD12 | 5 | 0.05 |
| (1,810) | 1:A:136:GLN:H | 1:A:147:LEU:HD13 | 5 | 0.05 |
| (1,806) | 1:A:166:LEU:HD21 | 1:A:193:GLN:H | 5 | 0.05 |
| (1,806) | 1:A:166:LEU:HD22 | 1:A:193:GLN:H | 5 | 0.05 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,806) | 1:A:166:LEU:HD23 | 1:A:193:GLN:H | 5 | 0.05 |
| (1,806) | 1:A:166:LEU:HD21 | 1:A:193:GLN:H | 8 | 0.05 |
| (1,806) | 1:A:166:LEU:HD22 | 1:A:193:GLN:H | 8 | 0.05 |
| (1,806) | 1:A:166:LEU:HD23 | 1:A:193:GLN:H | 8 | 0.05 |
| (1,801) | 1:A:113:LEU:HD11 | 1:A:116:LYS:H | 15 | 0.05 |
| (1,801) | 1:A:113:LEU:HD12 | 1:A:116:LYS:H | 15 | 0.05 |
| (1,801) | 1:A:113:LEU:HD13 | 1:A:116:LYS:H | 15 | 0.05 |
| (1,794) | 1:A:148:ASP:H | 1:A:149:LEU:HD21 | 6 | 0.05 |
| (1,794) | 1:A:148:ASP:H | 1:A:149:LEU:HD22 | 6 | 0.05 |
| (1,794) | 1:A:148:ASP:H | 1:A:149:LEU:HD23 | 6 | 0.05 |
| (1,790) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:85:LEU:HD21 | 8 | 0.05 |
| (1,790) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:85:LEU:HD22 | 8 | 0.05 |
| (1,790) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:85:LEU:HD23 | 8 | 0.05 |
| (1,788) | 1:A:37:ALA:H | 1:A:85:LEU:HD21 | 3 | 0.05 |
| (1,788) | 1:A:37:ALA:H | 1:A:85:LEU:HD22 | 3 | 0.05 |
| (1,788) | 1:A:37:ALA:H | 1:A:85:LEU:HD23 | 3 | 0.05 |
| (1,788) | 1:A:37:ALA:H | 1:A:85:LEU:HD21 | 4 | 0.05 |
| (1,788) | 1:A:37:ALA:H | 1:A:85:LEU:HD22 | 4 | 0.05 |
| (1,788) | 1:A:37:ALA:H | 1:A:85:LEU:HD23 | 4 | 0.05 |
| (1,781) | 1:A:126:VAL:HG11 | 1:A:194:LYS:H | 2 | 0.05 |
| (1,781) | 1:A:126:VAL:HG12 | 1:A:194:LYS:H | 2 | 0.05 |
| (1,781) | 1:A:126:VAL:HG13 | 1:A:194:LYS:H | 2 | 0.05 |
| (1,778) | 1:A:166:LEU:H | 1:A:191:LEU:HD11 | 10 | 0.05 |
| (1,778) | 1:A:166:LEU:H | 1:A:191:LEU:HD12 | 10 | 0.05 |
| (1,778) | 1:A:166:LEU:H | 1:A:191:LEU:HD13 | 10 | 0.05 |
| (1,778) | 1:A:166:LEU:H | 1:A:191:LEU:HD11 | 16 | 0.05 |
| (1,778) | 1:A:166:LEU:H | 1:A:191:LEU:HD12 | 16 | 0.05 |
| (1,778) | 1:A:166:LEU:H | 1:A:191:LEU:HD13 | 16 | 0.05 |
| (1,772) | 1:A:85:LEU:HD11 | 1:A:109:LEU:HD21 | 1 | 0.05 |
| (1,772) | 1:A:85:LEU:HD11 | 1:A:109:LEU:HD22 | 1 | 0.05 |
| (1,772) | 1:A:85:LEU:HD11 | 1:A:109:LEU:HD23 | 1 | 0.05 |
| (1,772) | 1:A:85:LEU:HD12 | 1:A:109:LEU:HD21 | 1 | 0.05 |
| (1,772) | 1:A:85:LEU:HD12 | 1:A:109:LEU:HD22 | 1 | 0.05 |
| (1,772) | 1:A:85:LEU:HD12 | 1:A:109:LEU:HD23 | 1 | 0.05 |
| (1,772) | 1:A:85:LEU:HD13 | 1:A:109:LEU:HD21 | 1 | 0.05 |
| (1,772) | 1:A:85:LEU:HD13 | 1:A:109:LEU:HD22 | 1 | 0.05 |
| (1,772) | 1:A:85:LEU:HD13 | 1:A:109:LEU:HD23 | 1 | 0.05 |
| (1,769) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:121:LEU:HD11 | 15 | 0.05 |
| (1,769) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:121:LEU:HD12 | 15 | 0.05 |
| (1,769) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:121:LEU:HD13 | 15 | 0.05 |
| (1,769) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:121:LEU:HD11 | 15 | 0.05 |
| (1,769) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:121:LEU:HD12 | 15 | 0.05 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,769) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:121:LEU:HD13 | 15 | 0.05 |
| (1,769) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:121:LEU:HD11 | 15 | 0.05 |
| (1,769) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:121:LEU:HD12 | 15 | 0.05 |
| (1,769) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:121:LEU:HD13 | 15 | 0.05 |
| (1,757) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:50:LEU:HD11 | 8 | 0.05 |
| (1,757) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:50:LEU:HD12 | 8 | 0.05 |
| (1,757) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:50:LEU:HD13 | 8 | 0.05 |
| (1,757) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:50:LEU:HD11 | 8 | 0.05 |
| (1,757) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:50:LEU:HD12 | 8 | 0.05 |
| (1,757) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:50:LEU:HD13 | 8 | 0.05 |
| (1,757) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:50:LEU:HD11 | 8 | 0.05 |
| (1,757) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:50:LEU:HD12 | 8 | 0.05 |
| (1,757) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:50:LEU:HD13 | 8 | 0.05 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD11 | 1:A:78:ILE:HD11 | 14 | 0.05 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD11 | 1:A:78:ILE:HD12 | 14 | 0.05 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD11 | 1:A:78:ILE:HD13 | 14 | 0.05 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD12 | 1:A:78:ILE:HD11 | 14 | 0.05 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD12 | 1:A:78:ILE:HD12 | 14 | 0.05 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD12 | 1:A:78:ILE:HD13 | 14 | 0.05 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD13 | 1:A:78:ILE:HD11 | 14 | 0.05 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD13 | 1:A:78:ILE:HD12 | 14 | 0.05 |
| (1,755) | 1:A:70:LEU:HD13 | 1:A:78:ILE:HD13 | 14 | 0.05 |
| (1,750) | 1:A:81:VAL:HG21 | 1:A:85:LEU:HD21 | 15 | 0.05 |
| (1,750) | 1:A:81:VAL:HG21 | 1:A:85:LEU:HD22 | 15 | 0.05 |
| (1,750) | 1:A:81:VAL:HG21 | 1:A:85:LEU:HD23 | 15 | 0.05 |
| (1,750) | 1:A:81:VAL:HG22 | 1:A:85:LEU:HD21 | 15 | 0.05 |
| (1,750) | 1:A:81:VAL:HG22 | 1:A:85:LEU:HD22 | 15 | 0.05 |
| (1,750) | 1:A:81:VAL:HG22 | 1:A:85:LEU:HD23 | 15 | 0.05 |
| (1,750) | 1:A:81:VAL:HG23 | 1:A:85:LEU:HD21 | 15 | 0.05 |
| (1,750) | 1:A:81:VAL:HG23 | 1:A:85:LEU:HD22 | 15 | 0.05 |
| (1,750) | 1:A:81:VAL:HG23 | 1:A:85:LEU:HD23 | 15 | 0.05 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD21 | 1:A:99:VAL:HG21 | 9 | 0.05 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD21 | 1:A:99:VAL:HG22 | 9 | 0.05 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD21 | 1:A:99:VAL:HG23 | 9 | 0.05 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD22 | 1:A:99:VAL:HG21 | 9 | 0.05 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD22 | 1:A:99:VAL:HG22 | 9 | 0.05 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD22 | 1:A:99:VAL:HG23 | 9 | 0.05 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD23 | 1:A:99:VAL:HG21 | 9 | 0.05 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD23 | 1:A:99:VAL:HG22 | 9 | 0.05 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD23 | 1:A:99:VAL:HG23 | 9 | 0.05 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD11 | 13 | 0.05 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD12 | 13 | 0.05 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD13 | 13 | 0.05 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD11 | 13 | 0.05 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD12 | 13 | 0.05 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD13 | 13 | 0.05 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD11 | 13 | 0.05 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD12 | 13 | 0.05 |
| (1,701) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD13 | 13 | 0.05 |
| (1,689) | 1:A:85:LEU:HD11 | 1:A:105:LEU:HD21 | 10 | 0.05 |
| (1,689) | 1:A:85:LEU:HD11 | 1:A:105:LEU:HD22 | 10 | 0.05 |
| (1,689) | 1:A:85:LEU:HD11 | 1:A:105:LEU:HD23 | 10 | 0.05 |
| (1,689) | 1:A:85:LEU:HD12 | 1:A:105:LEU:HD21 | 10 | 0.05 |
| (1,689) | 1:A:85:LEU:HD12 | 1:A:105:LEU:HD22 | 10 | 0.05 |
| (1,689) | 1:A:85:LEU:HD12 | 1:A:105:LEU:HD23 | 10 | 0.05 |
| (1,689) | 1:A:85:LEU:HD13 | 1:A:105:LEU:HD21 | 10 | 0.05 |
| (1,689) | 1:A:85:LEU:HD13 | 1:A:105:LEU:HD22 | 10 | 0.05 |
| (1,689) | 1:A:85:LEU:HD13 | 1:A:105:LEU:HD23 | 10 | 0.05 |
| (1,665) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:121:LEU:HD21 | 13 | 0.05 |
| (1,665) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:121:LEU:HD22 | 13 | 0.05 |
| (1,665) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:121:LEU:HD23 | 13 | 0.05 |
| (1,665) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:121:LEU:HD21 | 13 | 0.05 |
| (1,665) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:121:LEU:HD22 | 13 | 0.05 |
| (1,665) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:121:LEU:HD23 | 13 | 0.05 |
| (1,665) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:121:LEU:HD21 | 13 | 0.05 |
| (1,665) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:121:LEU:HD22 | 13 | 0.05 |
| (1,665) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:121:LEU:HD23 | 13 | 0.05 |
| (1,665) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:121:LEU:HD21 | 15 | 0.05 |
| (1,665) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:121:LEU:HD22 | 15 | 0.05 |
| (1,665) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:121:LEU:HD23 | 15 | 0.05 |
| (1,665) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:121:LEU:HD21 | 15 | 0.05 |
| (1,665) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:121:LEU:HD22 | 15 | 0.05 |
| (1,665) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:121:LEU:HD23 | 15 | 0.05 |
| (1,665) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:121:LEU:HD21 | 15 | 0.05 |
| (1,665) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:121:LEU:HD22 | 15 | 0.05 |
| (1,665) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:121:LEU:HD23 | 15 | 0.05 |
| (1,635) | 1:A:113:LEU:H | 1:A:114:TYR:H | 11 | 0.05 |
| (1,635) | 1:A:113:LEU:H | 1:A:114:TYR:H | 20 | 0.05 |
| (1,596) | 1:A:164:ASN:H | 1:A:195:LEU:H | 18 | 0.05 |
| (1,579) | 1:A:169:ASN:H | 1:A:189:GLN:H | 4 | 0.05 |
| (1,574) | 1:A:36:LEU:HD11 | 1:A:85:LEU:HD21 | 12 | 0.05 |
| (1,574) | 1:A:36:LEU:HD11 | 1:A:85:LEU:HD22 | 12 | 0.05 |
| (1,574) | 1:A:36:LEU:HD11 | 1:A:85:LEU:HD23 | 12 | 0.05 |
| (1,574) | 1:A:36:LEU:HD12 | 1:A:85:LEU:HD21 | 12 | 0.05 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,574) | 1:A:36:LEU:HD12 | 1:A:85:LEU:HD22 | 12 | 0.05 |
| (1,574) | 1:A:36:LEU:HD12 | 1:A:85:LEU:HD23 | 12 | 0.05 |
| (1,574) | 1:A:36:LEU:HD13 | 1:A:85:LEU:HD21 | 12 | 0.05 |
| (1,574) | 1:A:36:LEU:HD13 | 1:A:85:LEU:HD22 | 12 | 0.05 |
| (1,574) | 1:A:36:LEU:HD13 | 1:A:85:LEU:HD23 | 12 | 0.05 |
| (1,572) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:28:ILE:HD11 | 10 | 0.05 |
| (1,572) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:28:ILE:HD12 | 10 | 0.05 |
| (1,572) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:28:ILE:HD13 | 10 | 0.05 |
| (1,572) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:28:ILE:HD11 | 10 | 0.05 |
| (1,572) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:28:ILE:HD12 | 10 | 0.05 |
| (1,572) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:28:ILE:HD13 | 10 | 0.05 |
| (1,572) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:28:ILE:HD11 | 10 | 0.05 |
| (1,572) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:28:ILE:HD12 | 10 | 0.05 |
| (1,572) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:28:ILE:HD13 | 10 | 0.05 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:85:LEU:HD11 | 11 | 0.05 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:85:LEU:HD12 | 11 | 0.05 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:85:LEU:HD13 | 11 | 0.05 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:85:LEU:HD11 | 11 | 0.05 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:85:LEU:HD12 | 11 | 0.05 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:85:LEU:HD13 | 11 | 0.05 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:85:LEU:HD11 | 11 | 0.05 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:85:LEU:HD12 | 11 | 0.05 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:85:LEU:HD13 | 11 | 0.05 |
| (1,560) | 1:A:47:LEU:HD21 | 1:A:50:LEU:HD21 | 2 | 0.05 |
| (1,560) | 1:A:47:LEU:HD21 | 1:A:50:LEU:HD22 | 2 | 0.05 |
| (1,560) | 1:A:47:LEU:HD21 | 1:A:50:LEU:HD23 | 2 | 0.05 |
| (1,560) | 1:A:47:LEU:HD22 | 1:A:50:LEU:HD21 | 2 | 0.05 |
| (1,560) | 1:A:47:LEU:HD22 | 1:A:50:LEU:HD22 | 2 | 0.05 |
| (1,560) | 1:A:47:LEU:HD22 | 1:A:50:LEU:HD23 | 2 | 0.05 |
| (1,560) | 1:A:47:LEU:HD23 | 1:A:50:LEU:HD21 | 2 | 0.05 |
| (1,560) | 1:A:47:LEU:HD23 | 1:A:50:LEU:HD22 | 2 | 0.05 |
| (1,560) | 1:A:47:LEU:HD23 | 1:A:50:LEU:HD23 | 2 | 0.05 |
| (1,558) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:109:LEU:HD11 | 17 | 0.05 |
| (1,558) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:109:LEU:HD12 | 17 | 0.05 |
| (1,558) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:109:LEU:HD13 | 17 | 0.05 |
| (1,558) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:109:LEU:HD11 | 17 | 0.05 |
| (1,558) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:109:LEU:HD12 | 17 | 0.05 |
| (1,558) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:109:LEU:HD13 | 17 | 0.05 |
| (1,558) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:109:LEU:HD11 | 17 | 0.05 |
| (1,558) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:109:LEU:HD12 | 17 | 0.05 |
| (1,558) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:109:LEU:HD13 | 17 | 0.05 |
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD11 | 1:A:163:LEU:HD21 | 4 | 0.05 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD11 | 1:A:163:LEU:HD22 | 4 | 0.05 |
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD11 | 1:A:163:LEU:HD23 | 4 | 0.05 |
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD12 | 1:A:163:LEU:HD21 | 4 | 0.05 |
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD12 | 1:A:163:LEU:HD22 | 4 | 0.05 |
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD12 | 1:A:163:LEU:HD23 | 4 | 0.05 |
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD13 | 1:A:163:LEU:HD21 | 4 | 0.05 |
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD13 | 1:A:163:LEU:HD22 | 4 | 0.05 |
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD13 | 1:A:163:LEU:HD23 | 4 | 0.05 |
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD11 | 1:A:163:LEU:HD21 | 14 | 0.05 |
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD11 | 1:A:163:LEU:HD22 | 14 | 0.05 |
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD11 | 1:A:163:LEU:HD23 | 14 | 0.05 |
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD12 | 1:A:163:LEU:HD21 | 14 | 0.05 |
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD12 | 1:A:163:LEU:HD22 | 14 | 0.05 |
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD12 | 1:A:163:LEU:HD23 | 14 | 0.05 |
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD13 | 1:A:163:LEU:HD21 | 14 | 0.05 |
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD13 | 1:A:163:LEU:HD22 | 14 | 0.05 |
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD13 | 1:A:163:LEU:HD23 | 14 | 0.05 |
| (1,543) | 1:A:129:LEU:HD11 | 1:A:156:LEU:HD11 | 7 | 0.05 |
| (1,543) | 1:A:129:LEU:HD11 | 1:A:156:LEU:HD12 | 7 | 0.05 |
| (1,543) | 1:A:129:LEU:HD11 | 1:A:156:LEU:HD13 | 7 | 0.05 |
| (1,543) | 1:A:129:LEU:HD12 | 1:A:156:LEU:HD11 | 7 | 0.05 |
| (1,543) | 1:A:129:LEU:HD12 | 1:A:156:LEU:HD12 | 7 | 0.05 |
| (1,543) | 1:A:129:LEU:HD12 | 1:A:156:LEU:HD13 | 7 | 0.05 |
| (1,543) | 1:A:129:LEU:HD13 | 1:A:156:LEU:HD11 | 7 | 0.05 |
| (1,543) | 1:A:129:LEU:HD13 | 1:A:156:LEU:HD12 | 7 | 0.05 |
| (1,543) | 1:A:129:LEU:HD13 | 1:A:156:LEU:HD13 | 7 | 0.05 |
| (1,532) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:113:LEU:HD11 | 15 | 0.05 |
| (1,532) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:113:LEU:HD12 | 15 | 0.05 |
| (1,532) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:113:LEU:HD13 | 15 | 0.05 |
| (1,532) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:113:LEU:HD11 | 15 | 0.05 |
| (1,532) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:113:LEU:HD12 | 15 | 0.05 |
| (1,532) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:113:LEU:HD13 | 15 | 0.05 |
| (1,532) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:113:LEU:HD11 | 15 | 0.05 |
| (1,532) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:113:LEU:HD12 | 15 | 0.05 |
| (1,532) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:113:LEU:HD13 | 15 | 0.05 |
| (1,523) | 1:A:138:GLN:H | 1:A:150:LEU:HD11 | 6 | 0.05 |
| (1,523) | 1:A:138:GLN:H | 1:A:150:LEU:HD12 | 6 | 0.05 |
| (1,523) | 1:A:138:GLN:H | 1:A:150:LEU:HD13 | 6 | 0.05 |
| (1,511) | 1:A:145:LYS:H | 1:A:149:LEU:HD21 | 13 | 0.05 |
| (1,511) | 1:A:145:LYS:H | 1:A:149:LEU:HD22 | 13 | 0.05 |
| (1,511) | 1:A:145:LYS:H | 1:A:149:LEU:HD23 | 13 | 0.05 |
| (1,510) | 1:A:137:LEU:HD11 | 1:A:150:LEU:H | 10 | 0.05 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,510) | 1:A:137:LEU:HD12 | 1:A:150:LEU:H | 10 | 0.05 |
| (1,510) | 1:A:137:LEU:HD13 | 1:A:150:LEU:H | 10 | 0.05 |
| (1,508) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:85:LEU:HD21 | 6 | 0.05 |
| (1,508) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:85:LEU:HD22 | 6 | 0.05 |
| (1,508) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:85:LEU:HD23 | 6 | 0.05 |
| (1,508) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:85:LEU:HD21 | 6 | 0.05 |
| (1,508) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:85:LEU:HD22 | 6 | 0.05 |
| (1,508) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:85:LEU:HD23 | 6 | 0.05 |
| (1,508) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:85:LEU:HD21 | 6 | 0.05 |
| (1,508) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:85:LEU:HD22 | 6 | 0.05 |
| (1,508) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:85:LEU:HD23 | 6 | 0.05 |
| (1,508) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:85:LEU:HD21 | 16 | 0.05 |
| (1,508) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:85:LEU:HD22 | 16 | 0.05 |
| (1,508) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:85:LEU:HD23 | 16 | 0.05 |
| (1,508) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:85:LEU:HD21 | 16 | 0.05 |
| (1,508) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:85:LEU:HD22 | 16 | 0.05 |
| (1,508) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:85:LEU:HD23 | 16 | 0.05 |
| (1,508) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:85:LEU:HD21 | 16 | 0.05 |
| (1,508) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:85:LEU:HD22 | 16 | 0.05 |
| (1,508) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:85:LEU:HD23 | 16 | 0.05 |
| (1,508) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:85:LEU:HD21 | 17 | 0.05 |
| (1,508) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:85:LEU:HD22 | 17 | 0.05 |
| (1,508) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:85:LEU:HD23 | 17 | 0.05 |
| (1,508) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:85:LEU:HD21 | 17 | 0.05 |
| (1,508) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:85:LEU:HD22 | 17 | 0.05 |
| (1,508) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:85:LEU:HD23 | 17 | 0.05 |
| (1,508) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:85:LEU:HD21 | 17 | 0.05 |
| (1,508) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:85:LEU:HD22 | 17 | 0.05 |
| (1,508) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:85:LEU:HD23 | 17 | 0.05 |
| (1,507) | 1:A:37:ALA:H | 1:A:57:VAL:HG21 | 5 | 0.05 |
| (1,507) | 1:A:37:ALA:H | 1:A:57:VAL:HG22 | 5 | 0.05 |
| (1,507) | 1:A:37:ALA:H | 1:A:57:VAL:HG23 | 5 | 0.05 |
| (1,507) | 1:A:37:ALA:H | 1:A:57:VAL:HG21 | 15 | 0.05 |
| (1,507) | 1:A:37:ALA:H | 1:A:57:VAL:HG22 | 15 | 0.05 |
| (1,507) | 1:A:37:ALA:H | 1:A:57:VAL:HG23 | 15 | 0.05 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD21 | 1:A:160:LEU:HD11 | 8 | 0.05 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD21 | 1:A:160:LEU:HD12 | 8 | 0.05 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD21 | 1:A:160:LEU:HD13 | 8 | 0.05 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD22 | 1:A:160:LEU:HD11 | 8 | 0.05 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD22 | 1:A:160:LEU:HD12 | 8 | 0.05 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD22 | 1:A:160:LEU:HD13 | 8 | 0.05 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD23 | 1:A:160:LEU:HD11 | 8 | 0.05 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD23 | 1:A:160:LEU:HD12 | 8 | 0.05 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD23 | 1:A:160:LEU:HD13 | 8 | 0.05 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:109:LEU:HD21 | 7 | 0.05 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:109:LEU:HD22 | 7 | 0.05 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:109:LEU:HD23 | 7 | 0.05 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:109:LEU:HD21 | 7 | 0.05 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:109:LEU:HD22 | 7 | 0.05 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:109:LEU:HD23 | 7 | 0.05 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:109:LEU:HD21 | 7 | 0.05 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:109:LEU:HD22 | 7 | 0.05 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:109:LEU:HD23 | 7 | 0.05 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:109:LEU:HD21 | 12 | 0.05 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:109:LEU:HD22 | 12 | 0.05 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:109:LEU:HD23 | 12 | 0.05 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:109:LEU:HD21 | 12 | 0.05 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:109:LEU:HD22 | 12 | 0.05 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:109:LEU:HD23 | 12 | 0.05 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:109:LEU:HD21 | 12 | 0.05 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:109:LEU:HD22 | 12 | 0.05 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:109:LEU:HD23 | 12 | 0.05 |
| (1,467) | 1:A:62:VAL:HG11 | 1:A:63:GLY:H | 5 | 0.05 |
| (1,467) | 1:A:62:VAL:HG12 | 1:A:63:GLY:H | 5 | 0.05 |
| (1,467) | 1:A:62:VAL:HG13 | 1:A:63:GLY:H | 5 | 0.05 |
| (1,467) | 1:A:62:VAL:HG11 | 1:A:63:GLY:H | 10 | 0.05 |
| (1,467) | 1:A:62:VAL:HG12 | 1:A:63:GLY:H | 10 | 0.05 |
| (1,467) | 1:A:62:VAL:HG13 | 1:A:63:GLY:H | 10 | 0.05 |
| (1,467) | 1:A:62:VAL:HG11 | 1:A:63:GLY:H | 17 | 0.05 |
| (1,467) | 1:A:62:VAL:HG12 | 1:A:63:GLY:H | 17 | 0.05 |
| (1,467) | 1:A:62:VAL:HG13 | 1:A:63:GLY:H | 17 | 0.05 |
| (1,462) | 1:A:129:LEU:HD11 | 1:A:153:LEU:HD21 | 12 | 0.05 |
| (1,462) | 1:A:129:LEU:HD11 | 1:A:153:LEU:HD22 | 12 | 0.05 |
| (1,462) | 1:A:129:LEU:HD11 | 1:A:153:LEU:HD23 | 12 | 0.05 |
| (1,462) | 1:A:129:LEU:HD12 | 1:A:153:LEU:HD21 | 12 | 0.05 |
| (1,462) | 1:A:129:LEU:HD12 | 1:A:153:LEU:HD22 | 12 | 0.05 |
| (1,462) | 1:A:129:LEU:HD12 | 1:A:153:LEU:HD23 | 12 | 0.05 |
| (1,462) | 1:A:129:LEU:HD13 | 1:A:153:LEU:HD21 | 12 | 0.05 |
| (1,462) | 1:A:129:LEU:HD13 | 1:A:153:LEU:HD22 | 12 | 0.05 |
| (1,462) | 1:A:129:LEU:HD13 | 1:A:153:LEU:HD23 | 12 | 0.05 |
| (1,453) | 1:A:118:TYR:H | 1:A:121:LEU:HD21 | 17 | 0.05 |
| (1,453) | 1:A:118:TYR:H | 1:A:121:LEU:HD22 | 17 | 0.05 |
| (1,453) | 1:A:118:TYR:H | 1:A:121:LEU:HD23 | 17 | 0.05 |
| (1,446) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:36:LEU:HD21 | 5 | 0.05 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,446) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:36:LEU:HD22 | 5 | 0.05 |
| (1,446) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:36:LEU:HD23 | 5 | 0.05 |
| (1,446) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:36:LEU:HD21 | 5 | 0.05 |
| (1,446) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:36:LEU:HD22 | 5 | 0.05 |
| (1,446) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:36:LEU:HD23 | 5 | 0.05 |
| (1,446) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:36:LEU:HD21 | 5 | 0.05 |
| (1,446) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:36:LEU:HD22 | 5 | 0.05 |
| (1,446) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:36:LEU:HD23 | 5 | 0.05 |
| (1,420) | 1:A:171:LEU:H | 1:A:171:LEU:HD21 | 13 | 0.05 |
| (1,420) | 1:A:171:LEU:H | 1:A:171:LEU:HD22 | 13 | 0.05 |
| (1,420) | 1:A:171:LEU:H | 1:A:171:LEU:HD23 | 13 | 0.05 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD21 | 1:A:195:LEU:HD21 | 12 | 0.05 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD21 | 1:A:195:LEU:HD22 | 12 | 0.05 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD21 | 1:A:195:LEU:HD23 | 12 | 0.05 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD22 | 1:A:195:LEU:HD21 | 12 | 0.05 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD22 | 1:A:195:LEU:HD22 | 12 | 0.05 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD22 | 1:A:195:LEU:HD23 | 12 | 0.05 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD23 | 1:A:195:LEU:HD21 | 12 | 0.05 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD23 | 1:A:195:LEU:HD22 | 12 | 0.05 |
| (1,408) | 1:A:163:LEU:HD23 | 1:A:195:LEU:HD23 | 12 | 0.05 |
| (1,405) | 1:A:47:LEU:HD21 | 1:A:50:LEU:HD11 | 10 | 0.05 |
| (1,405) | 1:A:47:LEU:HD21 | 1:A:50:LEU:HD12 | 10 | 0.05 |
| (1,405) | 1:A:47:LEU:HD21 | 1:A:50:LEU:HD13 | 10 | 0.05 |
| (1,405) | 1:A:47:LEU:HD22 | 1:A:50:LEU:HD11 | 10 | 0.05 |
| (1,405) | 1:A:47:LEU:HD22 | 1:A:50:LEU:HD12 | 10 | 0.05 |
| (1,405) | 1:A:47:LEU:HD22 | 1:A:50:LEU:HD13 | 10 | 0.05 |
| (1,405) | 1:A:47:LEU:HD23 | 1:A:50:LEU:HD11 | 10 | 0.05 |
| (1,405) | 1:A:47:LEU:HD23 | 1:A:50:LEU:HD12 | 10 | 0.05 |
| (1,405) | 1:A:47:LEU:HD23 | 1:A:50:LEU:HD13 | 10 | 0.05 |
| (1,390) | 1:A:47:LEU:H | 1:A:50:LEU:HD21 | 3 | 0.05 |
| (1,390) | 1:A:47:LEU:H | 1:A:50:LEU:HD22 | 3 | 0.05 |
| (1,390) | 1:A:47:LEU:H | 1:A:50:LEU:HD23 | 3 | 0.05 |
| (1,390) | 1:A:47:LEU:H | 1:A:50:LEU:HD21 | 11 | 0.05 |
| (1,390) | 1:A:47:LEU:H | 1:A:50:LEU:HD22 | 11 | 0.05 |
| (1,390) | 1:A:47:LEU:H | 1:A:50:LEU:HD23 | 11 | 0.05 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD11 | 1:A:190:LEU:HD11 | 3 | 0.05 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD11 | 1:A:190:LEU:HD12 | 3 | 0.05 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD11 | 1:A:190:LEU:HD13 | 3 | 0.05 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD12 | 1:A:190:LEU:HD11 | 3 | 0.05 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD12 | 1:A:190:LEU:HD12 | 3 | 0.05 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD12 | 1:A:190:LEU:HD13 | 3 | 0.05 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD13 | 1:A:190:LEU:HD11 | 3 | 0.05 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD13 | 1:A:190:LEU:HD12 | 3 | 0.05 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD13 | 1:A:190:LEU:HD13 | 3 | 0.05 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD11 | 1:A:190:LEU:HD11 | 10 | 0.05 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD11 | 1:A:190:LEU:HD12 | 10 | 0.05 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD11 | 1:A:190:LEU:HD13 | 10 | 0.05 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD12 | 1:A:190:LEU:HD11 | 10 | 0.05 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD12 | 1:A:190:LEU:HD12 | 10 | 0.05 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD12 | 1:A:190:LEU:HD13 | 10 | 0.05 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD13 | 1:A:190:LEU:HD11 | 10 | 0.05 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD13 | 1:A:190:LEU:HD12 | 10 | 0.05 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD13 | 1:A:190:LEU:HD13 | 10 | 0.05 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD11 | 1:A:190:LEU:HD11 | 20 | 0.05 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD11 | 1:A:190:LEU:HD12 | 20 | 0.05 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD11 | 1:A:190:LEU:HD13 | 20 | 0.05 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD12 | 1:A:190:LEU:HD11 | 20 | 0.05 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD12 | 1:A:190:LEU:HD12 | 20 | 0.05 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD12 | 1:A:190:LEU:HD13 | 20 | 0.05 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD13 | 1:A:190:LEU:HD11 | 20 | 0.05 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD13 | 1:A:190:LEU:HD12 | 20 | 0.05 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD13 | 1:A:190:LEU:HD13 | 20 | 0.05 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG21 | 1:A:128:ILE:HD11 | 6 | 0.05 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG21 | 1:A:128:ILE:HD12 | 6 | 0.05 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG21 | 1:A:128:ILE:HD13 | 6 | 0.05 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG22 | 1:A:128:ILE:HD11 | 6 | 0.05 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG22 | 1:A:128:ILE:HD12 | 6 | 0.05 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG22 | 1:A:128:ILE:HD13 | 6 | 0.05 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG23 | 1:A:128:ILE:HD11 | 6 | 0.05 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG23 | 1:A:128:ILE:HD12 | 6 | 0.05 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG23 | 1:A:128:ILE:HD13 | 6 | 0.05 |
| (1,346) | 1:A:175:LEU:HD21 | 1:A:184:LYS:H | 12 | 0.05 |
| (1,346) | 1:A:175:LEU:HD22 | 1:A:184:LYS:H | 12 | 0.05 |
| (1,346) | 1:A:175:LEU:HD23 | 1:A:184:LYS:H | 12 | 0.05 |
| (1,338) | 1:A:48:ALA:H | 1:A:54:VAL:HG11 | 6 | 0.05 |
| (1,338) | 1:A:48:ALA:H | 1:A:54:VAL:HG12 | 6 | 0.05 |
| (1,338) | 1:A:48:ALA:H | 1:A:54:VAL:HG13 | 6 | 0.05 |
| (1,338) | 1:A:48:ALA:H | 1:A:54:VAL:HG11 | 20 | 0.05 |
| (1,338) | 1:A:48:ALA:H | 1:A:54:VAL:HG12 | 20 | 0.05 |
| (1,338) | 1:A:48:ALA:H | 1:A:54:VAL:HG13 | 20 | 0.05 |
| (1,334) | 1:A:90:ILE:H | 1:A:91:VAL:HG21 | 2 | 0.05 |
| (1,334) | 1:A:90:ILE:H | 1:A:91:VAL:HG22 | 2 | 0.05 |
| (1,334) | 1:A:90:ILE:H | 1:A:91:VAL:HG23 | 2 | 0.05 |
| (1,328) | 1:A:77:LYS:H | 1:A:78:ILE:HD11 | 2 | 0.05 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,328) | 1:A:77:LYS:H | 1:A:78:ILE:HD12 | 2 | 0.05 |
| (1,328) | 1:A:77:LYS:H | 1:A:78:ILE:HD13 | 2 | 0.05 |
| (1,328) | 1:A:77:LYS:H | 1:A:78:ILE:HD11 | 15 | 0.05 |
| (1,328) | 1:A:77:LYS:H | 1:A:78:ILE:HD12 | 15 | 0.05 |
| (1,328) | 1:A:77:LYS:H | 1:A:78:ILE:HD13 | 15 | 0.05 |
| (1,326) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:80:THR:H | 1 | 0.05 |
| (1,326) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:80:THR:H | 1 | 0.05 |
| (1,326) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:80:THR:H | 1 | 0.05 |
| (1,310) | 1:A:173:ARG:H | 1:A:187:LEU:HD11 | 6 | 0.05 |
| (1,310) | 1:A:173:ARG:H | 1:A:187:LEU:HD12 | 6 | 0.05 |
| (1,310) | 1:A:173:ARG:H | 1:A:187:LEU:HD13 | 6 | 0.05 |
| (1,306) | 1:A:131:GLY:H | 1:A:156:LEU:HD11 | 19 | 0.05 |
| (1,306) | 1:A:131:GLY:H | 1:A:156:LEU:HD12 | 19 | 0.05 |
| (1,306) | 1:A:131:GLY:H | 1:A:156:LEU:HD13 | 19 | 0.05 |
| (1,295) | 1:A:153:LEU:H | 1:A:190:LEU:HD21 | 13 | 0.05 |
| (1,295) | 1:A:153:LEU:H | 1:A:190:LEU:HD22 | 13 | 0.05 |
| (1,295) | 1:A:153:LEU:H | 1:A:190:LEU:HD23 | 13 | 0.05 |
| (1,272) | 1:A:124:GLY:H | 1:A:163:LEU:HD21 | 4 | 0.05 |
| (1,272) | 1:A:124:GLY:H | 1:A:163:LEU:HD22 | 4 | 0.05 |
| (1,272) | 1:A:124:GLY:H | 1:A:163:LEU:HD23 | 4 | 0.05 |
| (1,263) | 1:A:163:LEU:HD11 | 1:A:164:ASN:H | 17 | 0.05 |
| (1,263) | 1:A:163:LEU:HD12 | 1:A:164:ASN:H | 17 | 0.05 |
| (1,263) | 1:A:163:LEU:HD13 | 1:A:164:ASN:H | 17 | 0.05 |
| (1,260) | 1:A:171:LEU:HD21 | 1:A:189:GLN:H | 6 | 0.05 |
| (1,260) | 1:A:171:LEU:HD22 | 1:A:189:GLN:H | 6 | 0.05 |
| (1,260) | 1:A:171:LEU:HD23 | 1:A:189:GLN:H | 6 | 0.05 |
| (1,250) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:84:ASN:H | 18 | 0.05 |
| (1,250) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:84:ASN:H | 18 | 0.05 |
| (1,250) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:84:ASN:H | 18 | 0.05 |
| (1,242) | 1:A:133:ALA:H | 1:A:147:LEU:HD21 | 5 | 0.05 |
| (1,242) | 1:A:133:ALA:H | 1:A:147:LEU:HD22 | 5 | 0.05 |
| (1,242) | 1:A:133:ALA:H | 1:A:147:LEU:HD23 | 5 | 0.05 |
| (1,233) | 1:A:54:VAL:HG11 | 1:A:55:THR:H | 19 | 0.05 |
| (1,233) | 1:A:54:VAL:HG12 | 1:A:55:THR:H | 19 | 0.05 |
| (1,233) | 1:A:54:VAL:HG13 | 1:A:55:THR:H | 19 | 0.05 |
| (1,229) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:147:LEU:HD21 | 13 | 0.05 |
| (1,229) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:147:LEU:HD22 | 13 | 0.05 |
| (1,229) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:147:LEU:HD23 | 13 | 0.05 |
| (1,229) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:147:LEU:HD21 | 15 | 0.05 |
| (1,229) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:147:LEU:HD22 | 15 | 0.05 |
| (1,229) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:147:LEU:HD23 | 15 | 0.05 |
| (1,212) | 1:A:86:ALA:H | 1:A:88:PHE:H | 2 | 0.05 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,212) | 1:A:86:ALA:H | 1:A:88:PHE:H | 8 | 0.05 |
| (1,212) | 1:A:86:ALA:H | 1:A:88:PHE:H | 9 | 0.05 |
| (1,212) | 1:A:86:ALA:H | 1:A:88:PHE:H | 19 | 0.05 |
| (1,205) | 1:A:24:VAL:HG11 | 1:A:192:GLY:H | 2 | 0.05 |
| (1,205) | 1:A:24:VAL:HG12 | 1:A:192:GLY:H | 2 | 0.05 |
| (1,205) | 1:A:24:VAL:HG13 | 1:A:192:GLY:H | 2 | 0.05 |
| (1,205) | 1:A:24:VAL:HG11 | 1:A:192:GLY:H | 8 | 0.05 |
| (1,205) | 1:A:24:VAL:HG12 | 1:A:192:GLY:H | 8 | 0.05 |
| (1,205) | 1:A:24:VAL:HG13 | 1:A:192:GLY:H | 8 | 0.05 |
| (1,205) | 1:A:24:VAL:HG11 | 1:A:192:GLY:H | 15 | 0.05 |
| (1,205) | 1:A:24:VAL:HG12 | 1:A:192:GLY:H | 15 | 0.05 |
| (1,205) | 1:A:24:VAL:HG13 | 1:A:192:GLY:H | 15 | 0.05 |
| (1,205) | 1:A:24:VAL:HG11 | 1:A:192:GLY:H | 20 | 0.05 |
| (1,205) | 1:A:24:VAL:HG12 | 1:A:192:GLY:H | 20 | 0.05 |
| (1,205) | 1:A:24:VAL:HG13 | 1:A:192:GLY:H | 20 | 0.05 |
| (1,203) | 1:A:149:LEU:H | 1:A:150:LEU:HD21 | 16 | 0.05 |
| (1,203) | 1:A:149:LEU:H | 1:A:150:LEU:HD22 | 16 | 0.05 |
| (1,203) | 1:A:149:LEU:H | 1:A:150:LEU:HD23 | 16 | 0.05 |
| (1,201) | 1:A:157:GLN:H | 1:A:190:LEU:HD21 | 7 | 0.05 |
| (1,201) | 1:A:157:GLN:H | 1:A:190:LEU:HD22 | 7 | 0.05 |
| (1,201) | 1:A:157:GLN:H | 1:A:190:LEU:HD23 | 7 | 0.05 |
| (1,201) | 1:A:157:GLN:H | 1:A:190:LEU:HD21 | 16 | 0.05 |
| (1,201) | 1:A:157:GLN:H | 1:A:190:LEU:HD22 | 16 | 0.05 |
| (1,201) | 1:A:157:GLN:H | 1:A:190:LEU:HD23 | 16 | 0.05 |
| (1,175) | 1:A:163:LEU:HD11 | 1:A:166:LEU:H | 6 | 0.05 |
| (1,175) | 1:A:163:LEU:HD12 | 1:A:166:LEU:H | 6 | 0.05 |
| (1,175) | 1:A:163:LEU:HD13 | 1:A:166:LEU:H | 6 | 0.05 |
| (1,169) | 1:A:137:LEU:H | 1:A:147:LEU:HD21 | 19 | 0.05 |
| (1,169) | 1:A:137:LEU:H | 1:A:147:LEU:HD22 | 19 | 0.05 |
| (1,169) | 1:A:137:LEU:H | 1:A:147:LEU:HD23 | 19 | 0.05 |
| (1,168) | 1:A:137:LEU:H | 1:A:150:LEU:HD21 | 6 | 0.05 |
| (1,168) | 1:A:137:LEU:H | 1:A:150:LEU:HD22 | 6 | 0.05 |
| (1,168) | 1:A:137:LEU:H | 1:A:150:LEU:HD23 | 6 | 0.05 |
| (1,163) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:81:VAL:H | 5 | 0.05 |
| (1,163) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:81:VAL:H | 5 | 0.05 |
| (1,163) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:81:VAL:H | 5 | 0.05 |
| (1,163) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:81:VAL:H | 18 | 0.05 |
| (1,163) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:81:VAL:H | 18 | 0.05 |
| (1,163) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:81:VAL:H | 18 | 0.05 |
| (1,16) | 1:A:145:LYS:H | 1:A:146:ASP:H | 13 | 0.05 |
| (1,153) | 1:A:57:VAL:H | 1:A:81:VAL:HG21 | 7 | 0.05 |
| (1,153) | 1:A:57:VAL:H | 1:A:81:VAL:HG22 | 7 | 0.05 |



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

| (1,153) 1:A:24:VAL:H 1:A:128:ILE:HD11 13 0.05 (1,123) 1:A:24:VAL:H 1:A:128:ILE:HD12 13 0.05 (1,123) 1:A:24:VAL:H 1:A:128:ILE:HD13 13 0.05 (1,122) 1:A:24:VAL:H 1:A:128:ILE:HD13 13 0.05 (1,122) 1:A:24:VAL:H 1:A:191:LEU:HD21 3 0.05 (1,122) 1:A:24:VAL:H 1:A:191:LEU:HD22 3 0.05 (1,122) 1:A:24:VAL:H 1:A:191:LEU:HD22 3 0.05 (1,122) 1:A:24:VAL:H 1:A:191:LEU:HD23 3 0.05 (1,117) 1:A:167:ILE:H 1:A:191:LEU:HD23 3 0.05 (1,117) 1:A:167:ILE:H 1:A:191:LEU:HD23 3 0.05 (1,1098) 1:A:124:GLY:O 1:A:98:ILE:N 13 0.05 (1,1097) 1:A:32:LYS:O 1:A:96:GLU:H 9 0.05 (1,1097) 1:A:32:LYS:O 1:A:96:GLU:H 9 0.05 (1,1097) 1:A:32:LYS:O 1:A:96:GLU:H 9 0.05 (1,1085) 1:A:154:GLU:O 1:A:158:SER:N 3 0.05 (1,1085) 1:A:154:GLU:O 1:A:148:ASP:H 9 0.05 (1,1085) 1:A:154:GLU:O 1:A:148:ASP:H 9 0.05 (1,1084) 1:A:10:ARG:O 1:A:114:TYR:H 11 0.05 (1,1074) 1:A:10:ARG:O 1:A:112:GLN:H 13 0.05 (1,1046) 1:A:46:PHE:O 1:A:50:LEU:H 18 0.05 (1,1044) 1:A:23:SER:O 1:A:7:GLN:H 12 0.05 (1,1029) 1:A:114:TYR:HE1 1:A:127:PHE:HZ 2 0.05 (1,1029) 1:A:114:TYR:HE1 1:A:127:PHE:HZ 2 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD21 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD22 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU: | Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|--|----------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,123) 1:A:24:VAL:H 1:A:128:ILE:HD12 13 0.05 (1,123) 1:A:24:VAL:H 1:A:139:ILE:HD12 13 0.05 (1,122) 1:A:24:VAL:H 1:A:191:LEU:HD21 3 0.05 (1,122) 1:A:24:VAL:H 1:A:191:LEU:HD22 3 0.05 (1,122) 1:A:24:VAL:H 1:A:191:LEU:HD22 3 0.05 (1,117) 1:A:167:ILE:H 1:A:191:LEU:HD23 3 0.05 (1,117) 1:A:167:ILE:H 1:A:191:LEU:HD23 3 0.05 (1,117) 1:A:167:ILE:H 1:A:191:LEU:O 1 0.05 (1,1098) 1:A:124:GIX:O 1:A:98:ILE:N 13 0.05 (1,1097) 1:A:32:LYS:O 1:A:96:GLU:H 9 0.05 (1,1097) 1:A:32:LYS:O 1:A:96:GLU:H 9 0.05 (1,1097) 1:A:32:LYS:O 1:A:96:GLU:H 10 0.05 (1,1085) 1:A:154:GLU:O 1:A:158:SER:N 3 0.05 (1,1085) 1:A:154:GLU:O 1:A:158:SER:N 3 0.05 (1,108) 1:A:145:LYS:H 1:A:148:ASP:H 9 0.05 (1,1074) 1:A:10:ARG:O 1:A:14:TYR:H 11 0.05 (1,1074) 1:A:10:ARG:O 1:A:14:TYR:H 11 0.05 (1,104) 1:A:108:SER:O 1:A:112:GLN:H 13 0.05 (1,104) 1:A:46:PHE:O 1:A:45:LEU:HD 1 1:A:50:LEU:HD 1 1:A:105:LEU:HD 1 1:A:150:LEU:HD 1 1:A:150:LEU:HD 1 1:A:150:LEU:HD 2 0.05 (1,1029) 1:A:114:TYR:HE1 1:A:127:PHE:HZ 2 0.05 (1,1029) 1:A:105:LEU:HD 11 1:A:85:LEU:HD 2 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD 12 1:A:85:LEU:HD 2 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD 11 1:A:85:LEU:HD 2 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD 11 1:A:85:LEU:HD 2 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD 11 1:A:85:LEU:HD 2 11 0.05 (1,1023) | (1,153) | 1:A:57:VAL:H | 1:A:81:VAL:HG23 | 7 | 0.05 |
| (1,123) 1:A:24:VAL:H 1:A:128:ILE:HD13 13 0.05 (1,122) 1:A:24:VAL:H 1:A:191:LEU:HD21 3 0.05 (1,122) 1:A:24:VAL:H 1:A:191:LEU:HD22 3 0.05 (1,122) 1:A:24:VAL:H 1:A:191:LEU:HD22 3 0.05 (1,1117) 1:A:167:ILE:H 1:A:191:LEU:HD23 3 0.05 (1,1117) 1:A:167:ILE:H 1:A:191:LEU:O 1 0.05 (1,1098) 1:A:124:GLY:O 1:A:98:ILE:N 13 0.05 (1,1097) 1:A:32:LYS:O 1:A:96:GLU:H 9 0.05 (1,1097) 1:A:32:LYS:O 1:A:96:GLU:H 10 0.05 (1,1097) 1:A:32:LYS:O 1:A:96:GLU:H 10 0.05 (1,1085) 1:A:154:GLU:O 1:A:158:SER:N 3 0.05 (1,108) 1:A:145:LYS:H 1:A:148:ASP:H 9 0.05 (1,1070) 1:A:145:LYS:H 1:A:148:ASP:H 9 0.05 (1,1070) 1:A:145:LYS:H 1:A:148:ASP:H 9 0.05 (1,1070) 1:A:108:SER:O 1:A:114:TYR:H 11 0.05 (1,1070) 1:A:108:SER:O 1:A:112:GLN:H 13 0.05 (1,1046) 1:A:46:PHE:O 1:A:50:LEU:H 18 0.05 (1,1029) 1:A:114:TYR:HE1 1:A:127:PHE:HZ 2 0.05 (1,1029) 1:A:114:TYR:HE1 1:A:127:PHE:HZ 2 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD21 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD22 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD22 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD23 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD22 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD22 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD22 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 11 0.05 | (1,123) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:128:ILE:HD11 | 13 | 0.05 |
| (1,122) 1:A:24:VAL:H 1:A:191:LEU:HD21 3 0.05 (1,122) 1:A:24:VAL:H 1:A:191:LEU:HD22 3 0.05 (1,117) 1:A:24:VAL:H 1:A:191:LEU:HD23 3 0.05 (1,117) 1:A:167:ILE:H 1:A:191:LEU:O 1 0.05 (1,1097) 1:A:32:LYS:O 1:A:98:ILE:N 13 0.05 (1,1097) 1:A:32:LYS:O 1:A:96:GLU:H 9 0.05 (1,1097) 1:A:32:LYS:O 1:A:96:GLU:H 9 0.05 (1,1097) 1:A:32:LYS:O 1:A:96:GLU:H 10 0.05 (1,1097) 1:A:32:LYS:O 1:A:96:GLU:H 10 0.05 (1,1097) 1:A:154:GLU:O 1:A:158:SER:N 3 0.05 (1,1085) 1:A:154:GLU:O 1:A:158:SER:N 3 0.05 (1,1085) 1:A:145:LYS:H 1:A:145:ASP:H 9 0.05 (1,1070) 1:A:110:ARG:O 1:A:114:TYR:H 11 0.05 (1,1070) 1:A:110:ARG:O 1:A:114:TYR:H 11 0.05 (1,1070) 1:A:108:SER:O 1:A:112:GLN:H 18 0.05 (1,1034) 1:A:23:SER:O 1:A:27:GLN:H 12 0.05 (1,1029) 1:A:114:TYR:HE1 1:A:127:PHE:HZ 2 0.05 (1,1029) 1:A:114:TYR:HE1 1:A:127:PHE:HZ 2 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD21 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD22 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD22 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD22 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD22 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD22 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD22 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD22 11 0.05 (| (1,123) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:128:ILE:HD12 | 13 | 0.05 |
| (1,122) 1:A:24:VAL:H 1:A:191:LEU:HD22 3 0.05 (1,117) 1:A:167:ILE:H 1:A:191:LEU:O 1 0.05 (1,1098) 1:A:124:GLY:O 1:A:98:ILE:N 13 0.05 (1,1097) 1:A:32:LYS:O 1:A:96:GLU:H 9 0.05 (1,1097) 1:A:32:LYS:O 1:A:96:GLU:H 10 0.05 (1,1098) 1:A:154:GLU:O 1:A:158:SER:N 3 0.05 (1,1097) 1:A:32:LYS:O 1:A:96:GLU:H 10 0.05 (1,1085) 1:A:154:GLU:O 1:A:158:SER:N 3 0.05 (1,108) 1:A:145:LYS:H 1:A:148:ASP:H 9 0.05 (1,1074) 1:A:108:SER:O 1:A:114:TYR:H 11 0.05 (1,1070) 1:A:108:SER:O 1:A:114:TYR:H 11 0.05 (1,1046) 1:A:46:PHE:O 1:A:50:LEU:H 18 0.05 (1,1034) 1:A:23:SER:O 1:A:27:GLN:H 12 0.05 (1,1029) 1:A:114:TYR:HE1 1:A:127:PHE:HZ 2 0.05 (1,1029) 1:A:114:TYR:HE2 1:A:127:PHE:HZ 2 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD21 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD22 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD23 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD23 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD23 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD23 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 11 | (1,123) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:128:ILE:HD13 | 13 | 0.05 |
| (1,122) 1:A:24:VAL:H 1:A:191:LEU:HD23 3 0.05 (1,1117) 1:A:167:ILE:H 1:A:191:LEU:O 1 0.05 (1,1098) 1:A:124:GLY:O 1:A:98:GLU:H 10 0.05 (1,1097) 1:A:32:LYS:O 1:A:96:GLU:H 9 0.05 (1,1097) 1:A:32:LYS:O 1:A:96:GLU:H 10 0.05 (1,1097) 1:A:32:LYS:O 1:A:96:GLU:H 10 0.05 (1,1085) 1:A:145:LYS:H 1:A:158:SER:N 3 0.05 (1,1088) 1:A:145:LYS:H 1:A:148:ASP:H 9 0.05 (1,1074) 1:A:110:ARG:O 1:A:112:GLN:H 13 0.05 (1,1070) 1:A:108:SER:O 1:A:112:GLN:H 13 0.05 (1,1046) 1:A:4:6:PHE:O 1:A:27:GLN:H 12 0.05 (1,1023) 1:A:14:TYR:HE1 1:A:127:PHE:HZ 2 0.05 (1,1029) 1:A:14:TYR:HE2 1:A:127:PHE:HZ 2 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD22 10< | (1,122) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:191:LEU:HD21 | 3 | 0.05 |
| (1,1117) 1:A:167:ILE:H 1:A:191:LEU:O 1 0.05 (1,1098) 1:A:124:GLY:O 1:A:98:ILE:N 13 0.05 (1,1097) 1:A:32:LYS:O 1:A:96:GLU:H 9 0.05 (1,1097) 1:A:32:LYS:O 1:A:96:GLU:H 10 0.05 (1,1085) 1:A:154:GLU:O 1:A:158:SER:N 3 0.05 (1,1085) 1:A:145:LYS:H 1:A:148:ASP:H 9 0.05 (1,1080) 1:A:145:LYS:H 1:A:148:ASP:H 9 0.05 (1,1074) 1:A:110:ARG:O 1:A:114:TYR:H 11 0.05 (1,1070) 1:A:108:SER:O 1:A:112:GLN:H 13 0.05 (1,1046) 1:A:46:PHE:O 1:A:50:LEU:H 18 0.05 (1,1029) 1:A:114:TYR:HE1 1:A:127:PLE:HZ 2 0.05 (1,1029) 1:A:14:TYR:HE1 1:A:127:PHE:HZ 2 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD21 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 < | (1,122) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:191:LEU:HD22 | 3 | 0.05 |
| (1,1098) 1:A:124:GLY:O 1:A:98:ILE:N 13 0.05 (1,1097) 1:A:32:LYS:O 1:A:96:GLU:H 9 0.05 (1,1097) 1:A:32:LYS:O 1:A:96:GLU:H 10 0.05 (1,1097) 1:A:32:LYS:O 1:A:96:GLU:H 10 0.05 (1,1070) 1:A:145:LYS:H 1:A:158:SER:N 3 0.05 (1,1074) 1:A:110:ARG:O 1:A:141:TYR:H 11 0.05 (1,1074) 1:A:110:ARG:O 1:A:112:GLN:H 13 0.05 (1,1074) 1:A:10:ARG:O 1:A:112:GLN:H 13 0.05 (1,1074) 1:A:140:REC 1:A:112:GLN:H 13 0.05 (1,1046) 1:A:46:PHE:O 1:A:127:PHE:H 13 0.05 (1,1029) 1:A:114:TYR:HE1 1:A:27:PHE:HZ 2 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD21 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 | (1,122) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:191:LEU:HD23 | 3 | 0.05 |
| (1,1097) 1:A:32:LYS:O 1:A:96:GLU:H 9 0.05 (1,1097) 1:A:32:LYS:O 1:A:96:GLU:H 10 0.05 (1,1085) 1:A:154:GLU:O 1:A:158:SER:N 3 0.05 (1,108) 1:A:145:LYS:H 1:A:148:ASP:H 9 0.05 (1,1074) 1:A:110:ARG:O 1:A:114:TYR:H 11 0.05 (1,1070) 1:A:108:SER:O 1:A:112:GLN:H 13 0.05 (1,1046) 1:A:46:PHE:O 1:A:50:LEU:H 18 0.05 (1,1046) 1:A:46:PHE:O 1:A:27:GLN:H 12 0.05 (1,1046) 1:A:46:PHE:O 1:A:27:GLN:H 12 0.05 (1,1046) 1:A:414:TYR:HEI 1:A:127:PHE:HZ 2 0.05 (1,1029) 1:A:114:TYR:HE2 1:A:127:PHE:HZ 2 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD21 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD23 | (1,1117) | 1:A:167:ILE:H | 1:A:191:LEU:O | 1 | 0.05 |
| (1,1097) 1:A:32:LYS:O 1:A:96:GLU:H 10 0.05 (1,1085) 1:A:154:GLU:O 1:A:158:SER:N 3 0.05 (1,108) 1:A:145:LYS:H 1:A:148:ASP:H 9 0.05 (1,1074) 1:A:110:ARG:O 1:A:112:GLN:H 11 0.05 (1,1070) 1:A:108:SER:O 1:A:112:GLN:H 13 0.05 (1,1046) 1:A:46:PHE:O 1:A:50:LEU:H 18 0.05 (1,1034) 1:A:23:SER:O 1:A:27:GLN:H 12 0.05 (1,1029) 1:A:114:TYR:HE1 1:A:127:PHE:HZ 2 0.05 (1,1029) 1:A:114:TYR:HE2 1:A:127:PHE:HZ 2 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD21 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD22 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD23 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD23 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU: | (1,1098) | 1:A:124:GLY:O | 1:A:98:ILE:N | 13 | 0.05 |
| (1,1085) 1:A:154:GLU:O 1:A:158:SER:N 3 0.05 (1,108) 1:A:145:LYS:H 1:A:148:ASP:H 9 0.05 (1,1074) 1:A:110:ARG:O 1:A:112:GLN:H 11 0.05 (1,1070) 1:A:108:SER:O 1:A:112:GLN:H 13 0.05 (1,1046) 1:A:46:PHE:O 1:A:50:LEU:H 18 0.05 (1,1034) 1:A:23:SER:O 1:A:27:GLN:H 12 0.05 (1,1029) 1:A:114:TYR:HE1 1:A:127:PHE:HZ 2 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD21 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD22 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD23 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD21 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD23 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1 | (1,1097) | 1:A:32:LYS:O | 1:A:96:GLU:H | 9 | 0.05 |
| (1,108) 1:A:145:LYS:H 1:A:148:ASP:H 9 0.05 (1,1074) 1:A:110:ARG:O 1:A:114:TYR:H 11 0.05 (1,1070) 1:A:108:SER:O 1:A:112:GLN:H 13 0.05 (1,1046) 1:A:46:PHE:O 1:A:50:LEU:H 18 0.05 (1,1034) 1:A:23:SER:O 1:A:27:PHE:HZ 2 0.05 (1,1029) 1:A:114:TYR:HE1 1:A:127:PHE:HZ 2 0.05 (1,1029) 1:A:14:TYR:HE2 1:A:127:PHE:HZ 2 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD21 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD22 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD21 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD23 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 <th< td=""><td>(1,1097)</td><td>1:A:32:LYS:O</td><td>1:A:96:GLU:H</td><td>10</td><td>0.05</td></th<> | (1,1097) | 1:A:32:LYS:O | 1:A:96:GLU:H | 10 | 0.05 |
| (1,1074) 1:A:110:ARG:O 1:A:114:TYR:H 11 0.05 (1,1070) 1:A:108:SER:O 1:A:112:GLN:H 13 0.05 (1,1046) 1:A:46:PHE:O 1:A:50:LEU:H 18 0.05 (1,1034) 1:A:23:SER:O 1:A:27:PHE:HZ 2 0.05 (1,1029) 1:A:114:TYR:HE1 1:A:127:PHE:HZ 2 0.05 (1,1029) 1:A:14:TYR:HE2 1:A:127:PHE:HZ 2 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD21 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD22 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD23 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD23 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD21 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 | (1,1085) | 1:A:154:GLU:O | 1:A:158:SER:N | 3 | 0.05 |
| (1,1070) 1:A:108:SER:O 1:A:112:GLN:H 13 0.05 (1,1046) 1:A:46:PHE:O 1:A:50:LEU:H 18 0.05 (1,1034) 1:A:23:SER:O 1:A:27:GLN:H 12 0.05 (1,1029) 1:A:114:TYR:HE1 1:A:127:PHE:HZ 2 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD21 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD22 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD22 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD23 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD23 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD23 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD21 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13< | (1,108) | 1:A:145:LYS:H | 1:A:148:ASP:H | 9 | 0.05 |
| (1,1046) 1:A:46:PHE:O 1:A:50:LEU:H 18 0.05 (1,1034) 1:A:23:SER:O 1:A:27:GLN:H 12 0.05 (1,1029) 1:A:114:TYR:HE1 1:A:127:PHE:HZ 2 0.05 (1,1029) 1:A:114:TYR:HE2 1:A:127:PHE:HZ 2 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD21 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD22 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD21 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD22 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD22 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD1 | (1,1074) | 1:A:110:ARG:O | 1:A:114:TYR:H | 11 | 0.05 |
| (1,1034) 1:A:23:SER:O 1:A:27:GLN:H 12 0.05 (1,1029) 1:A:114:TYR:HE1 1:A:127:PHE:HZ 2 0.05 (1,1029) 1:A:114:TYR:HE2 1:A:127:PHE:HZ 2 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD21 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD22 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD21 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD22 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD23 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD21 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD22 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 10 0.05 (1,1023) 1:A:105: | (1,1070) | 1:A:108:SER:O | 1:A:112:GLN:H | 13 | 0.05 |
| (1,1029) 1:A:114:TYR:HE1 1:A:127:PHE:HZ 2 0.05 (1,1029) 1:A:114:TYR:HE2 1:A:127:PHE:HZ 2 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD21 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD22 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD21 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD22 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD23 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD21 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD22 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 11 0.05 (1,1023) 1 | (1,1046) | 1:A:46:PHE:O | 1:A:50:LEU:H | 18 | 0.05 |
| (1,1029) 1:A:114:TYR:HE2 1:A:127:PHE:HZ 2 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD21 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD22 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD21 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD22 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD23 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD21 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD22 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD22 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 11 0.05 (1,1023) <t< td=""><td>(1,1034)</td><td>1:A:23:SER:O</td><td>1:A:27:GLN:H</td><td>12</td><td>0.05</td></t<> | (1,1034) | 1:A:23:SER:O | 1:A:27:GLN:H | 12 | 0.05 |
| (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD21 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD22 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD21 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD22 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD23 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD21 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD22 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD22 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD22 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD23 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD22 11 0.05 (1,1023) | (1,1029) | 1:A:114:TYR:HE1 | 1:A:127:PHE:HZ | 2 | 0.05 |
| (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD22 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD21 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD22 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD23 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD21 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD22 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD22 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD22 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD21 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD22 11 0.05 (1,1023) | (1,1029) | 1:A:114:TYR:HE2 | 1:A:127:PHE:HZ | 2 | 0.05 |
| (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD21 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD22 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD23 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD21 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD22 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD22 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD21 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD22 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 11 0.05 (1,1023) | (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:85:LEU:HD21 | 10 | 0.05 |
| (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD22 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD22 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD23 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD21 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD22 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD21 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD22 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD21 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD23 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 11 0.05 (1,1023) | (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:85:LEU:HD22 | 10 | 0.05 |
| (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD22 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD23 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD21 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD22 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD21 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD22 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD23 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD23 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD21 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 11 0.05 (1,1023) | (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:85:LEU:HD23 | 10 | 0.05 |
| (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD23 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD21 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD22 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD21 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD22 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD21 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD22 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD22 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD22 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 11 0.05 (1,1023) | (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:85:LEU:HD21 | 10 | 0.05 |
| (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD21 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD22 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD21 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD22 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD21 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD22 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD22 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD21 16 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD22 16 0.05 (1,1023) | (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:85:LEU:HD22 | 10 | 0.05 |
| (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD21 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD22 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD21 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD22 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD23 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD21 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD22 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD21 16 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 16 0.05 (1,1023) | (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:85:LEU:HD23 | 10 | 0.05 |
| (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 10 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD21 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD22 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD21 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD22 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD23 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD21 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD22 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD21 16 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD22 16 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 16 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 16 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD21 16 0.05 <td>(1,1023)</td> <td>1:A:105:LEU:HD13</td> <td>1:A:85:LEU:HD21</td> <td>10</td> <td>0.05</td> | (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:85:LEU:HD21 | 10 | 0.05 |
| (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD21 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD22 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD21 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD22 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD23 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD21 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD22 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD21 16 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 16 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD21 16 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD21 16 0.05 | (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:85:LEU:HD22 | 10 | 0.05 |
| (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD22 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD21 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD22 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD23 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD21 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD22 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD21 16 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 16 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 16 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD21 16 0.05 | (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:85:LEU:HD23 | 10 | 0.05 |
| (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD21 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD22 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD23 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD21 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD22 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD21 16 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 16 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 16 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD21 16 0.05 | (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:85:LEU:HD21 | 11 | 0.05 |
| (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD21 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD22 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD23 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD21 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD22 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD21 16 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 16 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 16 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD21 16 0.05 | (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:85:LEU:HD22 | 11 | 0.05 |
| (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD22 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD23 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD21 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD22 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD21 16 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 16 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 16 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD21 16 0.05 | (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:85:LEU:HD23 | 11 | 0.05 |
| (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD23 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD21 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD22 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD21 16 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 16 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 16 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD21 16 0.05 | (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:85:LEU:HD21 | 11 | 0.05 |
| (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD21 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD22 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD21 16 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD22 16 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 16 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD21 16 0.05 | (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:85:LEU:HD22 | 11 | 0.05 |
| (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD21 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD22 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD21 16 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD22 16 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 16 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD21 16 0.05 | · · / | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:85:LEU:HD23 | 11 | 0.05 |
| (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD22 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD21 16 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD22 16 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 16 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD21 16 0.05 | · · / | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:85:LEU:HD21 | 11 | 0.05 |
| (1,1023) 1:A:105:LEU:HD13 1:A:85:LEU:HD23 11 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD21 16 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD22 16 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 16 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD21 16 0.05 | · · / | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:85:LEU:HD22 | 11 | 0.05 |
| (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD21 16 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD22 16 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 16 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD21 16 0.05 | · · / | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:85:LEU:HD23 | 11 | 0.05 |
| (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD22 16 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 16 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD21 16 0.05 | · · / | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:85:LEU:HD21 | 16 | 0.05 |
| (1,1023) 1:A:105:LEU:HD11 1:A:85:LEU:HD23 16 0.05 (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD21 16 0.05 | · · / | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:85:LEU:HD22 | 16 | 0.05 |
| (1,1023) 1:A:105:LEU:HD12 1:A:85:LEU:HD21 16 0.05 | · · / | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:85:LEU:HD23 | 16 | 0.05 |
| | · · / | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:85:LEU:HD21 | | |
| , , , , | (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:85:LEU:HD22 | 16 | 0.05 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:85:LEU:HD23 | 16 | 0.05 |
| (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:85:LEU:HD21 | 16 | 0.05 |
| (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:85:LEU:HD22 | 16 | 0.05 |
| (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:85:LEU:HD23 | 16 | 0.05 |
| (1,1017) | 1:A:101:ILE:HA | 1:A:128:ILE:H | 8 | 0.05 |
| (1,1017) | 1:A:101:ILE:HA | 1:A:128:ILE:H | 9 | 0.05 |
| (1,1017) | 1:A:101:ILE:HA | 1:A:128:ILE:H | 17 | 0.05 |
| (1,1016) | 1:A:165:TRP:HZ3 | 1:A:127:PHE:HZ | 4 | 0.05 |
| (1,1016) | 1:A:165:TRP:HZ3 | 1:A:127:PHE:HZ | 15 | 0.05 |
| (1,1016) | 1:A:165:TRP:HZ3 | 1:A:127:PHE:HZ | 18 | 0.05 |
| (1,1006) | 1:A:100:SER:H | 1:A:126:VAL:H | 13 | 0.05 |
| (1,997) | 1:A:81:VAL:H | 1:A:58:ASP:H | 17 | 0.04 |
| (1,991) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:112:GLN:H | 16 | 0.04 |
| (1,991) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:112:GLN:H | 16 | 0.04 |
| (1,991) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:112:GLN:H | 16 | 0.04 |
| (1,989) | 1:A:163:LEU:HD11 | 1:A:165:TRP:HE1 | 5 | 0.04 |
| (1,989) | 1:A:163:LEU:HD12 | 1:A:165:TRP:HE1 | 5 | 0.04 |
| (1,989) | 1:A:163:LEU:HD13 | 1:A:165:TRP:HE1 | 5 | 0.04 |
| (1,988) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:H | 6 | 0.04 |
| (1,988) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:H | 6 | 0.04 |
| (1,988) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:H | 6 | 0.04 |
| (1,988) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:H | 16 | 0.04 |
| (1,988) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:H | 16 | 0.04 |
| (1,988) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:H | 16 | 0.04 |
| (1,962) | 1:A:26:ASN:H | 1:A:28:ILE:HD11 | 4 | 0.04 |
| (1,962) | 1:A:26:ASN:H | 1:A:28:ILE:HD12 | 4 | 0.04 |
| (1,962) | 1:A:26:ASN:H | 1:A:28:ILE:HD13 | 4 | 0.04 |
| (1,954) | 1:A:70:LEU:H | 1:A:78:ILE:HD11 | 5 | 0.04 |
| (1,954) | 1:A:70:LEU:H | 1:A:78:ILE:HD12 | 5 | 0.04 |
| (1,954) | 1:A:70:LEU:H | 1:A:78:ILE:HD13 | 5 | 0.04 |
| (1,954) | 1:A:70:LEU:H | 1:A:78:ILE:HD11 | 8 | 0.04 |
| (1,954) | 1:A:70:LEU:H | 1:A:78:ILE:HD12 | 8 | 0.04 |
| (1,954) | 1:A:70:LEU:H | 1:A:78:ILE:HD13 | 8 | 0.04 |
| (1,943) | 1:A:68:LYS:H | 1:A:78:ILE:HD11 | 13 | 0.04 |
| (1,943) | 1:A:68:LYS:H | 1:A:78:ILE:HD12 | 13 | 0.04 |
| (1,943) | 1:A:68:LYS:H | 1:A:78:ILE:HD13 | 13 | 0.04 |
| (1,942) | 1:A:49:SER:H | 1:A:50:LEU:HD21 | 5 | 0.04 |
| (1,942) | 1:A:49:SER:H | 1:A:50:LEU:HD22 | 5 | 0.04 |
| (1,942) | 1:A:49:SER:H | 1:A:50:LEU:HD23 | 5 | 0.04 |
| (1,942) | 1:A:49:SER:H | 1:A:50:LEU:HD21 | 8 | 0.04 |
| (1,942) | 1:A:49:SER:H | 1:A:50:LEU:HD22 | 8 | 0.04 |
| (1,942) | 1:A:49:SER:H | 1:A:50:LEU:HD23 | 8 | 0.04 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,94) | 1:A:140:ASN:H | 1:A:142:GLY:H | 17 | 0.04 |
| (1,932) | 1:A:172:GLU:H | 1:A:187:LEU:HD11 | 6 | 0.04 |
| (1,932) | 1:A:172:GLU:H | 1:A:187:LEU:HD12 | 6 | 0.04 |
| (1,932) | 1:A:172:GLU:H | 1:A:187:LEU:HD13 | 6 | 0.04 |
| (1,928) | 1:A:195:LEU:HD21 | 1:A:196:GLU:H | 11 | 0.04 |
| (1,928) | 1:A:195:LEU:HD22 | 1:A:196:GLU:H | 11 | 0.04 |
| (1,928) | 1:A:195:LEU:HD23 | 1:A:196:GLU:H | 11 | 0.04 |
| (1,924) | 1:A:27:GLN:H | 1:A:126:VAL:HG21 | 6 | 0.04 |
| (1,924) | 1:A:27:GLN:H | 1:A:126:VAL:HG22 | 6 | 0.04 |
| (1,924) | 1:A:27:GLN:H | 1:A:126:VAL:HG23 | 6 | 0.04 |
| (1,921) | 1:A:164:ASN:H | 1:A:195:LEU:HD11 | 13 | 0.04 |
| (1,921) | 1:A:164:ASN:H | 1:A:195:LEU:HD12 | 13 | 0.04 |
| (1,921) | 1:A:164:ASN:H | 1:A:195:LEU:HD13 | 13 | 0.04 |
| (1,911) | 1:A:56:ALA:H | 1:A:64:LEU:HD11 | 16 | 0.04 |
| (1,911) | 1:A:56:ALA:H | 1:A:64:LEU:HD12 | 16 | 0.04 |
| (1,911) | 1:A:56:ALA:H | 1:A:64:LEU:HD13 | 16 | 0.04 |
| (1,902) | 1:A:153:LEU:HD11 | 1:A:169:ASN:H | 3 | 0.04 |
| (1,902) | 1:A:153:LEU:HD12 | 1:A:169:ASN:H | 3 | 0.04 |
| (1,902) | 1:A:153:LEU:HD13 | 1:A:169:ASN:H | 3 | 0.04 |
| (1,902) | 1:A:153:LEU:HD11 | 1:A:169:ASN:H | 15 | 0.04 |
| (1,902) | 1:A:153:LEU:HD12 | 1:A:169:ASN:H | 15 | 0.04 |
| (1,902) | 1:A:153:LEU:HD13 | 1:A:169:ASN:H | 15 | 0.04 |
| (1,896) | 1:A:166:LEU:HD11 | 1:A:193:GLN:H | 8 | 0.04 |
| (1,896) | 1:A:166:LEU:HD12 | 1:A:193:GLN:H | 8 | 0.04 |
| (1,896) | 1:A:166:LEU:HD13 | 1:A:193:GLN:H | 8 | 0.04 |
| (1,885) | 1:A:50:LEU:H | 1:A:54:VAL:HG21 | 9 | 0.04 |
| (1,885) | 1:A:50:LEU:H | 1:A:54:VAL:HG22 | 9 | 0.04 |
| (1,885) | 1:A:50:LEU:H | 1:A:54:VAL:HG23 | 9 | 0.04 |
| (1,854) | 1:A:131:GLY:H | 1:A:153:LEU:HD21 | 6 | 0.04 |
| (1,854) | 1:A:131:GLY:H | 1:A:153:LEU:HD22 | 6 | 0.04 |
| (1,854) | 1:A:131:GLY:H | 1:A:153:LEU:HD23 | 6 | 0.04 |
| (1,827) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:36:LEU:H | 7 | 0.04 |
| (1,827) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:36:LEU:H | 7 | 0.04 |
| (1,827) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:36:LEU:H | 7 | 0.04 |
| (1,822) | 1:A:90:ILE:HD11 | 1:A:116:LYS:H | 3 | 0.04 |
| (1,822) | 1:A:90:ILE:HD12 | 1:A:116:LYS:H | 3 | 0.04 |
| (1,822) | 1:A:90:ILE:HD13 | 1:A:116:LYS:H | 3 | 0.04 |
| (1,820) | 1:A:75:GLY:H | 1:A:76:VAL:HG11 | 6 | 0.04 |
| (1,820) | 1:A:75:GLY:H | 1:A:76:VAL:HG12 | 6 | 0.04 |
| (1,820) | 1:A:75:GLY:H | 1:A:76:VAL:HG13 | 6 | 0.04 |
| (1,820) | 1:A:75:GLY:H | 1:A:76:VAL:HG11 | 8 | 0.04 |
| (1,820) | 1:A:75:GLY:H | 1:A:76:VAL:HG12 | 8 | 0.04 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,820) | 1:A:75:GLY:H | 1:A:76:VAL:HG13 | 8 | 0.04 |
| (1,801) | 1:A:113:LEU:HD11 | 1:A:116:LYS:H | 16 | 0.04 |
| (1,801) | 1:A:113:LEU:HD12 | 1:A:116:LYS:H | 16 | 0.04 |
| (1,801) | 1:A:113:LEU:HD13 | 1:A:116:LYS:H | 16 | 0.04 |
| (1,798) | 1:A:86:ALA:H | 1:A:109:LEU:HD11 | 5 | 0.04 |
| (1,798) | 1:A:86:ALA:H | 1:A:109:LEU:HD12 | 5 | 0.04 |
| (1,798) | 1:A:86:ALA:H | 1:A:109:LEU:HD13 | 5 | 0.04 |
| (1,791) | 1:A:121:LEU:HD21 | 1:A:127:PHE:H | 5 | 0.04 |
| (1,791) | 1:A:121:LEU:HD22 | 1:A:127:PHE:H | 5 | 0.04 |
| (1,791) | 1:A:121:LEU:HD23 | 1:A:127:PHE:H | 5 | 0.04 |
| (1,791) | 1:A:121:LEU:HD21 | 1:A:127:PHE:H | 11 | 0.04 |
| (1,791) | 1:A:121:LEU:HD22 | 1:A:127:PHE:H | 11 | 0.04 |
| (1,791) | 1:A:121:LEU:HD23 | 1:A:127:PHE:H | 11 | 0.04 |
| (1,79) | 1:A:175:LEU:HD21 | 1:A:185:ALA:H | 11 | 0.04 |
| (1,79) | 1:A:175:LEU:HD22 | 1:A:185:ALA:H | 11 | 0.04 |
| (1,79) | 1:A:175:LEU:HD23 | 1:A:185:ALA:H | 11 | 0.04 |
| (1,779) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:191:LEU:HD11 | 3 | 0.04 |
| (1,779) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:191:LEU:HD12 | 3 | 0.04 |
| (1,779) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:191:LEU:HD13 | 3 | 0.04 |
| (1,776) | 1:A:153:LEU:HD11 | 1:A:190:LEU:HD11 | 4 | 0.04 |
| (1,776) | 1:A:153:LEU:HD11 | 1:A:190:LEU:HD12 | 4 | 0.04 |
| (1,776) | 1:A:153:LEU:HD11 | 1:A:190:LEU:HD13 | 4 | 0.04 |
| (1,776) | 1:A:153:LEU:HD12 | 1:A:190:LEU:HD11 | 4 | 0.04 |
| (1,776) | 1:A:153:LEU:HD12 | 1:A:190:LEU:HD12 | 4 | 0.04 |
| (1,776) | 1:A:153:LEU:HD12 | 1:A:190:LEU:HD13 | 4 | 0.04 |
| (1,776) | 1:A:153:LEU:HD13 | 1:A:190:LEU:HD11 | 4 | 0.04 |
| (1,776) | 1:A:153:LEU:HD13 | 1:A:190:LEU:HD12 | 4 | 0.04 |
| (1,776) | 1:A:153:LEU:HD13 | 1:A:190:LEU:HD13 | 4 | 0.04 |
| (1,750) | 1:A:81:VAL:HG21 | 1:A:85:LEU:HD21 | 14 | 0.04 |
| (1,750) | 1:A:81:VAL:HG21 | 1:A:85:LEU:HD22 | 14 | 0.04 |
| (1,750) | 1:A:81:VAL:HG21 | 1:A:85:LEU:HD23 | 14 | 0.04 |
| (1,750) | 1:A:81:VAL:HG22 | 1:A:85:LEU:HD21 | 14 | 0.04 |
| (1,750) | 1:A:81:VAL:HG22 | 1:A:85:LEU:HD22 | 14 | 0.04 |
| (1,750) | 1:A:81:VAL:HG22 | 1:A:85:LEU:HD23 | 14 | 0.04 |
| (1,750) | 1:A:81:VAL:HG23 | 1:A:85:LEU:HD21 | 14 | 0.04 |
| (1,750) | 1:A:81:VAL:HG23 | 1:A:85:LEU:HD22 | 14 | 0.04 |
| (1,750) | 1:A:81:VAL:HG23 | 1:A:85:LEU:HD23 | 14 | 0.04 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD21 | 1:A:99:VAL:HG21 | 3 | 0.04 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD21 | 1:A:99:VAL:HG22 | 3 | 0.04 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD21 | 1:A:99:VAL:HG23 | 3 | 0.04 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD22 | 1:A:99:VAL:HG21 | 3 | 0.04 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD22 | 1:A:99:VAL:HG22 | 3 | 0.04 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD22 | 1:A:99:VAL:HG23 | 3 | 0.04 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD23 | 1:A:99:VAL:HG21 | 3 | 0.04 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD23 | 1:A:99:VAL:HG22 | 3 | 0.04 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD23 | 1:A:99:VAL:HG23 | 3 | 0.04 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD21 | 1:A:99:VAL:HG21 | 13 | 0.04 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD21 | 1:A:99:VAL:HG22 | 13 | 0.04 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD21 | 1:A:99:VAL:HG23 | 13 | 0.04 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD22 | 1:A:99:VAL:HG21 | 13 | 0.04 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD22 | 1:A:99:VAL:HG22 | 13 | 0.04 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD22 | 1:A:99:VAL:HG23 | 13 | 0.04 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD23 | 1:A:99:VAL:HG21 | 13 | 0.04 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD23 | 1:A:99:VAL:HG22 | 13 | 0.04 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD23 | 1:A:99:VAL:HG23 | 13 | 0.04 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD21 | 1:A:99:VAL:HG21 | 19 | 0.04 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD21 | 1:A:99:VAL:HG22 | 19 | 0.04 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD21 | 1:A:99:VAL:HG23 | 19 | 0.04 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD22 | 1:A:99:VAL:HG21 | 19 | 0.04 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD22 | 1:A:99:VAL:HG22 | 19 | 0.04 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD22 | 1:A:99:VAL:HG23 | 19 | 0.04 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD23 | 1:A:99:VAL:HG21 | 19 | 0.04 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD23 | 1:A:99:VAL:HG22 | 19 | 0.04 |
| (1,741) | 1:A:47:LEU:HD23 | 1:A:99:VAL:HG23 | 19 | 0.04 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD21 | 1:A:150:LEU:HD21 | 13 | 0.04 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD21 | 1:A:150:LEU:HD22 | 13 | 0.04 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD21 | 1:A:150:LEU:HD23 | 13 | 0.04 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD22 | 1:A:150:LEU:HD21 | 13 | 0.04 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD22 | 1:A:150:LEU:HD22 | 13 | 0.04 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD22 | 1:A:150:LEU:HD23 | 13 | 0.04 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD23 | 1:A:150:LEU:HD21 | 13 | 0.04 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD23 | 1:A:150:LEU:HD22 | 13 | 0.04 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD23 | 1:A:150:LEU:HD23 | 13 | 0.04 |
| (1,721) | 1:A:175:LEU:HD21 | 1:A:187:LEU:HD11 | 19 | 0.04 |
| (1,721) | 1:A:175:LEU:HD21 | 1:A:187:LEU:HD12 | 19 | 0.04 |
| (1,721) | 1:A:175:LEU:HD21 | 1:A:187:LEU:HD13 | 19 | 0.04 |
| (1,721) | 1:A:175:LEU:HD22 | 1:A:187:LEU:HD11 | 19 | 0.04 |
| (1,721) | 1:A:175:LEU:HD22 | 1:A:187:LEU:HD12 | 19 | 0.04 |
| (1,721) | 1:A:175:LEU:HD22 | 1:A:187:LEU:HD13 | 19 | 0.04 |
| (1,721) | 1:A:175:LEU:HD23 | 1:A:187:LEU:HD11 | 19 | 0.04 |
| (1,721) | 1:A:175:LEU:HD23 | 1:A:187:LEU:HD12 | 19 | 0.04 |
| (1,721) | 1:A:175:LEU:HD23 | 1:A:187:LEU:HD13 | 19 | 0.04 |
| (1,718) | 1:A:166:LEU:HD21 | 1:A:191:LEU:HD11 | 4 | 0.04 |
| (1,718) | 1:A:166:LEU:HD21 | 1:A:191:LEU:HD12 | 4 | 0.04 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,718) | 1:A:166:LEU:HD21 | 1:A:191:LEU:HD13 | 4 | 0.04 |
| (1,718) | 1:A:166:LEU:HD22 | 1:A:191:LEU:HD11 | 4 | 0.04 |
| (1,718) | 1:A:166:LEU:HD22 | 1:A:191:LEU:HD12 | 4 | 0.04 |
| (1,718) | 1:A:166:LEU:HD22 | 1:A:191:LEU:HD13 | 4 | 0.04 |
| (1,718) | 1:A:166:LEU:HD23 | 1:A:191:LEU:HD11 | 4 | 0.04 |
| (1,718) | 1:A:166:LEU:HD23 | 1:A:191:LEU:HD12 | 4 | 0.04 |
| (1,718) | 1:A:166:LEU:HD23 | 1:A:191:LEU:HD13 | 4 | 0.04 |
| (1,679) | 1:A:171:LEU:HD11 | 1:A:187:LEU:HD11 | 3 | 0.04 |
| (1,679) | 1:A:171:LEU:HD11 | 1:A:187:LEU:HD12 | 3 | 0.04 |
| (1,679) | 1:A:171:LEU:HD11 | 1:A:187:LEU:HD13 | 3 | 0.04 |
| (1,679) | 1:A:171:LEU:HD12 | 1:A:187:LEU:HD11 | 3 | 0.04 |
| (1,679) | 1:A:171:LEU:HD12 | 1:A:187:LEU:HD12 | 3 | 0.04 |
| (1,679) | 1:A:171:LEU:HD12 | 1:A:187:LEU:HD13 | 3 | 0.04 |
| (1,679) | 1:A:171:LEU:HD13 | 1:A:187:LEU:HD11 | 3 | 0.04 |
| (1,679) | 1:A:171:LEU:HD13 | 1:A:187:LEU:HD12 | 3 | 0.04 |
| (1,679) | 1:A:171:LEU:HD13 | 1:A:187:LEU:HD13 | 3 | 0.04 |
| (1,679) | 1:A:171:LEU:HD11 | 1:A:187:LEU:HD11 | 9 | 0.04 |
| (1,679) | 1:A:171:LEU:HD11 | 1:A:187:LEU:HD12 | 9 | 0.04 |
| (1,679) | 1:A:171:LEU:HD11 | 1:A:187:LEU:HD13 | 9 | 0.04 |
| (1,679) | 1:A:171:LEU:HD12 | 1:A:187:LEU:HD11 | 9 | 0.04 |
| (1,679) | 1:A:171:LEU:HD12 | 1:A:187:LEU:HD12 | 9 | 0.04 |
| (1,679) | 1:A:171:LEU:HD12 | 1:A:187:LEU:HD13 | 9 | 0.04 |
| (1,679) | 1:A:171:LEU:HD13 | 1:A:187:LEU:HD11 | 9 | 0.04 |
| (1,679) | 1:A:171:LEU:HD13 | 1:A:187:LEU:HD12 | 9 | 0.04 |
| (1,679) | 1:A:171:LEU:HD13 | 1:A:187:LEU:HD13 | 9 | 0.04 |
| (1,635) | 1:A:113:LEU:H | 1:A:114:TYR:H | 5 | 0.04 |
| (1,596) | 1:A:164:ASN:H | 1:A:195:LEU:H | 17 | 0.04 |
| (1,596) | 1:A:164:ASN:H | 1:A:195:LEU:H | 20 | 0.04 |
| (1,579) | 1:A:169:ASN:H | 1:A:189:GLN:H | 2 | 0.04 |
| (1,579) | 1:A:169:ASN:H | 1:A:189:GLN:H | 6 | 0.04 |
| (1,579) | 1:A:169:ASN:H | 1:A:189:GLN:H | 8 | 0.04 |
| (1,579) | 1:A:169:ASN:H | 1:A:189:GLN:H | 16 | 0.04 |
| (1,579) | 1:A:169:ASN:H | 1:A:189:GLN:H | 20 | 0.04 |
| (1,574) | 1:A:36:LEU:HD11 | 1:A:85:LEU:HD21 | 3 | 0.04 |
| (1,574) | 1:A:36:LEU:HD11 | 1:A:85:LEU:HD22 | 3 | 0.04 |
| (1,574) | 1:A:36:LEU:HD11 | 1:A:85:LEU:HD23 | 3 | 0.04 |
| (1,574) | 1:A:36:LEU:HD12 | 1:A:85:LEU:HD21 | 3 | 0.04 |
| (1,574) | 1:A:36:LEU:HD12 | 1:A:85:LEU:HD22 | 3 | 0.04 |
| (1,574) | 1:A:36:LEU:HD12 | 1:A:85:LEU:HD23 | 3 | 0.04 |
| (1,574) | 1:A:36:LEU:HD13 | 1:A:85:LEU:HD21 | 3 | 0.04 |
| (1,574) | 1:A:36:LEU:HD13 | 1:A:85:LEU:HD22 | 3 | 0.04 |
| (1,574) | 1:A:36:LEU:HD13 | 1:A:85:LEU:HD23 | 3 | 0.04 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,570) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:145:LYS:H | 7 | 0.04 |
| (1,570) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:145:LYS:H | 7 | 0.04 |
| (1,570) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:145:LYS:H | 7 | 0.04 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD21 | 18 | 0.04 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD22 | 18 | 0.04 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:147:LEU:HD23 | 18 | 0.04 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD21 | 18 | 0.04 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD22 | 18 | 0.04 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:147:LEU:HD23 | 18 | 0.04 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD21 | 18 | 0.04 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD22 | 18 | 0.04 |
| (1,569) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:147:LEU:HD23 | 18 | 0.04 |
| (1,567) | 1:A:70:LEU:HD11 | 1:A:74:LYS:H | 17 | 0.04 |
| (1,567) | 1:A:70:LEU:HD12 | 1:A:74:LYS:H | 17 | 0.04 |
| (1,567) | 1:A:70:LEU:HD13 | 1:A:74:LYS:H | 17 | 0.04 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:85:LEU:HD11 | 4 | 0.04 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:85:LEU:HD12 | 4 | 0.04 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:85:LEU:HD13 | 4 | 0.04 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:85:LEU:HD11 | 4 | 0.04 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:85:LEU:HD12 | 4 | 0.04 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:85:LEU:HD13 | 4 | 0.04 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:85:LEU:HD11 | 4 | 0.04 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:85:LEU:HD12 | 4 | 0.04 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:85:LEU:HD13 | 4 | 0.04 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:85:LEU:HD11 | 6 | 0.04 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:85:LEU:HD12 | 6 | 0.04 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:85:LEU:HD13 | 6 | 0.04 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:85:LEU:HD11 | 6 | 0.04 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:85:LEU:HD12 | 6 | 0.04 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:85:LEU:HD13 | 6 | 0.04 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:85:LEU:HD11 | 6 | 0.04 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:85:LEU:HD12 | 6 | 0.04 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:85:LEU:HD13 | 6 | 0.04 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:85:LEU:HD11 | 12 | 0.04 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:85:LEU:HD12 | 12 | 0.04 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:85:LEU:HD13 | 12 | 0.04 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:85:LEU:HD11 | 12 | 0.04 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:85:LEU:HD12 | 12 | 0.04 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:85:LEU:HD13 | 12 | 0.04 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:85:LEU:HD11 | 12 | 0.04 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:85:LEU:HD12 | 12 | 0.04 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:85:LEU:HD13 | 12 | 0.04 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,558) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:109:LEU:HD11 | 9 | 0.04 |
| (1,558) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:109:LEU:HD12 | 9 | 0.04 |
| (1,558) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:109:LEU:HD13 | 9 | 0.04 |
| (1,558) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:109:LEU:HD11 | 9 | 0.04 |
| (1,558) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:109:LEU:HD12 | 9 | 0.04 |
| (1,558) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:109:LEU:HD13 | 9 | 0.04 |
| (1,558) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:109:LEU:HD11 | 9 | 0.04 |
| (1,558) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:109:LEU:HD12 | 9 | 0.04 |
| (1,558) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:109:LEU:HD13 | 9 | 0.04 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD21 | 1:A:81:VAL:HG11 | 2 | 0.04 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD21 | 1:A:81:VAL:HG12 | 2 | 0.04 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD21 | 1:A:81:VAL:HG13 | 2 | 0.04 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD22 | 1:A:81:VAL:HG11 | 2 | 0.04 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD22 | 1:A:81:VAL:HG12 | 2 | 0.04 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD22 | 1:A:81:VAL:HG13 | 2 | 0.04 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD23 | 1:A:81:VAL:HG11 | 2 | 0.04 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD23 | 1:A:81:VAL:HG12 | 2 | 0.04 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD23 | 1:A:81:VAL:HG13 | 2 | 0.04 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD21 | 1:A:81:VAL:HG11 | 5 | 0.04 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD21 | 1:A:81:VAL:HG12 | 5 | 0.04 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD21 | 1:A:81:VAL:HG13 | 5 | 0.04 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD22 | 1:A:81:VAL:HG11 | 5 | 0.04 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD22 | 1:A:81:VAL:HG12 | 5 | 0.04 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD22 | 1:A:81:VAL:HG13 | 5 | 0.04 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD23 | 1:A:81:VAL:HG11 | 5 | 0.04 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD23 | 1:A:81:VAL:HG12 | 5 | 0.04 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD23 | 1:A:81:VAL:HG13 | 5 | 0.04 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD21 | 1:A:81:VAL:HG11 | 10 | 0.04 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD21 | 1:A:81:VAL:HG12 | 10 | 0.04 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD21 | 1:A:81:VAL:HG13 | 10 | 0.04 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD22 | 1:A:81:VAL:HG11 | 10 | 0.04 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD22 | 1:A:81:VAL:HG12 | 10 | 0.04 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD22 | 1:A:81:VAL:HG13 | 10 | 0.04 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD23 | 1:A:81:VAL:HG11 | 10 | 0.04 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD23 | 1:A:81:VAL:HG12 | 10 | 0.04 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD23 | 1:A:81:VAL:HG13 | 10 | 0.04 |
| (1,543) | 1:A:129:LEU:HD11 | 1:A:156:LEU:HD11 | 18 | 0.04 |
| (1,543) | 1:A:129:LEU:HD11 | 1:A:156:LEU:HD12 | 18 | 0.04 |
| (1,543) | 1:A:129:LEU:HD11 | 1:A:156:LEU:HD13 | 18 | 0.04 |
| (1,543) | 1:A:129:LEU:HD12 | 1:A:156:LEU:HD11 | 18 | 0.04 |
| (1,543) | 1:A:129:LEU:HD12 | 1:A:156:LEU:HD12 | 18 | 0.04 |
| (1,543) | 1:A:129:LEU:HD12 | 1:A:156:LEU:HD13 | 18 | 0.04 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,543) | 1:A:129:LEU:HD13 | 1:A:156:LEU:HD11 | 18 | 0.04 |
| (1,543) | 1:A:129:LEU:HD13 | 1:A:156:LEU:HD12 | 18 | 0.04 |
| (1,543) | 1:A:129:LEU:HD13 | 1:A:156:LEU:HD13 | 18 | 0.04 |
| (1,535) | 1:A:74:LYS:H | 1:A:76:VAL:HG11 | 8 | 0.04 |
| (1,535) | 1:A:74:LYS:H | 1:A:76:VAL:HG12 | 8 | 0.04 |
| (1,535) | 1:A:74:LYS:H | 1:A:76:VAL:HG13 | 8 | 0.04 |
| (1,510) | 1:A:137:LEU:HD11 | 1:A:150:LEU:H | 4 | 0.04 |
| (1,510) | 1:A:137:LEU:HD12 | 1:A:150:LEU:H | 4 | 0.04 |
| (1,510) | 1:A:137:LEU:HD13 | 1:A:150:LEU:H | 4 | 0.04 |
| (1,508) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:85:LEU:HD21 | 15 | 0.04 |
| (1,508) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:85:LEU:HD22 | 15 | 0.04 |
| (1,508) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:85:LEU:HD23 | 15 | 0.04 |
| (1,508) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:85:LEU:HD21 | 15 | 0.04 |
| (1,508) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:85:LEU:HD22 | 15 | 0.04 |
| (1,508) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:85:LEU:HD23 | 15 | 0.04 |
| (1,508) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:85:LEU:HD21 | 15 | 0.04 |
| (1,508) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:85:LEU:HD22 | 15 | 0.04 |
| (1,508) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:85:LEU:HD23 | 15 | 0.04 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:109:LEU:HD21 | 16 | 0.04 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:109:LEU:HD22 | 16 | 0.04 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:109:LEU:HD23 | 16 | 0.04 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:109:LEU:HD21 | 16 | 0.04 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:109:LEU:HD22 | 16 | 0.04 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:109:LEU:HD23 | 16 | 0.04 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:109:LEU:HD21 | 16 | 0.04 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:109:LEU:HD22 | 16 | 0.04 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:109:LEU:HD23 | 16 | 0.04 |
| (1,480) | 1:A:57:VAL:HG11 | 1:A:81:VAL:HG21 | 10 | 0.04 |
| (1,480) | 1:A:57:VAL:HG11 | 1:A:81:VAL:HG22 | 10 | 0.04 |
| (1,480) | 1:A:57:VAL:HG11 | 1:A:81:VAL:HG23 | 10 | 0.04 |
| (1,480) | 1:A:57:VAL:HG12 | 1:A:81:VAL:HG21 | 10 | 0.04 |
| (1,480) | 1:A:57:VAL:HG12 | 1:A:81:VAL:HG22 | 10 | 0.04 |
| (1,480) | 1:A:57:VAL:HG12 | 1:A:81:VAL:HG23 | 10 | 0.04 |
| (1,480) | 1:A:57:VAL:HG13 | 1:A:81:VAL:HG21 | 10 | 0.04 |
| (1,480) | 1:A:57:VAL:HG13 | 1:A:81:VAL:HG22 | 10 | 0.04 |
| (1,480) | 1:A:57:VAL:HG13 | 1:A:81:VAL:HG23 | 10 | 0.04 |
| (1,478) | 1:A:81:VAL:HG21 | 1:A:82:GLN:H | 1 | 0.04 |
| (1,478) | 1:A:81:VAL:HG22 | 1:A:82:GLN:H | 1 | 0.04 |
| (1,478) | 1:A:81:VAL:HG23 | 1:A:82:GLN:H | 1 | 0.04 |
| (1,467) | 1:A:62:VAL:HG11 | 1:A:63:GLY:H | 19 | 0.04 |
| (1,467) | 1:A:62:VAL:HG12 | 1:A:63:GLY:H | 19 | 0.04 |
| (1,467) | 1:A:62:VAL:HG13 | 1:A:63:GLY:H | 19 | 0.04 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD11 | 1:A:117:VAL:HG11 | 20 | 0.04 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD11 | 1:A:117:VAL:HG12 | 20 | 0.04 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD11 | 1:A:117:VAL:HG13 | 20 | 0.04 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD12 | 1:A:117:VAL:HG11 | 20 | 0.04 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD12 | 1:A:117:VAL:HG12 | 20 | 0.04 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD12 | 1:A:117:VAL:HG13 | 20 | 0.04 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD13 | 1:A:117:VAL:HG11 | 20 | 0.04 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD13 | 1:A:117:VAL:HG12 | 20 | 0.04 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD13 | 1:A:117:VAL:HG13 | 20 | 0.04 |
| (1,453) | 1:A:118:TYR:H | 1:A:121:LEU:HD21 | 11 | 0.04 |
| (1,453) | 1:A:118:TYR:H | 1:A:121:LEU:HD22 | 11 | 0.04 |
| (1,453) | 1:A:118:TYR:H | 1:A:121:LEU:HD23 | 11 | 0.04 |
| (1,443) | 1:A:153:LEU:HD21 | 1:A:190:LEU:HD21 | 19 | 0.04 |
| (1,443) | 1:A:153:LEU:HD21 | 1:A:190:LEU:HD22 | 19 | 0.04 |
| (1,443) | 1:A:153:LEU:HD21 | 1:A:190:LEU:HD23 | 19 | 0.04 |
| (1,443) | 1:A:153:LEU:HD22 | 1:A:190:LEU:HD21 | 19 | 0.04 |
| (1,443) | 1:A:153:LEU:HD22 | 1:A:190:LEU:HD22 | 19 | 0.04 |
| (1,443) | 1:A:153:LEU:HD22 | 1:A:190:LEU:HD23 | 19 | 0.04 |
| (1,443) | 1:A:153:LEU:HD23 | 1:A:190:LEU:HD21 | 19 | 0.04 |
| (1,443) | 1:A:153:LEU:HD23 | 1:A:190:LEU:HD22 | 19 | 0.04 |
| (1,443) | 1:A:153:LEU:HD23 | 1:A:190:LEU:HD23 | 19 | 0.04 |
| (1,425) | 1:A:24:VAL:HG11 | 1:A:191:LEU:HD21 | 6 | 0.04 |
| (1,425) | 1:A:24:VAL:HG11 | 1:A:191:LEU:HD22 | 6 | 0.04 |
| (1,425) | 1:A:24:VAL:HG11 | 1:A:191:LEU:HD23 | 6 | 0.04 |
| (1,425) | 1:A:24:VAL:HG12 | 1:A:191:LEU:HD21 | 6 | 0.04 |
| (1,425) | 1:A:24:VAL:HG12 | 1:A:191:LEU:HD22 | 6 | 0.04 |
| (1,425) | 1:A:24:VAL:HG12 | 1:A:191:LEU:HD23 | 6 | 0.04 |
| (1,425) | 1:A:24:VAL:HG13 | 1:A:191:LEU:HD21 | 6 | 0.04 |
| (1,425) | 1:A:24:VAL:HG13 | 1:A:191:LEU:HD22 | 6 | 0.04 |
| (1,425) | 1:A:24:VAL:HG13 | 1:A:191:LEU:HD23 | 6 | 0.04 |
| (1,425) | 1:A:24:VAL:HG11 | 1:A:191:LEU:HD21 | 8 | 0.04 |
| (1,425) | 1:A:24:VAL:HG11 | 1:A:191:LEU:HD22 | 8 | 0.04 |
| (1,425) | 1:A:24:VAL:HG11 | 1:A:191:LEU:HD23 | 8 | 0.04 |
| (1,425) | 1:A:24:VAL:HG12 | 1:A:191:LEU:HD21 | 8 | 0.04 |
| (1,425) | 1:A:24:VAL:HG12 | 1:A:191:LEU:HD22 | 8 | 0.04 |
| (1,425) | 1:A:24:VAL:HG12 | 1:A:191:LEU:HD23 | 8 | 0.04 |
| (1,425) | 1:A:24:VAL:HG13 | 1:A:191:LEU:HD21 | 8 | 0.04 |
| (1,425) | 1:A:24:VAL:HG13 | 1:A:191:LEU:HD22 | 8 | 0.04 |
| (1,425) | 1:A:24:VAL:HG13 | 1:A:191:LEU:HD23 | 8 | 0.04 |
| (1,424) | 1:A:128:ILE:HD11 | 1:A:191:LEU:HD21 | 1 | 0.04 |
| (1,424) | 1:A:128:ILE:HD11 | 1:A:191:LEU:HD22 | 1 | 0.04 |
| (1,424) | 1:A:128:ILE:HD11 | 1:A:191:LEU:HD23 | 1 | 0.04 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,424) | 1:A:128:ILE:HD12 | 1:A:191:LEU:HD21 | 1 | 0.04 |
| (1,424) | 1:A:128:ILE:HD12 | 1:A:191:LEU:HD22 | 1 | 0.04 |
| (1,424) | 1:A:128:ILE:HD12 | 1:A:191:LEU:HD23 | 1 | 0.04 |
| (1,424) | 1:A:128:ILE:HD13 | 1:A:191:LEU:HD21 | 1 | 0.04 |
| (1,424) | 1:A:128:ILE:HD13 | 1:A:191:LEU:HD22 | 1 | 0.04 |
| (1,424) | 1:A:128:ILE:HD13 | 1:A:191:LEU:HD23 | 1 | 0.04 |
| (1,422) | 1:A:47:LEU:HD11 | 1:A:99:VAL:HG11 | 7 | 0.04 |
| (1,422) | 1:A:47:LEU:HD11 | 1:A:99:VAL:HG12 | 7 | 0.04 |
| (1,422) | 1:A:47:LEU:HD11 | 1:A:99:VAL:HG13 | 7 | 0.04 |
| (1,422) | 1:A:47:LEU:HD12 | 1:A:99:VAL:HG11 | 7 | 0.04 |
| (1,422) | 1:A:47:LEU:HD12 | 1:A:99:VAL:HG12 | 7 | 0.04 |
| (1,422) | 1:A:47:LEU:HD12 | 1:A:99:VAL:HG13 | 7 | 0.04 |
| (1,422) | 1:A:47:LEU:HD13 | 1:A:99:VAL:HG11 | 7 | 0.04 |
| (1,422) | 1:A:47:LEU:HD13 | 1:A:99:VAL:HG12 | 7 | 0.04 |
| (1,422) | 1:A:47:LEU:HD13 | 1:A:99:VAL:HG13 | 7 | 0.04 |
| (1,420) | 1:A:171:LEU:H | 1:A:171:LEU:HD21 | 1 | 0.04 |
| (1,420) | 1:A:171:LEU:H | 1:A:171:LEU:HD22 | 1 | 0.04 |
| (1,420) | 1:A:171:LEU:H | 1:A:171:LEU:HD23 | 1 | 0.04 |
| (1,420) | 1:A:171:LEU:H | 1:A:171:LEU:HD21 | 2 | 0.04 |
| (1,420) | 1:A:171:LEU:H | 1:A:171:LEU:HD22 | 2 | 0.04 |
| (1,420) | 1:A:171:LEU:H | 1:A:171:LEU:HD23 | 2 | 0.04 |
| (1,420) | 1:A:171:LEU:H | 1:A:171:LEU:HD21 | 16 | 0.04 |
| (1,420) | 1:A:171:LEU:H | 1:A:171:LEU:HD22 | 16 | 0.04 |
| (1,420) | 1:A:171:LEU:H | 1:A:171:LEU:HD23 | 16 | 0.04 |
| (1,419) | 1:A:169:ASN:H | 1:A:171:LEU:HD21 | 13 | 0.04 |
| (1,419) | 1:A:169:ASN:H | 1:A:171:LEU:HD22 | 13 | 0.04 |
| (1,419) | 1:A:169:ASN:H | 1:A:171:LEU:HD23 | 13 | 0.04 |
| (1,416) | 1:A:175:LEU:HD11 | 1:A:186:ALA:H | 4 | 0.04 |
| (1,416) | 1:A:175:LEU:HD12 | 1:A:186:ALA:H | 4 | 0.04 |
| (1,416) | 1:A:175:LEU:HD13 | 1:A:186:ALA:H | 4 | 0.04 |
| (1,407) | 1:A:126:VAL:HG11 | 1:A:163:LEU:HD21 | 4 | 0.04 |
| (1,407) | 1:A:126:VAL:HG11 | 1:A:163:LEU:HD22 | 4 | 0.04 |
| (1,407) | 1:A:126:VAL:HG11 | 1:A:163:LEU:HD23 | 4 | 0.04 |
| (1,407) | 1:A:126:VAL:HG12 | 1:A:163:LEU:HD21 | 4 | 0.04 |
| (1,407) | 1:A:126:VAL:HG12 | 1:A:163:LEU:HD22 | 4 | 0.04 |
| (1,407) | 1:A:126:VAL:HG12 | 1:A:163:LEU:HD23 | 4 | 0.04 |
| (1,407) | 1:A:126:VAL:HG13 | 1:A:163:LEU:HD21 | 4 | 0.04 |
| (1,407) | 1:A:126:VAL:HG13 | 1:A:163:LEU:HD22 | 4 | 0.04 |
| (1,407) | 1:A:126:VAL:HG13 | 1:A:163:LEU:HD23 | 4 | 0.04 |
| (1,404) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:47:LEU:HD21 | 1 | 0.04 |
| (1,404) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:47:LEU:HD22 | 1 | 0.04 |
| (1,404) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:47:LEU:HD23 | 1 | 0.04 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|-----------------|------------------|-------|---------------|
| (1,404) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:47:LEU:HD21 | 1 | 0.04 |
| (1,404) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:47:LEU:HD22 | 1 | 0.04 |
| (1,404) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:47:LEU:HD23 | 1 | 0.04 |
| (1,404) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:47:LEU:HD21 | 1 | 0.04 |
| (1,404) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:47:LEU:HD22 | 1 | 0.04 |
| (1,404) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:47:LEU:HD23 | 1 | 0.04 |
| (1,392) | 1:A:63:GLY:H | 1:A:64:LEU:HD21 | 6 | 0.04 |
| (1,392) | 1:A:63:GLY:H | 1:A:64:LEU:HD22 | 6 | 0.04 |
| (1,392) | 1:A:63:GLY:H | 1:A:64:LEU:HD23 | 6 | 0.04 |
| (1,382) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:167:ILE:HD11 | 17 | 0.04 |
| (1,382) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:167:ILE:HD12 | 17 | 0.04 |
| (1,382) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:167:ILE:HD13 | 17 | 0.04 |
| (1,376) | 1:A:33:ILE:HD11 | 1:A:50:LEU:HD11 | 10 | 0.04 |
| (1,376) | 1:A:33:ILE:HD11 | 1:A:50:LEU:HD12 | 10 | 0.04 |
| (1,376) | 1:A:33:ILE:HD11 | 1:A:50:LEU:HD13 | 10 | 0.04 |
| (1,376) | 1:A:33:ILE:HD12 | 1:A:50:LEU:HD11 | 10 | 0.04 |
| (1,376) | 1:A:33:ILE:HD12 | 1:A:50:LEU:HD12 | 10 | 0.04 |
| (1,376) | 1:A:33:ILE:HD12 | 1:A:50:LEU:HD13 | 10 | 0.04 |
| (1,376) | 1:A:33:ILE:HD13 | 1:A:50:LEU:HD11 | 10 | 0.04 |
| (1,376) | 1:A:33:ILE:HD13 | 1:A:50:LEU:HD12 | 10 | 0.04 |
| (1,376) | 1:A:33:ILE:HD13 | 1:A:50:LEU:HD13 | 10 | 0.04 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG21 | 1:A:128:ILE:HD11 | 2 | 0.04 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG21 | 1:A:128:ILE:HD12 | 2 | 0.04 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG21 | 1:A:128:ILE:HD13 | 2 | 0.04 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG22 | 1:A:128:ILE:HD11 | 2 | 0.04 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG22 | 1:A:128:ILE:HD12 | 2 | 0.04 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG22 | 1:A:128:ILE:HD13 | 2 | 0.04 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG23 | 1:A:128:ILE:HD11 | 2 | 0.04 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG23 | 1:A:128:ILE:HD12 | 2 | 0.04 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG23 | 1:A:128:ILE:HD13 | 2 | 0.04 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG21 | 1:A:128:ILE:HD11 | 8 | 0.04 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG21 | 1:A:128:ILE:HD12 | 8 | 0.04 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG21 | 1:A:128:ILE:HD13 | 8 | 0.04 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG22 | 1:A:128:ILE:HD11 | 8 | 0.04 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG22 | 1:A:128:ILE:HD12 | 8 | 0.04 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG22 | 1:A:128:ILE:HD13 | 8 | 0.04 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG23 | 1:A:128:ILE:HD11 | 8 | 0.04 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG23 | 1:A:128:ILE:HD12 | 8 | 0.04 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG23 | 1:A:128:ILE:HD13 | 8 | 0.04 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG21 | 1:A:128:ILE:HD11 | 10 | 0.04 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG21 | 1:A:128:ILE:HD12 | 10 | 0.04 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG21 | 1:A:128:ILE:HD13 | 10 | 0.04 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|-----------------|------------------|-------|---------------|
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG22 | 1:A:128:ILE:HD11 | 10 | 0.04 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG22 | 1:A:128:ILE:HD12 | 10 | 0.04 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG22 | 1:A:128:ILE:HD13 | 10 | 0.04 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG23 | 1:A:128:ILE:HD11 | 10 | 0.04 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG23 | 1:A:128:ILE:HD12 | 10 | 0.04 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG23 | 1:A:128:ILE:HD13 | 10 | 0.04 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG21 | 1:A:128:ILE:HD11 | 11 | 0.04 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG21 | 1:A:128:ILE:HD12 | 11 | 0.04 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG21 | 1:A:128:ILE:HD13 | 11 | 0.04 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG22 | 1:A:128:ILE:HD11 | 11 | 0.04 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG22 | 1:A:128:ILE:HD12 | 11 | 0.04 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG22 | 1:A:128:ILE:HD13 | 11 | 0.04 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG23 | 1:A:128:ILE:HD11 | 11 | 0.04 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG23 | 1:A:128:ILE:HD12 | 11 | 0.04 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG23 | 1:A:128:ILE:HD13 | 11 | 0.04 |
| (1,361) | 1:A:72:GLN:H | 1:A:78:ILE:HD11 | 18 | 0.04 |
| (1,361) | 1:A:72:GLN:H | 1:A:78:ILE:HD12 | 18 | 0.04 |
| (1,361) | 1:A:72:GLN:H | 1:A:78:ILE:HD13 | 18 | 0.04 |
| (1,358) | 1:A:90:ILE:HD11 | 1:A:113:LEU:HD11 | 11 | 0.04 |
| (1,358) | 1:A:90:ILE:HD11 | 1:A:113:LEU:HD12 | 11 | 0.04 |
| (1,358) | 1:A:90:ILE:HD11 | 1:A:113:LEU:HD13 | 11 | 0.04 |
| (1,358) | 1:A:90:ILE:HD12 | 1:A:113:LEU:HD11 | 11 | 0.04 |
| (1,358) | 1:A:90:ILE:HD12 | 1:A:113:LEU:HD12 | 11 | 0.04 |
| (1,358) | 1:A:90:ILE:HD12 | 1:A:113:LEU:HD13 | 11 | 0.04 |
| (1,358) | 1:A:90:ILE:HD13 | 1:A:113:LEU:HD11 | 11 | 0.04 |
| (1,358) | 1:A:90:ILE:HD13 | 1:A:113:LEU:HD12 | 11 | 0.04 |
| (1,358) | 1:A:90:ILE:HD13 | 1:A:113:LEU:HD13 | 11 | 0.04 |
| (1,358) | 1:A:90:ILE:HD11 | 1:A:113:LEU:HD11 | 15 | 0.04 |
| (1,358) | 1:A:90:ILE:HD11 | 1:A:113:LEU:HD12 | 15 | 0.04 |
| (1,358) | 1:A:90:ILE:HD11 | 1:A:113:LEU:HD13 | 15 | 0.04 |
| (1,358) | 1:A:90:ILE:HD12 | 1:A:113:LEU:HD11 | 15 | 0.04 |
| (1,358) | 1:A:90:ILE:HD12 | 1:A:113:LEU:HD12 | 15 | 0.04 |
| (1,358) | 1:A:90:ILE:HD12 | 1:A:113:LEU:HD13 | 15 | 0.04 |
| (1,358) | 1:A:90:ILE:HD13 | 1:A:113:LEU:HD11 | 15 | 0.04 |
| (1,358) | 1:A:90:ILE:HD13 | 1:A:113:LEU:HD12 | 15 | 0.04 |
| (1,358) | 1:A:90:ILE:HD13 | 1:A:113:LEU:HD13 | 15 | 0.04 |
| (1,338) | 1:A:48:ALA:H | 1:A:54:VAL:HG11 | 7 | 0.04 |
| (1,338) | 1:A:48:ALA:H | 1:A:54:VAL:HG12 | 7 | 0.04 |
| (1,338) | 1:A:48:ALA:H | 1:A:54:VAL:HG13 | 7 | 0.04 |
| (1,338) | 1:A:48:ALA:H | 1:A:54:VAL:HG11 | 8 | 0.04 |
| (1,338) | 1:A:48:ALA:H | 1:A:54:VAL:HG12 | 8 | 0.04 |
| (1,338) | 1:A:48:ALA:H | 1:A:54:VAL:HG13 | 8 | 0.04 |



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

| (1,334) 1:A:90:ILE:H 1:A:91:VAL:HG21 5 0.04 (1,334) 1:A:90:ILE:H 1:A:91:VAL:HG22 5 0.04 (1,334) 1:A:90:ILE:H 1:A:91:VAL:HG23 5 0.04 (1,334) 1:A:90:ILE:H 1:A:91:VAL:HG21 18 0.04 (1,334) 1:A:90:ILE:H 1:A:91:VAL:HG21 18 0.04 (1,334) 1:A:90:ILE:H 1:A:91:VAL:HG22 18 0.04 (1,334) 1:A:90:ILE:H 1:A:91:VAL:HG23 18 0.04 (1,333) 1:A:137:IEU:HD21 1:A:139:TYR:H 7 0.04 (1,333) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:139:TYR:H 7 0.04 (1,333) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:139:TYR:H 7 0.04 (1,333) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:139:TYR:H 7 0.04 (1,326) 1:A:64:LEU:HD11 1:A:80:THR:H 14 0.04 (1,326) 1:A:64:LEU:HD12 1:A:80:THR:H 14 0.04 (1,326) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:80:THR:H 14 0.04 (1,324) 1:A:148:ASP:H 1:A:150:LEU:HD12 20 0.04 (1,324) 1:A:148:ASP:H 1:A:150:LEU:HD12 20 0.04 (1,324) 1:A:148:ASP:H 1:A:150:LEU:HD13 20 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG11 13 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG11 14 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD11 4 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD11 17 0.04 (1,363) 1:A:163:LEU:HD12 1:A:164:ASN:H 2 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD12 1:A:164:ASN:H 2 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD | Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|--|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,334) 1:A:90:ILE:H 1:A:91:VAL:HG23 5 0.04 (1,334) 1:A:90:ILE:H 1:A:91:VAL:HG21 18 0.04 (1,334) 1:A:90:ILE:H 1:A:91:VAL:HG22 18 0.04 (1,334) 1:A:90:ILE:H 1:A:91:VAL:HG23 18 0.04 (1,334) 1:A:90:ILE:H 1:A:91:VAL:HG23 18 0.04 (1,334) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:139:TYR:H 7 0.04 (1,333) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:139:TYR:H 7 0.04 (1,333) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:139:TYR:H 7 0.04 (1,333) 1:A:137:LEU:HD13 1:A:139:TYR:H 7 0.04 (1,326) 1:A:64:LEU:HD11 1:A:80:THR:H 14 0.04 (1,326) 1:A:64:LEU:HD11 1:A:80:THR:H 14 0.04 (1,326) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:80:THR:H 14 0.04 (1,326) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:80:THR:H 14 0.04 (1,324) 1:A:148:ASP:H 1:A:150:LEU:HD11 20 0.04 (1,324) 1:A:148:ASP:H 1:A:150:LEU:HD12 20 0.04 (1,324) 1:A:148:ASP:H 1:A:150:LEU:HD13 20 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG11 13 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG12 14 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG11 14 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD11 4 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD11 4 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD11 4 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD11 9 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD11 9 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD11 17 0.04 (1,310) 1:A:163:LE | (1,334) | 1:A:90:ILE:H | 1:A:91:VAL:HG21 | 5 | 0.04 |
| (1,334) 1:A:90:ILE:H 1:A:91:VAL:HG21 18 0.04 (1,334) 1:A:90:ILE:H 1:A:91:VAL:HG22 18 0.04 (1,334) 1:A:90:ILE:H 1:A:91:VAL:HG23 18 0.04 (1,333) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:139:TYR:H 7 0.04 (1,333) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:139:TYR:H 7 0.04 (1,333) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:139:TYR:H 7 0.04 (1,333) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:139:TYR:H 7 0.04 (1,326) 1:A:64:LEU:HD11 1:A:80:THR:H 14 0.04 (1,326) 1:A:64:LEU:HD12 1:A:80:THR:H 14 0.04 (1,326) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:80:THR:H 14 0.04 (1,326) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:80:THR:H 14 0.04 (1,324) 1:A:148:ASP:H 1:A:150:LEU:HD11 20 0.04 (1,324) 1:A:148:ASP:H 1:A:150:LEU:HD12 20 0.04 (1,324) 1:A:148:ASP:H 1:A:150:LEU:HD13 20 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG11 13 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG12 13 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG12 13 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG12 14 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG11 14 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG12 14 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD11 4 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD11 4 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD11 4 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD11 9 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD11 9 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD11 17 0.04 (1,310) 1:A:163:LEU:HD11 11 1:A:164:ASN:H 9 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD11 11 1:A:164:ASN:H 9 0.04 (1,263) 1 | (1,334) | 1:A:90:ILE:H | 1:A:91:VAL:HG22 | 5 | 0.04 |
| (1,334) 1:A:90:ILE:H 1:A:91:VAL:HG22 18 0.04 (1,334) 1:A:90:ILE:H 1:A:91:VAL:HG23 18 0.04 (1,333) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:139:TYR:H 7 0.04 (1,333) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:139:TYR:H 7 0.04 (1,333) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:139:TYR:H 7 0.04 (1,333) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:139:TYR:H 7 0.04 (1,326) 1:A:64:LEU:HD11 1:A:80:THR:H 14 0.04 (1,326) 1:A:64:LEU:HD12 1:A:80:THR:H 14 0.04 (1,326) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:80:THR:H 14 0.04 (1,324) 1:A:148:ASP:H 1:A:150:LEU:HD11 20 0.04 (1,324) 1:A:148:ASP:H 1:A:150:LEU:HD12 20 0.04 (1,324) 1:A:148:ASP:H 1:A:150:LEU:HD13 20 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG11 13 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG12 13 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG12 13 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG12 14 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG12 14 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG11 14 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG11 14 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD11 4 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD11 4 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD11 9 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD11 9 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD11 9 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD11 17 0.04 (1,310) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:164:ASN:H 9 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:164:ASN:H 9 0.04 (1,263) 1:A:1 | (1,334) | 1:A:90:ILE:H | 1:A:91:VAL:HG23 | 5 | 0.04 |
| (1,334) 1:A:90:ILE:H 1:A:91:VAL:HG23 18 0.04 (1,333) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:139:TYR:H 7 0.04 (1,333) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:139:TYR:H 7 0.04 (1,333) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:139:TYR:H 7 0.04 (1,326) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:80:THR:H 14 0.04 (1,326) 1:A:64:LEU:HD11 1:A:80:THR:H 14 0.04 (1,326) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:80:THR:H 14 0.04 (1,326) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:80:THR:H 14 0.04 (1,324) 1:A:148:ASP:H 1:A:150:LEU:HD11 20 0.04 (1,324) 1:A:148:ASP:H 1:A:150:LEU:HD12 20 0.04 (1,324) 1:A:148:ASP:H 1:A:150:LEU:HD12 20 0.04 (1,324) 1:A:148:ASP:H 1:A:150:LEU:HD12 20 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG11 13 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG11 13 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG11 13 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG13 13 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG13 13 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG13 14 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG11 14 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG11 14 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD11 4 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD11 4 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD11 4 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD11 9 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD11 9 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD11 19 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD11 19 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD11 17 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:164:ASN:H 9 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:164:ASN:H 9 0.04 (1,263) 1:A:16 | (1,334) | 1:A:90:ILE:H | 1:A:91:VAL:HG21 | 18 | 0.04 |
| (1,333) 1:A:137:LEU:HD21 1:A:139:TYR:H 7 0.04 (1,333) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:139:TYR:H 7 0.04 (1,333) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:139:TYR:H 7 0.04 (1,326) 1:A:64:LEU:HD11 1:A:80:THR:H 14 0.04 (1,326) 1:A:64:LEU:HD12 1:A:80:THR:H 14 0.04 (1,326) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:80:THR:H 14 0.04 (1,324) 1:A:148:ASP:H 1:A:150:LEU:HD11 20 0.04 (1,324) 1:A:148:ASP:H 1:A:150:LEU:HD12 20 0.04 (1,324) 1:A:148:ASP:H 1:A:150:LEU:HD13 20 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG11 13 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG11 13 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG12 13 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG13 13 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG13 13 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG13 14 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG13 14 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD11 4 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD11 4 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD11 4 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD13 4 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD13 9 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD11 9 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD11 17 0.04 (1,303) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD11 17 0.04 (1,303) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD11 17 0.04 (1,303) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:164:ASN:H 2 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:164:ASN:H 2 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:164:ASN:H 9 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:164:ASN:H 9 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD13 1:A:164:ASN:H 9 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:164:ASN:H 9 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD12 1:A:164:ASN:H 9 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD12 1: | (1,334) | 1:A:90:ILE:H | 1:A:91:VAL:HG22 | 18 | 0.04 |
| (1,333) 1:A:137:LEU:HD22 1:A:139:TYR:H 7 0.04 (1,336) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:139:TYR:H 7 0.04 (1,326) 1:A:64:LEU:HD11 1:A:80:THR:H 14 0.04 (1,326) 1:A:64:LEU:HD12 1:A:80:THR:H 14 0.04 (1,326) 1:A:64:LEU:HD12 1:A:80:THR:H 14 0.04 (1,326) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:80:THR:H 14 0.04 (1,324) 1:A:148:ASP:H 1:A:150:LEU:HD11 20 0.04 (1,324) 1:A:148:ASP:H 1:A:150:LEU:HD12 20 0.04 (1,324) 1:A:148:ASP:H 1:A:150:LEU:HD12 20 0.04 (1,324) 1:A:148:ASP:H 1:A:150:LEU:HD13 20 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG11 13 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG11 13 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG12 13 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG13 13 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG11 14 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG11 14 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG11 14 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD11 4 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD11 4 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD11 4 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD11 9 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD11 9 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD11 9 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD11 17 0.04 (1,303) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:164:ASN:H 2 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:164:ASN:H 2 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:164:ASN:H 9 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD12 1:A:164:ASN:H 9 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:164:ASN:H 9 0.04 | (1,334) | 1:A:90:ILE:H | 1:A:91:VAL:HG23 | 18 | 0.04 |
| (1,333) 1:A:137:LEU:HD23 1:A:139:TYR:H 7 0.04 (1,326) 1:A:64:LEU:HD11 1:A:80:THR:H 14 0.04 (1,326) 1:A:64:LEU:HD12 1:A:80:THR:H 14 0.04 (1,326) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:80:THR:H 14 0.04 (1,326) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:80:THR:H 14 0.04 (1,324) 1:A:148:ASP:H 1:A:150:LEU:HD11 20 0.04 (1,324) 1:A:148:ASP:H 1:A:150:LEU:HD12 20 0.04 (1,324) 1:A:148:ASP:H 1:A:150:LEU:HD12 20 0.04 (1,324) 1:A:148:ASP:H 1:A:150:LEU:HD13 20 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG11 13 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG11 13 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG12 13 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG13 13 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG13 13 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG11 14 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG12 14 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG12 14 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD11 4 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD11 4 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD12 4 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD12 9 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD13 9 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD11 9 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD11 9 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD11 17 0.04 (1,303) 1:A:91:VAL:H 1:A:93:ASP:H 10 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:164:ASN:H 2 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:164:ASN:H 2 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:164:ASN:H 9 0.04 | (1,333) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:139:TYR:H | 7 | 0.04 |
| (1,326) 1:A:64:LEU:HD11 1:A:80:THR:H 14 0.04 (1,326) 1:A:64:LEU:HD12 1:A:80:THR:H 14 0.04 (1,326) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:80:THR:H 14 0.04 (1,324) 1:A:148:ASP:H 1:A:150:LEU:HD11 20 0.04 (1,324) 1:A:148:ASP:H 1:A:150:LEU:HD13 20 0.04 (1,324) 1:A:148:ASP:H 1:A:150:LEU:HD13 20 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG11 13 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG12 13 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG13 13 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG11 14 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD11 | (1,333) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:139:TYR:H | 7 | 0.04 |
| (1,326) 1:A:64:LEU:HD12 1:A:80:THR:H 14 0.04 (1,326) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:80:THR:H 14 0.04 (1,324) 1:A:148:ASP:H 1:A:150:LEU:HD11 20 0.04 (1,324) 1:A:148:ASP:H 1:A:150:LEU:HD12 20 0.04 (1,324) 1:A:148:ASP:H 1:A:150:LEU:HD13 20 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG11 13 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG12 13 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG13 13 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG11 14 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG13 14 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG12 14 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG13 14 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG13 14 0.04 (1,311) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD13 | (1,333) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:139:TYR:H | 7 | 0.04 |
| (1,326) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:80:THR:H 14 0.04 (1,324) 1:A:148:ASP:H 1:A:150:LEU:HD11 20 0.04 (1,324) 1:A:148:ASP:H 1:A:150:LEU:HD12 20 0.04 (1,324) 1:A:148:ASP:H 1:A:150:LEU:HD13 20 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG11 13 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG13 13 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG13 13 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG12 14 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG12 14 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG12 14 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG13 14 0.04 (1,311) 1:A:61:73:ARG:H 1:A:76:VAL:HG13 14 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD12 4 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD13 <td>(1,326)</td> <td>1:A:64:LEU:HD11</td> <td>1:A:80:THR:H</td> <td>14</td> <td>0.04</td> | (1,326) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:80:THR:H | 14 | 0.04 |
| (1,324) 1:A:148:ASP:H 1:A:150:LEU:HD11 20 0.04 (1,324) 1:A:148:ASP:H 1:A:150:LEU:HD12 20 0.04 (1,324) 1:A:148:ASP:H 1:A:150:LEU:HD13 20 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG11 13 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG13 13 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG11 14 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG12 14 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG12 14 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG12 14 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG13 14 0.04 (1,311) 1:A:65:GLY:H 1:A:76:VAL:HG13 14 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD11 4 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD13 4 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD13 | (1,326) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:80:THR:H | 14 | 0.04 |
| (1,324) 1:A:148:ASP:H 1:A:150:LEU:HD12 20 0.04 (1,324) 1:A:148:ASP:H 1:A:150:LEU:HD13 20 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG11 13 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG12 13 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG13 13 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG11 14 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG12 14 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG13 14 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG13 14 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD11 4 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD12 4 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD11 9 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD13 9 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD11 | (1,326) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:80:THR:H | 14 | 0.04 |
| (1,324) 1:A:148:ASP:H 1:A:150:LEU:HD13 20 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG11 13 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG12 13 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG13 13 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG11 14 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG12 14 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG13 14 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD11 4 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD12 4 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD13 4 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD12 9 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD13 9 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD13 9 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD13 | (1,324) | 1:A:148:ASP:H | 1:A:150:LEU:HD11 | 20 | 0.04 |
| (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG11 13 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG12 13 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG13 13 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG11 14 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG12 14 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG13 14 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG13 14 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD11 4 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD12 4 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD11 9 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD12 9 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD11 17 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD11 17 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD12 | (1,324) | 1:A:148:ASP:H | 1:A:150:LEU:HD12 | 20 | 0.04 |
| (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG12 13 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG13 13 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG11 14 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG12 14 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG13 14 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD11 4 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD12 4 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD13 4 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD11 9 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD12 9 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD13 9 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD11 17 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD12 17 0.04 (1,303) 1:A:193:ARG:H 1:A:187:LEU:HD13 <td>(1,324)</td> <td>1:A:148:ASP:H</td> <td>1:A:150:LEU:HD13</td> <td>20</td> <td>0.04</td> | (1,324) | 1:A:148:ASP:H | 1:A:150:LEU:HD13 | 20 | 0.04 |
| (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG13 13 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG11 14 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG12 14 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG13 14 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD11 4 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD12 4 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD13 4 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD12 9 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD12 9 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD13 9 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD11 17 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD11 17 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD11 17 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD13 </td <td>(1,311)</td> <td>1:A:51:GLY:H</td> <td>1:A:76:VAL:HG11</td> <td>13</td> <td>0.04</td> | (1,311) | 1:A:51:GLY:H | 1:A:76:VAL:HG11 | 13 | 0.04 |
| (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG11 14 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG12 14 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG13 14 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD11 4 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD12 4 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD13 4 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD11 9 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD12 9 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD13 9 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD13 9 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD11 17 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD12 17 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD12 17 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD12< | (1,311) | 1:A:51:GLY:H | 1:A:76:VAL:HG12 | 13 | 0.04 |
| (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG12 14 0.04 (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG13 14 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD11 4 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD12 4 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD13 4 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD12 9 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD13 9 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD11 17 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD12 17 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD12 17 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD12 17 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD13 17 0.04 (1,303) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD13 17 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:164:AS | (1,311) | 1:A:51:GLY:H | 1:A:76:VAL:HG13 | 13 | 0.04 |
| (1,311) 1:A:51:GLY:H 1:A:76:VAL:HG13 14 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD11 4 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD12 4 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD13 4 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD11 9 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD13 9 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD11 17 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD12 17 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD12 17 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD13 17 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD13 17 0.04 (1,310) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:164:ASN:H 2 0.04 (1,303) 1:A:19:VAL:H 1:A:164:ASN:H 2 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:164:ASN:H< | (1,311) | 1:A:51:GLY:H | 1:A:76:VAL:HG11 | 14 | 0.04 |
| (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD11 4 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD12 4 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD13 4 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD11 9 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD12 9 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD13 9 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD11 17 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD12 17 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD12 17 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD13 17 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD13 17 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD13 17 0.04 (1,310) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:164:ASN:H 2 0.04 (1,310) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:164: | (1,311) | 1:A:51:GLY:H | 1:A:76:VAL:HG12 | 14 | 0.04 |
| (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD12 4 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD13 4 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD11 9 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD12 9 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD13 9 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD12 17 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD12 17 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD13 17 0.04 (1,303) 1:A:191:VAL:H 1:A:93:ASP:H 10 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:164:ASN:H 2 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD12 1:A:164:ASN:H 2 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:164:ASN:H 9 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD12 1:A:164:ASN:H 9 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD13 1:A:164:ASN:H< | (1,311) | 1:A:51:GLY:H | 1:A:76:VAL:HG13 | 14 | 0.04 |
| (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD13 4 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD11 9 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD12 9 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD13 9 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD11 17 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD12 17 0.04 (1,300) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD13 17 0.04 (1,303) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD13 17 0.04 (1,303) 1:A:19:VAL:H 1:A:93:ASP:H 10 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:164:ASN:H 2 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD13 1:A:164:ASN:H 2 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD13 1:A:164:ASN:H 9 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD13 1:A:164:ASN:H 9 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:164:ASN:H< | (1,310) | 1:A:173:ARG:H | 1:A:187:LEU:HD11 | 4 | 0.04 |
| (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD11 9 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD12 9 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD13 9 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD11 17 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD12 17 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD13 17 0.04 (1,303) 1:A:91:VAL:H 1:A:93:ASP:H 10 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:164:ASN:H 2 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD12 1:A:164:ASN:H 2 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:164:ASN:H 9 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD12 1:A:164:ASN:H 9 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD13 1:A:164:ASN:H 9 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:164:ASN:H 14 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD12 1:A:164:ASN:H< | (1,310) | 1:A:173:ARG:H | 1:A:187:LEU:HD12 | 4 | 0.04 |
| (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD12 9 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD13 9 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD11 17 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD12 17 0.04 (1,301) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD13 17 0.04 (1,303) 1:A:191:VAL:H 1:A:93:ASP:H 10 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:164:ASN:H 2 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD12 1:A:164:ASN:H 2 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:164:ASN:H 9 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD12 1:A:164:ASN:H 9 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD13 1:A:164:ASN:H 9 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:164:ASN:H 9 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD12 1:A:164:ASN:H 14 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD12 1:A:164:ASN:H | (1,310) | 1:A:173:ARG:H | 1:A:187:LEU:HD13 | 4 | 0.04 |
| (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD13 9 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD11 17 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD12 17 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD13 17 0.04 (1,303) 1:A:191:VAL:H 1:A:93:ASP:H 10 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:164:ASN:H 2 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD12 1:A:164:ASN:H 2 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD13 1:A:164:ASN:H 9 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD12 1:A:164:ASN:H 9 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD13 1:A:164:ASN:H 9 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD13 1:A:164:ASN:H 9 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:164:ASN:H 14 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD12 1:A:164:ASN:H 14 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD12 1:A:164:ASN:H 14 0.04 | (1,310) | 1:A:173:ARG:H | 1:A:187:LEU:HD11 | 9 | 0.04 |
| (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD11 17 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD12 17 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD13 17 0.04 (1,303) 1:A:91:VAL:H 1:A:93:ASP:H 10 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:164:ASN:H 2 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD12 1:A:164:ASN:H 2 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:164:ASN:H 9 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD12 1:A:164:ASN:H 9 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD13 1:A:164:ASN:H 9 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD13 1:A:164:ASN:H 9 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:164:ASN:H 14 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD12 1:A:164:ASN:H 14 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD12 1:A:164:ASN:H 14 0.04 | (1,310) | 1:A:173:ARG:H | 1:A:187:LEU:HD12 | 9 | 0.04 |
| (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD12 17 0.04 (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD13 17 0.04 (1,303) 1:A:91:VAL:H 1:A:93:ASP:H 10 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:164:ASN:H 2 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD12 1:A:164:ASN:H 2 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD13 1:A:164:ASN:H 9 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD12 1:A:164:ASN:H 9 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD13 1:A:164:ASN:H 9 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD13 1:A:164:ASN:H 9 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:164:ASN:H 14 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD12 1:A:164:ASN:H 14 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD12 1:A:164:ASN:H 14 0.04 | (1,310) | 1:A:173:ARG:H | 1:A:187:LEU:HD13 | 9 | 0.04 |
| (1,310) 1:A:173:ARG:H 1:A:187:LEU:HD13 17 0.04 (1,303) 1:A:91:VAL:H 1:A:93:ASP:H 10 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:164:ASN:H 2 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD12 1:A:164:ASN:H 2 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD13 1:A:164:ASN:H 9 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD12 1:A:164:ASN:H 9 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD13 1:A:164:ASN:H 9 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD13 1:A:164:ASN:H 9 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:164:ASN:H 14 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD12 1:A:164:ASN:H 14 0.04 | (1,310) | 1:A:173:ARG:H | 1:A:187:LEU:HD11 | 17 | 0.04 |
| (1,303) 1:A:91:VAL:H 1:A:93:ASP:H 10 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:164:ASN:H 2 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD12 1:A:164:ASN:H 2 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD13 1:A:164:ASN:H 2 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:164:ASN:H 9 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD12 1:A:164:ASN:H 9 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD13 1:A:164:ASN:H 9 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:164:ASN:H 14 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD12 1:A:164:ASN:H 14 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD12 1:A:164:ASN:H 14 0.04 | (1,310) | 1:A:173:ARG:H | 1:A:187:LEU:HD12 | 17 | 0.04 |
| (1,263) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:164:ASN:H 2 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD12 1:A:164:ASN:H 2 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD13 1:A:164:ASN:H 2 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:164:ASN:H 9 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD12 1:A:164:ASN:H 9 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD13 1:A:164:ASN:H 9 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:164:ASN:H 14 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD12 1:A:164:ASN:H 14 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD12 1:A:164:ASN:H 14 0.04 | (1,310) | 1:A:173:ARG:H | 1:A:187:LEU:HD13 | 17 | 0.04 |
| (1,263) 1:A:163:LEU:HD12 1:A:164:ASN:H 2 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD13 1:A:164:ASN:H 2 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:164:ASN:H 9 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD12 1:A:164:ASN:H 9 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD13 1:A:164:ASN:H 9 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:164:ASN:H 14 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD12 1:A:164:ASN:H 14 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD12 1:A:164:ASN:H 14 0.04 | (1,303) | 1:A:91:VAL:H | 1:A:93:ASP:H | 10 | 0.04 |
| (1,263) 1:A:163:LEU:HD13 1:A:164:ASN:H 2 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:164:ASN:H 9 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD12 1:A:164:ASN:H 9 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD13 1:A:164:ASN:H 9 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:164:ASN:H 14 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD12 1:A:164:ASN:H 14 0.04 | (1,263) | 1:A:163:LEU:HD11 | 1:A:164:ASN:H | 2 | 0.04 |
| (1,263) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:164:ASN:H 9 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD12 1:A:164:ASN:H 9 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD13 1:A:164:ASN:H 9 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:164:ASN:H 14 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD12 1:A:164:ASN:H 14 0.04 | (1,263) | 1:A:163:LEU:HD12 | 1:A:164:ASN:H | 2 | 0.04 |
| (1,263) 1:A:163:LEU:HD12 1:A:164:ASN:H 9 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD13 1:A:164:ASN:H 9 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:164:ASN:H 14 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD12 1:A:164:ASN:H 14 0.04 | (1,263) | 1:A:163:LEU:HD13 | 1:A:164:ASN:H | 2 | 0.04 |
| (1,263) 1:A:163:LEU:HD12 1:A:164:ASN:H 9 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD13 1:A:164:ASN:H 9 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:164:ASN:H 14 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD12 1:A:164:ASN:H 14 0.04 | · ' / | 1:A:163:LEU:HD11 | 1:A:164:ASN:H | 9 | 0.04 |
| (1,263) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:164:ASN:H 14 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD12 1:A:164:ASN:H 14 0.04 | , , | 1:A:163:LEU:HD12 | 1:A:164:ASN:H | 9 | 0.04 |
| (1,263) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:164:ASN:H 14 0.04 (1,263) 1:A:163:LEU:HD12 1:A:164:ASN:H 14 0.04 | (1,263) | 1:A:163:LEU:HD13 | 1:A:164:ASN:H | 9 | 0.04 |
| | | 1:A:163:LEU:HD11 | 1:A:164:ASN:H | 14 | 0.04 |
| | (1,263) | 1:A:163:LEU:HD12 | 1:A:164:ASN:H | 14 | 0.04 |
| $ (1,203) 1:A:103:LEU:\PiD13 1:A:104:A5N:H 14 0.04$ | (1,263) | 1:A:163:LEU:HD13 | 1:A:164:ASN:H | 14 | 0.04 |
| (1,263) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:164:ASN:H 19 0.04 | (1,263) | 1:A:163:LEU:HD11 | 1:A:164:ASN:H | 19 | 0.04 |
| (1,263) 1:A:163:LEU:HD12 1:A:164:ASN:H 19 0.04 | , | 1:A:163:LEU:HD12 | 1:A:164:ASN:H | 19 | 0.04 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,263) | 1:A:163:LEU:HD13 | 1:A:164:ASN:H | 19 | 0.04 |
| (1,262) | 1:A:91:VAL:HG11 | 1:A:94:ALA:H | 1 | 0.04 |
| (1,262) | 1:A:91:VAL:HG12 | 1:A:94:ALA:H | 1 | 0.04 |
| (1,262) | 1:A:91:VAL:HG13 | 1:A:94:ALA:H | 1 | 0.04 |
| (1,262) | 1:A:91:VAL:HG11 | 1:A:94:ALA:H | 6 | 0.04 |
| (1,262) | 1:A:91:VAL:HG12 | 1:A:94:ALA:H | 6 | 0.04 |
| (1,262) | 1:A:91:VAL:HG13 | 1:A:94:ALA:H | 6 | 0.04 |
| (1,259) | 1:A:71:ALA:H | 1:A:78:ILE:HD11 | 10 | 0.04 |
| (1,259) | 1:A:71:ALA:H | 1:A:78:ILE:HD12 | 10 | 0.04 |
| (1,259) | 1:A:71:ALA:H | 1:A:78:ILE:HD13 | 10 | 0.04 |
| (1,254) | 1:A:57:VAL:HG11 | 1:A:83:SER:H | 3 | 0.04 |
| (1,254) | 1:A:57:VAL:HG12 | 1:A:83:SER:H | 3 | 0.04 |
| (1,254) | 1:A:57:VAL:HG13 | 1:A:83:SER:H | 3 | 0.04 |
| (1,242) | 1:A:133:ALA:H | 1:A:147:LEU:HD21 | 15 | 0.04 |
| (1,242) | 1:A:133:ALA:H | 1:A:147:LEU:HD22 | 15 | 0.04 |
| (1,242) | 1:A:133:ALA:H | 1:A:147:LEU:HD23 | 15 | 0.04 |
| (1,239) | 1:A:25:ALA:H | 1:A:28:ILE:HD11 | 9 | 0.04 |
| (1,239) | 1:A:25:ALA:H | 1:A:28:ILE:HD12 | 9 | 0.04 |
| (1,239) | 1:A:25:ALA:H | 1:A:28:ILE:HD13 | 9 | 0.04 |
| (1,236) | 1:A:21:LEU:HD11 | 1:A:25:ALA:H | 12 | 0.04 |
| (1,236) | 1:A:21:LEU:HD12 | 1:A:25:ALA:H | 12 | 0.04 |
| (1,236) | 1:A:21:LEU:HD13 | 1:A:25:ALA:H | 12 | 0.04 |
| (1,236) | 1:A:21:LEU:HD11 | 1:A:25:ALA:H | 15 | 0.04 |
| (1,236) | 1:A:21:LEU:HD12 | 1:A:25:ALA:H | 15 | 0.04 |
| (1,236) | 1:A:21:LEU:HD13 | 1:A:25:ALA:H | 15 | 0.04 |
| (1,233) | 1:A:54:VAL:HG11 | 1:A:55:THR:H | 4 | 0.04 |
| (1,233) | 1:A:54:VAL:HG12 | 1:A:55:THR:H | 4 | 0.04 |
| (1,233) | 1:A:54:VAL:HG13 | 1:A:55:THR:H | 4 | 0.04 |
| (1,230) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:150:LEU:HD21 | 5 | 0.04 |
| (1,230) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:150:LEU:HD22 | 5 | 0.04 |
| (1,230) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:150:LEU:HD23 | 5 | 0.04 |
| (1,229) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:147:LEU:HD21 | 3 | 0.04 |
| (1,229) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:147:LEU:HD22 | 3 | 0.04 |
| (1,229) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:147:LEU:HD23 | 3 | 0.04 |
| (1,227) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:95:TRP:HE1 | 7 | 0.04 |
| (1,227) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:95:TRP:HE1 | 7 | 0.04 |
| (1,227) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:95:TRP:HE1 | 7 | 0.04 |
| (1,226) | 1:A:57:VAL:HG11 | 1:A:82:GLN:H | 16 | 0.04 |
| (1,226) | 1:A:57:VAL:HG12 | 1:A:82:GLN:H | 16 | 0.04 |
| (1,226) | 1:A:57:VAL:HG13 | 1:A:82:GLN:H | 16 | 0.04 |
| (1,212) | 1:A:86:ALA:H | 1:A:88:PHE:H | 11 | 0.04 |
| (1,211) | 1:A:85:LEU:H | 1:A:88:PHE:H | 10 | 0.04 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|-----------------|------------------|-------|---------------|
| (1,207) | 1:A:60:SER:H | 1:A:64:LEU:HD11 | 9 | 0.04 |
| (1,207) | 1:A:60:SER:H | 1:A:64:LEU:HD12 | 9 | 0.04 |
| (1,207) | 1:A:60:SER:H | 1:A:64:LEU:HD13 | 9 | 0.04 |
| (1,207) | 1:A:60:SER:H | 1:A:64:LEU:HD11 | 10 | 0.04 |
| (1,207) | 1:A:60:SER:H | 1:A:64:LEU:HD12 | 10 | 0.04 |
| (1,207) | 1:A:60:SER:H | 1:A:64:LEU:HD13 | 10 | 0.04 |
| (1,207) | 1:A:60:SER:H | 1:A:64:LEU:HD11 | 15 | 0.04 |
| (1,207) | 1:A:60:SER:H | 1:A:64:LEU:HD12 | 15 | 0.04 |
| (1,207) | 1:A:60:SER:H | 1:A:64:LEU:HD13 | 15 | 0.04 |
| (1,205) | 1:A:24:VAL:HG11 | 1:A:192:GLY:H | 19 | 0.04 |
| (1,205) | 1:A:24:VAL:HG12 | 1:A:192:GLY:H | 19 | 0.04 |
| (1,205) | 1:A:24:VAL:HG13 | 1:A:192:GLY:H | 19 | 0.04 |
| (1,201) | 1:A:157:GLN:H | 1:A:190:LEU:HD21 | 5 | 0.04 |
| (1,201) | 1:A:157:GLN:H | 1:A:190:LEU:HD22 | 5 | 0.04 |
| (1,201) | 1:A:157:GLN:H | 1:A:190:LEU:HD23 | 5 | 0.04 |
| (1,201) | 1:A:157:GLN:H | 1:A:190:LEU:HD21 | 6 | 0.04 |
| (1,201) | 1:A:157:GLN:H | 1:A:190:LEU:HD22 | 6 | 0.04 |
| (1,201) | 1:A:157:GLN:H | 1:A:190:LEU:HD23 | 6 | 0.04 |
| (1,192) | 1:A:153:LEU:H | 1:A:157:GLN:H | 19 | 0.04 |
| (1,187) | 1:A:62:VAL:HG11 | 1:A:64:LEU:H | 6 | 0.04 |
| (1,187) | 1:A:62:VAL:HG12 | 1:A:64:LEU:H | 6 | 0.04 |
| (1,187) | 1:A:62:VAL:HG13 | 1:A:64:LEU:H | 6 | 0.04 |
| (1,187) | 1:A:62:VAL:HG11 | 1:A:64:LEU:H | 10 | 0.04 |
| (1,187) | 1:A:62:VAL:HG12 | 1:A:64:LEU:H | 10 | 0.04 |
| (1,187) | 1:A:62:VAL:HG13 | 1:A:64:LEU:H | 10 | 0.04 |
| (1,164) | 1:A:57:VAL:HG11 | 1:A:81:VAL:H | 3 | 0.04 |
| (1,164) | 1:A:57:VAL:HG12 | 1:A:81:VAL:H | 3 | 0.04 |
| (1,164) | 1:A:57:VAL:HG13 | 1:A:81:VAL:H | 3 | 0.04 |
| (1,153) | 1:A:57:VAL:H | 1:A:81:VAL:HG21 | 6 | 0.04 |
| (1,153) | 1:A:57:VAL:H | 1:A:81:VAL:HG22 | 6 | 0.04 |
| (1,153) | 1:A:57:VAL:H | 1:A:81:VAL:HG23 | 6 | 0.04 |
| (1,123) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:128:ILE:HD11 | 14 | 0.04 |
| (1,123) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:128:ILE:HD12 | 14 | 0.04 |
| (1,123) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:128:ILE:HD13 | 14 | 0.04 |
| (1,123) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:128:ILE:HD11 | 16 | 0.04 |
| (1,123) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:128:ILE:HD12 | 16 | 0.04 |
| (1,123) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:128:ILE:HD13 | 16 | 0.04 |
| (1,123) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:128:ILE:HD11 | 17 | 0.04 |
| (1,123) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:128:ILE:HD12 | 17 | 0.04 |
| (1,123) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:128:ILE:HD13 | 17 | 0.04 |
| (1,122) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:191:LEU:HD21 | 16 | 0.04 |
| (1,122) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:191:LEU:HD22 | 16 | 0.04 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,122) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:191:LEU:HD23 | 16 | 0.04 |
| (1,114) | 1:A:94:ALA:H | 1:A:95:TRP:HE1 | 5 | 0.04 |
| (1,1121) | 1:A:169:ASN:H | 1:A:189:GLN:O | 2 | 0.04 |
| (1,1121) | 1:A:169:ASN:H | 1:A:189:GLN:O | 19 | 0.04 |
| (1,1113) | 1:A:127:PHE:H | 1:A:192:GLY:O | 10 | 0.04 |
| (1,1113) | 1:A:127:PHE:H | 1:A:192:GLY:O | 17 | 0.04 |
| (1,1105) | 1:A:102:PHE:H | 1:A:128:ILE:O | 7 | 0.04 |
| (1,1105) | 1:A:102:PHE:H | 1:A:128:ILE:O | 13 | 0.04 |
| (1,1098) | 1:A:124:GLY:O | 1:A:98:ILE:N | 5 | 0.04 |
| (1,1046) | 1:A:46:PHE:O | 1:A:50:LEU:H | 16 | 0.04 |
| (1,1046) | 1:A:46:PHE:O | 1:A:50:LEU:H | 19 | 0.04 |
| (1,1034) | 1:A:23:SER:O | 1:A:27:GLN:H | 10 | 0.04 |
| (1,1032) | 1:A:22:VAL:O | 1:A:26:ASN:H | 5 | 0.04 |
| (1,1026) | 1:A:95:TRP:HE1 | 1:A:91:VAL:H | 3 | 0.04 |
| (1,1025) | 1:A:88:PHE:HE1 | 1:A:34:LEU:HD21 | 10 | 0.04 |
| (1,1025) | 1:A:88:PHE:HE1 | 1:A:34:LEU:HD22 | 10 | 0.04 |
| (1,1025) | 1:A:88:PHE:HE1 | 1:A:34:LEU:HD23 | 10 | 0.04 |
| (1,1025) | 1:A:88:PHE:HE2 | 1:A:34:LEU:HD21 | 10 | 0.04 |
| (1,1025) | 1:A:88:PHE:HE2 | 1:A:34:LEU:HD22 | 10 | 0.04 |
| (1,1025) | 1:A:88:PHE:HE2 | 1:A:34:LEU:HD23 | 10 | 0.04 |
| (1,1024) | 1:A:88:PHE:HE1 | 1:A:34:LEU:HD11 | 10 | 0.04 |
| (1,1024) | 1:A:88:PHE:HE1 | 1:A:34:LEU:HD12 | 10 | 0.04 |
| (1,1024) | 1:A:88:PHE:HE1 | 1:A:34:LEU:HD13 | 10 | 0.04 |
| (1,1024) | 1:A:88:PHE:HE2 | 1:A:34:LEU:HD11 | 10 | 0.04 |
| (1,1024) | 1:A:88:PHE:HE2 | 1:A:34:LEU:HD12 | 10 | 0.04 |
| (1,1024) | 1:A:88:PHE:HE2 | 1:A:34:LEU:HD13 | 10 | 0.04 |
| (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:85:LEU:HD21 | 18 | 0.04 |
| (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:85:LEU:HD22 | 18 | 0.04 |
| (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:85:LEU:HD23 | 18 | 0.04 |
| (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:85:LEU:HD21 | 18 | 0.04 |
| (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:85:LEU:HD22 | 18 | 0.04 |
| (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:85:LEU:HD23 | 18 | 0.04 |
| (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:85:LEU:HD21 | 18 | 0.04 |
| (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:85:LEU:HD22 | 18 | 0.04 |
| (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:85:LEU:HD23 | 18 | 0.04 |
| (1,1016) | 1:A:165:TRP:HZ3 | 1:A:127:PHE:HZ | 2 | 0.04 |
| (1,1016) | 1:A:165:TRP:HZ3 | 1:A:127:PHE:HZ | 19 | 0.04 |
| (1,1013) | 1:A:126:VAL:HA | 1:A:193:GLN:HA | 16 | 0.04 |
| (1,1006) | 1:A:100:SER:H | 1:A:126:VAL:H | 7 | 0.04 |
| (1,1002) | 1:A:57:VAL:H | 1:A:37:ALA:H | 15 | 0.04 |
| (1,993) | 1:A:36:LEU:H | 1:A:99:VAL:H | 10 | 0.03 |
| (1,993) | 1:A:36:LEU:H | 1:A:99:VAL:H | 11 | 0.03 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,993) | 1:A:36:LEU:H | 1:A:99:VAL:H | 13 | 0.03 |
| (1,993) | 1:A:36:LEU:H | 1:A:99:VAL:H | 18 | 0.03 |
| (1,989) | 1:A:163:LEU:HD11 | 1:A:165:TRP:HE1 | 18 | 0.03 |
| (1,989) | 1:A:163:LEU:HD12 | 1:A:165:TRP:HE1 | 18 | 0.03 |
| (1,989) | 1:A:163:LEU:HD13 | 1:A:165:TRP:HE1 | 18 | 0.03 |
| (1,988) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:H | 10 | 0.03 |
| (1,988) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:H | 10 | 0.03 |
| (1,988) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:H | 10 | 0.03 |
| (1,974) | 1:A:128:ILE:H | 1:A:129:LEU:HD21 | 13 | 0.03 |
| (1,974) | 1:A:128:ILE:H | 1:A:129:LEU:HD22 | 13 | 0.03 |
| (1,974) | 1:A:128:ILE:H | 1:A:129:LEU:HD23 | 13 | 0.03 |
| (1,971) | 1:A:160:LEU:HD11 | 1:A:163:LEU:H | 19 | 0.03 |
| (1,971) | 1:A:160:LEU:HD12 | 1:A:163:LEU:H | 19 | 0.03 |
| (1,971) | 1:A:160:LEU:HD13 | 1:A:163:LEU:H | 19 | 0.03 |
| (1,955) | 1:A:173:ARG:H | 1:A:187:LEU:HD21 | 3 | 0.03 |
| (1,955) | 1:A:173:ARG:H | 1:A:187:LEU:HD22 | 3 | 0.03 |
| (1,955) | 1:A:173:ARG:H | 1:A:187:LEU:HD23 | 3 | 0.03 |
| (1,942) | 1:A:49:SER:H | 1:A:50:LEU:HD21 | 10 | 0.03 |
| (1,942) | 1:A:49:SER:H | 1:A:50:LEU:HD22 | 10 | 0.03 |
| (1,942) | 1:A:49:SER:H | 1:A:50:LEU:HD23 | 10 | 0.03 |
| (1,937) | 1:A:167:ILE:H | 1:A:191:LEU:HD21 | 7 | 0.03 |
| (1,937) | 1:A:167:ILE:H | 1:A:191:LEU:HD22 | 7 | 0.03 |
| (1,937) | 1:A:167:ILE:H | 1:A:191:LEU:HD23 | 7 | 0.03 |
| (1,931) | 1:A:73:GLU:H | 1:A:76:VAL:HG21 | 14 | 0.03 |
| (1,931) | 1:A:73:GLU:H | 1:A:76:VAL:HG22 | 14 | 0.03 |
| (1,931) | 1:A:73:GLU:H | 1:A:76:VAL:HG23 | 14 | 0.03 |
| (1,921) | 1:A:164:ASN:H | 1:A:195:LEU:HD11 | 5 | 0.03 |
| (1,921) | 1:A:164:ASN:H | 1:A:195:LEU:HD12 | 5 | 0.03 |
| (1,921) | 1:A:164:ASN:H | 1:A:195:LEU:HD13 | 5 | 0.03 |
| (1,917) | 1:A:154:GLU:H | 1:A:190:LEU:HD21 | 1 | 0.03 |
| (1,917) | 1:A:154:GLU:H | 1:A:190:LEU:HD22 | 1 | 0.03 |
| (1,917) | 1:A:154:GLU:H | 1:A:190:LEU:HD23 | 1 | 0.03 |
| (1,917) | 1:A:154:GLU:H | 1:A:190:LEU:HD21 | 20 | 0.03 |
| (1,917) | 1:A:154:GLU:H | 1:A:190:LEU:HD22 | 20 | 0.03 |
| (1,917) | 1:A:154:GLU:H | 1:A:190:LEU:HD23 | 20 | 0.03 |
| (1,912) | 1:A:56:ALA:H | 1:A:81:VAL:HG21 | 12 | 0.03 |
| (1,912) | 1:A:56:ALA:H | 1:A:81:VAL:HG22 | 12 | 0.03 |
| (1,912) | 1:A:56:ALA:H | 1:A:81:VAL:HG23 | 12 | 0.03 |
| (1,911) | 1:A:56:ALA:H | 1:A:64:LEU:HD11 | 2 | 0.03 |
| (1,911) | 1:A:56:ALA:H | 1:A:64:LEU:HD12 | 2 | 0.03 |
| (1,911) | 1:A:56:ALA:H | 1:A:64:LEU:HD13 | 2 | 0.03 |
| (1,902) | 1:A:153:LEU:HD11 | 1:A:169:ASN:H | 10 | 0.03 |



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

| (1,902) 1.A:153:LEU:HD12 1.A:169:ASN:H 10 0.03 (1,900) 1.A:153:LEU:H 1:A:169:LEU:HD11 6 0.03 (1,900) 1.A:153:LEU:H 1:A:190:LEU:HD12 6 0.03 (1,900) 1:A:153:LEU:H 1:A:190:LEU:HD13 6 0.03 (1,896) 1:A:166:LEU:HD11 1:A:193:GLN:H 3 0.03 (1,896) 1:A:166:LEU:HD13 1:A:193:GLN:H 3 0.03 (1,896) 1:A:166:LEU:HD13 1:A:193:GLN:H 3 0.03 (1,896) 1:A:166:LEU:HD13 1:A:193:GLN:H 3 0.03 (1,848) 1:A:191:VAL:HG21 1:A:95:TRP:HE1 4 0.03 (1,848) 1:A:91:VAL:HG22 1:A:95:TRP:HE1 4 0.03 (1,836) 1:A:81:VAL:HG12 1:A:83:SER:H 6 0.03 (1,836) 1:A:81:VAL:HG13 1:A:83:SER:H 6 0.03 (1,831) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:118:TYR:H 13 0.03 (1,831) 1:A:147:VAL:HG13 1:A:148:TYR:H </th <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) |
|--|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,900) 1:A:153:LEU:H 1:A:190:LEU:HD11 6 0.03 (1,900) 1:A:153:LEU:H 1:A:190:LEU:HD12 6 0.03 (1,900) 1:A:153:LEU:H 1:A:190:LEU:HD13 6 0.03 (1,896) 1:A:166:LEU:HD11 1:A:193:GLN:H 3 0.03 (1,896) 1:A:166:LEU:HD12 1:A:193:GLN:H 3 0.03 (1,896) 1:A:166:LEU:HD13 1:A:193:GLN:H 3 0.03 (1,896) 1:A:166:LEU:HD13 1:A:193:GLN:H 3 0.03 (1,848) 1:A:91:VAL:HG21 1:A:95:TRP:HE1 4 0.03 (1,848) 1:A:91:VAL:HG22 1:A:95:TRP:HE1 4 0.03 (1,848) 1:A:91:VAL:HG21 1:A:95:TRP:HE1 4 0.03 (1,848) 1:A:91:VAL:HG21 1:A:95:TRP:HE1 4 0.03 (1,836) 1:A:81:VAL:HG11 1:A:83:SER:H 6 0.03 (1,836) 1:A:81:VAL:HG11 1:A:83:SER:H 6 0.03 (1,836) 1:A:81:VAL:HG12 1:A:83:SER:H 6 0.03 (1,836) 1:A:81:VAL:HG11 1:A:18:TYR:H 13 0.03 (1,831) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:18:TYR:H 13 0.03 (1,831) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:18:TYR:H 13 0.03 (1,831) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:118:TYR:H 13 0.03 (1,831) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:148:TYR:H 13 0.03 (1,823) 1:A:23:SER:H 1:A:24:VAL:HG21 5 0.03 (1,823) 1:A:23:SER:H 1:A:24:VAL:HG22 5 0.03 (1,823) 1:A:23:SER:H 1:A:24:VAL:HG22 5 0.03 (1,823) 1:A:23:SER:H 1:A:24:VAL:HG22 5 0.03 (1,823) 1:A:23:SER:H 1:A:24:VAL:HG23 5 0.03 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD11 4 0.03 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD11 1 0.03 (1,811) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD11 1 0.03 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD11 1 1 0.03 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD13 1 2 0.03 (1,810) 1:A:136:GLN:H | (1,902) | 1:A:153:LEU:HD12 | 1:A:169:ASN:H | 10 | 0.03 |
| (1,900) 1:A:153:LEU:H 1:A:190:LEU:HD12 6 0.03 (1,900) 1:A:153:LEU:H 1:A:190:LEU:HD13 6 0.03 (1,896) 1:A:166:LEU:HD11 1:A:193:GLN:H 3 0.03 (1,896) 1:A:166:LEU:HD13 1:A:193:GLN:H 3 0.03 (1,896) 1:A:166:LEU:HD13 1:A:193:GLN:H 3 0.03 (1,896) 1:A:162:LU:HD13 1:A:193:GLN:H 3 0.03 (1,848) 1:A:91:VAL:HG21 1:A:95:TRP:HE1 4 0.03 (1,848) 1:A:91:VAL:HG22 1:A:95:TRP:HE1 4 0.03 (1,836) 1:A:81:VAL:HG12 1:A:83:SER:H 6 0.03 (1,836) 1:A:81:VAL:HG13 1:A:83:SER:H 6 0.03 (1,831) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:18:TYR:H 13 0.03 (1,831) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:118:TYR:H 13 0.03 (1,831) 1:A:1417:VAL:HG13 1:A:18:TYR:H 13 0.03 (1,831) 1:A:146:ASP:H 1:A:148:TYR:H | (1,902) | 1:A:153:LEU:HD13 | 1:A:169:ASN:H | 10 | 0.03 |
| (1,900) 1:A:153:LEU:H 1:A:190:LEU:HD13 6 0.03 (1,896) 1:A:166:LEU:HD11 1:A:193:GLN:H 3 0.03 (1,896) 1:A:166:LEU:HD12 1:A:193:GLN:H 3 0.03 (1,896) 1:A:166:LEU:HD13 1:A:193:GLN:H 3 0.03 (1,896) 1:A:166:LEU:HD13 1:A:193:GLN:H 3 0.03 (1,848) 1:A:91:VAL:HG21 1:A:95:TRP:HE1 4 0.03 (1,848) 1:A:91:VAL:HG22 1:A:95:TRP:HE1 4 0.03 (1,848) 1:A:91:VAL:HG22 1:A:95:TRP:HE1 4 0.03 (1,848) 1:A:91:VAL:HG23 1:A:95:TRP:HE1 4 0.03 (1,836) 1:A:81:VAL:HG11 1:A:83:SER:H 6 0.03 (1,831) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:118:TYR:H 13 0.03 (1,831) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:118:TYR:H 13 0.03 (1,831) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:118:TYR:H 13 0.03 (1,831) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:118:TYR:H 13 0.03 (1,823) 1:A:23:SER:H 1:A:24:VAL:HG21 5 0.03 (1,823) 1:A:23:SER:H 1:A:24:VAL:HG22 5 0.03 (1,823) 1:A:23:SER:H 1:A:24:VAL:HG23 5 0.03 (1,823) 1:A:23:SER:H 1:A:24:VAL:HG23 5 0.03 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD11 4 0.03 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD11 4 0.03 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD12 4 0.03 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD11 11 0.03 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD11 11 0.03 (1,811) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD11 11 0.03 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD13 11 0.03 (1,810) 1:A:13 | (1,900) | 1:A:153:LEU:H | 1:A:190:LEU:HD11 | 6 | 0.03 |
| (1,896) 1:A:166:LEU:HD11 1:A:193:GLN:H 3 0.03 (1,896) 1:A:166:LEU:HD12 1:A:193:GLN:H 3 0.03 (1,896) 1:A:166:LEU:HD13 1:A:193:GLN:H 3 0.03 (1,848) 1:A:91:VAL:HG21 1:A:95:TRP:HE1 4 0.03 (1,848) 1:A:91:VAL:HG22 1:A:95:TRP:HE1 4 0.03 (1,848) 1:A:91:VAL:HG22 1:A:95:TRP:HE1 4 0.03 (1,848) 1:A:91:VAL:HG22 1:A:95:TRP:HE1 4 0.03 (1,836) 1:A:81:VAL:HG11 1:A:83:SER:H 6 0.03 (1,836) 1:A:81:VAL:HG12 1:A:83:SER:H 6 0.03 (1,836) 1:A:81:VAL:HG12 1:A:83:SER:H 6 0.03 (1,831) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:18:TYR:H 13 0.03 (1,831) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:118:TYR:H 13 0.03 (1,831) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:118:TYR:H 13 0.03 (1,831) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:118:TYR:H 13 0.03 (1,823) 1:A:23:SER:H 1:A:24:VAL:HG22 5 0.03 (1,823) 1:A:23:SER:H 1:A:24:VAL:HG22 5 0.03 (1,823) 1:A:23:SER:H 1:A:24:VAL:HG22 5 0.03 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD11 4 0.03 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD12 4 0.03 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD13 4 0.03 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD13 4 0.03 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD13 1 0.03 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD11 11 0.03 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD11 10 0.03 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD11 11 0.03 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD11 10 0.03 (1,810) 1:A:136:GLN:H | (1,900) | 1:A:153:LEU:H | 1:A:190:LEU:HD12 | 6 | 0.03 |
| (1,896) 1:A:166:LEU:HD12 1:A:193:GLN:H 3 0.03 (1,896) 1:A:166:LEU:HD13 1:A:193:GLN:H 3 0.03 (1,848) 1:A:91:VAL:HG21 1:A:95:TRP:HE1 4 0.03 (1,848) 1:A:91:VAL:HG22 1:A:95:TRP:HE1 4 0.03 (1,848) 1:A:91:VAL:HG23 1:A:95:TRP:HE1 4 0.03 (1,836) 1:A:81:VAL:HG11 1:A:83:SER:H 6 0.03 (1,836) 1:A:81:VAL:HG13 1:A:83:SER:H 6 0.03 (1,831) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:18:TYR:H 13 0.03 (1,831) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:118:TYR:H 13 0.03 (1,831) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:118:TYR:H 13 0.03 (1,831) 1:A:17:VAL:HG13 1:A:118:TYR:H 13 0.03 (1,831) 1:A:17:VAL:HG13 1:A:118:TYR:H 13 0.03 (1,823) 1:A:23:SER:H 1:A:124:VAL:HG21 5 0.03 (1,823) 1:A:23:SER:H 1:A:24:VAL:HG22 | (1,900) | 1:A:153:LEU:H | 1:A:190:LEU:HD13 | 6 | 0.03 |
| (1,896) 1:A:166:LEU:HD13 1:A:193:GLN:H 3 0.03 (1,848) 1:A:91:VAL:HG21 1:A:95:TRP:HE1 4 0.03 (1,848) 1:A:91:VAL:HG22 1:A:95:TRP:HE1 4 0.03 (1,848) 1:A:91:VAL:HG23 1:A:95:TRP:HE1 4 0.03 (1,836) 1:A:81:VAL:HG12 1:A:83:SER:H 6 0.03 (1,836) 1:A:81:VAL:HG12 1:A:83:SER:H 6 0.03 (1,836) 1:A:81:VAL:HG12 1:A:18:TYR:H 13 0.03 (1,831) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:118:TYR:H 13 0.03 (1,831) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:118:TYR:H 13 0.03 (1,831) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:118:TYR:H 13 0.03 (1,831) 1:A:1217:VAL:HG13 1:A:118:TYR:H 13 0.03 (1,831) 1:A:23:SER:H 1:A:24:VAL:HG21 5 0.03 (1,823) 1:A:23:SER:H 1:A:24:VAL:HG22 5 0.03 (1,823) 1:A:23:SER:H 1:A:24:VAL:HG23 | (1,896) | 1:A:166:LEU:HD11 | 1:A:193:GLN:H | 3 | 0.03 |
| (1,848) 1:A:91:VAL:HG21 1:A:95:TRP:HE1 4 0.03 (1,848) 1:A:91:VAL:HG22 1:A:95:TRP:HE1 4 0.03 (1,848) 1:A:91:VAL:HG23 1:A:95:TRP:HE1 4 0.03 (1,836) 1:A:81:VAL:HG11 1:A:83:SER:H 6 0.03 (1,836) 1:A:81:VAL:HG12 1:A:83:SER:H 6 0.03 (1,836) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:18:TYR:H 13 0.03 (1,831) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:118:TYR:H 13 0.03 (1,831) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:118:TYR:H 13 0.03 (1,831) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:118:TYR:H 13 0.03 (1,823) 1:A:23:SER:H 1:A:24:VAL:HG21 5 0.03 (1,823) 1:A:23:SER:H 1:A:24:VAL:HG22 5 0.03 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD11 4 0.03 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD12 4 0.03 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD13 | (1,896) | 1:A:166:LEU:HD12 | 1:A:193:GLN:H | 3 | 0.03 |
| (1,848) 1:A:91:VAL:HG22 1:A:95:TRP:HE1 4 0.03 (1,848) 1:A:91:VAL:HG23 1:A:95:TRP:HE1 4 0.03 (1,836) 1:A:81:VAL:HG11 1:A:83:SER:H 6 0.03 (1,836) 1:A:81:VAL:HG12 1:A:83:SER:H 6 0.03 (1,836) 1:A:81:VAL:HG13 1:A:83:SER:H 6 0.03 (1,831) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:118:TYR:H 13 0.03 (1,831) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:118:TYR:H 13 0.03 (1,831) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:118:TYR:H 13 0.03 (1,831) 1:A:23:SER:H 1:A:24:VAL:HG21 5 0.03 (1,823) 1:A:23:SER:H 1:A:24:VAL:HG23 5 0.03 (1,823) 1:A:23:SER:H 1:A:147:LEU:HD11 4 0.03 (1,823) 1:A:23:SER:H 1:A:147:LEU:HD11 4 0.03 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD11 4 0.03 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD13 | (1,896) | 1:A:166:LEU:HD13 | 1:A:193:GLN:H | 3 | 0.03 |
| (1,848) 1:A:91:VAL:HG23 1:A:95:TRP:HE1 4 0.03 (1,836) 1:A:81:VAL:HG11 1:A:83:SER:H 6 0.03 (1,836) 1:A:81:VAL:HG12 1:A:83:SER:H 6 0.03 (1,836) 1:A:81:VAL:HG13 1:A:33:SER:H 6 0.03 (1,831) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:118:TYR:H 13 0.03 (1,831) 1:A:17:VAL:HG12 1:A:118:TYR:H 13 0.03 (1,823) 1:A:23:SER:H 1:A:24:VAL:HG21 5 0.03 (1,823) 1:A:23:SER:H 1:A:24:VAL:HG22 5 0.03 (1,823) 1:A:23:SER:H 1:A:147:LEU:HD12 4 0.03 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD11 4 0.03 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD12 4 0.03 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD13 4 0.03 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD11 11 0.03 (1,811) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD13 | (1,848) | 1:A:91:VAL:HG21 | 1:A:95:TRP:HE1 | 4 | 0.03 |
| (1,836) 1:A:81:VAL:HG11 1:A:83:SER:H 6 0.03 (1,836) 1:A:81:VAL:HG12 1:A:83:SER:H 6 0.03 (1,836) 1:A:81:VAL:HG13 1:A:83:SER:H 6 0.03 (1,831) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:118:TYR:H 13 0.03 (1,831) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:118:TYR:H 13 0.03 (1,823) 1:A:23:SER:H 1:A:24:VAL:HG21 5 0.03 (1,823) 1:A:23:SER:H 1:A:24:VAL:HG22 5 0.03 (1,823) 1:A:23:SER:H 1:A:24:VAL:HG23 5 0.03 (1,823) 1:A:23:SER:H 1:A:147:LEU:HD11 4 0.03 (1,823) 1:A:23:SER:H 1:A:147:LEU:HD11 4 0.03 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD12 4 0.03 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD13 4 0.03 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD11 11 0.03 (1,811) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD13 | (1,848) | 1:A:91:VAL:HG22 | 1:A:95:TRP:HE1 | 4 | 0.03 |
| (1,836) 1:A:81:VAL:HG12 1:A:83:SER:H 6 0.03 (1,836) 1:A:81:VAL:HG13 1:A:83:SER:H 6 0.03 (1,831) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:118:TYR:H 13 0.03 (1,831) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:118:TYR:H 13 0.03 (1,831) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:118:TYR:H 13 0.03 (1,823) 1:A:23:SER:H 1:A:24:VAL:HG21 5 0.03 (1,823) 1:A:23:SER:H 1:A:24:VAL:HG22 5 0.03 (1,823) 1:A:23:SER:H 1:A:24:VAL:HG23 5 0.03 (1,823) 1:A:23:SER:H 1:A:24:VAL:HG23 5 0.03 (1,823) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD11 4 0.03 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD12 4 0.03 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD13 4 0.03 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD12 11 0.03 (1,811) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD13 | (1,848) | 1:A:91:VAL:HG23 | 1:A:95:TRP:HE1 | 4 | 0.03 |
| (1,836) 1:A:81:VAL:HG13 1:A:83:SER:H 6 0.03 (1,831) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:118:TYR:H 13 0.03 (1,831) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:118:TYR:H 13 0.03 (1,831) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:118:TYR:H 13 0.03 (1,823) 1:A:23:SER:H 1:A:24:VAL:HG21 5 0.03 (1,823) 1:A:23:SER:H 1:A:24:VAL:HG23 5 0.03 (1,823) 1:A:23:SER:H 1:A:147:LEU:HD11 4 0.03 (1,823) 1:A:23:SER:H 1:A:147:LEU:HD12 4 0.03 (1,823) 1:A:46:ASP:H 1:A:147:LEU:HD12 4 0.03 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD12 4 0.03 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD13 4 0.03 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD12 11 0.03 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD13 11 0.03 (1,811) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD13 | (1,836) | 1:A:81:VAL:HG11 | 1:A:83:SER:H | 6 | 0.03 |
| (1,831) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:118:TYR:H 13 0.03 (1,831) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:118:TYR:H 13 0.03 (1,831) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:118:TYR:H 13 0.03 (1,823) 1:A:23:SER:H 1:A:24:VAL:HG21 5 0.03 (1,823) 1:A:23:SER:H 1:A:24:VAL:HG22 5 0.03 (1,823) 1:A:23:SER:H 1:A:24:VAL:HG23 5 0.03 (1,823) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD11 4 0.03 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD12 4 0.03 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD13 4 0.03 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD11 11 0.03 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD12 11 0.03 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD13 11 0.03 (1,811) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD13 11 0.03 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD13 | (1,836) | 1:A:81:VAL:HG12 | 1:A:83:SER:H | 6 | 0.03 |
| (1,831) 1:A:117:VAL:HG11 1:A:118:TYR:H 13 0.03 (1,831) 1:A:117:VAL:HG12 1:A:118:TYR:H 13 0.03 (1,831) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:118:TYR:H 13 0.03 (1,823) 1:A:23:SER:H 1:A:24:VAL:HG21 5 0.03 (1,823) 1:A:23:SER:H 1:A:24:VAL:HG22 5 0.03 (1,823) 1:A:23:SER:H 1:A:24:VAL:HG23 5 0.03 (1,823) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD11 4 0.03 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD12 4 0.03 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD13 4 0.03 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD11 11 0.03 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD12 11 0.03 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD13 11 0.03 (1,811) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD13 11 0.03 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD13 | , | 1:A:81:VAL:HG13 | 1:A:83:SER:H | 6 | 0.03 |
| (1,831) 1:A:117:VAL:HG13 1:A:118:TYR:H 13 0.03 (1,823) 1:A:23:SER:H 1:A:24:VAL:HG21 5 0.03 (1,823) 1:A:23:SER:H 1:A:24:VAL:HG22 5 0.03 (1,823) 1:A:23:SER:H 1:A:24:VAL:HG23 5 0.03 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD11 4 0.03 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD12 4 0.03 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD13 4 0.03 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD11 11 0.03 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD12 11 0.03 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD12 11 0.03 (1,811) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD13 11 0.03 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD12 11 0.03 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD13 11 0.03 (1,800) 1:A:191:VAL:HG11 1:A:147:LEU:H | (1,831) | 1:A:117:VAL:HG11 | 1:A:118:TYR:H | 13 | 0.03 |
| (1,823) 1:A:23:SER:H 1:A:24:VAL:HG21 5 0.03 (1,823) 1:A:23:SER:H 1:A:24:VAL:HG22 5 0.03 (1,823) 1:A:23:SER:H 1:A:24:VAL:HG23 5 0.03 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD11 4 0.03 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD12 4 0.03 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD13 4 0.03 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD11 11 0.03 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD12 11 0.03 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD12 11 0.03 (1,811) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD13 11 0.03 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD12 11 0.03 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD13 11 0.03 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD13 12 0.03 (1,810) 1:A:191:GLN:H 1:A:147:LEU:HD13 | | 1:A:117:VAL:HG12 | 1:A:118:TYR:H | 13 | 0.03 |
| (1,823) 1:A:23:SER:H 1:A:24:VAL:HG21 5 0.03 (1,823) 1:A:23:SER:H 1:A:24:VAL:HG22 5 0.03 (1,823) 1:A:23:SER:H 1:A:24:VAL:HG23 5 0.03 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD11 4 0.03 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD12 4 0.03 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD13 4 0.03 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD11 11 0.03 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD12 11 0.03 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD12 11 0.03 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD13 11 0.03 (1,811) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD11 11 0.03 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD13 11 0.03 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD13 12 0.03 (1,810) 1:A:191:GLN:H 1:A:147:LEU:HD13 | (' / | 1:A:117:VAL:HG13 | 1:A:118:TYR:H | 13 | 0.03 |
| (1,823) 1:A:23:SER:H 1:A:24:VAL:HG22 5 0.03 (1,823) 1:A:23:SER:H 1:A:24:VAL:HG23 5 0.03 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD11 4 0.03 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD12 4 0.03 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD13 4 0.03 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD11 11 0.03 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD12 11 0.03 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD13 11 0.03 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD13 11 0.03 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD11 11 0.03 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD13 11 0.03 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD11 12 0.03 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD12 12 0.03 (1,809) 1:A:191:VAL:HG11 1:A:192:AL | (' / | 1:A:23:SER:H | 1:A:24:VAL:HG21 | 5 | 0.03 |
| (1,823) 1:A:23:SER:H 1:A:24:VAL:HG23 5 0.03 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD11 4 0.03 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD12 4 0.03 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD13 4 0.03 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD11 11 0.03 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD12 11 0.03 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD13 11 0.03 (1,811) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD13 11 0.03 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD12 11 0.03 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD13 11 0.03 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD11 12 0.03 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD11 12 0.03 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD11 12 0.03 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LE | (1,823) | 1:A:23:SER:H | 1:A:24:VAL:HG22 | 5 | 0.03 |
| (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD12 4 0.03 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD13 4 0.03 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD11 11 0.03 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD12 11 0.03 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD13 11 0.03 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD11 11 0.03 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD12 11 0.03 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD13 11 0.03 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD11 12 0.03 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD12 12 0.03 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD12 12 0.03 (1,801) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD12 12 0.03 (1,809) 1:A:91:VAL:HG11 1:A:92:ALA:H 3 0.03 (1,809) 1:A:91:VAL:HG13 1:A:92: | / | 1:A:23:SER:H | 1:A:24:VAL:HG23 | 5 | 0.03 |
| (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD13 4 0.03 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD11 11 0.03 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD12 11 0.03 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD13 11 0.03 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD11 11 0.03 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD12 11 0.03 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD13 11 0.03 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD11 12 0.03 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD12 12 0.03 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD12 12 0.03 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD12 12 0.03 (1,800) 1:A:191:VAL:HG11 1:A:147:LEU:HD13 12 0.03 (1,809) 1:A:91:VAL:HG12 1:A:92:ALA:H 3 0.03 (1,809) 1:A:91:VAL:HG13 1:A | (1,811) | 1:A:146:ASP:H | 1:A:147:LEU:HD11 | 4 | 0.03 |
| (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD11 11 0.03 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD12 11 0.03 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD13 11 0.03 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD11 11 0.03 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD12 11 0.03 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD13 11 0.03 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD11 12 0.03 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD12 12 0.03 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD12 12 0.03 (1,800) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD13 12 0.03 (1,809) 1:A:91:VAL:HG11 1:A:92:ALA:H 3 0.03 (1,809) 1:A:91:VAL:HG13 1:A:92:ALA:H 1 0.03 (1,809) 1:A:91:VAL:HG13 1:A:92:ALA:H 11 0.03 (1,806) 1:A:166:LEU:HD21 1:A:193:G | (1,811) | 1:A:146:ASP:H | 1:A:147:LEU:HD12 | 4 | 0.03 |
| (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD12 11 0.03 (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD13 11 0.03 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD11 11 0.03 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD12 11 0.03 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD13 11 0.03 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD11 12 0.03 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD12 12 0.03 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD13 12 0.03 (1,800) 1:A:91:VAL:HG11 1:A:92:ALA:H 3 0.03 (1,809) 1:A:91:VAL:HG12 1:A:92:ALA:H 3 0.03 (1,809) 1:A:91:VAL:HG13 1:A:92:ALA:H 11 0.03 (1,809) 1:A:91:VAL:HG12 1:A:92:ALA:H 11 0.03 (1,809) 1:A:91:VAL:HG13 1:A:92:ALA:H 11 0.03 (1,806) 1:A:166:LEU:HD21 1:A:193:GLN:H | (1,811) | 1:A:146:ASP:H | 1:A:147:LEU:HD13 | 4 | 0.03 |
| (1,811) 1:A:146:ASP:H 1:A:147:LEU:HD13 11 0.03 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD11 11 0.03 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD12 11 0.03 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD13 11 0.03 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD11 12 0.03 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD12 12 0.03 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD13 12 0.03 (1,809) 1:A:91:VAL:HG11 1:A:92:ALA:H 3 0.03 (1,809) 1:A:91:VAL:HG12 1:A:92:ALA:H 3 0.03 (1,809) 1:A:91:VAL:HG13 1:A:92:ALA:H 11 0.03 (1,809) 1:A:91:VAL:HG12 1:A:92:ALA:H 11 0.03 (1,809) 1:A:91:VAL:HG13 1:A:92:ALA:H 11 0.03 (1,806) 1:A:166:LEU:HD21 1:A:193:GLN:H 2 0.03 (1,806) 1:A:166:LEU:HD22 1:A:193:GLN:H 2 0.03 (1,806) 1:A:166:LEU:HD23 | (1,811) | 1:A:146:ASP:H | 1:A:147:LEU:HD11 | 11 | 0.03 |
| (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD11 11 0.03 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD12 11 0.03 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD13 11 0.03 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD11 12 0.03 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD12 12 0.03 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD13 12 0.03 (1,801) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD13 12 0.03 (1,809) 1:A:91:VAL:HG11 1:A:92:ALA:H 3 0.03 (1,809) 1:A:91:VAL:HG13 1:A:92:ALA:H 3 0.03 (1,809) 1:A:91:VAL:HG12 1:A:92:ALA:H 11 0.03 (1,809) 1:A:91:VAL:HG13 1:A:92:ALA:H 11 0.03 (1,806) 1:A:166:LEU:HD21 1:A:193:GLN:H 2 0.03 (1,806) 1:A:166:LEU:HD23 1:A:193:GLN:H 2 0.03 | (1,811) | 1:A:146:ASP:H | 1:A:147:LEU:HD12 | 11 | 0.03 |
| (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD12 11 0.03 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD13 11 0.03 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD11 12 0.03 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD12 12 0.03 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD13 12 0.03 (1,809) 1:A:91:VAL:HG11 1:A:92:ALA:H 3 0.03 (1,809) 1:A:91:VAL:HG12 1:A:92:ALA:H 3 0.03 (1,809) 1:A:91:VAL:HG13 1:A:92:ALA:H 11 0.03 (1,809) 1:A:91:VAL:HG12 1:A:92:ALA:H 11 0.03 (1,809) 1:A:91:VAL:HG13 1:A:92:ALA:H 11 0.03 (1,809) 1:A:91:VAL:HG13 1:A:92:ALA:H 11 0.03 (1,806) 1:A:166:LEU:HD21 1:A:193:GLN:H 2 0.03 (1,806) 1:A:166:LEU:HD22 1:A:193:GLN:H 2 0.03 (1,806) 1:A:166:LEU:HD23 1:A:193:GLN:H <td>(1,811)</td> <td>1:A:146:ASP:H</td> <td>1:A:147:LEU:HD13</td> <td>11</td> <td>0.03</td> | (1,811) | 1:A:146:ASP:H | 1:A:147:LEU:HD13 | 11 | 0.03 |
| (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD13 11 0.03 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD11 12 0.03 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD12 12 0.03 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD13 12 0.03 (1,809) 1:A:91:VAL:HG11 1:A:92:ALA:H 3 0.03 (1,809) 1:A:91:VAL:HG12 1:A:92:ALA:H 3 0.03 (1,809) 1:A:91:VAL:HG13 1:A:92:ALA:H 1 0.03 (1,809) 1:A:91:VAL:HG12 1:A:92:ALA:H 11 0.03 (1,809) 1:A:91:VAL:HG13 1:A:92:ALA:H 11 0.03 (1,809) 1:A:91:VAL:HG13 1:A:92:ALA:H 11 0.03 (1,806) 1:A:166:LEU:HD21 1:A:193:GLN:H 2 0.03 (1,806) 1:A:166:LEU:HD22 1:A:193:GLN:H 2 0.03 (1,806) 1:A:166:LEU:HD23 1:A:193:GLN:H 2 0.03 | (1,810) | 1:A:136:GLN:H | 1:A:147:LEU:HD11 | 11 | 0.03 |
| (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD11 12 0.03 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD12 12 0.03 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD13 12 0.03 (1,809) 1:A:91:VAL:HG11 1:A:92:ALA:H 3 0.03 (1,809) 1:A:91:VAL:HG12 1:A:92:ALA:H 3 0.03 (1,809) 1:A:91:VAL:HG13 1:A:92:ALA:H 1 0.03 (1,809) 1:A:91:VAL:HG12 1:A:92:ALA:H 11 0.03 (1,809) 1:A:91:VAL:HG12 1:A:92:ALA:H 11 0.03 (1,809) 1:A:91:VAL:HG13 1:A:92:ALA:H 11 0.03 (1,806) 1:A:166:LEU:HD21 1:A:193:GLN:H 2 0.03 (1,806) 1:A:166:LEU:HD22 1:A:193:GLN:H 2 0.03 (1,806) 1:A:166:LEU:HD23 1:A:193:GLN:H 2 0.03 | (1,810) | 1:A:136:GLN:H | 1:A:147:LEU:HD12 | 11 | 0.03 |
| (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD12 12 0.03 (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD13 12 0.03 (1,809) 1:A:91:VAL:HG11 1:A:92:ALA:H 3 0.03 (1,809) 1:A:91:VAL:HG12 1:A:92:ALA:H 3 0.03 (1,809) 1:A:91:VAL:HG13 1:A:92:ALA:H 3 0.03 (1,809) 1:A:91:VAL:HG11 1:A:92:ALA:H 11 0.03 (1,809) 1:A:91:VAL:HG12 1:A:92:ALA:H 11 0.03 (1,809) 1:A:91:VAL:HG13 1:A:92:ALA:H 11 0.03 (1,806) 1:A:166:LEU:HD21 1:A:193:GLN:H 2 0.03 (1,806) 1:A:166:LEU:HD22 1:A:193:GLN:H 2 0.03 (1,806) 1:A:166:LEU:HD23 1:A:193:GLN:H 2 0.03 | (1,810) | 1:A:136:GLN:H | 1:A:147:LEU:HD13 | 11 | 0.03 |
| (1,810) 1:A:136:GLN:H 1:A:147:LEU:HD13 12 0.03 (1,809) 1:A:91:VAL:HG11 1:A:92:ALA:H 3 0.03 (1,809) 1:A:91:VAL:HG12 1:A:92:ALA:H 3 0.03 (1,809) 1:A:91:VAL:HG13 1:A:92:ALA:H 3 0.03 (1,809) 1:A:91:VAL:HG11 1:A:92:ALA:H 11 0.03 (1,809) 1:A:91:VAL:HG12 1:A:92:ALA:H 11 0.03 (1,809) 1:A:91:VAL:HG13 1:A:92:ALA:H 11 0.03 (1,806) 1:A:166:LEU:HD21 1:A:193:GLN:H 2 0.03 (1,806) 1:A:166:LEU:HD22 1:A:193:GLN:H 2 0.03 (1,806) 1:A:166:LEU:HD23 1:A:193:GLN:H 2 0.03 | (1,810) | 1:A:136:GLN:H | 1:A:147:LEU:HD11 | 12 | 0.03 |
| (1,809) 1:A:91:VAL:HG11 1:A:92:ALA:H 3 0.03 (1,809) 1:A:91:VAL:HG12 1:A:92:ALA:H 3 0.03 (1,809) 1:A:91:VAL:HG13 1:A:92:ALA:H 3 0.03 (1,809) 1:A:91:VAL:HG11 1:A:92:ALA:H 11 0.03 (1,809) 1:A:91:VAL:HG12 1:A:92:ALA:H 11 0.03 (1,809) 1:A:91:VAL:HG13 1:A:92:ALA:H 11 0.03 (1,806) 1:A:166:LEU:HD21 1:A:193:GLN:H 2 0.03 (1,806) 1:A:166:LEU:HD22 1:A:193:GLN:H 2 0.03 (1,806) 1:A:166:LEU:HD23 1:A:193:GLN:H 2 0.03 | (1,810) | 1:A:136:GLN:H | 1:A:147:LEU:HD12 | 12 | 0.03 |
| (1,809) 1:A:91:VAL:HG12 1:A:92:ALA:H 3 0.03 (1,809) 1:A:91:VAL:HG13 1:A:92:ALA:H 3 0.03 (1,809) 1:A:91:VAL:HG11 1:A:92:ALA:H 11 0.03 (1,809) 1:A:91:VAL:HG12 1:A:92:ALA:H 11 0.03 (1,809) 1:A:91:VAL:HG13 1:A:92:ALA:H 11 0.03 (1,806) 1:A:166:LEU:HD21 1:A:193:GLN:H 2 0.03 (1,806) 1:A:166:LEU:HD22 1:A:193:GLN:H 2 0.03 (1,806) 1:A:166:LEU:HD23 1:A:193:GLN:H 2 0.03 | (1,810) | 1:A:136:GLN:H | 1:A:147:LEU:HD13 | 12 | 0.03 |
| (1,809) 1:A:91:VAL:HG12 1:A:92:ALA:H 3 0.03 (1,809) 1:A:91:VAL:HG13 1:A:92:ALA:H 3 0.03 (1,809) 1:A:91:VAL:HG11 1:A:92:ALA:H 11 0.03 (1,809) 1:A:91:VAL:HG12 1:A:92:ALA:H 11 0.03 (1,809) 1:A:91:VAL:HG13 1:A:92:ALA:H 11 0.03 (1,806) 1:A:166:LEU:HD21 1:A:193:GLN:H 2 0.03 (1,806) 1:A:166:LEU:HD22 1:A:193:GLN:H 2 0.03 (1,806) 1:A:166:LEU:HD23 1:A:193:GLN:H 2 0.03 | , , | 1:A:91:VAL:HG11 | 1:A:92:ALA:H | 3 | 0.03 |
| (1,809) 1:A:91:VAL:HG13 1:A:92:ALA:H 3 0.03 (1,809) 1:A:91:VAL:HG11 1:A:92:ALA:H 11 0.03 (1,809) 1:A:91:VAL:HG12 1:A:92:ALA:H 11 0.03 (1,809) 1:A:91:VAL:HG13 1:A:92:ALA:H 11 0.03 (1,806) 1:A:166:LEU:HD21 1:A:193:GLN:H 2 0.03 (1,806) 1:A:166:LEU:HD22 1:A:193:GLN:H 2 0.03 (1,806) 1:A:166:LEU:HD23 1:A:193:GLN:H 2 0.03 | | 1:A:91:VAL:HG12 | 1:A:92:ALA:H | | 0.03 |
| (1,809) 1:A:91:VAL:HG11 1:A:92:ALA:H 11 0.03 (1,809) 1:A:91:VAL:HG12 1:A:92:ALA:H 11 0.03 (1,809) 1:A:91:VAL:HG13 1:A:92:ALA:H 11 0.03 (1,806) 1:A:166:LEU:HD21 1:A:193:GLN:H 2 0.03 (1,806) 1:A:166:LEU:HD22 1:A:193:GLN:H 2 0.03 (1,806) 1:A:166:LEU:HD23 1:A:193:GLN:H 2 0.03 | · · / | 1:A:91:VAL:HG13 | 1:A:92:ALA:H | 3 | 0.03 |
| (1,809) 1:A:91:VAL:HG12 1:A:92:ALA:H 11 0.03 (1,809) 1:A:91:VAL:HG13 1:A:92:ALA:H 11 0.03 (1,806) 1:A:166:LEU:HD21 1:A:193:GLN:H 2 0.03 (1,806) 1:A:166:LEU:HD22 1:A:193:GLN:H 2 0.03 (1,806) 1:A:166:LEU:HD23 1:A:193:GLN:H 2 0.03 | | 1:A:91:VAL:HG11 | 1:A:92:ALA:H | | |
| (1,809) 1:A:91:VAL:HG13 1:A:92:ALA:H 11 0.03 (1,806) 1:A:166:LEU:HD21 1:A:193:GLN:H 2 0.03 (1,806) 1:A:166:LEU:HD22 1:A:193:GLN:H 2 0.03 (1,806) 1:A:166:LEU:HD23 1:A:193:GLN:H 2 0.03 | / | 1:A:91:VAL:HG12 | 1:A:92:ALA:H | 11 | 0.03 |
| (1,806) 1:A:166:LEU:HD21 1:A:193:GLN:H 2 0.03 (1,806) 1:A:166:LEU:HD22 1:A:193:GLN:H 2 0.03 (1,806) 1:A:166:LEU:HD23 1:A:193:GLN:H 2 0.03 | | 1:A:91:VAL:HG13 | 1:A:92:ALA:H | 11 | 0.03 |
| (1,806) 1:A:166:LEU:HD22 1:A:193:GLN:H 2 0.03 (1,806) 1:A:166:LEU:HD23 1:A:193:GLN:H 2 0.03 | | 1:A:166:LEU:HD21 | 1:A:193:GLN:H | 2 | 0.03 |
| (1,806) 1:A:166:LEU:HD23 1:A:193:GLN:H 2 0.03 | | 1:A:166:LEU:HD22 | 1:A:193:GLN:H | 2 | 0.03 |
| | · · / | | 1:A:193:GLN:H | 2 | 0.03 |
| | (1,806) | | | 4 | |



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

| (1,806) 1:A:166:LEU:HD22 1:A:193:GLN:H 4 0.03 (1,806) 1:A:166:LEU:HD23 1:A:193:GLN:H 4 0.03 (1,790) 1:A:84:ASN:H 1:A:85:LEU:HD21 1 0.03 (1,790) 1:A:84:ASN:H 1:A:85:LEU:HD22 1 0.03 (1,790) 1:A:175:LEU:HD21 1:A:185:ALA:H 5 0.03 (1,79) 1:A:175:LEU:HD21 1:A:185:ALA:H 5 0.03 (1,79) 1:A:175:LEU:HD22 1:A:185:ALA:H 5 0.03 (1,79) 1:A:175:LEU:HD23 1:A:185:ALA:H 5 0.03 (1,79) 1:A:175:LEU:HD21 1:A:185:ALA:H 16 0.03 (1,79) 1:A:175:LEU:HD22 1:A:185:ALA:H 16 0.03 (1,79) 1:A:175:LEU:HD22 1:A:185:ALA:H 16 0.03 (1,79) 1:A:167:ILE:H 1:A:191:LEU:HD11 17 0.03 (1,79) 1:A:167:ILE:H 1:A:191:LEU:HD12 17 0.03 (1,780) 1:A:167:ILE:H 1:A:191:LEU:HD13 | |
|--|--|
| (1,790) 1:A:84:ASN:H 1:A:85:LEU:HD21 1 0.03 (1,790) 1:A:84:ASN:H 1:A:85:LEU:HD22 1 0.03 (1,790) 1:A:84:ASN:H 1:A:85:LEU:HD23 1 0.03 (1,79) 1:A:175:LEU:HD21 1:A:185:ALA:H 5 0.03 (1,79) 1:A:175:LEU:HD22 1:A:185:ALA:H 5 0.03 (1,79) 1:A:175:LEU:HD23 1:A:185:ALA:H 5 0.03 (1,79) 1:A:175:LEU:HD21 1:A:185:ALA:H 16 0.03 (1,79) 1:A:175:LEU:HD22 1:A:185:ALA:H 16 0.03 (1,79) 1:A:175:LEU:HD22 1:A:185:ALA:H 16 0.03 (1,79) 1:A:175:LEU:HD22 1:A:185:ALA:H 16 0.03 (1,79) 1:A:175:LEU:HD23 1:A:185:ALA:H 16 0.03 (1,79) 1:A:167:ILE:H 1:A:1819:LEU:HD11 17 0.03 (1,780) 1:A:167:ILE:H 1:A:191:LEU:HD12 17 0.03 (1,779) 1:A:24:VAL:H 1:A:191:LEU:HD11 | |
| (1,790) 1:A:84:ASN:H 1:A:85:LEU:HD22 1 0.03 (1,790) 1:A:84:ASN:H 1:A:85:LEU:HD23 1 0.03 (1,79) 1:A:175:LEU:HD21 1:A:185:ALA:H 5 0.03 (1,79) 1:A:175:LEU:HD22 1:A:185:ALA:H 5 0.03 (1,79) 1:A:175:LEU:HD23 1:A:185:ALA:H 16 0.03 (1,79) 1:A:175:LEU:HD21 1:A:185:ALA:H 16 0.03 (1,79) 1:A:175:LEU:HD22 1:A:185:ALA:H 16 0.03 (1,79) 1:A:175:LEU:HD22 1:A:185:ALA:H 16 0.03 (1,79) 1:A:175:LEU:HD22 1:A:185:ALA:H 16 0.03 (1,79) 1:A:175:LEU:HD23 1:A:185:ALA:H 16 0.03 (1,79) 1:A:167:ILE:H 1:A:191:LEU:HD11 17 0.03 (1,780) 1:A:167:ILE:H 1:A:191:LEU:HD13 17 0.03 (1,779) 1:A:24:VAL:H 1:A:191:LEU:HD11 2 0.03 (1,779) 1:A:24:VAL:H 1:A:191:LEU:HD13 | |
| (1,790) 1:A:84:ASN:H 1:A:85:LEU:HD22 1 0.03 (1,790) 1:A:84:ASN:H 1:A:85:LEU:HD23 1 0.03 (1,79) 1:A:175:LEU:HD21 1:A:185:ALA:H 5 0.03 (1,79) 1:A:175:LEU:HD22 1:A:185:ALA:H 5 0.03 (1,79) 1:A:175:LEU:HD23 1:A:185:ALA:H 16 0.03 (1,79) 1:A:175:LEU:HD21 1:A:185:ALA:H 16 0.03 (1,79) 1:A:175:LEU:HD22 1:A:185:ALA:H 16 0.03 (1,79) 1:A:175:LEU:HD22 1:A:185:ALA:H 16 0.03 (1,79) 1:A:175:LEU:HD22 1:A:185:ALA:H 16 0.03 (1,79) 1:A:175:LEU:HD23 1:A:185:ALA:H 16 0.03 (1,79) 1:A:167:ILE:H 1:A:191:LEU:HD11 17 0.03 (1,780) 1:A:167:ILE:H 1:A:191:LEU:HD13 17 0.03 (1,779) 1:A:24:VAL:H 1:A:191:LEU:HD11 2 0.03 (1,779) 1:A:24:VAL:H 1:A:191:LEU:HD13 | |
| (1,79) 1:A:175:LEU:HD21 1:A:185:ALA:H 5 0.03 (1,79) 1:A:175:LEU:HD22 1:A:185:ALA:H 5 0.03 (1,79) 1:A:175:LEU:HD23 1:A:185:ALA:H 5 0.03 (1,79) 1:A:175:LEU:HD21 1:A:185:ALA:H 16 0.03 (1,79) 1:A:175:LEU:HD22 1:A:185:ALA:H 16 0.03 (1,79) 1:A:175:LEU:HD23 1:A:185:ALA:H 16 0.03 (1,79) 1:A:167:ILE:H 1:A:191:LEU:HD11 17 0.03 (1,780) 1:A:167:ILE:H 1:A:191:LEU:HD12 17 0.03 (1,780) 1:A:167:ILE:H 1:A:191:LEU:HD13 17 0.03 (1,779) 1:A:24:VAL:H 1:A:191:LEU:HD11 2 0.03 (1,779) 1:A:24:VAL:H 1:A:191:LEU:HD12 2 0.03 (1,779) 1:A:24:VAL:H 1:A:191:LEU:HD13 2 0.03 (1,778) 1:A:166:LEU:H 1:A:191:LEU:HD11 3 0.03 (1,778) 1:A:166:LEU:H 1:A:191:LEU:HD13 | |
| (1,79) 1:A:175:LEU:HD22 1:A:185:ALA:H 5 0.03 (1,79) 1:A:175:LEU:HD23 1:A:185:ALA:H 5 0.03 (1,79) 1:A:175:LEU:HD21 1:A:185:ALA:H 16 0.03 (1,79) 1:A:175:LEU:HD22 1:A:185:ALA:H 16 0.03 (1,79) 1:A:175:LEU:HD23 1:A:185:ALA:H 16 0.03 (1,780) 1:A:167:ILE:H 1:A:191:LEU:HD11 17 0.03 (1,780) 1:A:167:ILE:H 1:A:191:LEU:HD12 17 0.03 (1,780) 1:A:167:ILE:H 1:A:191:LEU:HD12 17 0.03 (1,780) 1:A:167:ILE:H 1:A:191:LEU:HD13 17 0.03 (1,779) 1:A:24:VAL:H 1:A:191:LEU:HD11 2 0.03 (1,779) 1:A:24:VAL:H 1:A:191:LEU:HD13 2 0.03 (1,779) 1:A:26:LEU:H 1:A:191:LEU:HD13 3 0.03 (1,778) 1:A:166:LEU:H 1:A:191:LEU:HD13 3 0.03 (1,777) 1:A:64:LEU:HD11 1:A:83:SER:H <td></td> | |
| (1,79) 1:A:175:LEU:HD23 1:A:185:ALA:H 5 0.03 (1,79) 1:A:175:LEU:HD21 1:A:185:ALA:H 16 0.03 (1,79) 1:A:175:LEU:HD22 1:A:185:ALA:H 16 0.03 (1,79) 1:A:175:LEU:HD23 1:A:185:ALA:H 16 0.03 (1,79) 1:A:167:ILE:H 1:A:191:LEU:HD11 17 0.03 (1,780) 1:A:167:ILE:H 1:A:191:LEU:HD12 17 0.03 (1,780) 1:A:167:ILE:H 1:A:191:LEU:HD13 17 0.03 (1,779) 1:A:24:VAL:H 1:A:191:LEU:HD11 2 0.03 (1,779) 1:A:24:VAL:H 1:A:191:LEU:HD12 2 0.03 (1,779) 1:A:166:LEU:H 1:A:191:LEU:HD13 2 0.03 (1,778) 1:A:166:LEU:H 1:A:191:LEU:HD11 3 0.03 (1,778) 1:A:166:LEU:H 1:A:191:LEU:HD13 3 0.03 (1,777) 1:A:64:LEU:HD11 1:A:83:SER:H 2 0.03 (1,777) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:83:SER:H | |
| (1,79) 1:A:175:LEU:HD21 1:A:185:ALA:H 16 0.03 (1,79) 1:A:175:LEU:HD22 1:A:185:ALA:H 16 0.03 (1,79) 1:A:175:LEU:HD23 1:A:185:ALA:H 16 0.03 (1,79) 1:A:167:ILE:H 1:A:191:LEU:HD11 17 0.03 (1,780) 1:A:167:ILE:H 1:A:191:LEU:HD12 17 0.03 (1,780) 1:A:167:ILE:H 1:A:191:LEU:HD13 17 0.03 (1,779) 1:A:24:VAL:H 1:A:191:LEU:HD11 2 0.03 (1,779) 1:A:24:VAL:H 1:A:191:LEU:HD12 2 0.03 (1,779) 1:A:166:LEU:H 1:A:191:LEU:HD13 2 0.03 (1,778) 1:A:166:LEU:H 1:A:191:LEU:HD11 3 0.03 (1,778) 1:A:166:LEU:H 1:A:191:LEU:HD13 3 0.03 (1,777) 1:A:64:LEU:HD11 1:A:83:SER:H 2 0.03 (1,777) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:83:SER:H 2 0.03 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD11 </td <td></td> | |
| (1,79) 1:A:175:LEU:HD22 1:A:185:ALA:H 16 0.03 (1,79) 1:A:175:LEU:HD23 1:A:185:ALA:H 16 0.03 (1,780) 1:A:167:ILE:H 1:A:191:LEU:HD11 17 0.03 (1,780) 1:A:167:ILE:H 1:A:191:LEU:HD12 17 0.03 (1,780) 1:A:167:ILE:H 1:A:191:LEU:HD13 17 0.03 (1,779) 1:A:24:VAL:H 1:A:191:LEU:HD11 2 0.03 (1,779) 1:A:24:VAL:H 1:A:191:LEU:HD12 2 0.03 (1,779) 1:A:166:LEU:H 1:A:191:LEU:HD13 2 0.03 (1,778) 1:A:166:LEU:H 1:A:191:LEU:HD11 3 0.03 (1,778) 1:A:166:LEU:H 1:A:191:LEU:HD12 3 0.03 (1,777) 1:A:64:LEU:HD11 1:A:83:SER:H 2 0.03 (1,777) 1:A:64:LEU:HD12 1:A:83:SER:H 2 0.03 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD11 3 0.03 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD | |
| (1,79) 1:A:175:LEU:HD23 1:A:185:ALA:H 16 0.03 (1,780) 1:A:167:ILE:H 1:A:191:LEU:HD11 17 0.03 (1,780) 1:A:167:ILE:H 1:A:191:LEU:HD12 17 0.03 (1,780) 1:A:167:ILE:H 1:A:191:LEU:HD13 17 0.03 (1,779) 1:A:24:VAL:H 1:A:191:LEU:HD11 2 0.03 (1,779) 1:A:24:VAL:H 1:A:191:LEU:HD12 2 0.03 (1,779) 1:A:24:VAL:H 1:A:191:LEU:HD13 2 0.03 (1,779) 1:A:24:VAL:H 1:A:191:LEU:HD13 2 0.03 (1,778) 1:A:166:LEU:H 1:A:191:LEU:HD11 3 0.03 (1,778) 1:A:166:LEU:H 1:A:191:LEU:HD12 3 0.03 (1,777) 1:A:64:LEU:HD11 1:A:83:SER:H 2 0.03 (1,777) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:83:SER:H 2 0.03 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD11 3 0.03 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD13 | |
| (1,780) 1:A:167:ILE:H 1:A:191:LEU:HD11 17 0.03 (1,780) 1:A:167:ILE:H 1:A:191:LEU:HD12 17 0.03 (1,780) 1:A:167:ILE:H 1:A:191:LEU:HD13 17 0.03 (1,779) 1:A:24:VAL:H 1:A:191:LEU:HD11 2 0.03 (1,779) 1:A:24:VAL:H 1:A:191:LEU:HD12 2 0.03 (1,779) 1:A:24:VAL:H 1:A:191:LEU:HD13 2 0.03 (1,778) 1:A:166:LEU:H 1:A:191:LEU:HD11 3 0.03 (1,778) 1:A:166:LEU:H 1:A:191:LEU:HD12 3 0.03 (1,778) 1:A:166:LEU:H 1:A:191:LEU:HD13 3 0.03 (1,777) 1:A:64:LEU:HD11 1:A:83:SER:H 2 0.03 (1,777) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:83:SER:H 2 0.03 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD11 3 0.03 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD13 3 0.03 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU: | |
| (1,780) 1:A:167:ILE:H 1:A:191:LEU:HD12 17 0.03 (1,780) 1:A:167:ILE:H 1:A:191:LEU:HD13 17 0.03 (1,779) 1:A:24:VAL:H 1:A:191:LEU:HD11 2 0.03 (1,779) 1:A:24:VAL:H 1:A:191:LEU:HD12 2 0.03 (1,779) 1:A:24:VAL:H 1:A:191:LEU:HD13 2 0.03 (1,779) 1:A:166:LEU:H 1:A:191:LEU:HD11 3 0.03 (1,778) 1:A:166:LEU:H 1:A:191:LEU:HD12 3 0.03 (1,778) 1:A:166:LEU:H 1:A:191:LEU:HD13 3 0.03 (1,777) 1:A:64:LEU:HD11 1:A:83:SER:H 2 0.03 (1,777) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:83:SER:H 2 0.03 (1,777) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD11 3 0.03 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD12 3 0.03 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD13 3 0.03 | |
| (1,780) 1:A:167:ILE:H 1:A:191:LEU:HD13 17 0.03 (1,779) 1:A:24:VAL:H 1:A:191:LEU:HD11 2 0.03 (1,779) 1:A:24:VAL:H 1:A:191:LEU:HD12 2 0.03 (1,779) 1:A:24:VAL:H 1:A:191:LEU:HD13 2 0.03 (1,778) 1:A:166:LEU:H 1:A:191:LEU:HD11 3 0.03 (1,778) 1:A:166:LEU:H 1:A:191:LEU:HD12 3 0.03 (1,778) 1:A:166:LEU:H 1:A:191:LEU:HD13 3 0.03 (1,778) 1:A:64:LEU:HD11 1:A:83:SER:H 2 0.03 (1,777) 1:A:64:LEU:HD12 1:A:83:SER:H 2 0.03 (1,777) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:83:SER:H 2 0.03 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD11 3 0.03 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD12 3 0.03 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD13 3 0.03 | |
| (1,779) 1:A:24:VAL:H 1:A:191:LEU:HD11 2 0.03 (1,779) 1:A:24:VAL:H 1:A:191:LEU:HD12 2 0.03 (1,779) 1:A:24:VAL:H 1:A:191:LEU:HD13 2 0.03 (1,778) 1:A:166:LEU:H 1:A:191:LEU:HD11 3 0.03 (1,778) 1:A:166:LEU:H 1:A:191:LEU:HD12 3 0.03 (1,778) 1:A:166:LEU:H 1:A:191:LEU:HD13 3 0.03 (1,777) 1:A:64:LEU:HD11 1:A:83:SER:H 2 0.03 (1,777) 1:A:64:LEU:HD12 1:A:83:SER:H 2 0.03 (1,777) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:83:SER:H 2 0.03 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD11 3 0.03 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD13 3 0.03 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD13 3 0.03 | |
| (1,779) 1:A:24:VAL:H 1:A:191:LEU:HD12 2 0.03 (1,779) 1:A:24:VAL:H 1:A:191:LEU:HD13 2 0.03 (1,778) 1:A:166:LEU:H 1:A:191:LEU:HD11 3 0.03 (1,778) 1:A:166:LEU:H 1:A:191:LEU:HD12 3 0.03 (1,778) 1:A:166:LEU:H 1:A:191:LEU:HD13 3 0.03 (1,777) 1:A:64:LEU:HD11 1:A:83:SER:H 2 0.03 (1,777) 1:A:64:LEU:HD12 1:A:83:SER:H 2 0.03 (1,777) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:83:SER:H 2 0.03 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD11 3 0.03 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD12 3 0.03 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD13 3 0.03 | |
| (1,779) 1:A:24:VAL:H 1:A:191:LEU:HD13 2 0.03 (1,778) 1:A:166:LEU:H 1:A:191:LEU:HD11 3 0.03 (1,778) 1:A:166:LEU:H 1:A:191:LEU:HD12 3 0.03 (1,778) 1:A:166:LEU:H 1:A:191:LEU:HD13 3 0.03 (1,777) 1:A:64:LEU:HD11 1:A:83:SER:H 2 0.03 (1,777) 1:A:64:LEU:HD12 1:A:83:SER:H 2 0.03 (1,777) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:83:SER:H 2 0.03 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD11 3 0.03 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD12 3 0.03 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD13 3 0.03 | |
| (1,778) 1:A:166:LEU:H 1:A:191:LEU:HD11 3 0.03 (1,778) 1:A:166:LEU:H 1:A:191:LEU:HD12 3 0.03 (1,778) 1:A:166:LEU:H 1:A:191:LEU:HD13 3 0.03 (1,777) 1:A:64:LEU:HD11 1:A:83:SER:H 2 0.03 (1,777) 1:A:64:LEU:HD12 1:A:83:SER:H 2 0.03 (1,777) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:83:SER:H 2 0.03 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD11 3 0.03 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD12 3 0.03 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD13 3 0.03 | |
| (1,778) 1:A:166:LEU:H 1:A:191:LEU:HD12 3 0.03 (1,778) 1:A:166:LEU:H 1:A:191:LEU:HD13 3 0.03 (1,777) 1:A:64:LEU:HD11 1:A:83:SER:H 2 0.03 (1,777) 1:A:64:LEU:HD12 1:A:83:SER:H 2 0.03 (1,777) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:83:SER:H 2 0.03 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD11 3 0.03 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD12 3 0.03 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD13 3 0.03 | |
| (1,778) 1:A:166:LEU:H 1:A:191:LEU:HD13 3 0.03 (1,777) 1:A:64:LEU:HD11 1:A:83:SER:H 2 0.03 (1,777) 1:A:64:LEU:HD12 1:A:83:SER:H 2 0.03 (1,777) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:83:SER:H 2 0.03 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD11 3 0.03 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD12 3 0.03 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD13 3 0.03 | |
| (1,777) 1:A:64:LEU:HD11 1:A:83:SER:H 2 0.03 (1,777) 1:A:64:LEU:HD12 1:A:83:SER:H 2 0.03 (1,777) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:83:SER:H 2 0.03 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD11 3 0.03 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD12 3 0.03 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD13 3 0.03 | |
| (1,777) 1:A:64:LEU:HD12 1:A:83:SER:H 2 0.03 (1,777) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:83:SER:H 2 0.03 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD11 3 0.03 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD12 3 0.03 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD13 3 0.03 | |
| (1,777) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:83:SER:H 2 0.03 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD11 3 0.03 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD12 3 0.03 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD13 3 0.03 | |
| (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD11 3 0.03 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD12 3 0.03 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD13 3 0.03 | |
| (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD12 3 0.03 (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD13 3 0.03 | |
| (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD13 3 0.03 | |
| (' ' ' | |
| (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD11 3 0.03 | |
| | |
| (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD12 3 0.03 | |
| (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD13 3 0.03 | |
| (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD11 3 0.03 | |
| (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD12 3 0.03 | |
| (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD13 3 0.03 | |
| (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD11 8 0.03 | |
| (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD12 8 0.03 | |
| (1,776) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:190:LEU:HD13 8 0.03 | |
| (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD11 8 0.03 | |
| (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD12 8 0.03 | |
| (1,776) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:190:LEU:HD13 8 0.03 | |
| (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD11 8 0.03 | |
| (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD12 8 0.03 | |
| (1,776) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:190:LEU:HD13 8 0.03 | |
| (1,773) 1:A:126:VAL:HG21 1:A:166:LEU:HD11 2 0.03 | |



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

| (1,773) 1:A:126 (1,773) 1:A:126 | 6:VAL:HG21 6:VAL:HG21 | 1:A:166:LEU:HD12 | 2 | 0.02 |
|------------------------------------|--------------------------|------------------|----|------|
| (1,773) 1:A:126 | 6:VAL:HG21 | | | 0.03 |
| ()) | | 1:A:166:LEU:HD13 | 2 | 0.03 |
| (1.772) 1 A 100 | 6:VAL:HG22 | 1:A:166:LEU:HD11 | 2 | 0.03 |
| (1,773) 1:A:126 | 6:VAL:HG22 | 1:A:166:LEU:HD12 | 2 | 0.03 |
| (1,773) 1:A:126 | 6:VAL:HG22 | 1:A:166:LEU:HD13 | 2 | 0.03 |
| (1,773) 1:A:126 | 6:VAL:HG23 | 1:A:166:LEU:HD11 | 2 | 0.03 |
| (1,773) 1:A:126 | 6:VAL:HG23 | 1:A:166:LEU:HD12 | 2 | 0.03 |
| (1,773) 1:A:126 | 6:VAL:HG23 | 1:A:166:LEU:HD13 | 2 | 0.03 |
| (1,773) 1:A:126 | 6:VAL:HG21 | 1:A:166:LEU:HD11 | 4 | 0.03 |
| (1,773) 1:A:126 | 6:VAL:HG21 | 1:A:166:LEU:HD12 | 4 | 0.03 |
| (1,773) 1:A:126 | 6:VAL:HG21 | 1:A:166:LEU:HD13 | 4 | 0.03 |
| (1,773) 1:A:126 | 6:VAL:HG22 | 1:A:166:LEU:HD11 | 4 | 0.03 |
| (1,773) 1:A:126 | 6:VAL:HG22 | 1:A:166:LEU:HD12 | 4 | 0.03 |
| (1,773) 1:A:126 | 6:VAL:HG22 | 1:A:166:LEU:HD13 | 4 | 0.03 |
| (1,773) 1:A:126 | 6:VAL:HG23 | 1:A:166:LEU:HD11 | 4 | 0.03 |
| (1,773) 1:A:126 | 6:VAL:HG23 | 1:A:166:LEU:HD12 | 4 | 0.03 |
| (1,773) 1:A:126 | 5:VAL:HG23 | 1:A:166:LEU:HD13 | 4 | 0.03 |
| (1,770) 1:A:81 | :VAL:HG11 | 1:A:85:LEU:HD21 | 8 | 0.03 |
| (1,770) 1:A:81 | :VAL:HG11 | 1:A:85:LEU:HD22 | 8 | 0.03 |
| (1,770) 1:A:81 | :VAL:HG11 | 1:A:85:LEU:HD23 | 8 | 0.03 |
| (1,770) 1:A:81 | :VAL:HG12 | 1:A:85:LEU:HD21 | 8 | 0.03 |
| (1,770) 1:A:81 | :VAL:HG12 | 1:A:85:LEU:HD22 | 8 | 0.03 |
| (1,770) 1:A:81 | :VAL:HG12 | 1:A:85:LEU:HD23 | 8 | 0.03 |
| (1,770) 1:A:81 | :VAL:HG13 | 1:A:85:LEU:HD21 | 8 | 0.03 |
| (1,770) 1:A:81 | :VAL:HG13 | 1:A:85:LEU:HD22 | 8 | 0.03 |
| (1,770) 1:A:81 | :VAL:HG13 | 1:A:85:LEU:HD23 | 8 | 0.03 |
| (1,741) 1:A:47 | :LEU:HD21 | 1:A:99:VAL:HG21 | 18 | 0.03 |
| (1,741) 1:A:47 | :LEU:HD21 | 1:A:99:VAL:HG22 | 18 | 0.03 |
| (1,741) 1:A:47 | :LEU:HD21 | 1:A:99:VAL:HG23 | 18 | 0.03 |
| (1,741) 1:A:47 | :LEU:HD22 | 1:A:99:VAL:HG21 | 18 | 0.03 |
| (1,741) 1:A:47 | :LEU:HD22 | 1:A:99:VAL:HG22 | 18 | 0.03 |
| (1,741) 1:A:47 | :LEU:HD22 | 1:A:99:VAL:HG23 | 18 | 0.03 |
| | :LEU:HD23 | 1:A:99:VAL:HG21 | 18 | 0.03 |
| | :LEU:HD23 | 1:A:99:VAL:HG22 | 18 | 0.03 |
| | :LEU:HD23 | 1:A:99:VAL:HG23 | 18 | 0.03 |
| (1,732) 1:A:147 | 7:LEU:HD21 | 1:A:150:LEU:HD21 | 12 | 0.03 |
| (1,732) 1:A:147 | 7:LEU:HD21 | 1:A:150:LEU:HD22 | 12 | 0.03 |
| · · · · · | 7:LEU:HD21 | 1:A:150:LEU:HD23 | 12 | 0.03 |
| | 7:LEU:HD22 | 1:A:150:LEU:HD21 | 12 | 0.03 |
| | 7:LEU:HD22 | 1:A:150:LEU:HD22 | 12 | 0.03 |
| (1,732) 1:A:147 | 7:LEU:HD22 | 1:A:150:LEU:HD23 | 12 | 0.03 |
| (1,732) 1:A:147 | 7:LEU:HD23 | 1:A:150:LEU:HD21 | 12 | 0.03 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD23 | 1:A:150:LEU:HD22 | 12 | 0.03 |
| (1,732) | 1:A:147:LEU:HD23 | 1:A:150:LEU:HD23 | 12 | 0.03 |
| (1,702) | 1:A:137:LEU:HD11 | 1:A:147:LEU:HD11 | 16 | 0.03 |
| (1,702) | 1:A:137:LEU:HD11 | 1:A:147:LEU:HD12 | 16 | 0.03 |
| (1,702) | 1:A:137:LEU:HD11 | 1:A:147:LEU:HD13 | 16 | 0.03 |
| (1,702) | 1:A:137:LEU:HD12 | 1:A:147:LEU:HD11 | 16 | 0.03 |
| (1,702) | 1:A:137:LEU:HD12 | 1:A:147:LEU:HD12 | 16 | 0.03 |
| (1,702) | 1:A:137:LEU:HD12 | 1:A:147:LEU:HD13 | 16 | 0.03 |
| (1,702) | 1:A:137:LEU:HD13 | 1:A:147:LEU:HD11 | 16 | 0.03 |
| (1,702) | 1:A:137:LEU:HD13 | 1:A:147:LEU:HD12 | 16 | 0.03 |
| (1,702) | 1:A:137:LEU:HD13 | 1:A:147:LEU:HD13 | 16 | 0.03 |
| (1,674) | 1:A:57:VAL:HG11 | 1:A:81:VAL:HG11 | 17 | 0.03 |
| (1,674) | 1:A:57:VAL:HG11 | 1:A:81:VAL:HG12 | 17 | 0.03 |
| (1,674) | 1:A:57:VAL:HG11 | 1:A:81:VAL:HG13 | 17 | 0.03 |
| (1,674) | 1:A:57:VAL:HG12 | 1:A:81:VAL:HG11 | 17 | 0.03 |
| (1,674) | 1:A:57:VAL:HG12 | 1:A:81:VAL:HG12 | 17 | 0.03 |
| (1,674) | 1:A:57:VAL:HG12 | 1:A:81:VAL:HG13 | 17 | 0.03 |
| (1,674) | 1:A:57:VAL:HG13 | 1:A:81:VAL:HG11 | 17 | 0.03 |
| (1,674) | 1:A:57:VAL:HG13 | 1:A:81:VAL:HG12 | 17 | 0.03 |
| (1,674) | 1:A:57:VAL:HG13 | 1:A:81:VAL:HG13 | 17 | 0.03 |
| (1,669) | 1:A:109:LEU:HD21 | 1:A:113:LEU:HD11 | 7 | 0.03 |
| (1,669) | 1:A:109:LEU:HD21 | 1:A:113:LEU:HD12 | 7 | 0.03 |
| (1,669) | 1:A:109:LEU:HD21 | 1:A:113:LEU:HD13 | 7 | 0.03 |
| (1,669) | 1:A:109:LEU:HD22 | 1:A:113:LEU:HD11 | 7 | 0.03 |
| (1,669) | 1:A:109:LEU:HD22 | 1:A:113:LEU:HD12 | 7 | 0.03 |
| (1,669) | 1:A:109:LEU:HD22 | 1:A:113:LEU:HD13 | 7 | 0.03 |
| (1,669) | 1:A:109:LEU:HD23 | 1:A:113:LEU:HD11 | 7 | 0.03 |
| (1,669) | 1:A:109:LEU:HD23 | 1:A:113:LEU:HD12 | 7 | 0.03 |
| (1,669) | 1:A:109:LEU:HD23 | 1:A:113:LEU:HD13 | 7 | 0.03 |
| (1,665) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:121:LEU:HD21 | 18 | 0.03 |
| (1,665) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:121:LEU:HD22 | 18 | 0.03 |
| (1,665) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:121:LEU:HD23 | 18 | 0.03 |
| (1,665) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:121:LEU:HD21 | 18 | 0.03 |
| (1,665) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:121:LEU:HD22 | 18 | 0.03 |
| (1,665) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:121:LEU:HD23 | 18 | 0.03 |
| (1,665) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:121:LEU:HD21 | 18 | 0.03 |
| (1,665) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:121:LEU:HD22 | 18 | 0.03 |
| (1,665) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:121:LEU:HD23 | 18 | 0.03 |
| (1,660) | 1:A:162:SER:H | 1:A:165:TRP:HE1 | 19 | 0.03 |
| (1,658) | 1:A:133:ALA:H | 1:A:186:ALA:H | 19 | 0.03 |
| (1,635) | 1:A:113:LEU:H | 1:A:114:TYR:H | 12 | 0.03 |
| (1,632) | 1:A:146:ASP:H | 1:A:150:LEU:H | 18 | 0.03 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,628) | 1:A:145:LYS:H | 1:A:147:LEU:H | 4 | 0.03 |
| (1,625) | 1:A:135:GLU:H | 1:A:137:LEU:H | 20 | 0.03 |
| (1,622) | 1:A:133:ALA:H | 1:A:137:LEU:H | 7 | 0.03 |
| (1,603) | 1:A:58:ASP:H | 1:A:81:VAL:H | 17 | 0.03 |
| (1,594) | 1:A:152:LYS:H | 1:A:156:LEU:H | 19 | 0.03 |
| (1,592) | 1:A:124:GLY:H | 1:A:195:LEU:H | 7 | 0.03 |
| (1,592) | 1:A:124:GLY:H | 1:A:195:LEU:H | 19 | 0.03 |
| (1,570) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:145:LYS:H | 8 | 0.03 |
| (1,570) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:145:LYS:H | 8 | 0.03 |
| (1,570) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:145:LYS:H | 8 | 0.03 |
| (1,570) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:145:LYS:H | 15 | 0.03 |
| (1,570) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:145:LYS:H | 15 | 0.03 |
| (1,570) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:145:LYS:H | 15 | 0.03 |
| (1,567) | 1:A:70:LEU:HD11 | 1:A:74:LYS:H | 7 | 0.03 |
| (1,567) | 1:A:70:LEU:HD12 | 1:A:74:LYS:H | 7 | 0.03 |
| (1,567) | 1:A:70:LEU:HD13 | 1:A:74:LYS:H | 7 | 0.03 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:85:LEU:HD11 | 14 | 0.03 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:85:LEU:HD12 | 14 | 0.03 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:85:LEU:HD13 | 14 | 0.03 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:85:LEU:HD11 | 14 | 0.03 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:85:LEU:HD12 | 14 | 0.03 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:85:LEU:HD13 | 14 | 0.03 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:85:LEU:HD11 | 14 | 0.03 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:85:LEU:HD12 | 14 | 0.03 |
| (1,566) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:85:LEU:HD13 | 14 | 0.03 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD11 | 1:A:54:VAL:HG21 | 17 | 0.03 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD11 | 1:A:54:VAL:HG22 | 17 | 0.03 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD11 | 1:A:54:VAL:HG23 | 17 | 0.03 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD12 | 1:A:54:VAL:HG21 | 17 | 0.03 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD12 | 1:A:54:VAL:HG22 | 17 | 0.03 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD12 | 1:A:54:VAL:HG23 | 17 | 0.03 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD13 | 1:A:54:VAL:HG21 | 17 | 0.03 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD13 | 1:A:54:VAL:HG22 | 17 | 0.03 |
| (1,563) | 1:A:50:LEU:HD13 | 1:A:54:VAL:HG23 | 17 | 0.03 |
| (1,560) | 1:A:47:LEU:HD21 | 1:A:50:LEU:HD21 | 5 | 0.03 |
| (1,560) | 1:A:47:LEU:HD21 | 1:A:50:LEU:HD22 | 5 | 0.03 |
| (1,560) | 1:A:47:LEU:HD21 | 1:A:50:LEU:HD23 | 5 | 0.03 |
| (1,560) | 1:A:47:LEU:HD22 | 1:A:50:LEU:HD21 | 5 | 0.03 |
| (1,560) | 1:A:47:LEU:HD22 | 1:A:50:LEU:HD22 | 5 | 0.03 |
| (1,560) | 1:A:47:LEU:HD22 | 1:A:50:LEU:HD23 | 5 | 0.03 |
| (1,560) | 1:A:47:LEU:HD23 | 1:A:50:LEU:HD21 | 5 | 0.03 |
| (1,560) | 1:A:47:LEU:HD23 | 1:A:50:LEU:HD22 | 5 | 0.03 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,560) | 1:A:47:LEU:HD23 | 1:A:50:LEU:HD23 | 5 | 0.03 |
| (1,556) | 1:A:185:ALA:H | 1:A:187:LEU:HD21 | 19 | 0.03 |
| (1,556) | 1:A:185:ALA:H | 1:A:187:LEU:HD22 | 19 | 0.03 |
| (1,556) | 1:A:185:ALA:H | 1:A:187:LEU:HD23 | 19 | 0.03 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD21 | 1:A:81:VAL:HG11 | 11 | 0.03 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD21 | 1:A:81:VAL:HG12 | 11 | 0.03 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD21 | 1:A:81:VAL:HG13 | 11 | 0.03 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD22 | 1:A:81:VAL:HG11 | 11 | 0.03 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD22 | 1:A:81:VAL:HG12 | 11 | 0.03 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD22 | 1:A:81:VAL:HG13 | 11 | 0.03 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD23 | 1:A:81:VAL:HG11 | 11 | 0.03 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD23 | 1:A:81:VAL:HG12 | 11 | 0.03 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD23 | 1:A:81:VAL:HG13 | 11 | 0.03 |
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD11 | 1:A:163:LEU:HD21 | 18 | 0.03 |
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD11 | 1:A:163:LEU:HD22 | 18 | 0.03 |
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD11 | 1:A:163:LEU:HD23 | 18 | 0.03 |
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD12 | 1:A:163:LEU:HD21 | 18 | 0.03 |
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD12 | 1:A:163:LEU:HD22 | 18 | 0.03 |
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD12 | 1:A:163:LEU:HD23 | 18 | 0.03 |
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD13 | 1:A:163:LEU:HD21 | 18 | 0.03 |
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD13 | 1:A:163:LEU:HD22 | 18 | 0.03 |
| (1,546) | 1:A:121:LEU:HD13 | 1:A:163:LEU:HD23 | 18 | 0.03 |
| (1,543) | 1:A:129:LEU:HD11 | 1:A:156:LEU:HD11 | 1 | 0.03 |
| (1,543) | 1:A:129:LEU:HD11 | 1:A:156:LEU:HD12 | 1 | 0.03 |
| (1,543) | 1:A:129:LEU:HD11 | 1:A:156:LEU:HD13 | 1 | 0.03 |
| (1,543) | 1:A:129:LEU:HD12 | 1:A:156:LEU:HD11 | 1 | 0.03 |
| (1,543) | 1:A:129:LEU:HD12 | 1:A:156:LEU:HD12 | 1 | 0.03 |
| (1,543) | 1:A:129:LEU:HD12 | 1:A:156:LEU:HD13 | 1 | 0.03 |
| (1,543) | 1:A:129:LEU:HD13 | 1:A:156:LEU:HD11 | 1 | 0.03 |
| (1,543) | 1:A:129:LEU:HD13 | 1:A:156:LEU:HD12 | 1 | 0.03 |
| (1,543) | 1:A:129:LEU:HD13 | 1:A:156:LEU:HD13 | 1 | 0.03 |
| (1,543) | 1:A:129:LEU:HD11 | 1:A:156:LEU:HD11 | 2 | 0.03 |
| (1,543) | 1:A:129:LEU:HD11 | 1:A:156:LEU:HD12 | 2 | 0.03 |
| (1,543) | 1:A:129:LEU:HD11 | 1:A:156:LEU:HD13 | 2 | 0.03 |
| (1,543) | 1:A:129:LEU:HD12 | 1:A:156:LEU:HD11 | 2 | 0.03 |
| (1,543) | 1:A:129:LEU:HD12 | 1:A:156:LEU:HD12 | 2 | 0.03 |
| (1,543) | 1:A:129:LEU:HD12 | 1:A:156:LEU:HD13 | 2 | 0.03 |
| (1,543) | 1:A:129:LEU:HD13 | 1:A:156:LEU:HD11 | 2 | 0.03 |
| (1,543) | 1:A:129:LEU:HD13 | 1:A:156:LEU:HD12 | 2 | 0.03 |
| (1,543) | 1:A:129:LEU:HD13 | 1:A:156:LEU:HD13 | 2 | 0.03 |
| (1,510) | 1:A:137:LEU:HD11 | 1:A:150:LEU:H | 14 | 0.03 |
| (1,510) | 1:A:137:LEU:HD12 | 1:A:150:LEU:H | 14 | 0.03 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,510) | 1:A:137:LEU:HD13 | 1:A:150:LEU:H | 14 | 0.03 |
| (1,507) | 1:A:37:ALA:H | 1:A:57:VAL:HG21 | 1 | 0.03 |
| (1,507) | 1:A:37:ALA:H | 1:A:57:VAL:HG22 | 1 | 0.03 |
| (1,507) | 1:A:37:ALA:H | 1:A:57:VAL:HG23 | 1 | 0.03 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD21 | 1:A:160:LEU:HD11 | 3 | 0.03 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD21 | 1:A:160:LEU:HD12 | 3 | 0.03 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD21 | 1:A:160:LEU:HD13 | 3 | 0.03 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD22 | 1:A:160:LEU:HD11 | 3 | 0.03 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD22 | 1:A:160:LEU:HD12 | 3 | 0.03 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD22 | 1:A:160:LEU:HD13 | 3 | 0.03 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD23 | 1:A:160:LEU:HD11 | 3 | 0.03 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD23 | 1:A:160:LEU:HD12 | 3 | 0.03 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD23 | 1:A:160:LEU:HD13 | 3 | 0.03 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD21 | 1:A:160:LEU:HD11 | 7 | 0.03 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD21 | 1:A:160:LEU:HD12 | 7 | 0.03 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD21 | 1:A:160:LEU:HD13 | 7 | 0.03 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD22 | 1:A:160:LEU:HD11 | 7 | 0.03 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD22 | 1:A:160:LEU:HD12 | 7 | 0.03 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD22 | 1:A:160:LEU:HD13 | 7 | 0.03 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD23 | 1:A:160:LEU:HD11 | 7 | 0.03 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD23 | 1:A:160:LEU:HD12 | 7 | 0.03 |
| (1,498) | 1:A:156:LEU:HD23 | 1:A:160:LEU:HD13 | 7 | 0.03 |
| (1,497) | 1:A:129:LEU:HD21 | 1:A:156:LEU:HD21 | 4 | 0.03 |
| (1,497) | 1:A:129:LEU:HD21 | 1:A:156:LEU:HD22 | 4 | 0.03 |
| (1,497) | 1:A:129:LEU:HD21 | 1:A:156:LEU:HD23 | 4 | 0.03 |
| (1,497) | 1:A:129:LEU:HD22 | 1:A:156:LEU:HD21 | 4 | 0.03 |
| (1,497) | 1:A:129:LEU:HD22 | 1:A:156:LEU:HD22 | 4 | 0.03 |
| (1,497) | 1:A:129:LEU:HD22 | 1:A:156:LEU:HD23 | 4 | 0.03 |
| (1,497) | 1:A:129:LEU:HD23 | 1:A:156:LEU:HD21 | 4 | 0.03 |
| (1,497) | 1:A:129:LEU:HD23 | 1:A:156:LEU:HD22 | 4 | 0.03 |
| (1,497) | 1:A:129:LEU:HD23 | 1:A:156:LEU:HD23 | 4 | 0.03 |
| (1,497) | 1:A:129:LEU:HD21 | 1:A:156:LEU:HD21 | 14 | 0.03 |
| (1,497) | 1:A:129:LEU:HD21 | 1:A:156:LEU:HD22 | 14 | 0.03 |
| (1,497) | 1:A:129:LEU:HD21 | 1:A:156:LEU:HD23 | 14 | 0.03 |
| (1,497) | 1:A:129:LEU:HD22 | 1:A:156:LEU:HD21 | 14 | 0.03 |
| (1,497) | 1:A:129:LEU:HD22 | 1:A:156:LEU:HD22 | 14 | 0.03 |
| (1,497) | 1:A:129:LEU:HD22 | 1:A:156:LEU:HD23 | 14 | 0.03 |
| (1,497) | 1:A:129:LEU:HD23 | 1:A:156:LEU:HD21 | 14 | 0.03 |
| (1,497) | 1:A:129:LEU:HD23 | 1:A:156:LEU:HD22 | 14 | 0.03 |
| (1,497) | 1:A:129:LEU:HD23 | 1:A:156:LEU:HD23 | 14 | 0.03 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:109:LEU:HD21 | 1 | 0.03 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:109:LEU:HD22 | 1 | 0.03 |



Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:109:LEU:HD23 | 1 | 0.03 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:109:LEU:HD21 | 1 | 0.03 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:109:LEU:HD22 | 1 | 0.03 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:109:LEU:HD23 | 1 | 0.03 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:109:LEU:HD21 | 1 | 0.03 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:109:LEU:HD22 | 1 | 0.03 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:109:LEU:HD23 | 1 | 0.03 |
| (1,462) | 1:A:129:LEU:HD11 | 1:A:153:LEU:HD21 | 15 | 0.03 |
| (1,462) | 1:A:129:LEU:HD11 | 1:A:153:LEU:HD22 | 15 | 0.03 |
| (1,462) | 1:A:129:LEU:HD11 | 1:A:153:LEU:HD23 | 15 | 0.03 |
| (1,462) | 1:A:129:LEU:HD12 | 1:A:153:LEU:HD21 | 15 | 0.03 |
| (1,462) | 1:A:129:LEU:HD12 | 1:A:153:LEU:HD22 | 15 | 0.03 |
| (1,462) | 1:A:129:LEU:HD12 | 1:A:153:LEU:HD23 | 15 | 0.03 |
| (1,462) | 1:A:129:LEU:HD13 | 1:A:153:LEU:HD21 | 15 | 0.03 |
| (1,462) | 1:A:129:LEU:HD13 | 1:A:153:LEU:HD22 | 15 | 0.03 |
| (1,462) | 1:A:129:LEU:HD13 | 1:A:153:LEU:HD23 | 15 | 0.03 |
| (1,455) | 1:A:121:LEU:HD21 | 1:A:160:LEU:HD21 | 13 | 0.03 |
| (1,455) | 1:A:121:LEU:HD21 | 1:A:160:LEU:HD22 | 13 | 0.03 |
| (1,455) | 1:A:121:LEU:HD21 | 1:A:160:LEU:HD23 | 13 | 0.03 |
| (1,455) | 1:A:121:LEU:HD22 | 1:A:160:LEU:HD21 | 13 | 0.03 |
| (1,455) | 1:A:121:LEU:HD22 | 1:A:160:LEU:HD22 | 13 | 0.03 |
| (1,455) | 1:A:121:LEU:HD22 | 1:A:160:LEU:HD23 | 13 | 0.03 |
| (1,455) | 1:A:121:LEU:HD23 | 1:A:160:LEU:HD21 | 13 | 0.03 |
| (1,455) | 1:A:121:LEU:HD23 | 1:A:160:LEU:HD22 | 13 | 0.03 |
| (1,455) | 1:A:121:LEU:HD23 | 1:A:160:LEU:HD23 | 13 | 0.03 |
| (1,450) | 1:A:21:LEU:HD11 | 1:A:47:LEU:HD21 | 1 | 0.03 |
| (1,450) | 1:A:21:LEU:HD11 | 1:A:47:LEU:HD22 | 1 | 0.03 |
| (1,450) | 1:A:21:LEU:HD11 | 1:A:47:LEU:HD23 | 1 | 0.03 |
| (1,450) | 1:A:21:LEU:HD12 | 1:A:47:LEU:HD21 | 1 | 0.03 |
| (1,450) | 1:A:21:LEU:HD12 | 1:A:47:LEU:HD22 | 1 | 0.03 |
| (1,450) | 1:A:21:LEU:HD12 | 1:A:47:LEU:HD23 | 1 | 0.03 |
| (1,450) | 1:A:21:LEU:HD13 | 1:A:47:LEU:HD21 | 1 | 0.03 |
| (1,450) | 1:A:21:LEU:HD13 | 1:A:47:LEU:HD22 | 1 | 0.03 |
| (1,450) | 1:A:21:LEU:HD13 | 1:A:47:LEU:HD23 | 1 | 0.03 |
| (1,447) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:57:VAL:HG21 | 11 | 0.03 |
| (1,447) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:57:VAL:HG22 | 11 | 0.03 |
| (1,447) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:57:VAL:HG23 | 11 | 0.03 |
| (1,447) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:57:VAL:HG21 | 11 | 0.03 |
| (1,447) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:57:VAL:HG22 | 11 | 0.03 |
| (1,447) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:57:VAL:HG23 | 11 | 0.03 |
| (1,447) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:57:VAL:HG21 | 11 | 0.03 |
| (1,447) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:57:VAL:HG22 | 11 | 0.03 |



Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|-----------------|------------------|-------|---------------|
| (1,447) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:57:VAL:HG23 | 11 | 0.03 |
| | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:36:LEU:HD21 | 3 | 0.03 |
| (1,446) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:36:LEU:HD22 | 3 | 0.03 |
| (1,446) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:36:LEU:HD23 | 3 | 0.03 |
| (1,446) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:36:LEU:HD21 | 3 | 0.03 |
| (1,446) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:36:LEU:HD22 | 3 | 0.03 |
| (1,446) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:36:LEU:HD23 | 3 | 0.03 |
| (1,446) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:36:LEU:HD21 | 3 | 0.03 |
| (1,446) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:36:LEU:HD22 | 3 | 0.03 |
| (1,446) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:36:LEU:HD23 | 3 | 0.03 |
| (1,446) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:36:LEU:HD21 | 17 | 0.03 |
| (1,446) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:36:LEU:HD22 | 17 | 0.03 |
| (1,446) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:36:LEU:HD23 | 17 | 0.03 |
| (1,446) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:36:LEU:HD21 | 17 | 0.03 |
| (1,446) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:36:LEU:HD22 | 17 | 0.03 |
| (1,446) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:36:LEU:HD23 | 17 | 0.03 |
| (1,446) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:36:LEU:HD21 | 17 | 0.03 |
| (1,446) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:36:LEU:HD22 | 17 | 0.03 |
| (1,446) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:36:LEU:HD23 | 17 | 0.03 |
| (1,425) | 1:A:24:VAL:HG11 | 1:A:191:LEU:HD21 | 2 | 0.03 |
| (1,425) | 1:A:24:VAL:HG11 | 1:A:191:LEU:HD22 | 2 | 0.03 |
| (1,425) | 1:A:24:VAL:HG11 | 1:A:191:LEU:HD23 | 2 | 0.03 |
| (1,425) | 1:A:24:VAL:HG12 | 1:A:191:LEU:HD21 | 2 | 0.03 |
| (1,425) | 1:A:24:VAL:HG12 | 1:A:191:LEU:HD22 | 2 | 0.03 |
| (1,425) | 1:A:24:VAL:HG12 | 1:A:191:LEU:HD23 | 2 | 0.03 |
| (1,425) | 1:A:24:VAL:HG13 | 1:A:191:LEU:HD21 | 2 | 0.03 |
| (1,425) | 1:A:24:VAL:HG13 | 1:A:191:LEU:HD22 | 2 | 0.03 |
| (1,425) | 1:A:24:VAL:HG13 | 1:A:191:LEU:HD23 | 2 | 0.03 |
| (1,422) | 1:A:47:LEU:HD11 | 1:A:99:VAL:HG11 | 20 | 0.03 |
| (1,422) | 1:A:47:LEU:HD11 | 1:A:99:VAL:HG12 | 20 | 0.03 |
| (1,422) | 1:A:47:LEU:HD11 | 1:A:99:VAL:HG13 | 20 | 0.03 |
| (1,422) | 1:A:47:LEU:HD12 | 1:A:99:VAL:HG11 | 20 | 0.03 |
| (1,422) | 1:A:47:LEU:HD12 | 1:A:99:VAL:HG12 | 20 | 0.03 |
| (1,422) | 1:A:47:LEU:HD12 | 1:A:99:VAL:HG13 | 20 | 0.03 |
| (1,422) | 1:A:47:LEU:HD13 | 1:A:99:VAL:HG11 | 20 | 0.03 |
| (1,422) | 1:A:47:LEU:HD13 | 1:A:99:VAL:HG12 | 20 | 0.03 |
| (1,422) | 1:A:47:LEU:HD13 | 1:A:99:VAL:HG13 | 20 | 0.03 |
| (1,420) | 1:A:171:LEU:H | 1:A:171:LEU:HD21 | 14 | 0.03 |
| (1,420) | 1:A:171:LEU:H | 1:A:171:LEU:HD22 | 14 | 0.03 |
| (1,420) | 1:A:171:LEU:H | 1:A:171:LEU:HD23 | 14 | 0.03 |
| (1,420) | 1:A:171:LEU:H | 1:A:171:LEU:HD21 | 20 | 0.03 |
| (1,420) | 1:A:171:LEU:H | 1:A:171:LEU:HD22 | 20 | 0.03 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,420) | 1:A:171:LEU:H | 1:A:171:LEU:HD23 | 20 | 0.03 |
| (1,407) | 1:A:126:VAL:HG11 | 1:A:163:LEU:HD21 | 17 | 0.03 |
| (1,407) | 1:A:126:VAL:HG11 | 1:A:163:LEU:HD22 | 17 | 0.03 |
| (1,407) | 1:A:126:VAL:HG11 | 1:A:163:LEU:HD23 | 17 | 0.03 |
| (1,407) | 1:A:126:VAL:HG12 | 1:A:163:LEU:HD21 | 17 | 0.03 |
| (1,407) | 1:A:126:VAL:HG12 | 1:A:163:LEU:HD22 | 17 | 0.03 |
| (1,407) | 1:A:126:VAL:HG12 | 1:A:163:LEU:HD23 | 17 | 0.03 |
| (1,407) | 1:A:126:VAL:HG13 | 1:A:163:LEU:HD21 | 17 | 0.03 |
| (1,407) | 1:A:126:VAL:HG13 | 1:A:163:LEU:HD22 | 17 | 0.03 |
| (1,407) | 1:A:126:VAL:HG13 | 1:A:163:LEU:HD23 | 17 | 0.03 |
| (1,407) | 1:A:126:VAL:HG11 | 1:A:163:LEU:HD21 | 20 | 0.03 |
| (1,407) | 1:A:126:VAL:HG11 | 1:A:163:LEU:HD22 | 20 | 0.03 |
| (1,407) | 1:A:126:VAL:HG11 | 1:A:163:LEU:HD23 | 20 | 0.03 |
| (1,407) | 1:A:126:VAL:HG12 | 1:A:163:LEU:HD21 | 20 | 0.03 |
| (1,407) | 1:A:126:VAL:HG12 | 1:A:163:LEU:HD22 | 20 | 0.03 |
| (1,407) | 1:A:126:VAL:HG12 | 1:A:163:LEU:HD23 | 20 | 0.03 |
| (1,407) | 1:A:126:VAL:HG13 | 1:A:163:LEU:HD21 | 20 | 0.03 |
| (1,407) | 1:A:126:VAL:HG13 | 1:A:163:LEU:HD22 | 20 | 0.03 |
| (1,407) | 1:A:126:VAL:HG13 | 1:A:163:LEU:HD23 | 20 | 0.03 |
| (1,399) | 1:A:34:LEU:H | 1:A:99:VAL:HG21 | 1 | 0.03 |
| (1,399) | 1:A:34:LEU:H | 1:A:99:VAL:HG22 | 1 | 0.03 |
| (1,399) | 1:A:34:LEU:H | 1:A:99:VAL:HG23 | 1 | 0.03 |
| (1,399) | 1:A:34:LEU:H | 1:A:99:VAL:HG21 | 11 | 0.03 |
| (1,399) | 1:A:34:LEU:H | 1:A:99:VAL:HG22 | 11 | 0.03 |
| (1,399) | 1:A:34:LEU:H | 1:A:99:VAL:HG23 | 11 | 0.03 |
| (1,391) | 1:A:58:ASP:H | 1:A:64:LEU:HD21 | 9 | 0.03 |
| (1,391) | 1:A:58:ASP:H | 1:A:64:LEU:HD22 | 9 | 0.03 |
| (1,391) | 1:A:58:ASP:H | 1:A:64:LEU:HD23 | 9 | 0.03 |
| (1,386) | 1:A:50:LEU:H | 1:A:76:VAL:HG21 | 7 | 0.03 |
| (1,386) | 1:A:50:LEU:H | 1:A:76:VAL:HG22 | 7 | 0.03 |
| (1,386) | 1:A:50:LEU:H | 1:A:76:VAL:HG23 | 7 | 0.03 |
| (1,380) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:98:ILE:HD11 | 15 | 0.03 |
| (1,380) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:98:ILE:HD12 | 15 | 0.03 |
| (1,380) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:98:ILE:HD13 | 15 | 0.03 |
| (1,380) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:98:ILE:HD11 | 15 | 0.03 |
| (1,380) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:98:ILE:HD12 | 15 | 0.03 |
| (1,380) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:98:ILE:HD13 | 15 | 0.03 |
| (1,380) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:98:ILE:HD11 | 15 | 0.03 |
| (1,380) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:98:ILE:HD12 | 15 | 0.03 |
| (1,380) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:98:ILE:HD13 | 15 | 0.03 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD11 | 1:A:190:LEU:HD11 | 14 | 0.03 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD11 | 1:A:190:LEU:HD12 | 14 | 0.03 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD11 | 1:A:190:LEU:HD13 | 14 | 0.03 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD12 | 1:A:190:LEU:HD11 | 14 | 0.03 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD12 | 1:A:190:LEU:HD12 | 14 | 0.03 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD12 | 1:A:190:LEU:HD13 | 14 | 0.03 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD13 | 1:A:190:LEU:HD11 | 14 | 0.03 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD13 | 1:A:190:LEU:HD12 | 14 | 0.03 |
| (1,379) | 1:A:188:ILE:HD13 | 1:A:190:LEU:HD13 | 14 | 0.03 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG21 | 1:A:128:ILE:HD11 | 3 | 0.03 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG21 | 1:A:128:ILE:HD12 | 3 | 0.03 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG21 | 1:A:128:ILE:HD13 | 3 | 0.03 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG22 | 1:A:128:ILE:HD11 | 3 | 0.03 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG22 | 1:A:128:ILE:HD12 | 3 | 0.03 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG22 | 1:A:128:ILE:HD13 | 3 | 0.03 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG23 | 1:A:128:ILE:HD11 | 3 | 0.03 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG23 | 1:A:128:ILE:HD12 | 3 | 0.03 |
| (1,368) | 1:A:24:VAL:HG23 | 1:A:128:ILE:HD13 | 3 | 0.03 |
| (1,361) | 1:A:72:GLN:H | 1:A:78:ILE:HD11 | 4 | 0.03 |
| (1,361) | 1:A:72:GLN:H | 1:A:78:ILE:HD12 | 4 | 0.03 |
| (1,361) | 1:A:72:GLN:H | 1:A:78:ILE:HD13 | 4 | 0.03 |
| (1,346) | 1:A:175:LEU:HD21 | 1:A:184:LYS:H | 3 | 0.03 |
| (1,346) | 1:A:175:LEU:HD22 | 1:A:184:LYS:H | 3 | 0.03 |
| (1,346) | 1:A:175:LEU:HD23 | 1:A:184:LYS:H | 3 | 0.03 |
| (1,346) | 1:A:175:LEU:HD21 | 1:A:184:LYS:H | 5 | 0.03 |
| (1,346) | 1:A:175:LEU:HD22 | 1:A:184:LYS:H | 5 | 0.03 |
| (1,346) | 1:A:175:LEU:HD23 | 1:A:184:LYS:H | 5 | 0.03 |
| (1,346) | 1:A:175:LEU:HD21 | 1:A:184:LYS:H | 10 | 0.03 |
| (1,346) | 1:A:175:LEU:HD22 | 1:A:184:LYS:H | 10 | 0.03 |
| (1,346) | 1:A:175:LEU:HD23 | 1:A:184:LYS:H | 10 | 0.03 |
| (1,338) | 1:A:48:ALA:H | 1:A:54:VAL:HG11 | 13 | 0.03 |
| (1,338) | 1:A:48:ALA:H | 1:A:54:VAL:HG12 | 13 | 0.03 |
| (1,338) | 1:A:48:ALA:H | 1:A:54:VAL:HG13 | 13 | 0.03 |
| (1,338) | 1:A:48:ALA:H | 1:A:54:VAL:HG11 | 15 | 0.03 |
| (1,338) | 1:A:48:ALA:H | 1:A:54:VAL:HG12 | 15 | 0.03 |
| (1,338) | 1:A:48:ALA:H | 1:A:54:VAL:HG13 | 15 | 0.03 |
| (1,334) | 1:A:90:ILE:H | 1:A:91:VAL:HG21 | 16 | 0.03 |
| (1,334) | 1:A:90:ILE:H | 1:A:91:VAL:HG22 | 16 | 0.03 |
| (1,334) | 1:A:90:ILE:H | 1:A:91:VAL:HG23 | 16 | 0.03 |
| (1,295) | 1:A:153:LEU:H | 1:A:190:LEU:HD21 | 2 | 0.03 |
| (1,295) | 1:A:153:LEU:H | 1:A:190:LEU:HD22 | 2 | 0.03 |
| (1,295) | 1:A:153:LEU:H | 1:A:190:LEU:HD23 | 2 | 0.03 |
| (1,289) | 1:A:101:ILE:HD11 | 1:A:128:ILE:H | 7 | 0.03 |
| (1,289) | 1:A:101:ILE:HD12 | 1:A:128:ILE:H | 7 | 0.03 |



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

| (1,289) 1:A:101:ILE:HD13 1:A:128:ILE:H 7 0.03 (1,263) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:164:ASN:H 8 0.03 (1,263) 1:A:163:LEU:HD13 1:A:164:ASN:H 8 0.03 (1,263) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:164:ASN:H 15 0.03 (1,263) 1:A:163:LEU:HD13 1:A:164:ASN:H 15 0.03 (1,263) 1:A:163:LEU:HD13 1:A:164:ASN:H 15 0.03 (1,263) 1:A:163:LEU:HD13 1:A:164:ASN:H 15 0.03 (1,262) 1:A:171:VAL:HG11 1:A:164:ASN:H 4 0.03 (1,262) 1:A:171:VAL:HG13 1:A:184:ALA:H 4 0.03 (1,262) 1:A:171:LEU:HD21 1:A:189:GLN:H 17 0.03 (1,260) 1:A:171:LEU:HD23 1:A:189:GLN:H 17 0.03 (1,259) 1:A:71:ALA:H 1:A:78:ILE:HD11 19 0.03 (1,259) 1:A:71:ALA:H 1:A:78:ILE:HD12 19 0.03 (1,259) 1:A:71:ALA:H 1:A:78:ILE:HD1 | Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|--|---------|------------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,263) 1:A:163:LEU:HD12 1:A:164:ASN:H 8 0.03 (1,263) 1:A:163:LEU:HD13 1:A:164:ASN:H 8 0.03 (1,263) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:164:ASN:H 15 0.03 (1,263) 1:A:163:LEU:HD13 1:A:164:ASN:H 15 0.03 (1,262) 1:A:191:VAL:HG11 1:A:164:ASN:H 15 0.03 (1,262) 1:A:91:VAL:HG12 1:A:94:ALA:H 4 0.03 (1,262) 1:A:91:VAL:HG13 1:A:94:ALA:H 4 0.03 (1,262) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:189:GLN:H 17 0.03 (1,260) 1:A:171:LEU:HD23 1:A:189:GLN:H 17 0.03 (1,260) 1:A:71:ALA:H 1:A:78:ILE:HD11 19 0.03 (1,259) 1:A:71:ALA:H 1:A:78:ILE:HD12 | (1,289) | 1:A:101:ILE:HD13 | 1:A:128:ILE:H | 7 | 0.03 |
| (1,263) 1:A:163:LEU:HD13 1:A:164:ASN:H 15 0.03 (1,263) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:164:ASN:H 15 0.03 (1,263) 1:A:163:LEU:HD12 1:A:164:ASN:H 15 0.03 (1,263) 1:A:163:LEU:HD13 1:A:164:ASN:H 15 0.03 (1,262) 1:A:91:VAL:HG11 1:A:94:ALA:H 4 0.03 (1,262) 1:A:91:VAL:HG12 1:A:94:ALA:H 4 0.03 (1,262) 1:A:91:VAL:HG13 1:A:94:ALA:H 4 0.03 (1,260) 1:A:171:LEU:HD21 1:A:189:GLN:H 17 0.03 (1,260) 1:A:171:LEU:HD22 1:A:189:GLN:H 17 0.03 (1,260) 1:A:171:LEU:HD23 1:A:189:GLN:H 17 0.03 (1,260) 1:A:171:ALA:H 1:A:78:ILE:HD11 19 0.03 (1,259) 1:A:71:ALA:H 1:A:78:ILE:HD12 19 0.03 (1,259) 1:A:71:ALA:H 1:A:78:ILE:HD12 19 0.03 (1,259) 1:A:71:ALA:H 1:A:78:ILE:HD12 19 0.03 (1,247) 1:A:35:CYS:H 1:A:81:VAL:HG21 19 0.03 (1,239) 1:A:25:ALA:H 1:A:28:ILE:HD11 17 0.03 (1,239) 1:A:25:ALA:H 1:A:28:ILE:HD11 17 0.03 (1,239) 1:A:25:ALA:H 1:A:28:ILE:HD12 17 0.03 (1,226) 1:A:57:VAL:HG11 1:A:82:GLN:H 2 0.03 (1,226) 1:A:57:VAL:HG12 1:A:82:GLN:H 2 0.03 (1,226) 1:A:57:VAL:HG12 1:A:82:GLN:H 2 0.03 (1,217) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:195:LEU:H 6 0.03 (1,217) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:195:LEU:H 6 0.03 (1,208) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD12 15 0.03 (1,208) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD13 16 0.03 (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD11 10 0.03 (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD13 10 0.03 (1,205) 1:A:24:VAL:HG11 1:A:192:GLY:H 3 0.03 | (1,263) | 1:A:163:LEU:HD11 | 1:A:164:ASN:H | 8 | 0.03 |
| (1,263) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:164:ASN:H 15 0.03 (1,263) 1:A:163:LEU:HD12 1:A:164:ASN:H 15 0.03 (1,262) 1:A:91:VAL:HG11 1:A:94:ALA:H 4 0.03 (1,262) 1:A:91:VAL:HG11 1:A:94:ALA:H 4 0.03 (1,262) 1:A:91:VAL:HG12 1:A:94:ALA:H 4 0.03 (1,262) 1:A:91:VAL:HG13 1:A:94:ALA:H 4 0.03 (1,260) 1:A:171:LEU:HD21 1:A:189:GLN:H 17 0.03 (1,260) 1:A:171:LEU:HD22 1:A:189:GLN:H 17 0.03 (1,260) 1:A:171:LEU:HD22 1:A:189:GLN:H 17 0.03 (1,260) 1:A:171:LEU:HD23 1:A:189:GLN:H 17 0.03 (1,259) 1:A:71:ALA:H 1:A:78:ILE:HD11 19 0.03 (1,259) 1:A:71:ALA:H 1:A:78:ILE:HD12 19 0.03 (1,259) 1:A:71:ALA:H 1:A:78:ILE:HD13 19 0.03 (1,247) 1:A:35:CYS:H 1:A:81:VAL:HG21 19 0.03 (1,247) 1:A:35:CYS:H 1:A:81:VAL:HG21 19 0.03 (1,247) 1:A:35:CYS:H 1:A:81:VAL:HG23 19 0.03 (1,239) 1:A:25:ALA:H 1:A:28:ILE:HD11 17 0.03 (1,239) 1:A:25:ALA:H 1:A:28:ILE:HD12 17 0.03 (1,239) 1:A:25:ALA:H 1:A:28:ILE:HD12 17 0.03 (1,239) 1:A:25:ALA:H 1:A:28:ILE:HD14 17 0.03 (1,226) 1:A:57:VAL:HG11 1:A:82:GLN:H 2 0.03 (1,226) 1:A:57:VAL:HG11 1:A:82:GLN:H 2 0.03 (1,226) 1:A:57:VAL:HG11 1:A:82:GLN:H 2 0.03 (1,217) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:195:LEU:H 6 0.03 (1,217) 1:A:163:LEU:HD12 1:A:195:LEU:H 6 0.03 (1,217) 1:A:163:LEU:HD12 1:A:195:LEU:H 6 0.03 (1,208) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD12 15 0.03 (1,208) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD12 15 0.03 (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD11 16 0.03 (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD12 16 0.03 (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD13 16 0.03 (| (1,263) | 1:A:163:LEU:HD12 | 1:A:164:ASN:H | 8 | 0.03 |
| (1,263) 1:A:163:LEU:HD12 1:A:164:ASN:H 15 0.03 (1,263) 1:A:163:LEU:HD13 1:A:164:ASN:H 15 0.03 (1,262) 1:A:91:VAL:HG11 1:A:94:ALA:H 4 0.03 (1,262) 1:A:91:VAL:HG12 1:A:94:ALA:H 4 0.03 (1,262) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:189:GLN:H 17 0.03 (1,260) 1:A:171:LEU:HD22 1:A:189:GLN:H 17 0.03 (1,260) 1:A:171:LEU:HD23 1:A:189:GLN:H 17 0.03 (1,260) 1:A:71:ALA:H 1:A:78:ILE:HD11 19 0.03 (1,259) 1:A:71:ALA:H 1:A:78:ILE:HD12 19 0.03 (1,259) 1:A:71:ALA:H 1:A:78:ILE:HD13 19 0.03 (1,259) 1:A:71:ALA:H 1:A:78:ILE:HD13 19 0.03 (1,259) 1:A:71:ALA:H 1:A:78:ILE:HD13 19 0.03 (1,247) 1:A:35:CYS:H 1:A:81:VAL:HG21 19 0.03 (1,247) 1:A:35:CYS:H 1:A:81:VAL:HG23 | (1,263) | 1:A:163:LEU:HD13 | 1:A:164:ASN:H | 8 | 0.03 |
| (1,263) 1:A:163:LEU:HD13 1:A:164:ASN:H 15 0.03 (1,262) 1:A:91:VAL:HG11 1:A:94:ALA:H 4 0.03 (1,262) 1:A:91:VAL:HG12 1:A:94:ALA:H 4 0.03 (1,262) 1:A:91:VAL:HG13 1:A:94:ALA:H 4 0.03 (1,260) 1:A:171:LEU:HD21 1:A:189:GLN:H 17 0.03 (1,260) 1:A:171:LEU:HD22 1:A:189:GLN:H 17 0.03 (1,260) 1:A:171:LEU:HD23 1:A:189:GLN:H 17 0.03 (1,259) 1:A:71:ALA:H 1:A:78:ILE:HD11 19 0.03 (1,259) 1:A:71:ALA:H 1:A:78:ILE:HD12 19 0.03 (1,247) 1:A:35:CYS:H 1:A:81:VAL:HG21 19 0.03 (1,247) 1:A:35:CYS:H 1:A:81:VAL:HG21 19 0.03 (1,247) 1:A:35:CYS:H 1:A:81:VAL:HG23 19 0.03 (1,247) 1:A:35:CYS:H 1:A:81:VAL:HG23 19 0.03 (1,247) 1:A:35:CYS:H 1:A:28:ILE:HD11 | (1,263) | 1:A:163:LEU:HD11 | 1:A:164:ASN:H | 15 | 0.03 |
| (1,262) 1:A:91:VAL:HG11 1:A:94:ALA:H 4 0.03 (1,262) 1:A:91:VAL:HG12 1:A:94:ALA:H 4 0.03 (1,260) 1:A:91:VAL:HG13 1:A:94:ALA:H 4 0.03 (1,260) 1:A:171:LEU:HD21 1:A:189:GLN:H 17 0.03 (1,260) 1:A:171:LEU:HD22 1:A:189:GLN:H 17 0.03 (1,260) 1:A:171:LEU:HD23 1:A:189:GLN:H 17 0.03 (1,260) 1:A:171:LEU:HD23 1:A:189:GLN:H 17 0.03 (1,259) 1:A:71:ALA:H 1:A:78:ILE:HD11 19 0.03 (1,259) 1:A:71:ALA:H 1:A:78:ILE:HD12 19 0.03 (1,259) 1:A:71:ALA:H 1:A:78:ILE:HD13 19 0.03 (1,247) 1:A:35:CYS:H 1:A:81:VAL:HG21 19 0.03 (1,247) 1:A:35:CYS:H 1:A:81:VAL:HG21 19 0.03 (1,247) 1:A:35:CYS:H 1:A:81:VAL:HG22 19 0.03 (1,239) 1:A:25:ALA:H 1:A:28:ILE:HD11 17 0.03 (1,239) 1:A:25:ALA:H 1:A:28:ILE:HD11 17 0.03 (1,239) 1:A:25:ALA:H 1:A:28:ILE:HD12 17 0.03 (1,239) 1:A:25:ALA:H 1:A:28:ILE:HD13 17 0.03 (1,226) 1:A:57:VAL:HG11 1:A:82:GLN:H 2 0.03 (1,226) 1:A:57:VAL:HG11 1:A:82:GLN:H 2 0.03 (1,226) 1:A:57:VAL:HG13 1:A:82:GLN:H 2 0.03 (1,217) 1:A:163:LEU:HD13 1:A:195:LEU:H 6 0.03 (1,217) 1:A:163:LEU:HD13 1:A:195:LEU:H 6 0.03 (1,217) 1:A:163:LEU:HD13 1:A:195:LEU:H 6 0.03 (1,208) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD22 15 0.03 (1,208) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD23 15 0.03 (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD13 16 0.03 (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD13 20 0.03 (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD13 20 0.03 (1,205) 1:A:24:VAL:HG13 1:A:192:GLY:H 3 0.03 (1,205) 1:A:24:VAL:HG13 1:A:192:GLY:H 3 0.03 (1,205) 1:A:24:VAL:HG11 1:A:192:GLY:H 3 0.03 (1,205) 1:A:24:VAL:HG11 1:A:192:GLY:H 3 0.03 (1,205) 1:A:24:VAL:HG11 1:A:192:GLY:H 9 0.03 | (1,263) | 1:A:163:LEU:HD12 | 1:A:164:ASN:H | 15 | 0.03 |
| (1,262) 1:A:91:VAL:HG12 1:A:94:ALA:H 4 0.03 (1,262) 1:A:91:VAL:HG13 1:A:94:ALA:H 4 0.03 (1,260) 1:A:171:LEU:HD21 1:A:189:GLN:H 17 0.03 (1,260) 1:A:171:LEU:HD22 1:A:189:GLN:H 17 0.03 (1,260) 1:A:171:LEU:HD23 1:A:189:GLN:H 17 0.03 (1,259) 1:A:71:ALA:H 1:A:78:ILE:HD11 19 0.03 (1,259) 1:A:71:ALA:H 1:A:78:ILE:HD12 19 0.03 (1,259) 1:A:71:ALA:H 1:A:78:ILE:HD12 19 0.03 (1,259) 1:A:71:ALA:H 1:A:78:ILE:HD13 19 0.03 (1,259) 1:A:71:ALA:H 1:A:81:VAL:HG21 19 0.03 (1,247) 1:A:35:CYS:H 1:A:81:VAL:HG21 19 0.03 (1,247) 1:A:35:CYS:H 1:A:81:VAL:HG22 19 0.03 (1,247) 1:A:35:CYS:H 1:A:81:VAL:HG23 19 0.03 (1,239) 1:A:25:ALA:H 1:A:28:ILE:HD11 17 0.03 (1,239) 1:A:25:ALA:H 1:A:28:ILE:HD11 17 0.03 (1,239) 1:A:57:VAL:HG11 1:A:28:ILE:HD12 17 0.03 (1,226) 1:A:57:VAL:HG11 1:A:82:GLN:H 2 0.03 (1,226) 1:A:57:VAL:HG11 1:A:82:GLN:H 2 0.03 (1,226) 1:A:57:VAL:HG13 1:A:82:GLN:H 2 0.03 (1,217) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:195:LEU:H 6 0.03 (1,217) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:195:LEU:H 6 0.03 (1,208) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD21 15 0.03 (1,208) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD21 15 0.03 (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD12 16 0.03 (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD11 16 0.03 (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD11 16 0.03 (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD11 10 0.03 (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD13 10 0.03 (1,205) 1:A:24:VAL:HG11 1:A:192:GLY:H 3 0.03 (1,205) 1:A:24:V | (1,263) | 1:A:163:LEU:HD13 | 1:A:164:ASN:H | 15 | 0.03 |
| (1,262) 1:A:91:VAL:HG13 1:A:94:ALA:H 4 0.03 (1,260) 1:A:171:LEU:HD21 1:A:189:GLN:H 17 0.03 (1,260) 1:A:171:LEU:HD22 1:A:189:GLN:H 17 0.03 (1,260) 1:A:171:LEU:HD23 1:A:189:GLN:H 17 0.03 (1,259) 1:A:71:ALA:H 1:A:78:ILE:HD11 19 0.03 (1,259) 1:A:71:ALA:H 1:A:78:ILE:HD12 19 0.03 (1,259) 1:A:71:ALA:H 1:A:78:ILE:HD13 19 0.03 (1,259) 1:A:71:ALA:H 1:A:78:ILE:HD13 19 0.03 (1,247) 1:A:35:CYS:H 1:A:81:VAL:HG21 19 0.03 (1,247) 1:A:35:CYS:H 1:A:81:VAL:HG23 19 0.03 (1,247) 1:A:35:CYS:H 1:A:81:VAL:HG23 19 0.03 (1,247) 1:A:35:CYS:H 1:A:81:VAL:HG23 19 0.03 (1,239) 1:A:25:ALA:H 1:A:28:ILE:HD11 17 0.03 (1,239) 1:A:25:ALA:H 1:A:28:ILE:HD13 | (1,262) | 1:A:91:VAL:HG11 | 1:A:94:ALA:H | 4 | 0.03 |
| (1,260) 1:A:171:LEU:HD21 1:A:189:GLN:H 17 0.03 (1,260) 1:A:171:LEU:HD22 1:A:189:GLN:H 17 0.03 (1,260) 1:A:171:LEU:HD23 1:A:189:GLN:H 17 0.03 (1,259) 1:A:71:ALA:H 1:A:78:ILE:HD11 19 0.03 (1,259) 1:A:71:ALA:H 1:A:78:ILE:HD13 19 0.03 (1,247) 1:A:35:CYS:H 1:A:81:VAL:HG21 19 0.03 (1,247) 1:A:35:CYS:H 1:A:81:VAL:HG22 19 0.03 (1,247) 1:A:35:CYS:H 1:A:81:VAL:HG23 19 0.03 (1,247) 1:A:35:CYS:H 1:A:81:VAL:HG23 19 0.03 (1,247) 1:A:35:CYS:H 1:A:81:VAL:HG23 19 0.03 (1,239) 1:A:25:ALA:H 1:A:28:ILE:HD11 17 0.03 (1,239) 1:A:25:ALA:H 1:A:28:ILE:HD12 17 0.03 (1,239) 1:A:57:VAL:HG11 1:A:82:GLN:H 2 0.03 (1,226) 1:A:57:VAL:HG11 1:A:82:GLN:H | (1,262) | 1:A:91:VAL:HG12 | 1:A:94:ALA:H | 4 | 0.03 |
| (1,260) 1:A:171:LEU:HD22 1:A:189:GLN:H 17 0.03 (1,260) 1:A:171:LEU:HD23 1:A:189:GLN:H 17 0.03 (1,259) 1:A:71:ALA:H 1:A:78:ILE:HD11 19 0.03 (1,259) 1:A:71:ALA:H 1:A:78:ILE:HD12 19 0.03 (1,259) 1:A:71:ALA:H 1:A:78:ILE:HD13 19 0.03 (1,247) 1:A:35:CYS:H 1:A:81:VAL:HG21 19 0.03 (1,247) 1:A:35:CYS:H 1:A:81:VAL:HG22 19 0.03 (1,247) 1:A:35:CYS:H 1:A:81:VAL:HG23 19 0.03 (1,247) 1:A:35:CYS:H 1:A:81:VAL:HG23 19 0.03 (1,247) 1:A:35:CYS:H 1:A:81:VAL:HG23 19 0.03 (1,239) 1:A:25:ALA:H 1:A:28:ILE:HD11 17 0.03 (1,239) 1:A:25:ALA:H 1:A:28:ILE:HD13 17 0.03 (1,226) 1:A:57:VAL:HG11 1:A:82:GLN:H 2 0.03 (1,226) 1:A:57:VAL:HG13 1:A:82:GLN:H | (1,262) | 1:A:91:VAL:HG13 | 1:A:94:ALA:H | 4 | 0.03 |
| (1,260) 1:A:171:LEU:HD23 1:A:189:GLN:H 17 0.03 (1,259) 1:A:71:ALA:H 1:A:78:ILE:HD11 19 0.03 (1,259) 1:A:71:ALA:H 1:A:78:ILE:HD12 19 0.03 (1,259) 1:A:71:ALA:H 1:A:78:ILE:HD13 19 0.03 (1,247) 1:A:35:CYS:H 1:A:81:VAL:HG21 19 0.03 (1,247) 1:A:35:CYS:H 1:A:81:VAL:HG22 19 0.03 (1,247) 1:A:35:CYS:H 1:A:81:VAL:HG23 19 0.03 (1,247) 1:A:35:CYS:H 1:A:81:VAL:HG23 19 0.03 (1,239) 1:A:25:ALA:H 1:A:28:ILE:HD11 17 0.03 (1,239) 1:A:25:ALA:H 1:A:28:ILE:HD12 17 0.03 (1,239) 1:A:57:VAL:HG11 1:A:82:GLN:H 2 0.03 (1,226) 1:A:57:VAL:HG11 1:A:82:GLN:H 2 0.03 (1,226) 1:A:57:VAL:HG13 1:A:82:GLN:H 2 0.03 (1,226) 1:A:65:EU:HD13 1:A:195:LEU:H <td< td=""><td>(1,260)</td><td>1:A:171:LEU:HD21</td><td>1:A:189:GLN:H</td><td>17</td><td>0.03</td></td<> | (1,260) | 1:A:171:LEU:HD21 | 1:A:189:GLN:H | 17 | 0.03 |
| (1,259) 1:A:71:ALA:H 1:A:78:ILE:HD11 19 0.03 (1,259) 1:A:71:ALA:H 1:A:78:ILE:HD12 19 0.03 (1,259) 1:A:71:ALA:H 1:A:78:ILE:HD13 19 0.03 (1,247) 1:A:35:CYS:H 1:A:81:VAL:HG21 19 0.03 (1,247) 1:A:35:CYS:H 1:A:81:VAL:HG22 19 0.03 (1,247) 1:A:35:CYS:H 1:A:81:VAL:HG23 19 0.03 (1,247) 1:A:35:CYS:H 1:A:81:VAL:HG23 19 0.03 (1,239) 1:A:25:ALA:H 1:A:22:ILE:HD11 17 0.03 (1,239) 1:A:25:ALA:H 1:A:28:ILE:HD12 17 0.03 (1,239) 1:A:57:VAL:HG11 1:A:82:GLN:H 2 0.03 (1,226) 1:A:57:VAL:HG12 1:A:82:GLN:H 2 0.03 (1,226) 1:A:57:VAL:HG13 1:A:82:GLN:H 2 0.03 (1,226) 1:A:57:VAL:HG13 1:A:8195:LEU:H 6 0.03 (1,217) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:193:LEU:H <t< td=""><td>(1,260)</td><td>1:A:171:LEU:HD22</td><td>1:A:189:GLN:H</td><td>17</td><td>0.03</td></t<> | (1,260) | 1:A:171:LEU:HD22 | 1:A:189:GLN:H | 17 | 0.03 |
| (1,259) 1:A:71:ALA:H 1:A:78:ILE:HD12 19 0.03 (1,259) 1:A:71:ALA:H 1:A:78:ILE:HD13 19 0.03 (1,247) 1:A:35:CYS:H 1:A:81:VAL:HG21 19 0.03 (1,247) 1:A:35:CYS:H 1:A:81:VAL:HG22 19 0.03 (1,247) 1:A:35:CYS:H 1:A:81:VAL:HG23 19 0.03 (1,239) 1:A:25:ALA:H 1:A:28:ILE:HD11 17 0.03 (1,239) 1:A:25:ALA:H 1:A:28:ILE:HD12 17 0.03 (1,239) 1:A:57:VAL:HG11 1:A:82:GLN:H 2 0.03 (1,226) 1:A:57:VAL:HG12 1:A:82:GLN:H 2 0.03 (1,226) 1:A:57:VAL:HG13 1:A:82:GLN:H 2 0.03 (1,226) 1:A:6163:LEU:HD11 1:A:195:LEU:H 6 0.03 (1,217) 1:A:163:LEU:HD12 1:A:195:LEU:H 6 0.03 (1,217) 1:A:166:SER:H 1:A:64:LEU:HD21 15 0.03 (1,208) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD21 < | (1,260) | 1:A:171:LEU:HD23 | 1:A:189:GLN:H | 17 | 0.03 |
| (1,259) 1:A:71:ALA:H 1:A:78:ILE:HD12 19 0.03 (1,259) 1:A:71:ALA:H 1:A:78:ILE:HD13 19 0.03 (1,247) 1:A:35:CYS:H 1:A:81:VAL:HG21 19 0.03 (1,247) 1:A:35:CYS:H 1:A:81:VAL:HG22 19 0.03 (1,247) 1:A:35:CYS:H 1:A:81:VAL:HG23 19 0.03 (1,239) 1:A:25:ALA:H 1:A:28:ILE:HD11 17 0.03 (1,239) 1:A:25:ALA:H 1:A:28:ILE:HD12 17 0.03 (1,239) 1:A:57:VAL:HG11 1:A:82:GLN:H 2 0.03 (1,226) 1:A:57:VAL:HG12 1:A:82:GLN:H 2 0.03 (1,226) 1:A:57:VAL:HG13 1:A:82:GLN:H 2 0.03 (1,227) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:195:LEU:H 6 0.03 (1,217) 1:A:163:LEU:HD12 1:A:195:LEU:H 6 0.03 (1,217) 1:A:163:CEU:HD13 1:A:195:LEU:H 6 0.03 (1,217) 1:A:166:SER:H 1:A:64:LEU:HD21 < | (1,259) | 1:A:71:ALA:H | 1:A:78:ILE:HD11 | 19 | 0.03 |
| (1,247) 1:A:35:CYS:H 1:A:81:VAL:HG21 19 0.03 (1,247) 1:A:35:CYS:H 1:A:81:VAL:HG22 19 0.03 (1,247) 1:A:35:CYS:H 1:A:81:VAL:HG23 19 0.03 (1,239) 1:A:25:ALA:H 1:A:28:ILE:HD11 17 0.03 (1,239) 1:A:25:ALA:H 1:A:28:ILE:HD12 17 0.03 (1,239) 1:A:57:VAL:HG11 1:A:82:GLN:H 2 0.03 (1,226) 1:A:57:VAL:HG11 1:A:82:GLN:H 2 0.03 (1,226) 1:A:57:VAL:HG13 1:A:82:GLN:H 2 0.03 (1,226) 1:A:57:VAL:HG13 1:A:82:GLN:H 2 0.03 (1,226) 1:A:63:LEU:HD11 1:A:195:LEU:H 6 0.03 (1,217) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:195:LEU:H 6 0.03 (1,217) 1:A:663:LEU:HD12 1:A:64:LEU:HD21 15 0.03 (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD22 15 0.03 (1,208) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD11 < | · · / | 1:A:71:ALA:H | 1:A:78:ILE:HD12 | 19 | 0.03 |
| (1,247) 1:A:35:CYS:H 1:A:81:VAL:HG22 19 0.03 (1,247) 1:A:35:CYS:H 1:A:81:VAL:HG23 19 0.03 (1,239) 1:A:25:ALA:H 1:A:28:ILE:HD11 17 0.03 (1,239) 1:A:25:ALA:H 1:A:28:ILE:HD13 17 0.03 (1,239) 1:A:25:ALA:H 1:A:28:ILE:HD13 17 0.03 (1,226) 1:A:57:VAL:HG11 1:A:82:GLN:H 2 0.03 (1,226) 1:A:57:VAL:HG12 1:A:82:GLN:H 2 0.03 (1,226) 1:A:57:VAL:HG13 1:A:82:GLN:H 2 0.03 (1,226) 1:A:57:VAL:HG13 1:A:82:GLN:H 2 0.03 (1,226) 1:A:63:LEU:HD11 1:A:195:LEU:H 6 0.03 (1,217) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:195:LEU:H 6 0.03 (1,217) 1:A:163:LEU:HD13 1:A:195:LEU:H 6 0.03 (1,208) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD21 15 0.03 (1,208) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD13 | · · / | 1:A:71:ALA:H | 1:A:78:ILE:HD13 | 19 | 0.03 |
| (1,247) 1:A:35:CYS:H 1:A:81:VAL:HG22 19 0.03 (1,247) 1:A:35:CYS:H 1:A:81:VAL:HG23 19 0.03 (1,239) 1:A:25:ALA:H 1:A:28:ILE:HD11 17 0.03 (1,239) 1:A:25:ALA:H 1:A:28:ILE:HD12 17 0.03 (1,239) 1:A:57:VAL:HG11 1:A:82:GLN:H 2 0.03 (1,226) 1:A:57:VAL:HG11 1:A:82:GLN:H 2 0.03 (1,226) 1:A:57:VAL:HG12 1:A:82:GLN:H 2 0.03 (1,226) 1:A:57:VAL:HG13 1:A:82:GLN:H 2 0.03 (1,226) 1:A:57:VAL:HG13 1:A:82:GLN:H 2 0.03 (1,226) 1:A:657:VAL:HG13 1:A:82:GLN:H 2 0.03 (1,226) 1:A:657:VAL:HG11 1:A:82:GLN:H 2 0.03 (1,226) 1:A:657:VAL:HG12 1:A:82:GLN:H 2 0.03 (1,227) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:163:LEU:HD12 6 0.03 (1,217) 1:A:163:LEU:HD13 1:A:19:164 | (1,247) | 1:A:35:CYS:H | 1:A:81:VAL:HG21 | 19 | 0.03 |
| (1,247) 1:A:35:CYS:H 1:A:81:VAL:HG23 19 0.03 (1,239) 1:A:25:ALA:H 1:A:28:ILE:HD11 17 0.03 (1,239) 1:A:25:ALA:H 1:A:28:ILE:HD12 17 0.03 (1,239) 1:A:57:VAL:HG11 1:A:82:GLN:H 2 0.03 (1,226) 1:A:57:VAL:HG11 1:A:82:GLN:H 2 0.03 (1,226) 1:A:57:VAL:HG12 1:A:82:GLN:H 2 0.03 (1,226) 1:A:57:VAL:HG13 1:A:82:GLN:H 2 0.03 (1,227) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:195:LEU:H 6 0.03 (1,217) 1:A:163:LEU:HD12 1:A:195:LEU:H 6 0.03 (1,217) 1:A:163:LEU:HD13 1:A:195:LEU:H 6 0.03 (1,217) 1:A:163:LEU:HD13 1:A:195:LEU:H 6 0.03 (1,208) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD21 15 0.03 (1,208) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD22 15 0.03 (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD11 <t< td=""><td>· · /</td><td>1:A:35:CYS:H</td><td>1:A:81:VAL:HG22</td><td>19</td><td></td></t<> | · · / | 1:A:35:CYS:H | 1:A:81:VAL:HG22 | 19 | |
| (1,239) 1:A:25:ALA:H 1:A:28:ILE:HD11 17 0.03 (1,239) 1:A:25:ALA:H 1:A:28:ILE:HD12 17 0.03 (1,239) 1:A:25:ALA:H 1:A:28:ILE:HD13 17 0.03 (1,226) 1:A:57:VAL:HG11 1:A:82:GLN:H 2 0.03 (1,226) 1:A:57:VAL:HG12 1:A:82:GLN:H 2 0.03 (1,226) 1:A:57:VAL:HG13 1:A:82:GLN:H 2 0.03 (1,217) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:195:LEU:H 6 0.03 (1,217) 1:A:163:LEU:HD12 1:A:195:LEU:H 6 0.03 (1,217) 1:A:163:LEU:HD13 1:A:195:LEU:H 6 0.03 (1,217) 1:A:163:LEU:HD13 1:A:195:LEU:H 6 0.03 (1,217) 1:A:163:LEU:HD13 1:A:195:LEU:H 6 0.03 (1,227) 1:A:163:EEU:HD13 1:A:196:LEU:HD21 15 0.03 (1,208) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD12 16 0.03 (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD11 | · · · / | 1:A:35:CYS:H | 1:A:81:VAL:HG23 | 19 | 0.03 |
| (1,239) 1:A:25:ALA:H 1:A:28:ILE:HD12 17 0.03 (1,239) 1:A:25:ALA:H 1:A:28:ILE:HD13 17 0.03 (1,226) 1:A:57:VAL:HG11 1:A:82:GLN:H 2 0.03 (1,226) 1:A:57:VAL:HG12 1:A:82:GLN:H 2 0.03 (1,226) 1:A:57:VAL:HG13 1:A:82:GLN:H 2 0.03 (1,226) 1:A:57:VAL:HG13 1:A:82:GLN:H 2 0.03 (1,227) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:82:GLN:H 2 0.03 (1,217) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:82:GLN:H 2 0.03 (1,217) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:82:GLN:H 2 0.03 (1,217) 1:A:63:LEU:HD12 1:A:195:LEU:H 6 0.03 (1,217) 1:A:66:SER:H 1:A:64:LEU:HD21 15 0.03 (1,208) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD22 15 0.03 (1,208) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD13 16 0.03 (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD13 16 | (' / | | 1:A:28:ILE:HD11 | 17 | 0.03 |
| (1,239) 1:A:25:ALA:H 1:A:28:ILE:HD13 17 0.03 (1,226) 1:A:57:VAL:HG11 1:A:82:GLN:H 2 0.03 (1,226) 1:A:57:VAL:HG12 1:A:82:GLN:H 2 0.03 (1,226) 1:A:57:VAL:HG13 1:A:82:GLN:H 2 0.03 (1,217) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:195:LEU:H 6 0.03 (1,217) 1:A:163:LEU:HD12 1:A:195:LEU:H 6 0.03 (1,217) 1:A:163:LEU:HD13 1:A:195:LEU:H 6 0.03 (1,217) 1:A:163:LEU:HD13 1:A:195:LEU:H 6 0.03 (1,217) 1:A:163:LEU:HD13 1:A:195:LEU:H 6 0.03 (1,208) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD21 15 0.03 (1,208) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD13 15 0.03 (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD11 16 0.03 (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD13 16 0.03 (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD13 | (1,239) | 1:A:25:ALA:H | 1:A:28:ILE:HD12 | 17 | 0.03 |
| (1,226) 1:A:57:VAL:HG12 1:A:82:GLN:H 2 0.03 (1,226) 1:A:57:VAL:HG13 1:A:82:GLN:H 2 0.03 (1,217) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:195:LEU:H 6 0.03 (1,217) 1:A:163:LEU:HD12 1:A:195:LEU:H 6 0.03 (1,217) 1:A:163:LEU:HD13 1:A:195:LEU:H 6 0.03 (1,208) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD21 15 0.03 (1,208) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD22 15 0.03 (1,208) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD23 15 0.03 (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD11 16 0.03 (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD12 16 0.03 (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD13 16 0.03 (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD11 20 0.03 (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD12 20 0.03 (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD13 < | (1,239) | 1:A:25:ALA:H | 1:A:28:ILE:HD13 | 17 | 0.03 |
| (1,226) 1:A:57:VAL:HG13 1:A:82:GLN:H 2 0.03 (1,217) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:195:LEU:H 6 0.03 (1,217) 1:A:163:LEU:HD12 1:A:195:LEU:H 6 0.03 (1,217) 1:A:163:LEU:HD13 1:A:195:LEU:H 6 0.03 (1,208) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD21 15 0.03 (1,208) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD22 15 0.03 (1,208) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD23 15 0.03 (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD11 16 0.03 (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD12 16 0.03 (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD13 16 0.03 (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD11 20 0.03 (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD12 20 0.03 (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD12 20 0.03 (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD13 | (1,226) | 1:A:57:VAL:HG11 | 1:A:82:GLN:H | 2 | 0.03 |
| (1,217) 1:A:163:LEU:HD11 1:A:195:LEU:H 6 0.03 (1,217) 1:A:163:LEU:HD12 1:A:195:LEU:H 6 0.03 (1,217) 1:A:163:LEU:HD13 1:A:195:LEU:H 6 0.03 (1,208) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD21 15 0.03 (1,208) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD22 15 0.03 (1,208) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD23 15 0.03 (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD11 16 0.03 (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD12 16 0.03 (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD13 16 0.03 (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD11 20 0.03 (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD12 20 0.03 (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD13 20 0.03 (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD13 20 0.03 (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD13 20 0.03 (1,205) 1:A:24:VAL:HG11 1:A:192:GLY: | (1,226) | 1:A:57:VAL:HG12 | 1:A:82:GLN:H | 2 | 0.03 |
| (1,217) 1:A:163:LEU:HD12 1:A:195:LEU:H 6 0.03 (1,217) 1:A:163:LEU:HD13 1:A:195:LEU:H 6 0.03 (1,208) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD21 15 0.03 (1,208) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD22 15 0.03 (1,208) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD23 15 0.03 (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD11 16 0.03 (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD12 16 0.03 (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD13 16 0.03 (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD11 20 0.03 (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD12 20 0.03 (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD13 20 0.03 (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD13 20 0.03 (1,205) 1:A:24:VAL:HG11 1:A:192:GLY:H 3 0.03 (1,205) 1:A:24:VAL:HG13 1:A:192:GLY:H 3 0.03 (1,205) 1:A:24:VAL:HG11 1:A:192:GLY:H | (1,226) | 1:A:57:VAL:HG13 | 1:A:82:GLN:H | 2 | 0.03 |
| (1,217) 1:A:163:LEU:HD13 1:A:195:LEU:H 6 0.03 (1,208) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD21 15 0.03 (1,208) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD22 15 0.03 (1,208) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD23 15 0.03 (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD11 16 0.03 (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD12 16 0.03 (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD13 16 0.03 (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD11 20 0.03 (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD12 20 0.03 (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD12 20 0.03 (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD13 20 0.03 (1,205) 1:A:24:VAL:HG11 1:A:192:GLY:H 3 0.03 (1,205) 1:A:24:VAL:HG13 1:A:192:GLY:H 3 0.03 (1,205) 1:A:24:VAL:HG11 1:A:192:GLY:H | (1,217) | 1:A:163:LEU:HD11 | 1:A:195:LEU:H | 6 | 0.03 |
| (1,208) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD21 15 0.03 (1,208) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD22 15 0.03 (1,208) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD23 15 0.03 (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD11 16 0.03 (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD12 16 0.03 (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD13 16 0.03 (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD11 20 0.03 (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD12 20 0.03 (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD13 20 0.03 (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD13 20 0.03 (1,205) 1:A:24:VAL:HG11 1:A:192:GLY:H 3 0.03 (1,205) 1:A:24:VAL:HG13 1:A:192:GLY:H 3 0.03 (1,205) 1:A:24:VAL:HG11 1:A:192:GLY:H 9 0.03 | (1,217) | 1:A:163:LEU:HD12 | 1:A:195:LEU:H | 6 | 0.03 |
| (1,208) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD22 15 0.03 (1,208) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD23 15 0.03 (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD11 16 0.03 (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD12 16 0.03 (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD13 16 0.03 (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD11 20 0.03 (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD12 20 0.03 (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD13 20 0.03 (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD13 20 0.03 (1,205) 1:A:24:VAL:HG11 1:A:192:GLY:H 3 0.03 (1,205) 1:A:24:VAL:HG12 1:A:192:GLY:H 3 0.03 (1,205) 1:A:24:VAL:HG13 1:A:192:GLY:H 3 0.03 (1,205) 1:A:24:VAL:HG11 1:A:192:GLY:H 9 0.03 | (1,217) | 1:A:163:LEU:HD13 | 1:A:195:LEU:H | 6 | 0.03 |
| (1,208) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD23 15 0.03 (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD11 16 0.03 (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD12 16 0.03 (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD13 16 0.03 (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD11 20 0.03 (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD12 20 0.03 (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD13 20 0.03 (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD13 20 0.03 (1,205) 1:A:24:VAL:HG11 1:A:192:GLY:H 3 0.03 (1,205) 1:A:24:VAL:HG12 1:A:192:GLY:H 3 0.03 (1,205) 1:A:24:VAL:HG13 1:A:192:GLY:H 3 0.03 (1,205) 1:A:24:VAL:HG11 1:A:192:GLY:H 9 0.03 | (1,208) | 1:A:60:SER:H | 1:A:64:LEU:HD21 | 15 | 0.03 |
| (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD11 16 0.03 (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD12 16 0.03 (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD13 16 0.03 (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD11 20 0.03 (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD12 20 0.03 (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD13 20 0.03 (1,207) 1:A:24:VAL:HG11 1:A:192:GLY:H 3 0.03 (1,205) 1:A:24:VAL:HG12 1:A:192:GLY:H 3 0.03 (1,205) 1:A:24:VAL:HG13 1:A:192:GLY:H 3 0.03 (1,205) 1:A:24:VAL:HG11 1:A:192:GLY:H 9 0.03 | (1,208) | 1:A:60:SER:H | 1:A:64:LEU:HD22 | 15 | 0.03 |
| (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD12 16 0.03 (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD13 16 0.03 (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD11 20 0.03 (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD12 20 0.03 (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD13 20 0.03 (1,205) 1:A:24:VAL:HG11 1:A:192:GLY:H 3 0.03 (1,205) 1:A:24:VAL:HG13 1:A:192:GLY:H 3 0.03 (1,205) 1:A:24:VAL:HG13 1:A:192:GLY:H 3 0.03 (1,205) 1:A:24:VAL:HG11 1:A:192:GLY:H 9 0.03 | (1,208) | 1:A:60:SER:H | 1:A:64:LEU:HD23 | 15 | 0.03 |
| (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD13 16 0.03 (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD11 20 0.03 (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD12 20 0.03 (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD13 20 0.03 (1,207) 1:A:24:VAL:HG11 1:A:192:GLY:H 3 0.03 (1,205) 1:A:24:VAL:HG11 1:A:192:GLY:H 3 0.03 (1,205) 1:A:24:VAL:HG13 1:A:192:GLY:H 3 0.03 (1,205) 1:A:24:VAL:HG11 1:A:192:GLY:H 9 0.03 | (1,207) | 1:A:60:SER:H | 1:A:64:LEU:HD11 | 16 | 0.03 |
| (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD13 16 0.03 (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD11 20 0.03 (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD12 20 0.03 (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD13 20 0.03 (1,207) 1:A:24:VAL:HG11 1:A:192:GLY:H 3 0.03 (1,205) 1:A:24:VAL:HG12 1:A:192:GLY:H 3 0.03 (1,205) 1:A:24:VAL:HG13 1:A:192:GLY:H 3 0.03 (1,205) 1:A:24:VAL:HG11 1:A:192:GLY:H 9 0.03 | (1,207) | 1:A:60:SER:H | 1:A:64:LEU:HD12 | 16 | 0.03 |
| (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD11 20 0.03 (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD12 20 0.03 (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD13 20 0.03 (1,205) 1:A:24:VAL:HG11 1:A:192:GLY:H 3 0.03 (1,205) 1:A:24:VAL:HG12 1:A:192:GLY:H 3 0.03 (1,205) 1:A:24:VAL:HG13 1:A:192:GLY:H 3 0.03 (1,205) 1:A:24:VAL:HG11 1:A:192:GLY:H 9 0.03 | , , | 1:A:60:SER:H | 1:A:64:LEU:HD13 | 16 | 0.03 |
| (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD12 20 0.03 (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD13 20 0.03 (1,205) 1:A:24:VAL:HG11 1:A:192:GLY:H 3 0.03 (1,205) 1:A:24:VAL:HG12 1:A:192:GLY:H 3 0.03 (1,205) 1:A:24:VAL:HG13 1:A:192:GLY:H 3 0.03 (1,205) 1:A:24:VAL:HG11 1:A:192:GLY:H 9 0.03 | | 1:A:60:SER:H | 1:A:64:LEU:HD11 | 20 | 0.03 |
| (1,207) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD13 20 0.03 (1,205) 1:A:24:VAL:HG11 1:A:192:GLY:H 3 0.03 (1,205) 1:A:24:VAL:HG12 1:A:192:GLY:H 3 0.03 (1,205) 1:A:24:VAL:HG13 1:A:192:GLY:H 3 0.03 (1,205) 1:A:24:VAL:HG11 1:A:192:GLY:H 9 0.03 | | 1:A:60:SER:H | 1:A:64:LEU:HD12 | 20 | 0.03 |
| (1,205) 1:A:24:VAL:HG11 1:A:192:GLY:H 3 0.03 (1,205) 1:A:24:VAL:HG12 1:A:192:GLY:H 3 0.03 (1,205) 1:A:24:VAL:HG13 1:A:192:GLY:H 3 0.03 (1,205) 1:A:24:VAL:HG11 1:A:192:GLY:H 9 0.03 | | 1:A:60:SER:H | 1:A:64:LEU:HD13 | 20 | 0.03 |
| (1,205) 1:A:24:VAL:HG12 1:A:192:GLY:H 3 0.03 (1,205) 1:A:24:VAL:HG13 1:A:192:GLY:H 3 0.03 (1,205) 1:A:24:VAL:HG11 1:A:192:GLY:H 9 0.03 | ` ' | 1:A:24:VAL:HG11 | 1:A:192:GLY:H | 3 | 0.03 |
| (1,205) 1:A:24:VAL:HG13 1:A:192:GLY:H 3 0.03 (1,205) 1:A:24:VAL:HG11 1:A:192:GLY:H 9 0.03 | · · / | 1:A:24:VAL:HG12 | 1:A:192:GLY:H | 3 | 0.03 |
| | | 1:A:24:VAL:HG13 | 1:A:192:GLY:H | 3 | 0.03 |
| | (1,205) | 1:A:24:VAL:HG11 | 1:A:192:GLY:H | 9 | 0.03 |
| (1,200) 1.11.24. VIII.11012 1.11.132.GD1.11 3 0.00 | (1,205) | 1:A:24:VAL:HG12 | 1:A:192:GLY:H | 9 | 0.03 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------------------|--------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,205) | 1:A:24:VAL:HG13 | 1:A:192:GLY:H | 9 | 0.03 |
| (1,203) | 1:A:149:LEU:H | 1:A:150:LEU:HD21 | 17 | 0.03 |
| (1,203) | 1:A:149:LEU:H | 1:A:150:LEU:HD22 | 17 | 0.03 |
| (1,203) | 1:A:149:LEU:H | 1:A:150:LEU:HD23 | 17 | 0.03 |
| (1,202) | 1:A:138:GLN:H | 1:A:147:LEU:HD21 | 10 | 0.03 |
| (1,202) | 1:A:138:GLN:H | 1:A:147:LEU:HD22 | 10 | 0.03 |
| (1,202) | 1:A:138:GLN:H | 1:A:147:LEU:HD23 | 10 | 0.03 |
| (1,201) | 1:A:157:GLN:H | 1:A:190:LEU:HD21 | 12 | 0.03 |
| (1,201) | 1:A:157:GLN:H | 1:A:190:LEU:HD22 | 12 | 0.03 |
| (1,201) | 1:A:157:GLN:H | 1:A:190:LEU:HD23 | 12 | 0.03 |
| (1,201) | 1:A:157:GLN:H | 1:A:190:LEU:HD21 | 14 | 0.03 |
| (1,201) | 1:A:157:GLN:H | 1:A:190:LEU:HD22 | 14 | 0.03 |
| (1,201) | 1:A:157:GLN:H | 1:A:190:LEU:HD23 | 14 | 0.03 |
| (1,2) | 1:A:60:SER:H | 1:A:62:VAL:H | 7 | 0.03 |
| (1,188) | 1:A:62:VAL:HG21 | 1:A:64:LEU:H | 11 | 0.03 |
| (1,188) | 1:A:62:VAL:HG22 | 1:A:64:LEU:H | 11 | 0.03 |
| (1,188) | 1:A:62:VAL:HG23 | 1:A:64:LEU:H | 11 | 0.03 |
| (1,187) | 1:A:62:VAL:HG11 | 1:A:64:LEU:H | 16 | 0.03 |
| (1,187) | 1:A:62:VAL:HG12 | 1:A:64:LEU:H | 16 | 0.03 |
| (1,187) | 1:A:62:VAL:HG13 | 1:A:64:LEU:H | 16 | 0.03 |
| (1,159) | 1:A:160:LEU:HD21 | 1:A:163:LEU:H | 16 | 0.03 |
| (1,159) | 1:A:160:LEU:HD22 | 1:A:163:LEU:H | 16 | 0.03 |
| (1,159) | 1:A:160:LEU:HD23 | 1:A:163:LEU:H | 16 | 0.03 |
| (1,159) | 1:A:160:LEU:HD21 | 1:A:163:LEU:H | 19 | 0.03 |
| (1,159) | 1:A:160:LEU:HD22 | 1:A:163:LEU:H | 19 | 0.03 |
| (1,159) | 1:A:160:LEU:HD23 | 1:A:163:LEU:H | 19 | 0.03 |
| (1,153) | 1:A:57:VAL:H | 1:A:81:VAL:HG21 | 4 | 0.03 |
| (1,153) | 1:A:57:VAL:H | 1:A:81:VAL:HG22 | 4 | 0.03 |
| (1,153) | 1:A:57:VAL:H | 1:A:81:VAL:HG23 | 4 | 0.03 |
| (1,153) | 1:A:57:VAL:H | 1:A:81:VAL:HG21 | 13 | 0.03 |
| (1,153) | 1:A:57:VAL:H | 1:A:81:VAL:HG22 | 13 | 0.03 |
| (1,153) | 1:A:57:VAL:H | 1:A:81:VAL:HG23 | 13 | 0.03 |
| (1,153) | 1:A:57:VAL:H | 1:A:81:VAL:HG21 | 15 | 0.03 |
| (1,153) | 1:A:57:VAL:H | 1:A:81:VAL:HG22 | 15 | 0.03 |
| (1,153) | 1:A:57:VAL:H | 1:A:81:VAL:HG23 | 15 | 0.03 |
| (1,152) | 1:A:37:ALA:H | 1:A:57:VAL:H | 5 | 0.03 |
| (1,145) | 1:A:175:LEU:H | 1:A:184:LYS:H | 11 | 0.03 |
| (1,1121) | 1:A:169:ASN:H | 1:A:189:GLN:O | 20 | 0.03 |
| (1,1113) | 1:A:127:PHE:H | 1:A:192:GLY:O | 2 | 0.03 |
| (1,1113) | 1:A:127:PHE:H | 1:A:192:GLY:O | 3 | 0.03 |
| (1,1105) | 1:A:102:PHE:H | 1:A:128:ILE:O | 4 | 0.03 |
| $-(\tau,\tau\tau00)$ | 1.71.102.1 1111.11 | 1.71.120.1111.0 | _ | 0.00 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,1098) | 1:A:124:GLY:O | 1:A:98:ILE:N | 3 | 0.03 |
| (1,1098) | 1:A:124:GLY:O | 1:A:98:ILE:N | 11 | 0.03 |
| (1,1086) | 1:A:155:THR:O | 1:A:159:GLU:H | 11 | 0.03 |
| (1,1085) | 1:A:154:GLU:O | 1:A:158:SER:N | 7 | 0.03 |
| (1,1085) | 1:A:154:GLU:O | 1:A:158:SER:N | 20 | 0.03 |
| (1,108) | 1:A:145:LYS:H | 1:A:148:ASP:H | 1 | 0.03 |
| (1,1070) | 1:A:108:SER:O | 1:A:112:GLN:H | 18 | 0.03 |
| (1,1050) | 1:A:62:VAL:O | 1:A:66:LYS:H | 15 | 0.03 |
| (1,1046) | 1:A:46:PHE:O | 1:A:50:LEU:H | 3 | 0.03 |
| (1,1046) | 1:A:46:PHE:O | 1:A:50:LEU:H | 9 | 0.03 |
| (1,1046) | 1:A:46:PHE:O | 1:A:50:LEU:H | 12 | 0.03 |
| (1,1042) | 1:A:44:ALA:O | 1:A:48:ALA:H | 15 | 0.03 |
| (1,1035) | 1:A:23:SER:O | 1:A:27:GLN:N | 4 | 0.03 |
| (1,1025) | 1:A:88:PHE:HE1 | 1:A:34:LEU:HD21 | 5 | 0.03 |
| (1,1025) | 1:A:88:PHE:HE1 | 1:A:34:LEU:HD22 | 5 | 0.03 |
| (1,1025) | 1:A:88:PHE:HE1 | 1:A:34:LEU:HD23 | 5 | 0.03 |
| (1,1025) | 1:A:88:PHE:HE2 | 1:A:34:LEU:HD21 | 5 | 0.03 |
| (1,1025) | 1:A:88:PHE:HE2 | 1:A:34:LEU:HD22 | 5 | 0.03 |
| (1,1025) | 1:A:88:PHE:HE2 | 1:A:34:LEU:HD23 | 5 | 0.03 |
| (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:85:LEU:HD21 | 15 | 0.03 |
| (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:85:LEU:HD22 | 15 | 0.03 |
| (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:85:LEU:HD23 | 15 | 0.03 |
| (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:85:LEU:HD21 | 15 | 0.03 |
| (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:85:LEU:HD22 | 15 | 0.03 |
| (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:85:LEU:HD23 | 15 | 0.03 |
| (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:85:LEU:HD21 | 15 | 0.03 |
| (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:85:LEU:HD22 | 15 | 0.03 |
| (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:85:LEU:HD23 | 15 | 0.03 |
| (1,1003) | 1:A:59:GLN:H | 1:A:37:ALA:H | 15 | 0.03 |
| (1,1002) | 1:A:57:VAL:H | 1:A:37:ALA:H | 16 | 0.03 |
| (1,997) | 1:A:81:VAL:H | 1:A:58:ASP:H | 11 | 0.02 |
| (1,994) | 1:A:79:THR:H | 1:A:54:VAL:H | 20 | 0.02 |
| (1,993) | 1:A:36:LEU:H | 1:A:99:VAL:H | 5 | 0.02 |
| (1,989) | 1:A:163:LEU:HD11 | 1:A:165:TRP:HE1 | 7 | 0.02 |
| (1,989) | 1:A:163:LEU:HD12 | 1:A:165:TRP:HE1 | 7 | 0.02 |
| (1,989) | 1:A:163:LEU:HD13 | 1:A:165:TRP:HE1 | 7 | 0.02 |
| (1,989) | 1:A:163:LEU:HD11 | 1:A:165:TRP:HE1 | 8 | 0.02 |
| (1,989) | 1:A:163:LEU:HD12 | 1:A:165:TRP:HE1 | 8 | 0.02 |
| (1,989) | 1:A:163:LEU:HD13 | 1:A:165:TRP:HE1 | 8 | 0.02 |
| (1,989) | 1:A:163:LEU:HD11 | 1:A:165:TRP:HE1 | 10 | 0.02 |
| (1,989) | 1:A:163:LEU:HD12 | 1:A:165:TRP:HE1 | 10 | 0.02 |
| (1,989) | 1:A:163:LEU:HD13 | 1:A:165:TRP:HE1 | 10 | 0.02 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,988) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:H | 20 | 0.02 |
| (1,988) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:H | 20 | 0.02 |
| (1,988) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:H | 20 | 0.02 |
| (1,985) | 1:A:129:LEU:HD21 | 1:A:130:GLU:H | 13 | 0.02 |
| (1,985) | 1:A:129:LEU:HD22 | 1:A:130:GLU:H | 13 | 0.02 |
| (1,985) | 1:A:129:LEU:HD23 | 1:A:130:GLU:H | 13 | 0.02 |
| (1,971) | 1:A:160:LEU:HD11 | 1:A:163:LEU:H | 17 | 0.02 |
| (1,971) | 1:A:160:LEU:HD12 | 1:A:163:LEU:H | 17 | 0.02 |
| (1,971) | 1:A:160:LEU:HD13 | 1:A:163:LEU:H | 17 | 0.02 |
| (1,955) | 1:A:173:ARG:H | 1:A:187:LEU:HD21 | 9 | 0.02 |
| (1,955) | 1:A:173:ARG:H | 1:A:187:LEU:HD22 | 9 | 0.02 |
| (1,955) | 1:A:173:ARG:H | 1:A:187:LEU:HD23 | 9 | 0.02 |
| (1,955) | 1:A:173:ARG:H | 1:A:187:LEU:HD21 | 11 | 0.02 |
| (1,955) | 1:A:173:ARG:H | 1:A:187:LEU:HD22 | 11 | 0.02 |
| (1,955) | 1:A:173:ARG:H | 1:A:187:LEU:HD23 | 11 | 0.02 |
| (1,954) | 1:A:70:LEU:H | 1:A:78:ILE:HD11 | 9 | 0.02 |
| (1,954) | 1:A:70:LEU:H | 1:A:78:ILE:HD12 | 9 | 0.02 |
| (1,954) | 1:A:70:LEU:H | 1:A:78:ILE:HD13 | 9 | 0.02 |
| (1,943) | 1:A:68:LYS:H | 1:A:78:ILE:HD11 | 7 | 0.02 |
| (1,943) | 1:A:68:LYS:H | 1:A:78:ILE:HD12 | 7 | 0.02 |
| (1,943) | 1:A:68:LYS:H | 1:A:78:ILE:HD13 | 7 | 0.02 |
| (1,942) | 1:A:49:SER:H | 1:A:50:LEU:HD21 | 15 | 0.02 |
| (1,942) | 1:A:49:SER:H | 1:A:50:LEU:HD22 | 15 | 0.02 |
| (1,942) | 1:A:49:SER:H | 1:A:50:LEU:HD23 | 15 | 0.02 |
| (1,937) | 1:A:167:ILE:H | 1:A:191:LEU:HD21 | 13 | 0.02 |
| (1,937) | 1:A:167:ILE:H | 1:A:191:LEU:HD22 | 13 | 0.02 |
| (1,937) | 1:A:167:ILE:H | 1:A:191:LEU:HD23 | 13 | 0.02 |
| (1,937) | 1:A:167:ILE:H | 1:A:191:LEU:HD21 | 20 | 0.02 |
| (1,937) | 1:A:167:ILE:H | 1:A:191:LEU:HD22 | 20 | 0.02 |
| (1,937) | 1:A:167:ILE:H | 1:A:191:LEU:HD23 | 20 | 0.02 |
| (1,932) | 1:A:172:GLU:H | 1:A:187:LEU:HD11 | 3 | 0.02 |
| (1,932) | 1:A:172:GLU:H | 1:A:187:LEU:HD12 | 3 | 0.02 |
| (1,932) | 1:A:172:GLU:H | 1:A:187:LEU:HD13 | 3 | 0.02 |
| (1,927) | 1:A:76:VAL:HG21 | 1:A:77:LYS:H | 4 | 0.02 |
| (1,927) | 1:A:76:VAL:HG22 | 1:A:77:LYS:H | 4 | 0.02 |
| (1,927) | 1:A:76:VAL:HG23 | 1:A:77:LYS:H | 4 | 0.02 |
| (1,924) | 1:A:27:GLN:H | 1:A:126:VAL:HG21 | 2 | 0.02 |
| (1,924) | 1:A:27:GLN:H | 1:A:126:VAL:HG22 | 2 | 0.02 |
| (1,924) | 1:A:27:GLN:H | 1:A:126:VAL:HG23 | 2 | 0.02 |
| (1,924) | 1:A:27:GLN:H | 1:A:126:VAL:HG21 | 15 | 0.02 |
| (1,924) | 1:A:27:GLN:H | 1:A:126:VAL:HG22 | 15 | 0.02 |
| (1,924) | 1:A:27:GLN:H | 1:A:126:VAL:HG23 | 15 | 0.02 |



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

| (1,917) 1:A:154:GLU:H 1:A:190;LEU:HD21 2 0.02 (1,917) 1:A:154:GLU:H 1:A:190;LEU:HD22 2 0.02 (1,917) 1:A:154:GLU:H 1:A:190;LEU:HD21 14 0.02 (1,917) 1:A:154:GLU:H 1:A:190;LEU:HD22 14 0.02 (1,917) 1:A:154:GLU:H 1:A:190;LEU:HD22 14 0.02 (1,910) 1:A:31:VAL:HG11 1:A:82;GLN:H 5 0.02 (1,910) 1:A:81:VAL:HG11 1:A:82;GLN:H 5 0.02 (1,910) 1:A:81:VAL:HG13 1:A:82;GLN:H 5 0.02 (1,910) 1:A:81:VAL:HG11 1:A:82;GLN:H 5 0.02 (1,910) 1:A:81:VAL:HG11 1:A:82;GLN:H 15 0.02 (1,910) 1:A:81:VAL:HG12 1:A:82;GLN:H 15 0.02 (1,910) 1:A:81:VAL:HG13 1:A:82;GLN:H 16 0.02 (1,910) 1:A:31:12;GLN:H 16 0.02 1 (1,910) 1:A:33:ILE:H 1:A:54:VAL:HG21 16 <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) |
|--|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,917) 1:A:154:GLU:H 1:A:190:LEU:HD23 2 0.02 (1,917) 1:A:154:GLU:H 1:A:190:LEU:HD21 14 0.02 (1,917) 1:A:154:GLU:H 1:A:190:LEU:HD22 14 0.02 (1,917) 1:A:154:GLU:H 1:A:190:LEU:HD23 14 0.02 (1,917) 1:A:154:GLU:H 1:A:190:LEU:HD23 14 0.02 (1,910) 1:A:81:VAL:HG11 1:A:82:GLN:H 5 0.02 (1,910) 1:A:81:VAL:HG12 1:A:82:GLN:H 5 0.02 (1,910) 1:A:81:VAL:HG13 1:A:82:GLN:H 5 0.02 (1,910) 1:A:81:VAL:HG13 1:A:82:GLN:H 5 0.02 (1,910) 1:A:81:VAL:HG11 1:A:82:GLN:H 15 0.02 (1,910) 1:A:81:VAL:HG13 1:A:82:GLN:H 16 0.02 (1,910) 1:A:81:VAL:HG13 1:A:82:GLN:H 16 0.02 (1,910) 1:A:81:VAL:HG11 1:A:82:GLN:H 16 0.02 (1,910) 1:A:81:VAL:HG13 1:A:82:GLN:H 16 0.02 (1,910) 1:A:81:VAL:HG13 1:A:82:GLN:H 16 0.02 (1,907) 1:A:33:ILE:H 1:A:54:VAL:HG21 16 0.02 (1,907) 1:A:33:ILE:H 1:A:54:VAL:HG21 16 0.02 (1,907) 1:A:33:ILE:H 1:A:54:VAL:HG21 16 0.02 (1,907) 1:A:33:ILE:H 1:A:54:VAL:HG22 16 0.02 (1,907) 1:A:33:ILE:H 1:A:54:VAL:HG23 16 0.02 (1,904) 1:A:100:SER:H 1:A:101:ILE:HD11 11 0.02 (1,904) 1:A:100:SER:H 1:A:101:ILE:HD11 11 0.02 (1,904) 1:A:100:SER:H 1:A:101:ILE:HD11 11 0.02 (1,904) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:169:ASN:H 12 0.02 (1,902) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:169:ASN:H 12 0.02 (1,902) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:169:ASN:H 12 0.02 (1,902) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:169:ASN:H 12 0.02 (1,896) 1:A:166:LEU:HD11 1:A:169:ASN:H 11 0.02 (1,896) 1:A:166:LEU:HD11 1:A:169:ASN:H 11 0.02 (1,896) 1:A:166:LEU:HD11 1:A:169:ASN:H 12 0.02 (1,896) 1:A:166:LEU:HD11 1:A:169:ASN:H 11 0.02 (1,896) 1:A:166:LEU:HD11 1:A:169:ASN:H 12 0.02 (1,896) 1:A:166:LEU:HD11 1:A:169:ASN:H 11 0.02 (1,896) 1:A:166:LEU:HD11 1:A:169:ABD:HD12 10 0.02 (1,896) 1:A:166:LEU:HD12 1:A:169:ABD:HD12 10 0.02 (1,896) 1:A:166:LEU:HD12 1:A:169:ABD:HD12 10 0.02 (1,896) 1:A: | (1,917) | 1:A:154:GLU:H | 1:A:190:LEU:HD21 | 2 | 0.02 |
| (1,917) 1:A:154:GLU:H 1:A:190:LEU:HD21 14 0.02 (1,917) 1:A:154:GLU:H 1:A:190:LEU:HD22 14 0.02 (1,917) 1:A:154:GLU:H 1:A:190:LEU:HD23 14 0.02 (1,910) 1:A:81:VAL:HG11 1:A:82:GLN:H 5 0.02 (1,910) 1:A:81:VAL:HG11 1:A:82:GLN:H 5 0.02 (1,910) 1:A:81:VAL:HG12 1:A:82:GLN:H 5 0.02 (1,910) 1:A:81:VAL:HG13 1:A:82:GLN:H 5 0.02 (1,910) 1:A:81:VAL:HG11 1:A:82:GLN:H 5 0.02 (1,910) 1:A:81:VAL:HG11 1:A:82:GLN:H 15 0.02 (1,910) 1:A:81:VAL:HG13 1:A:82:GLN:H 15 0.02 (1,910) 1:A:81:VAL:HG13 1:A:82:GLN:H 16 0.02 (1,910) 1:A:31:LE:H 1:A:54:VAL:HG21 16 0.02 (1,907) 1:A:33:ILE:H 1:A:54:VAL:HG21 16 0.02 (1,907) 1:A:33:ILE:H 1:A:54:VAL:HG21 16 0.02 (1,907) 1:A:33:ILE:H 1:A:54:VAL:HG23 16 0.02 (1,904) 1:A:100:SER:H 1:A:101:ILE:HD11 11 0.02 (1,904) 1:A:100:SER:H 1:A:101:ILE:HD11 11 0.02 (1,904) 1:A:100:SER:H 1:A:101:ILE:HD13 11 0.02 (1,902) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:169:ASN:H 12 0.02 (1,902) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:169:ASN:H 12 0.02 (1,902) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:169:ASN:H 12 0.02 (1,902) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:169:ASN:H 12 0.02 (1,896) 1:A:166:LEU:HD13 1:A:169:ASD:H 11 0.02 (1,896) 1:A:166:LEU:HD13 1:A:179:THR:H 14 0.02 (1,896) 1:A:166:LEU:HD | (1,917) | 1:A:154:GLU:H | 1:A:190:LEU:HD22 | 2 | 0.02 |
| (1,917) 1:A:154:GLU:H 1:A:190:LEU:HD23 14 0.02 (1,917) 1:A:154:GLU:H 1:A:190:LEU:HD23 14 0.02 (1,910) 1:A:81:VAL:HG11 1:A:82:GLN:H 5 0.02 (1,910) 1:A:81:VAL:HG12 1:A:82:GLN:H 5 0.02 (1,910) 1:A:81:VAL:HG13 1:A:82:GLN:H 5 0.02 (1,910) 1:A:81:VAL:HG12 1:A:82:GLN:H 15 0.02 (1,910) 1:A:81:VAL:HG12 1:A:82:GLN:H 15 0.02 (1,910) 1:A:81:VAL:HG13 1:A:82:GLN:H 16 0.02 (1,910) 1:A:13:SI:LEH 1:A:482:GLN:H 16 0.02 (1,910) 1:A:33:LE:H 1:A:54:VAL:HG21 16 0.02 (1,907) 1:A:33:LE:H 1:A:54:VAL:HG23 | (1,917) | 1:A:154:GLU:H | 1:A:190:LEU:HD23 | 2 | 0.02 |
| (1,917) 1:A:154:GLU:H 1:A:190:LEU:HD23 14 0.02 (1,910) 1:A:81:VAL:HG11 1:A:82:GLN:H 5 0.02 (1,910) 1:A:81:VAL:HG12 1:A:82:GLN:H 5 0.02 (1,910) 1:A:81:VAL:HG13 1:A:82:GLN:H 5 0.02 (1,910) 1:A:81:VAL:HG13 1:A:82:GLN:H 5 0.02 (1,910) 1:A:81:VAL:HG11 1:A:82:GLN:H 15 0.02 (1,910) 1:A:81:VAL:HG11 1:A:82:GLN:H 15 0.02 (1,910) 1:A:81:VAL:HG12 1:A:82:GLN:H 15 0.02 (1,910) 1:A:81:VAL:HG13 1:A:82:GLN:H 15 0.02 (1,910) 1:A:81:VAL:HG13 1:A:82:GLN:H 16 0.02 (1,910) 1:A:81:VAL:HG11 1:A:82:GLN:H 16 0.02 (1,910) 1:A:81:VAL:HG13 1:A:82:GLN:H 16 0.02 (1,910) 1:A:81:VAL:HG13 1:A:82:GLN:H 16 0.02 (1,910) 1:A:81:VAL:HG13 1:A:82:GLN:H 16 0.02 (1,910) 1:A:33:ILE:H 1:A:54:VAL:HG21 16 0.02 (1,907) 1:A:33:ILE:H 1:A:54:VAL:HG21 16 0.02 (1,907) 1:A:33:ILE:H 1:A:54:VAL:HG21 16 0.02 (1,907) 1:A:33:ILE:H 1:A:54:VAL:HG23 16 0.02 (1,907) 1:A:33:ILE:H 1:A:54:VAL:HG23 16 0.02 (1,904) 1:A:100:SER:H 1:A:101:ILE:HD11 11 0.02 (1,904) 1:A:100:SER:H 1:A:101:ILE:HD11 11 0.02 (1,904) 1:A:100:SER:H 1:A:101:ILE:HD11 11 0.02 (1,904) 1:A:100:SER:H 1:A:101:ILE:HD13 11 0.02 (1,902) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:169:ASN:H 12 0.02 (1,896) 1:A:166:LEU:HD11 1:A:193:GLN:H 11 0.02 (1,896) 1:A:166:LEU:HD13 1:A:193:GLN:H 11 0.02 (1,891) 1:A:125:GLY:H 1:A:163:LEU:HD22 20 0.02 (1,885) 1:A:50:LEU:H 1:A:54:VAL:HG23 12 0.02 (1,885) 1:A:50:LEU:H 1:A:54:VAL:HG23 12 0.02 (1,885) 1:A:50:LEU:H 1:A:54:VAL:HG21 12 0.02 (1,885) 1:A:50:LEU:H 1:A:163:LEU:HD23 20 0.02 (1,885) 1:A:50:LEU:H 1:A:163:LEU:HD23 20 0.02 (1,885) 1:A:50:LEU:H 1:A:54:VAL:HG21 12 0.02 (1,880) 1:A:109:LEU:HD21 1:A:133:LEU:H 7 0.02 (1,880) 1:A:109:LEU:HD21 1:A:133:LEU: | (1,917) | 1:A:154:GLU:H | 1:A:190:LEU:HD21 | 14 | 0.02 |
| (1,910) 1:A:81:VAL:HG11 1:A:82:GLN:H 5 0.02 (1,910) 1:A:81:VAL:HG12 1:A:82:GLN:H 5 0.02 (1,910) 1:A:81:VAL:HG13 1:A:82:GLN:H 5 0.02 (1,910) 1:A:81:VAL:HG11 1:A:82:GLN:H 15 0.02 (1,910) 1:A:81:VAL:HG11 1:A:82:GLN:H 15 0.02 (1,910) 1:A:81:VAL:HG12 1:A:82:GLN:H 15 0.02 (1,910) 1:A:81:VAL:HG13 1:A:82:GLN:H 15 0.02 (1,910) 1:A:81:VAL:HG13 1:A:82:GLN:H 15 0.02 (1,910) 1:A:81:VAL:HG13 1:A:82:GLN:H 16 0.02 (1,910) 1:A:81:VAL:HG11 1:A:82:GLN:H 16 0.02 (1,910) 1:A:81:VAL:HG12 1:A:82:GLN:H 16 0.02 (1,910) 1:A:81:VAL:HG13 1:A:82:GLN:H 16 0.02 (1,910) 1:A:31:LE:H 1:A:54:VAL:HG21 16 0.02 (1,907) 1:A:33:ILE:H 1:A:54:VAL:HG21 16 0.02 (1,907) 1:A:33:ILE:H 1:A:54:VAL:HG21 16 0.02 (1,907) 1:A:33:ILE:H 1:A:54:VAL:HG23 16 0.02 (1,907) 1:A:33:ILE:H 1:A:54:VAL:HG23 16 0.02 (1,904) 1:A:100:SER:H 1:A:101:ILE:HD11 11 0.02 (1,904) 1:A:100:SER:H 1:A:101:ILE:HD11 11 0.02 (1,904) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:169:ASN:H 12 0.02 (1,902) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:169:ASN:H 11 0.02 (1,896) 1:A:166:LEU:HD11 1:A:193:GLN:H 11 0.02 (1,896) 1:A:166:LEU:HD11 1:A:193:GLN:H 11 0.02 (1,896) 1:A:166:LEU:HD12 1:A:193:GLN:H 11 0.02 (1,891) 1:A:125:GLY:H 1:A:163:LEU:HD22 20 0.02 (1,891) 1:A:125:GLY:H 1:A:163:LEU:HD22 20 0.02 (1,885) 1:A:50:LEU:H 1:A:54:VAL:HG23 12 0.02 (1,886) 1:A:100:LEU:HD11 1:A:136:LEU:HD23 12 0.02 (1,886) 1:A:100:LEU:HD11 1:A:136:LEU:H 77 | (1,917) | 1:A:154:GLU:H | 1:A:190:LEU:HD22 | 14 | 0.02 |
| (1,910) 1:A:81:VAL:HG12 1:A:82:GLN:H 5 0.02 (1,910) 1:A:81:VAL:HG13 1:A:82:GLN:H 5 0.02 (1,910) 1:A:81:VAL:HG11 1:A:82:GLN:H 15 0.02 (1,910) 1:A:81:VAL:HG12 1:A:82:GLN:H 15 0.02 (1,910) 1:A:81:VAL:HG13 1:A:82:GLN:H 16 0.02 (1,910) 1:A:81:VAL:HG12 1:A:82:GLN:H 16 0.02 (1,910) 1:A:81:VAL:HG13 1:A:82:GLN:H 16 0.02 (1,910) 1:A:81:VAL:HG12 1:A:82:GLN:H 16 0.02 (1,901) 1:A:33:LE:H 1:A:4:14:TYR:H 14 0.02 (1,907) 1:A:33:LE:H 1:A:54:VAL:HG23 16 0.02 (1,907) 1:A:33:LE:H 1:A:54:VAL:HG23 16 </td <td>(1,917)</td> <td>1:A:154:GLU:H</td> <td>1:A:190:LEU:HD23</td> <td>14</td> <td>0.02</td> | (1,917) | 1:A:154:GLU:H | 1:A:190:LEU:HD23 | 14 | 0.02 |
| (1,910) 1:A:81:VAL:HG13 1:A:82:GLN:H 5 0.02 (1,910) 1:A:81:VAL:HG11 1:A:82:GLN:H 15 0.02 (1,910) 1:A:81:VAL:HG12 1:A:82:GLN:H 15 0.02 (1,910) 1:A:81:VAL:HG13 1:A:82:GLN:H 15 0.02 (1,910) 1:A:81:VAL:HG13 1:A:82:GLN:H 15 0.02 (1,910) 1:A:81:VAL:HG11 1:A:82:GLN:H 16 0.02 (1,910) 1:A:81:VAL:HG11 1:A:82:GLN:H 16 0.02 (1,910) 1:A:81:VAL:HG13 1:A:82:GLN:H 16 0.02 (1,910) 1:A:81:VAL:HG13 1:A:82:GLN:H 16 0.02 (1,910) 1:A:81:VAL:HG13 1:A:82:GLN:H 16 0.02 (1,910) 1:A:31:U2:GLN:H 1:A:114:TYR:H 14 0.02 (1,907) 1:A:33:ILE:H 1:A:54:VAL:HG21 16 0.02 (1,907) 1:A:33:ILE:H 1:A:54:VAL:HG21 16 0.02 (1,907) 1:A:33:ILE:H 1:A:54:VAL:HG22 16 0.02 (1,907) 1:A:33:ILE:H 1:A:54:VAL:HG23 16 0.02 (1,904) 1:A:100:SER:H 1:A:101:ILE:HD11 11 0.02 (1,904) 1:A:100:SER:H 1:A:101:ILE:HD11 11 0.02 (1,904) 1:A:100:SER:H 1:A:101:ILE:HD12 11 0.02 (1,902) 1:A:153:IEU:HD11 1:A:169:ASN:H 12 0.02 (1,902) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:169:ASN:H 12 0.02 (1,902) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:169:ASN:H 12 0.02 (1,902) 1:A:166:LEU:HD13 1:A:169:ASN:H 11 0.02 (1,896) 1:A:166:LEU:HD11 1:A:193:GLN:H 11 0.02 (1,896) 1:A:166:LEU:HD11 1:A:193:GLN:H 11 0.02 (1,896) 1:A:125:GLY:H 1:A:163:LEU:HD22 20 0.02 (1,891) 1:A:125:GLY:H 1:A:163:LEU:HD23 20 0.02 (1,891) 1:A:125:GLY:H 1:A:163:LEU:HD23 20 0.02 (1,891) 1:A:125:GLY:H 1:A:163:LEU:HD23 20 0.02 (1,885) 1:A:50:LEU:H 1:A:54:VAL:HG23 12 0.02 (1,885) 1:A:50:LEU:H 1:A:63:LEU:HD23 20 0.02 (1,885) 1:A:50:LEU:H 1:A:63:LEU:HD23 12 0.02 (1,885) 1:A:50:LEU:H 1:A:63:LEU:HD23 12 0.02 (1,886) 1:A:78:ILE:HD11 1:A:79:THR:H 14 0.02 (1,880) 1:A:109:LEU:HD21 1:A:113:LEU:H 7 0.02 (1,880) 1:A:109:LEU:HD21 1:A:113 | (1,910) | 1:A:81:VAL:HG11 | 1:A:82:GLN:H | 5 | 0.02 |
| (1,910) 1:A:81:VAL:HG11 1:A:82:GLN:H 15 0.02 (1,910) 1:A:81:VAL:HG12 1:A:82:GLN:H 15 0.02 (1,910) 1:A:81:VAL:HG13 1:A:82:GLN:H 15 0.02 (1,910) 1:A:81:VAL:HG11 1:A:82:GLN:H 16 0.02 (1,910) 1:A:81:VAL:HG11 1:A:82:GLN:H 16 0.02 (1,910) 1:A:81:VAL:HG13 1:A:82:GLN:H 16 0.02 (1,910) 1:A:81:VAL:HG13 1:A:82:GLN:H 16 0.02 (1,910) 1:A:81:VAL:HG13 1:A:82:GLN:H 16 0.02 (1,910) 1:A:33:ILE:H 1:A:54:VAL:HG21 16 0.02 (1,907) 1:A:33:ILE:H 1:A:54:VAL:HG21 16 0.02 (1,907) 1:A:33:ILE:H 1:A:54:VAL:HG22 16 0.02 (1,907) 1:A:33:ILE:H 1:A:54:VAL:HG23 16 0.02 (1,907) 1:A:33:ILE:H 1:A:54:VAL:HG23 16 0.02 (1,904) 1:A:100:SER:H 1:A:101:ILE:HD11 11 0.02 (1,904) 1:A:100:SER:H 1:A:101:ILE:HD12 11 0.02 (1,904) 1:A:153:IEU:HD11 1:A:169:ASN:H 12 0.02 (1,902) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:169:ASN:H 12 0.02 (1,902) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:169:ASN:H 12 0.02 (1,902) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:169:ASN:H 12 0.02 (1,896) 1:A:166:LEU:HD11 1:A:193:GLN:H 11 0.02 (1,896) 1:A:166:LEU:HD11 1:A:193:GLN:H 11 0.02 (1,891) 1:A:125:GLY:H 1:A:163:LEU:HD22 20 0.02 (1,891) 1:A:125:GLY:H 1:A:163:LEU:HD22 20 0.02 (1,891) 1:A:125:GLY:H 1:A:163:LEU:HD23 12 0.02 (1,891) 1:A:125:GLY:H 1:A:163:LEU:HD23 12 0.02 (1,885) 1:A:50:LEU:H 1:A:54:VAL:HG23 12 0.02 (1,885) 1:A:50:LEU:H 1:A:54:VAL:HG23 12 0.02 (1,881) 1:A:78:ILE:HD11 1:A:79:THR:H 14 0.02 (1,880) 1:A:109:LEU:HD21 1:A:113:LEU:H 7 0.02 (1,880) 1:A:109:LEU:HD21 1:A: | (1,910) | 1:A:81:VAL:HG12 | 1:A:82:GLN:H | 5 | 0.02 |
| (1,910) 1:A:81:VAL:HG12 1:A:82:GLN:H 15 0.02 (1,910) 1:A:81:VAL:HG13 1:A:82:GLN:H 15 0.02 (1,910) 1:A:81:VAL:HG11 1:A:82:GLN:H 16 0.02 (1,910) 1:A:81:VAL:HG12 1:A:82:GLN:H 16 0.02 (1,910) 1:A:81:VAL:HG13 1:A:82:GLN:H 16 0.02 (1,910) 1:A:31:VAL:HG13 1:A:82:GLN:H 16 0.02 (1,911) 1:A:112:GLN:H 1:A:114:TYR:H 14 0.02 (1,907) 1:A:33:ILE:H 1:A:54:VAL:HG21 16 0.02 (1,907) 1:A:33:ILE:H 1:A:54:VAL:HG22 16 0.02 (1,907) 1:A:33:ILE:H 1:A:54:VAL:HG23 16 0.02 (1,907) 1:A:33:ILE:H 1:A:101:ILE:HD11 11 0.02 (1,904) 1:A:100:SER:H 1:A:101:ILE:HD11 11 0.02 (1,904) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:169:ASN:H 12 0.02 (1,902) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:169:ASN:H | (1,910) | 1:A:81:VAL:HG13 | 1:A:82:GLN:H | 5 | 0.02 |
| (1,910) 1:A:81:VAL:HG13 1:A:82:GLN:H 15 0.02 (1,910) 1:A:81:VAL:HG11 1:A:82:GLN:H 16 0.02 (1,910) 1:A:81:VAL:HG12 1:A:82:GLN:H 16 0.02 (1,910) 1:A:81:VAL:HG13 1:A:82:GLN:H 16 0.02 (1,910) 1:A:112:GLN:H 1:A:114:TYR:H 14 0.02 (1,907) 1:A:33:ILE:H 1:A:54:VAL:HG21 16 0.02 (1,907) 1:A:33:ILE:H 1:A:54:VAL:HG22 16 0.02 (1,907) 1:A:33:ILE:H 1:A:54:VAL:HG23 16 0.02 (1,907) 1:A:33:ILE:H 1:A:54:VAL:HG23 16 0.02 (1,907) 1:A:33:ILE:H 1:A:101:ILE:HD111 11 0.02 (1,904) 1:A:100:SER:H 1:A:101:ILE:HD12 11 0.02 (1,904) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:169:ASN:H 12 0.02 (1,902) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:169:ASN:H 12 0.02 (1,902) 1:A:166:LEU:HD13 1:A:193:GLN:H | (1,910) | 1:A:81:VAL:HG11 | 1:A:82:GLN:H | 15 | 0.02 |
| (1,910) 1:A:81:VAL:HG11 1:A:82:GLN:H 16 0.02 (1,910) 1:A:81:VAL:HG12 1:A:82:GLN:H 16 0.02 (1,910) 1:A:81:VAL:HG13 1:A:82:GLN:H 16 0.02 (1,91) 1:A:112:GLN:H 1:A:82:GLN:H 16 0.02 (1,907) 1:A:33:ILE:H 1:A:54:VAL:HG21 16 0.02 (1,907) 1:A:33:ILE:H 1:A:54:VAL:HG22 16 0.02 (1,907) 1:A:33:ILE:H 1:A:54:VAL:HG23 16 0.02 (1,907) 1:A:33:ILE:H 1:A:410:ILE:HD13 11 0.02 (1,904) 1:A:100:SER:H 1:A:101:ILE:HD11 11 0.02 (1,904) 1:A:100:SER:H 1:A:101:ILE:HD13 11 0.02 (1,904) 1:A:100:SER:H 1:A:101:ILE:HD13 11 0.02 (1,904) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:169:ASN:H 12 0.02 (1,902) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:169:ASN:H 12 0.02 (1,902) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:169:ASN:H | (1,910) | 1:A:81:VAL:HG12 | 1:A:82:GLN:H | 15 | 0.02 |
| (1,910) 1:A:81:VAL:HG12 1:A:82:GLN:H 16 0.02 (1,910) 1:A:81:VAL:HG13 1:A:82:GLN:H 16 0.02 (1,91) 1:A:112:GLN:H 1:A:114:TYR:H 14 0.02 (1,907) 1:A:33:ILE:H 1:A:54:VAL:HG21 16 0.02 (1,907) 1:A:33:ILE:H 1:A:54:VAL:HG22 16 0.02 (1,907) 1:A:33:ILE:H 1:A:54:VAL:HG23 16 0.02 (1,907) 1:A:33:ILE:H 1:A:410:ILE:HD11 11 0.02 (1,904) 1:A:100:SER:H 1:A:101:ILE:HD12 11 0.02 (1,904) 1:A:100:SER:H 1:A:101:ILE:HD13 11 0.02 (1,902) 1:A:13:ILE:HD11 1:A:169:ASN:H <td>(1,910)</td> <td>1:A:81:VAL:HG13</td> <td>1:A:82:GLN:H</td> <td>15</td> <td>0.02</td> | (1,910) | 1:A:81:VAL:HG13 | 1:A:82:GLN:H | 15 | 0.02 |
| (1,910) 1:A:81:VAL:HG13 1:A:82:GLN:H 16 0.02 (1,91) 1:A:112:GLN:H 1:A:114:TYR:H 14 0.02 (1,907) 1:A:33:ILE:H 1:A:54:VAL:HG21 16 0.02 (1,907) 1:A:33:ILE:H 1:A:54:VAL:HG22 16 0.02 (1,907) 1:A:33:ILE:H 1:A:54:VAL:HG23 16 0.02 (1,904) 1:A:100:SER:H 1:A:101:ILE:HD11 11 0.02 (1,904) 1:A:100:SER:H 1:A:101:ILE:HD12 11 0.02 (1,904) 1:A:100:SER:H 1:A:101:ILE:HD13 11 0.02 (1,904) 1:A:160:SER:H 1:A:101:ILE:HD13 11 0.02 (1,902) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:169:ASN:H 12 0.02 (1,902) 1:A:163:LEU:HD13 1:A:169:ASN:H | (1,910) | 1:A:81:VAL:HG11 | 1:A:82:GLN:H | 16 | 0.02 |
| (1,910) 1:A:81:VAL:HG13 1:A:82:GLN:H 16 0.02 (1,91) 1:A:112:GLN:H 1:A:114:TYR:H 14 0.02 (1,907) 1:A:33:ILE:H 1:A:54:VAL:HG21 16 0.02 (1,907) 1:A:33:ILE:H 1:A:54:VAL:HG22 16 0.02 (1,907) 1:A:33:ILE:H 1:A:54:VAL:HG23 16 0.02 (1,904) 1:A:100:SER:H 1:A:101:ILE:HD11 11 0.02 (1,904) 1:A:100:SER:H 1:A:101:ILE:HD12 11 0.02 (1,904) 1:A:100:SER:H 1:A:101:ILE:HD13 11 0.02 (1,904) 1:A:100:SER:H 1:A:101:ILE:HD13 11 0.02 (1,904) 1:A:100:SER:H 1:A:101:ILE:HD13 11 0.02 (1,902) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:169:ASN:H 12 0.02 (1,902) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:169:ASN:H 12 0.02 (1,902) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:169:ASN:H 12 0.02 (1,902) 1:A:166:LEU:HD13 1:A:169:ASN:H | , | 1:A:81:VAL:HG12 | 1:A:82:GLN:H | 16 | 0.02 |
| (1,907) 1:A:33:ILE:H 1:A:54:VAL:HG21 16 0.02 (1,907) 1:A:33:ILE:H 1:A:54:VAL:HG22 16 0.02 (1,907) 1:A:33:ILE:H 1:A:54:VAL:HG23 16 0.02 (1,904) 1:A:100:SER:H 1:A:101:ILE:HD11 11 0.02 (1,904) 1:A:100:SER:H 1:A:101:ILE:HD12 11 0.02 (1,904) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:169:ASN:H 12 0.02 (1,902) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:169:ASN:H 12 0.02 (1,902) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:169:ASN:H 12 0.02 (1,902) 1:A:166:LEU:HD13 1:A:169:ASN:H 12 0.02 (1,896) 1:A:166:LEU:HD11 1:A:193:GLN:H 11 0.02 (1,896) 1:A:166:LEU:HD12 1:A:193:GLN:H 11 0.02 (1,891) 1:A:125:GLY:H 1:A:163:LEU:HD21 20 0.02 (1,891) 1:A:125:GLY:H 1:A:163:LEU:HD22 20 0.02 (1,885) 1:A:50:LEU:H 1:A:54:VAL: | · · / | 1:A:81:VAL:HG13 | 1:A:82:GLN:H | 16 | 0.02 |
| (1,907) 1:A:33:ILE:H 1:A:54:VAL:HG22 16 0.02 (1,907) 1:A:33:ILE:H 1:A:54:VAL:HG23 16 0.02 (1,904) 1:A:100:SER:H 1:A:101:ILE:HD11 11 0.02 (1,904) 1:A:100:SER:H 1:A:101:ILE:HD12 11 0.02 (1,904) 1:A:100:SER:H 1:A:101:ILE:HD13 11 0.02 (1,902) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:169:ASN:H 12 0.02 (1,902) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:169:ASN:H 12 0.02 (1,902) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:169:ASN:H 12 0.02 (1,902) 1:A:166:LEU:HD13 1:A:169:ASN:H 12 0.02 (1,896) 1:A:166:LEU:HD11 1:A:193:GLN:H 11 0.02 (1,896) 1:A:166:LEU:HD13 1:A:193:GLN:H 11 0.02 (1,891) 1:A:125:GLY:H 1:A:163:LEU:HD21 20 0.02 (1,891) 1:A:125:GLY:H 1:A:163:LEU:HD22 20 0.02 (1,885) 1:A:50:LEU:H 1:A:54:VA | , | 1:A:112:GLN:H | 1:A:114:TYR:H | 14 | 0.02 |
| (1,907) 1:A:33:ILE:H 1:A:54:VAL:HG22 16 0.02 (1,907) 1:A:33:ILE:H 1:A:54:VAL:HG23 16 0.02 (1,904) 1:A:100:SER:H 1:A:101:ILE:HD11 11 0.02 (1,904) 1:A:100:SER:H 1:A:101:ILE:HD12 11 0.02 (1,904) 1:A:100:SER:H 1:A:101:ILE:HD13 11 0.02 (1,904) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:169:ASN:H 12 0.02 (1,902) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:169:ASN:H 12 0.02 (1,902) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:169:ASN:H 12 0.02 (1,902) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:169:ASN:H 12 0.02 (1,896) 1:A:166:LEU:HD11 1:A:193:GLN:H 11 0.02 (1,896) 1:A:166:LEU:HD12 1:A:193:GLN:H 11 0.02 (1,896) 1:A:166:LEU:HD13 1:A:193:GLN:H 11 0.02 (1,891) 1:A:125:GLY:H 1:A:163:LEU:HD21 20 0.02 (1,891) 1:A:125:GLY:H 1:A:163: | / | 1:A:33:ILE:H | 1:A:54:VAL:HG21 | 16 | 0.02 |
| (1,907) 1:A:333:ILE:H 1:A:54:VAL:HG23 16 0.02 (1,904) 1:A:100:SER:H 1:A:101:ILE:HD11 11 0.02 (1,904) 1:A:100:SER:H 1:A:101:ILE:HD12 11 0.02 (1,904) 1:A:100:SER:H 1:A:101:ILE:HD13 11 0.02 (1,902) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:169:ASN:H 12 0.02 (1,902) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:169:ASN:H 12 0.02 (1,902) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:169:ASN:H 12 0.02 (1,902) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:169:ASN:H 12 0.02 (1,896) 1:A:166:LEU:HD11 1:A:193:GLN:H 11 0.02 (1,896) 1:A:166:LEU:HD12 1:A:193:GLN:H 11 0.02 (1,896) 1:A:166:LEU:HD13 1:A:193:GLN:H 11 0.02 (1,891) 1:A:125:GLY:H 1:A:163:LEU:HD21 20 0.02 (1,891) 1:A:125:GLY:H 1:A:163:LEU:HD23 20 0.02 (1,885) 1:A:50:LEU:H 1:A:54 | | 1:A:33:ILE:H | 1:A:54:VAL:HG22 | 16 | 0.02 |
| (1,904) 1:A:100:SER:H 1:A:101:ILE:HD12 11 0.02 (1,904) 1:A:100:SER:H 1:A:101:ILE:HD13 11 0.02 (1,902) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:169:ASN:H 12 0.02 (1,902) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:169:ASN:H 12 0.02 (1,902) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:169:ASN:H 12 0.02 (1,896) 1:A:166:LEU:HD11 1:A:193:GLN:H 11 0.02 (1,896) 1:A:166:LEU:HD12 1:A:193:GLN:H 11 0.02 (1,896) 1:A:166:LEU:HD13 1:A:193:GLN:H 11 0.02 (1,891) 1:A:125:GLY:H 1:A:163:LEU:HD21 20 0.02 (1,891) 1:A:125:GLY:H 1:A:163:LEU:HD22 20 0.02 (1,891) 1:A:125:GLY:H 1:A:163:LEU:HD23 20 0.02 (1,881) 1:A:50:LEU:H 1:A:54:VAL:HG21 12 0.02 (1,885) 1:A:50:LEU:H 1:A:54:VAL:HG22 12 0.02 (1,881) 1:A:78:ILE:HD11 1:A:79 | (1,907) | 1:A:33:ILE:H | 1:A:54:VAL:HG23 | 16 | 0.02 |
| (1,904) 1:A:100:SER:H 1:A:101:ILE:HD13 11 0.02 (1,902) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:169:ASN:H 12 0.02 (1,902) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:169:ASN:H 12 0.02 (1,902) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:169:ASN:H 12 0.02 (1,896) 1:A:166:LEU:HD11 1:A:193:GLN:H 11 0.02 (1,896) 1:A:166:LEU:HD12 1:A:193:GLN:H 11 0.02 (1,896) 1:A:166:LEU:HD13 1:A:193:GLN:H 11 0.02 (1,896) 1:A:166:LEU:HD13 1:A:193:GLN:H 11 0.02 (1,891) 1:A:125:GLY:H 1:A:163:LEU:HD21 20 0.02 (1,891) 1:A:125:GLY:H 1:A:163:LEU:HD22 20 0.02 (1,885) 1:A:150:LEU:H 1:A:54:VAL:HG21 12 0.02 (1,885) 1:A:50:LEU:H 1:A:54:VAL:HG23 12 0.02 (1,881) 1:A:78:ILE:HD11 1:A:79:THR:H 14 0.02 (1,881) 1:A:78:ILE:HD13 1:A:79: | (1,904) | 1:A:100:SER:H | 1:A:101:ILE:HD11 | 11 | 0.02 |
| (1,902) 1:A:153:LEU:HD11 1:A:169:ASN:H 12 0.02 (1,902) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:169:ASN:H 12 0.02 (1,902) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:169:ASN:H 12 0.02 (1,896) 1:A:166:LEU:HD11 1:A:193:GLN:H 11 0.02 (1,896) 1:A:166:LEU:HD12 1:A:193:GLN:H 11 0.02 (1,896) 1:A:166:LEU:HD13 1:A:193:GLN:H 11 0.02 (1,891) 1:A:125:GLY:H 1:A:163:LEU:HD21 20 0.02 (1,891) 1:A:125:GLY:H 1:A:163:LEU:HD22 20 0.02 (1,881) 1:A:50:LEU:H 1:A:54:VAL:HG21 12 0.02 (1,885) 1:A:50:LEU:H 1:A:54:VAL:HG22 12 0.02 (1,885) 1:A:50:LEU:H 1:A:79:THR:H 14 0.02 (1,881) 1:A:78:ILE:HD11 1:A:79:THR:H 14 0.02 (1,881) 1:A:109:LEU:HD21 1:A:113:LEU:H 7 0.02 (1,880) 1:A:109:LEU:HD22 1:A:113:LEU:H | (1,904) | 1:A:100:SER:H | 1:A:101:ILE:HD12 | 11 | 0.02 |
| (1,902) 1:A:153:LEU:HD12 1:A:169:ASN:H 12 0.02 (1,902) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:169:ASN:H 12 0.02 (1,896) 1:A:166:LEU:HD11 1:A:193:GLN:H 11 0.02 (1,896) 1:A:166:LEU:HD12 1:A:193:GLN:H 11 0.02 (1,896) 1:A:166:LEU:HD13 1:A:193:GLN:H 11 0.02 (1,891) 1:A:125:GLY:H 1:A:163:LEU:HD21 20 0.02 (1,891) 1:A:125:GLY:H 1:A:163:LEU:HD22 20 0.02 (1,885) 1:A:50:LEU:H 1:A:54:VAL:HG21 12 0.02 (1,885) 1:A:50:LEU:H 1:A:54:VAL:HG21 12 0.02 (1,885) 1:A:50:LEU:H 1:A:54:VAL:HG23 12 0.02 (1,881) 1:A:78:ILE:HD11 1:A:79:THR:H 14 0.02 (1,881) 1:A:78:ILE:HD12 1:A:79:THR:H 14 0.02 (1,880) 1:A:109:LEU:HD21 1:A:113:LEU:H 7 0.02 (1,880) 1:A:109:LEU:HD22 1:A:113:LEU: | (1,904) | 1:A:100:SER:H | 1:A:101:ILE:HD13 | 11 | 0.02 |
| (1,902) 1:A:153:LEU:HD13 1:A:169:ASN:H 12 0.02 (1,896) 1:A:166:LEU:HD11 1:A:193:GLN:H 11 0.02 (1,896) 1:A:166:LEU:HD12 1:A:193:GLN:H 11 0.02 (1,896) 1:A:166:LEU:HD13 1:A:193:GLN:H 11 0.02 (1,891) 1:A:125:GLY:H 1:A:163:LEU:HD21 20 0.02 (1,891) 1:A:125:GLY:H 1:A:163:LEU:HD22 20 0.02 (1,891) 1:A:125:GLY:H 1:A:163:LEU:HD23 20 0.02 (1,891) 1:A:125:GLY:H 1:A:163:LEU:HD23 20 0.02 (1,885) 1:A:50:LEU:H 1:A:54:VAL:HG21 12 0.02 (1,885) 1:A:50:LEU:H 1:A:54:VAL:HG22 12 0.02 (1,885) 1:A:50:LEU:H 1:A:79:THR:H 14 0.02 (1,881) 1:A:78:ILE:HD11 1:A:79:THR:H 14 0.02 (1,881) 1:A:78:ILE:HD13 1:A:79:THR:H 14 0.02 (1,880) 1:A:109:LEU:HD21 1:A:113:LEU:H 7 0.02 (1,880) 1:A:109:LEU:HD23 | (1,902) | 1:A:153:LEU:HD11 | 1:A:169:ASN:H | 12 | 0.02 |
| (1,896) 1:A:166:LEU:HD11 1:A:193:GLN:H 11 0.02 (1,896) 1:A:166:LEU:HD12 1:A:193:GLN:H 11 0.02 (1,896) 1:A:166:LEU:HD13 1:A:193:GLN:H 11 0.02 (1,891) 1:A:125:GLY:H 1:A:163:LEU:HD21 20 0.02 (1,891) 1:A:125:GLY:H 1:A:163:LEU:HD22 20 0.02 (1,891) 1:A:125:GLY:H 1:A:163:LEU:HD23 20 0.02 (1,881) 1:A:50:LEU:H 1:A:54:VAL:HG21 12 0.02 (1,885) 1:A:50:LEU:H 1:A:54:VAL:HG22 12 0.02 (1,885) 1:A:50:LEU:H 1:A:54:VAL:HG23 12 0.02 (1,881) 1:A:78:ILE:HD11 1:A:79:THR:H 14 0.02 (1,881) 1:A:78:ILE:HD12 1:A:79:THR:H 14 0.02 (1,880) 1:A:109:LEU:HD21 1:A:113:LEU:H 7 0.02 (1,880) 1:A:109:LEU:HD23 1:A:113:LEU:H 7 0.02 (1,887) 1:A:34:LEU:HD11 1:A:36:LEU:H 7 0.02 | (1,902) | 1:A:153:LEU:HD12 | 1:A:169:ASN:H | 12 | 0.02 |
| (1,896) 1:A:166:LEU:HD12 1:A:193:GLN:H 11 0.02 (1,896) 1:A:166:LEU:HD13 1:A:193:GLN:H 11 0.02 (1,891) 1:A:125:GLY:H 1:A:163:LEU:HD21 20 0.02 (1,891) 1:A:125:GLY:H 1:A:163:LEU:HD22 20 0.02 (1,891) 1:A:125:GLY:H 1:A:163:LEU:HD23 20 0.02 (1,885) 1:A:50:LEU:H 1:A:54:VAL:HG21 12 0.02 (1,885) 1:A:50:LEU:H 1:A:54:VAL:HG22 12 0.02 (1,885) 1:A:50:LEU:H 1:A:54:VAL:HG23 12 0.02 (1,881) 1:A:78:ILE:HD11 1:A:79:THR:H 14 0.02 (1,881) 1:A:78:ILE:HD12 1:A:79:THR:H 14 0.02 (1,880) 1:A:109:LEU:HD21 1:A:113:LEU:H 7 0.02 (1,880) 1:A:109:LEU:HD22 1:A:113:LEU:H 7 0.02 (1,880) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:113:LEU:H 7 0.02 (1,887) 1:A:34:LEU:HD11 1:A:36:LEU:H <td>(1,902)</td> <td>1:A:153:LEU:HD13</td> <td>1:A:169:ASN:H</td> <td>12</td> <td>0.02</td> | (1,902) | 1:A:153:LEU:HD13 | 1:A:169:ASN:H | 12 | 0.02 |
| (1,896) 1:A:166:LEU:HD13 1:A:193:GLN:H 11 0.02 (1,891) 1:A:125:GLY:H 1:A:163:LEU:HD21 20 0.02 (1,891) 1:A:125:GLY:H 1:A:163:LEU:HD22 20 0.02 (1,891) 1:A:125:GLY:H 1:A:163:LEU:HD23 20 0.02 (1,885) 1:A:50:LEU:H 1:A:54:VAL:HG21 12 0.02 (1,885) 1:A:50:LEU:H 1:A:54:VAL:HG22 12 0.02 (1,885) 1:A:50:LEU:H 1:A:54:VAL:HG23 12 0.02 (1,881) 1:A:78:ILE:HD11 1:A:79:THR:H 14 0.02 (1,881) 1:A:78:ILE:HD12 1:A:79:THR:H 14 0.02 (1,881) 1:A:78:ILE:HD13 1:A:79:THR:H 14 0.02 (1,880) 1:A:109:LEU:HD21 1:A:113:LEU:H 7 0.02 (1,880) 1:A:109:LEU:HD23 1:A:113:LEU:H 7 0.02 (1,887) 1:A:34:LEU:HD11 1:A:36:LEU:H 16 0.02 | (1,896) | 1:A:166:LEU:HD11 | 1:A:193:GLN:H | 11 | 0.02 |
| (1,891) 1:A:125:GLY:H 1:A:163:LEU:HD21 20 0.02 (1,891) 1:A:125:GLY:H 1:A:163:LEU:HD22 20 0.02 (1,891) 1:A:125:GLY:H 1:A:163:LEU:HD23 20 0.02 (1,885) 1:A:50:LEU:H 1:A:54:VAL:HG21 12 0.02 (1,885) 1:A:50:LEU:H 1:A:54:VAL:HG22 12 0.02 (1,885) 1:A:50:LEU:H 1:A:54:VAL:HG23 12 0.02 (1,881) 1:A:78:ILE:HD11 1:A:79:THR:H 14 0.02 (1,881) 1:A:78:ILE:HD12 1:A:79:THR:H 14 0.02 (1,881) 1:A:78:ILE:HD13 1:A:79:THR:H 14 0.02 (1,880) 1:A:109:LEU:HD21 1:A:113:LEU:H 7 0.02 (1,880) 1:A:109:LEU:HD22 1:A:113:LEU:H 7 0.02 (1,887) 1:A:34:LEU:HD11 1:A:36:LEU:H 7 0.02 (1,887) 1:A:34:LEU:HD11 1:A:36:LEU:H 16 0.02 | (1,896) | 1:A:166:LEU:HD12 | 1:A:193:GLN:H | 11 | 0.02 |
| (1,891) 1:A:125:GLY:H 1:A:163:LEU:HD22 20 0.02 (1,891) 1:A:125:GLY:H 1:A:163:LEU:HD23 20 0.02 (1,885) 1:A:50:LEU:H 1:A:54:VAL:HG21 12 0.02 (1,885) 1:A:50:LEU:H 1:A:54:VAL:HG22 12 0.02 (1,885) 1:A:50:LEU:H 1:A:54:VAL:HG23 12 0.02 (1,881) 1:A:78:ILE:HD11 1:A:79:THR:H 14 0.02 (1,881) 1:A:78:ILE:HD12 1:A:79:THR:H 14 0.02 (1,881) 1:A:78:ILE:HD13 1:A:79:THR:H 14 0.02 (1,880) 1:A:109:LEU:HD21 1:A:113:LEU:H 7 0.02 (1,880) 1:A:109:LEU:HD22 1:A:113:LEU:H 7 0.02 (1,880) 1:A:109:LEU:HD23 1:A:113:LEU:H 7 0.02 (1,887) 1:A:34:LEU:HD11 1:A:36:LEU:H 16 0.02 | (1,896) | 1:A:166:LEU:HD13 | 1:A:193:GLN:H | 11 | 0.02 |
| (1,891) 1:A:125:GLY:H 1:A:163:LEU:HD23 20 0.02 (1,885) 1:A:50:LEU:H 1:A:54:VAL:HG21 12 0.02 (1,885) 1:A:50:LEU:H 1:A:54:VAL:HG22 12 0.02 (1,885) 1:A:50:LEU:H 1:A:54:VAL:HG23 12 0.02 (1,881) 1:A:78:ILE:HD11 1:A:79:THR:H 14 0.02 (1,881) 1:A:78:ILE:HD12 1:A:79:THR:H 14 0.02 (1,881) 1:A:78:ILE:HD13 1:A:79:THR:H 14 0.02 (1,880) 1:A:109:LEU:HD21 1:A:113:LEU:H 7 0.02 (1,880) 1:A:109:LEU:HD22 1:A:113:LEU:H 7 0.02 (1,880) 1:A:109:LEU:HD23 1:A:113:LEU:H 7 0.02 (1,827) 1:A:34:LEU:HD11 1:A:36:LEU:H 16 0.02 | (1,891) | 1:A:125:GLY:H | 1:A:163:LEU:HD21 | 20 | 0.02 |
| (1,885) 1:A:50:LEU:H 1:A:54:VAL:HG21 12 0.02 (1,885) 1:A:50:LEU:H 1:A:54:VAL:HG22 12 0.02 (1,885) 1:A:50:LEU:H 1:A:54:VAL:HG23 12 0.02 (1,881) 1:A:78:ILE:HD11 1:A:79:THR:H 14 0.02 (1,881) 1:A:78:ILE:HD12 1:A:79:THR:H 14 0.02 (1,881) 1:A:78:ILE:HD13 1:A:79:THR:H 14 0.02 (1,880) 1:A:109:LEU:HD21 1:A:113:LEU:H 7 0.02 (1,880) 1:A:109:LEU:HD22 1:A:113:LEU:H 7 0.02 (1,880) 1:A:109:LEU:HD23 1:A:113:LEU:H 7 0.02 (1,827) 1:A:34:LEU:HD11 1:A:36:LEU:H 16 0.02 | (1,891) | 1:A:125:GLY:H | 1:A:163:LEU:HD22 | 20 | 0.02 |
| (1,885) 1:A:50:LEU:H 1:A:54:VAL:HG22 12 0.02 (1,885) 1:A:50:LEU:H 1:A:54:VAL:HG23 12 0.02 (1,881) 1:A:78:ILE:HD11 1:A:79:THR:H 14 0.02 (1,881) 1:A:78:ILE:HD12 1:A:79:THR:H 14 0.02 (1,881) 1:A:78:ILE:HD13 1:A:79:THR:H 14 0.02 (1,880) 1:A:109:LEU:HD21 1:A:113:LEU:H 7 0.02 (1,880) 1:A:109:LEU:HD22 1:A:113:LEU:H 7 0.02 (1,880) 1:A:109:LEU:HD23 1:A:113:LEU:H 7 0.02 (1,827) 1:A:34:LEU:HD11 1:A:36:LEU:H 16 0.02 | (1,891) | 1:A:125:GLY:H | 1:A:163:LEU:HD23 | 20 | 0.02 |
| (1,885) 1:A:50:LEU:H 1:A:54:VAL:HG22 12 0.02 (1,885) 1:A:50:LEU:H 1:A:54:VAL:HG23 12 0.02 (1,881) 1:A:78:ILE:HD11 1:A:79:THR:H 14 0.02 (1,881) 1:A:78:ILE:HD12 1:A:79:THR:H 14 0.02 (1,881) 1:A:78:ILE:HD13 1:A:79:THR:H 14 0.02 (1,880) 1:A:109:LEU:HD21 1:A:113:LEU:H 7 0.02 (1,880) 1:A:109:LEU:HD22 1:A:113:LEU:H 7 0.02 (1,880) 1:A:109:LEU:HD23 1:A:113:LEU:H 7 0.02 (1,827) 1:A:34:LEU:HD11 1:A:36:LEU:H 16 0.02 | (1,885) | 1:A:50:LEU:H | 1:A:54:VAL:HG21 | 12 | 0.02 |
| (1,885) 1:A:50:LEU:H 1:A:54:VAL:HG23 12 0.02 (1,881) 1:A:78:ILE:HD11 1:A:79:THR:H 14 0.02 (1,881) 1:A:78:ILE:HD12 1:A:79:THR:H 14 0.02 (1,881) 1:A:78:ILE:HD13 1:A:79:THR:H 14 0.02 (1,880) 1:A:109:LEU:HD21 1:A:113:LEU:H 7 0.02 (1,880) 1:A:109:LEU:HD22 1:A:113:LEU:H 7 0.02 (1,880) 1:A:109:LEU:HD23 1:A:113:LEU:H 7 0.02 (1,827) 1:A:34:LEU:HD11 1:A:36:LEU:H 16 0.02 | | 1:A:50:LEU:H | 1:A:54:VAL:HG22 | 12 | 0.02 |
| (1,881) 1:A:78:ILE:HD11 1:A:79:THR:H 14 0.02 (1,881) 1:A:78:ILE:HD12 1:A:79:THR:H 14 0.02 (1,881) 1:A:78:ILE:HD13 1:A:79:THR:H 14 0.02 (1,880) 1:A:109:LEU:HD21 1:A:113:LEU:H 7 0.02 (1,880) 1:A:109:LEU:HD22 1:A:113:LEU:H 7 0.02 (1,880) 1:A:109:LEU:HD23 1:A:113:LEU:H 7 0.02 (1,827) 1:A:34:LEU:HD11 1:A:36:LEU:H 16 0.02 | | 1:A:50:LEU:H | 1:A:54:VAL:HG23 | 12 | 0.02 |
| (1,881) 1:A:78:ILE:HD12 1:A:79:THR:H 14 0.02 (1,881) 1:A:78:ILE:HD13 1:A:79:THR:H 14 0.02 (1,880) 1:A:109:LEU:HD21 1:A:113:LEU:H 7 0.02 (1,880) 1:A:109:LEU:HD22 1:A:113:LEU:H 7 0.02 (1,880) 1:A:109:LEU:HD23 1:A:113:LEU:H 7 0.02 (1,827) 1:A:34:LEU:HD11 1:A:36:LEU:H 16 0.02 | | 1:A:78:ILE:HD11 | 1:A:79:THR:H | 14 | 0.02 |
| (1,881) 1:A:78:ILE:HD13 1:A:79:THR:H 14 0.02 (1,880) 1:A:109:LEU:HD21 1:A:113:LEU:H 7 0.02 (1,880) 1:A:109:LEU:HD22 1:A:113:LEU:H 7 0.02 (1,880) 1:A:109:LEU:HD23 1:A:113:LEU:H 7 0.02 (1,827) 1:A:34:LEU:HD11 1:A:36:LEU:H 16 0.02 | (1,881) | 1:A:78:ILE:HD12 | 1:A:79:THR:H | 14 | 0.02 |
| (1,880) 1:A:109:LEU:HD21 1:A:113:LEU:H 7 0.02 (1,880) 1:A:109:LEU:HD22 1:A:113:LEU:H 7 0.02 (1,880) 1:A:109:LEU:HD23 1:A:113:LEU:H 7 0.02 (1,827) 1:A:34:LEU:HD11 1:A:36:LEU:H 16 0.02 | | 1:A:78:ILE:HD13 | 1:A:79:THR:H | 14 | 0.02 |
| (1,880) 1:A:109:LEU:HD22 1:A:113:LEU:H 7 0.02 (1,880) 1:A:109:LEU:HD23 1:A:113:LEU:H 7 0.02 (1,827) 1:A:34:LEU:HD11 1:A:36:LEU:H 16 0.02 | | 1:A:109:LEU:HD21 | 1:A:113:LEU:H | 7 | 0.02 |
| (1,880) 1:A:109:LEU:HD23 1:A:113:LEU:H 7 0.02 (1,827) 1:A:34:LEU:HD11 1:A:36:LEU:H 16 0.02 | · · / | 1:A:109:LEU:HD22 | 1:A:113:LEU:H | 7 | 0.02 |
| (1,827) 1:A:34:LEU:HD11 1:A:36:LEU:H 16 0.02 | | 1:A:109:LEU:HD23 | 1:A:113:LEU:H | 7 | 0.02 |
| | , | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:36:LEU:H | 16 | 0.02 |
| (1,02) $(1,11,03,04,04)$ $(1,11,04)$ $(1,11,00,04)$ $(1,11,04)$ $(1,11,04)$ | (1,827) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:36:LEU:H | 16 | 0.02 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,827) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:36:LEU:H | 16 | 0.02 |
| (1,824) | 1:A:24:VAL:HG21 | 1:A:26:ASN:H | 9 | 0.02 |
| (1,824) | 1:A:24:VAL:HG22 | 1:A:26:ASN:H | 9 | 0.02 |
| (1,824) | 1:A:24:VAL:HG23 | 1:A:26:ASN:H | 9 | 0.02 |
| (1,820) | 1:A:75:GLY:H | 1:A:76:VAL:HG11 | 19 | 0.02 |
| (1,820) | 1:A:75:GLY:H | 1:A:76:VAL:HG12 | 19 | 0.02 |
| (1,820) | 1:A:75:GLY:H | 1:A:76:VAL:HG13 | 19 | 0.02 |
| (1,817) | 1:A:171:LEU:HD11 | 1:A:189:GLN:H | 17 | 0.02 |
| (1,817) | 1:A:171:LEU:HD12 | 1:A:189:GLN:H | 17 | 0.02 |
| (1,817) | 1:A:171:LEU:HD13 | 1:A:189:GLN:H | 17 | 0.02 |
| (1,815) | 1:A:170:ASN:H | 1:A:171:LEU:HD21 | 6 | 0.02 |
| (1,815) | 1:A:170:ASN:H | 1:A:171:LEU:HD22 | 6 | 0.02 |
| (1,815) | 1:A:170:ASN:H | 1:A:171:LEU:HD23 | 6 | 0.02 |
| (1,815) | 1:A:170:ASN:H | 1:A:171:LEU:HD21 | 12 | 0.02 |
| (1,815) | 1:A:170:ASN:H | 1:A:171:LEU:HD22 | 12 | 0.02 |
| (1,815) | 1:A:170:ASN:H | 1:A:171:LEU:HD23 | 12 | 0.02 |
| (1,812) | 1:A:130:GLU:H | 1:A:156:LEU:HD11 | 10 | 0.02 |
| (1,812) | 1:A:130:GLU:H | 1:A:156:LEU:HD12 | 10 | 0.02 |
| (1,812) | 1:A:130:GLU:H | 1:A:156:LEU:HD13 | 10 | 0.02 |
| (1,812) | 1:A:130:GLU:H | 1:A:156:LEU:HD11 | 13 | 0.02 |
| (1,812) | 1:A:130:GLU:H | 1:A:156:LEU:HD12 | 13 | 0.02 |
| (1,812) | 1:A:130:GLU:H | 1:A:156:LEU:HD13 | 13 | 0.02 |
| (1,809) | 1:A:91:VAL:HG11 | 1:A:92:ALA:H | 6 | 0.02 |
| (1,809) | 1:A:91:VAL:HG12 | 1:A:92:ALA:H | 6 | 0.02 |
| (1,809) | 1:A:91:VAL:HG13 | 1:A:92:ALA:H | 6 | 0.02 |
| (1,806) | 1:A:166:LEU:HD21 | 1:A:193:GLN:H | 1 | 0.02 |
| (1,806) | 1:A:166:LEU:HD22 | 1:A:193:GLN:H | 1 | 0.02 |
| (1,806) | 1:A:166:LEU:HD23 | 1:A:193:GLN:H | 1 | 0.02 |
| (1,798) | 1:A:86:ALA:H | 1:A:109:LEU:HD11 | 3 | 0.02 |
| (1,798) | 1:A:86:ALA:H | 1:A:109:LEU:HD12 | 3 | 0.02 |
| (1,798) | 1:A:86:ALA:H | 1:A:109:LEU:HD13 | 3 | 0.02 |
| (1,798) | 1:A:86:ALA:H | 1:A:109:LEU:HD11 | 13 | 0.02 |
| (1,798) | 1:A:86:ALA:H | 1:A:109:LEU:HD12 | 13 | 0.02 |
| (1,798) | 1:A:86:ALA:H | 1:A:109:LEU:HD13 | 13 | 0.02 |
| (1,793) | 1:A:149:LEU:H | 1:A:149:LEU:HD11 | 4 | 0.02 |
| (1,793) | 1:A:149:LEU:H | 1:A:149:LEU:HD12 | 4 | 0.02 |
| (1,793) | 1:A:149:LEU:H | 1:A:149:LEU:HD13 | 4 | 0.02 |
| (1,79) | 1:A:175:LEU:HD21 | 1:A:185:ALA:H | 6 | 0.02 |
| (1,79) | 1:A:175:LEU:HD22 | 1:A:185:ALA:H | 6 | 0.02 |
| (1,79) | 1:A:175:LEU:HD23 | 1:A:185:ALA:H | 6 | 0.02 |
| (1,788) | 1:A:37:ALA:H | 1:A:85:LEU:HD21 | 12 | 0.02 |
| (1,788) | 1:A:37:ALA:H | 1:A:85:LEU:HD22 | 12 | 0.02 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,788) | 1:A:37:ALA:H | 1:A:85:LEU:HD23 | 12 | 0.02 |
| (1,780) | 1:A:167:ILE:H | 1:A:191:LEU:HD11 | 7 | 0.02 |
| (1,780) | 1:A:167:ILE:H | 1:A:191:LEU:HD12 | 7 | 0.02 |
| (1,780) | 1:A:167:ILE:H | 1:A:191:LEU:HD13 | 7 | 0.02 |
| (1,778) | 1:A:166:LEU:H | 1:A:191:LEU:HD11 | 12 | 0.02 |
| (1,778) | 1:A:166:LEU:H | 1:A:191:LEU:HD12 | 12 | 0.02 |
| (1,778) | 1:A:166:LEU:H | 1:A:191:LEU:HD13 | 12 | 0.02 |
| (1,776) | 1:A:153:LEU:HD11 | 1:A:190:LEU:HD11 | 12 | 0.02 |
| (1,776) | 1:A:153:LEU:HD11 | 1:A:190:LEU:HD12 | 12 | 0.02 |
| (1,776) | 1:A:153:LEU:HD11 | 1:A:190:LEU:HD13 | 12 | 0.02 |
| (1,776) | 1:A:153:LEU:HD12 | 1:A:190:LEU:HD11 | 12 | 0.02 |
| (1,776) | 1:A:153:LEU:HD12 | 1:A:190:LEU:HD12 | 12 | 0.02 |
| (1,776) | 1:A:153:LEU:HD12 | 1:A:190:LEU:HD13 | 12 | 0.02 |
| (1,776) | 1:A:153:LEU:HD13 | 1:A:190:LEU:HD11 | 12 | 0.02 |
| (1,776) | 1:A:153:LEU:HD13 | 1:A:190:LEU:HD12 | 12 | 0.02 |
| (1,776) | 1:A:153:LEU:HD13 | 1:A:190:LEU:HD13 | 12 | 0.02 |
| (1,77) | 1:A:173:ARG:H | 1:A:185:ALA:H | 10 | 0.02 |
| (1,769) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:121:LEU:HD11 | 10 | 0.02 |
| (1,769) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:121:LEU:HD12 | 10 | 0.02 |
| (1,769) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:121:LEU:HD13 | 10 | 0.02 |
| (1,769) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:121:LEU:HD11 | 10 | 0.02 |
| (1,769) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:121:LEU:HD12 | 10 | 0.02 |
| (1,769) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:121:LEU:HD13 | 10 | 0.02 |
| (1,769) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:121:LEU:HD11 | 10 | 0.02 |
| (1,769) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:121:LEU:HD12 | 10 | 0.02 |
| (1,769) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:121:LEU:HD13 | 10 | 0.02 |
| (1,756) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:47:LEU:HD11 | 7 | 0.02 |
| (1,756) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:47:LEU:HD12 | 7 | 0.02 |
| (1,756) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:47:LEU:HD13 | 7 | 0.02 |
| (1,756) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:47:LEU:HD11 | 7 | 0.02 |
| (1,756) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:47:LEU:HD12 | 7 | 0.02 |
| (1,756) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:47:LEU:HD13 | 7 | 0.02 |
| (1,756) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:47:LEU:HD11 | 7 | 0.02 |
| (1,756) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:47:LEU:HD12 | 7 | 0.02 |
| (1,756) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:47:LEU:HD13 | 7 | 0.02 |
| (1,750) | 1:A:81:VAL:HG21 | 1:A:85:LEU:HD21 | 10 | 0.02 |
| (1,750) | 1:A:81:VAL:HG21 | 1:A:85:LEU:HD22 | 10 | 0.02 |
| (1,750) | 1:A:81:VAL:HG21 | 1:A:85:LEU:HD23 | 10 | 0.02 |
| (1,750) | 1:A:81:VAL:HG22 | 1:A:85:LEU:HD21 | 10 | 0.02 |
| (1,750) | 1:A:81:VAL:HG22 | 1:A:85:LEU:HD22 | 10 | 0.02 |
| (1,750) | 1:A:81:VAL:HG22 | 1:A:85:LEU:HD23 | 10 | 0.02 |
| (1,750) | 1:A:81:VAL:HG23 | 1:A:85:LEU:HD21 | 10 | 0.02 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,750) | 1:A:81:VAL:HG23 | 1:A:85:LEU:HD22 | 10 | 0.02 |
| (1,750) | 1:A:81:VAL:HG23 | 1:A:85:LEU:HD23 | 10 | 0.02 |
| (1,750) | 1:A:81:VAL:HG21 | 1:A:85:LEU:HD21 | 12 | 0.02 |
| (1,750) | 1:A:81:VAL:HG21 | 1:A:85:LEU:HD22 | 12 | 0.02 |
| (1,750) | 1:A:81:VAL:HG21 | 1:A:85:LEU:HD23 | 12 | 0.02 |
| (1,750) | 1:A:81:VAL:HG22 | 1:A:85:LEU:HD21 | 12 | 0.02 |
| (1,750) | 1:A:81:VAL:HG22 | 1:A:85:LEU:HD22 | 12 | 0.02 |
| (1,750) | 1:A:81:VAL:HG22 | 1:A:85:LEU:HD23 | 12 | 0.02 |
| (1,750) | 1:A:81:VAL:HG23 | 1:A:85:LEU:HD21 | 12 | 0.02 |
| (1,750) | 1:A:81:VAL:HG23 | 1:A:85:LEU:HD22 | 12 | 0.02 |
| (1,750) | 1:A:81:VAL:HG23 | 1:A:85:LEU:HD23 | 12 | 0.02 |
| (1,736) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:85:LEU:HD21 | 3 | 0.02 |
| (1,736) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:85:LEU:HD22 | 3 | 0.02 |
| (1,736) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:85:LEU:HD23 | 3 | 0.02 |
| (1,736) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:85:LEU:HD21 | 3 | 0.02 |
| (1,736) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:85:LEU:HD22 | 3 | 0.02 |
| (1,736) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:85:LEU:HD23 | 3 | 0.02 |
| (1,736) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:85:LEU:HD21 | 3 | 0.02 |
| (1,736) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:85:LEU:HD22 | 3 | 0.02 |
| (1,736) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:85:LEU:HD23 | 3 | 0.02 |
| (1,736) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:85:LEU:HD21 | 5 | 0.02 |
| (1,736) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:85:LEU:HD22 | 5 | 0.02 |
| (1,736) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:85:LEU:HD23 | 5 | 0.02 |
| (1,736) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:85:LEU:HD21 | 5 | 0.02 |
| (1,736) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:85:LEU:HD22 | 5 | 0.02 |
| (1,736) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:85:LEU:HD23 | 5 | 0.02 |
| (1,736) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:85:LEU:HD21 | 5 | 0.02 |
| (1,736) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:85:LEU:HD22 | 5 | 0.02 |
| (1,736) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:85:LEU:HD23 | 5 | 0.02 |
| (1,712) | 1:A:156:LEU:HD11 | 1:A:188:ILE:HD11 | 5 | 0.02 |
| (1,712) | 1:A:156:LEU:HD11 | 1:A:188:ILE:HD12 | 5 | 0.02 |
| (1,712) | 1:A:156:LEU:HD11 | 1:A:188:ILE:HD13 | 5 | 0.02 |
| (1,712) | 1:A:156:LEU:HD12 | 1:A:188:ILE:HD11 | 5 | 0.02 |
| (1,712) | 1:A:156:LEU:HD12 | 1:A:188:ILE:HD12 | 5 | 0.02 |
| (1,712) | 1:A:156:LEU:HD12 | 1:A:188:ILE:HD13 | 5 | 0.02 |
| (1,712) | 1:A:156:LEU:HD13 | 1:A:188:ILE:HD11 | 5 | 0.02 |
| (1,712) | 1:A:156:LEU:HD13 | 1:A:188:ILE:HD12 | 5 | 0.02 |
| (1,712) | 1:A:156:LEU:HD13 | 1:A:188:ILE:HD13 | 5 | 0.02 |
| (1,654) | 1:A:60:SER:H | 1:A:83:SER:H | 11 | 0.02 |
| (1,635) | 1:A:113:LEU:H | 1:A:114:TYR:H | 13 | 0.02 |
| (1,628) | 1:A:145:LYS:H | 1:A:147:LEU:H | 3 | 0.02 |
| (1,605) | 1:A:73:GLU:H | 1:A:76:VAL:H | 13 | 0.02 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,601) | 1:A:111:GLN:H | 1:A:114:TYR:H | 20 | 0.02 |
| (1,574) | 1:A:36:LEU:HD11 | 1:A:85:LEU:HD21 | 2 | 0.02 |
| (1,574) | 1:A:36:LEU:HD11 | 1:A:85:LEU:HD22 | 2 | 0.02 |
| (1,574) | 1:A:36:LEU:HD11 | 1:A:85:LEU:HD23 | 2 | 0.02 |
| (1,574) | 1:A:36:LEU:HD12 | 1:A:85:LEU:HD21 | 2 | 0.02 |
| (1,574) | 1:A:36:LEU:HD12 | 1:A:85:LEU:HD22 | 2 | 0.02 |
| (1,574) | 1:A:36:LEU:HD12 | 1:A:85:LEU:HD23 | 2 | 0.02 |
| (1,574) | 1:A:36:LEU:HD13 | 1:A:85:LEU:HD21 | 2 | 0.02 |
| (1,574) | 1:A:36:LEU:HD13 | 1:A:85:LEU:HD22 | 2 | 0.02 |
| (1,574) | 1:A:36:LEU:HD13 | 1:A:85:LEU:HD23 | 2 | 0.02 |
| (1,570) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:145:LYS:H | 13 | 0.02 |
| (1,570) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:145:LYS:H | 13 | 0.02 |
| (1,570) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:145:LYS:H | 13 | 0.02 |
| (1,560) | 1:A:47:LEU:HD21 | 1:A:50:LEU:HD21 | 20 | 0.02 |
| (1,560) | 1:A:47:LEU:HD21 | 1:A:50:LEU:HD22 | 20 | 0.02 |
| (1,560) | 1:A:47:LEU:HD21 | 1:A:50:LEU:HD23 | 20 | 0.02 |
| (1,560) | 1:A:47:LEU:HD22 | 1:A:50:LEU:HD21 | 20 | 0.02 |
| (1,560) | 1:A:47:LEU:HD22 | 1:A:50:LEU:HD22 | 20 | 0.02 |
| (1,560) | 1:A:47:LEU:HD22 | 1:A:50:LEU:HD23 | 20 | 0.02 |
| (1,560) | 1:A:47:LEU:HD23 | 1:A:50:LEU:HD21 | 20 | 0.02 |
| (1,560) | 1:A:47:LEU:HD23 | 1:A:50:LEU:HD22 | 20 | 0.02 |
| (1,560) | 1:A:47:LEU:HD23 | 1:A:50:LEU:HD23 | 20 | 0.02 |
| (1,543) | 1:A:129:LEU:HD11 | 1:A:156:LEU:HD11 | 6 | 0.02 |
| (1,543) | 1:A:129:LEU:HD11 | 1:A:156:LEU:HD12 | 6 | 0.02 |
| (1,543) | 1:A:129:LEU:HD11 | 1:A:156:LEU:HD13 | 6 | 0.02 |
| (1,543) | 1:A:129:LEU:HD12 | 1:A:156:LEU:HD11 | 6 | 0.02 |
| (1,543) | 1:A:129:LEU:HD12 | 1:A:156:LEU:HD12 | 6 | 0.02 |
| (1,543) | 1:A:129:LEU:HD12 | 1:A:156:LEU:HD13 | 6 | 0.02 |
| (1,543) | 1:A:129:LEU:HD13 | 1:A:156:LEU:HD11 | 6 | 0.02 |
| (1,543) | 1:A:129:LEU:HD13 | 1:A:156:LEU:HD12 | 6 | 0.02 |
| (1,543) | 1:A:129:LEU:HD13 | 1:A:156:LEU:HD13 | 6 | 0.02 |
| (1,535) | 1:A:74:LYS:H | 1:A:76:VAL:HG11 | 5 | 0.02 |
| (1,535) | 1:A:74:LYS:H | 1:A:76:VAL:HG12 | 5 | 0.02 |
| (1,535) | 1:A:74:LYS:H | 1:A:76:VAL:HG13 | 5 | 0.02 |
| (1,521) | 1:A:33:ILE:HD11 | 1:A:54:VAL:HG11 | 2 | 0.02 |
| (1,521) | 1:A:33:ILE:HD11 | 1:A:54:VAL:HG12 | 2 | 0.02 |
| (1,521) | 1:A:33:ILE:HD11 | 1:A:54:VAL:HG13 | 2 | 0.02 |
| (1,521) | 1:A:33:ILE:HD12 | 1:A:54:VAL:HG11 | 2 | 0.02 |
| (1,521) | 1:A:33:ILE:HD12 | 1:A:54:VAL:HG12 | 2 | 0.02 |
| (1,521) | 1:A:33:ILE:HD12 | 1:A:54:VAL:HG13 | 2 | 0.02 |
| (1,521) | 1:A:33:ILE:HD13 | 1:A:54:VAL:HG11 | 2 | 0.02 |
| (1,521) | 1:A:33:ILE:HD13 | 1:A:54:VAL:HG12 | 2 | 0.02 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,521) | 1:A:33:ILE:HD13 | 1:A:54:VAL:HG13 | 2 | 0.02 |
| (1,511) | 1:A:145:LYS:H | 1:A:149:LEU:HD21 | 2 | 0.02 |
| (1,511) | 1:A:145:LYS:H | 1:A:149:LEU:HD22 | 2 | 0.02 |
| (1,511) | 1:A:145:LYS:H | 1:A:149:LEU:HD23 | 2 | 0.02 |
| (1,508) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:85:LEU:HD21 | 2 | 0.02 |
| (1,508) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:85:LEU:HD22 | 2 | 0.02 |
| (1,508) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:85:LEU:HD23 | 2 | 0.02 |
| (1,508) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:85:LEU:HD21 | 2 | 0.02 |
| (1,508) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:85:LEU:HD22 | 2 | 0.02 |
| (1,508) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:85:LEU:HD23 | 2 | 0.02 |
| (1,508) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:85:LEU:HD21 | 2 | 0.02 |
| (1,508) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:85:LEU:HD22 | 2 | 0.02 |
| (1,508) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:85:LEU:HD23 | 2 | 0.02 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:109:LEU:HD21 | 11 | 0.02 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:109:LEU:HD22 | 11 | 0.02 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:109:LEU:HD23 | 11 | 0.02 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:109:LEU:HD21 | 11 | 0.02 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:109:LEU:HD22 | 11 | 0.02 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:109:LEU:HD23 | 11 | 0.02 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:109:LEU:HD21 | 11 | 0.02 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:109:LEU:HD22 | 11 | 0.02 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:109:LEU:HD23 | 11 | 0.02 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:109:LEU:HD21 | 18 | 0.02 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:109:LEU:HD22 | 18 | 0.02 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:109:LEU:HD23 | 18 | 0.02 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:109:LEU:HD21 | 18 | 0.02 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:109:LEU:HD22 | 18 | 0.02 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:109:LEU:HD23 | 18 | 0.02 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:109:LEU:HD21 | 18 | 0.02 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:109:LEU:HD22 | 18 | 0.02 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:109:LEU:HD23 | 18 | 0.02 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:109:LEU:HD21 | 20 | 0.02 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:109:LEU:HD22 | 20 | 0.02 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:109:LEU:HD23 | 20 | 0.02 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:109:LEU:HD21 | 20 | 0.02 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:109:LEU:HD22 | 20 | 0.02 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:109:LEU:HD23 | 20 | 0.02 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:109:LEU:HD21 | 20 | 0.02 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:109:LEU:HD22 | 20 | 0.02 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:109:LEU:HD23 | 20 | 0.02 |
| (1,480) | 1:A:57:VAL:HG11 | 1:A:81:VAL:HG21 | 1 | 0.02 |
| (1,480) | 1:A:57:VAL:HG11 | 1:A:81:VAL:HG22 | 1 | 0.02 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,480) | 1:A:57:VAL:HG11 | 1:A:81:VAL:HG23 | 1 | 0.02 |
| (1,480) | 1:A:57:VAL:HG12 | 1:A:81:VAL:HG21 | 1 | 0.02 |
| (1,480) | 1:A:57:VAL:HG12 | 1:A:81:VAL:HG22 | 1 | 0.02 |
| (1,480) | 1:A:57:VAL:HG12 | 1:A:81:VAL:HG23 | 1 | 0.02 |
| (1,480) | 1:A:57:VAL:HG13 | 1:A:81:VAL:HG21 | 1 | 0.02 |
| (1,480) | 1:A:57:VAL:HG13 | 1:A:81:VAL:HG22 | 1 | 0.02 |
| (1,480) | 1:A:57:VAL:HG13 | 1:A:81:VAL:HG23 | 1 | 0.02 |
| (1,478) | 1:A:81:VAL:HG21 | 1:A:82:GLN:H | 10 | 0.02 |
| (1,478) | 1:A:81:VAL:HG22 | 1:A:82:GLN:H | 10 | 0.02 |
| (1,478) | 1:A:81:VAL:HG23 | 1:A:82:GLN:H | 10 | 0.02 |
| (1,467) | 1:A:62:VAL:HG11 | 1:A:63:GLY:H | 2 | 0.02 |
| (1,467) | 1:A:62:VAL:HG12 | 1:A:63:GLY:H | 2 | 0.02 |
| (1,467) | 1:A:62:VAL:HG13 | 1:A:63:GLY:H | 2 | 0.02 |
| (1,467) | 1:A:62:VAL:HG11 | 1:A:63:GLY:H | 12 | 0.02 |
| | 1:A:62:VAL:HG12 | 1:A:63:GLY:H | 12 | 0.02 |
| (1,467) | 1:A:62:VAL:HG13 | 1:A:63:GLY:H | 12 | 0.02 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD11 | 1:A:117:VAL:HG11 | 8 | 0.02 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD11 | 1:A:117:VAL:HG12 | 8 | 0.02 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD11 | 1:A:117:VAL:HG13 | 8 | 0.02 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD12 | 1:A:117:VAL:HG11 | 8 | 0.02 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD12 | 1:A:117:VAL:HG12 | 8 | 0.02 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD12 | 1:A:117:VAL:HG13 | 8 | 0.02 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD13 | 1:A:117:VAL:HG11 | 8 | 0.02 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD13 | 1:A:117:VAL:HG12 | 8 | 0.02 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD13 | 1:A:117:VAL:HG13 | 8 | 0.02 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD11 | 1:A:117:VAL:HG11 | 10 | 0.02 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD11 | 1:A:117:VAL:HG12 | 10 | 0.02 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD11 | 1:A:117:VAL:HG13 | 10 | 0.02 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD12 | 1:A:117:VAL:HG11 | 10 | 0.02 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD12 | 1:A:117:VAL:HG12 | 10 | 0.02 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD12 | 1:A:117:VAL:HG13 | 10 | 0.02 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD13 | 1:A:117:VAL:HG11 | 10 | 0.02 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD13 | 1:A:117:VAL:HG12 | 10 | 0.02 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD13 | 1:A:117:VAL:HG13 | 10 | 0.02 |
| (1,455) | 1:A:121:LEU:HD21 | 1:A:160:LEU:HD21 | 4 | 0.02 |
| (1,455) | 1:A:121:LEU:HD21 | 1:A:160:LEU:HD22 | 4 | 0.02 |
| (1,455) | 1:A:121:LEU:HD21 | 1:A:160:LEU:HD23 | 4 | 0.02 |
| (1,455) | 1:A:121:LEU:HD22 | 1:A:160:LEU:HD21 | 4 | 0.02 |
| (1,455) | 1:A:121:LEU:HD22 | 1:A:160:LEU:HD22 | 4 | 0.02 |
| (1,455) | 1:A:121:LEU:HD22 | 1:A:160:LEU:HD23 | 4 | 0.02 |
| (1,455) | 1:A:121:LEU:HD23 | 1:A:160:LEU:HD21 | 4 | 0.02 |
| (1,455) | 1:A:121:LEU:HD23 | 1:A:160:LEU:HD22 | 4 | 0.02 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,455) | 1:A:121:LEU:HD23 | 1:A:160:LEU:HD23 | 4 | 0.02 |
| (1,453) | 1:A:118:TYR:H | 1:A:121:LEU:HD21 | 9 | 0.02 |
| (1,453) | 1:A:118:TYR:H | 1:A:121:LEU:HD22 | 9 | 0.02 |
| (1,453) | 1:A:118:TYR:H | 1:A:121:LEU:HD23 | 9 | 0.02 |
| (1,446) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:36:LEU:HD21 | 1 | 0.02 |
| (1,446) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:36:LEU:HD22 | 1 | 0.02 |
| (1,446) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:36:LEU:HD23 | 1 | 0.02 |
| (1,446) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:36:LEU:HD21 | 1 | 0.02 |
| (1,446) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:36:LEU:HD22 | 1 | 0.02 |
| (1,446) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:36:LEU:HD23 | 1 | 0.02 |
| (1,446) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:36:LEU:HD21 | 1 | 0.02 |
| (1,446) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:36:LEU:HD22 | 1 | 0.02 |
| (1,446) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:36:LEU:HD23 | 1 | 0.02 |
| (1,425) | 1:A:24:VAL:HG11 | 1:A:191:LEU:HD21 | 17 | 0.02 |
| (1,425) | 1:A:24:VAL:HG11 | 1:A:191:LEU:HD22 | 17 | 0.02 |
| (1,425) | 1:A:24:VAL:HG11 | 1:A:191:LEU:HD23 | 17 | 0.02 |
| (1,425) | 1:A:24:VAL:HG12 | 1:A:191:LEU:HD21 | 17 | 0.02 |
| (1,425) | 1:A:24:VAL:HG12 | 1:A:191:LEU:HD22 | 17 | 0.02 |
| (1,425) | 1:A:24:VAL:HG12 | 1:A:191:LEU:HD23 | 17 | 0.02 |
| (1,425) | 1:A:24:VAL:HG13 | 1:A:191:LEU:HD21 | 17 | 0.02 |
| (1,425) | 1:A:24:VAL:HG13 | 1:A:191:LEU:HD22 | 17 | 0.02 |
| (1,425) | 1:A:24:VAL:HG13 | 1:A:191:LEU:HD23 | 17 | 0.02 |
| (1,424) | 1:A:128:ILE:HD11 | 1:A:191:LEU:HD21 | 12 | 0.02 |
| (1,424) | 1:A:128:ILE:HD11 | 1:A:191:LEU:HD22 | 12 | 0.02 |
| (1,424) | 1:A:128:ILE:HD11 | 1:A:191:LEU:HD23 | 12 | 0.02 |
| (1,424) | 1:A:128:ILE:HD12 | 1:A:191:LEU:HD21 | 12 | 0.02 |
| (1,424) | 1:A:128:ILE:HD12 | 1:A:191:LEU:HD22 | 12 | 0.02 |
| (1,424) | 1:A:128:ILE:HD12 | 1:A:191:LEU:HD23 | 12 | 0.02 |
| (1,424) | 1:A:128:ILE:HD13 | 1:A:191:LEU:HD21 | 12 | 0.02 |
| (1,424) | 1:A:128:ILE:HD13 | 1:A:191:LEU:HD22 | 12 | 0.02 |
| (1,424) | 1:A:128:ILE:HD13 | 1:A:191:LEU:HD23 | 12 | 0.02 |
| (1,422) | 1:A:47:LEU:HD11 | 1:A:99:VAL:HG11 | 19 | 0.02 |
| (1,422) | 1:A:47:LEU:HD11 | 1:A:99:VAL:HG12 | 19 | 0.02 |
| (1,422) | 1:A:47:LEU:HD11 | 1:A:99:VAL:HG13 | 19 | 0.02 |
| (1,422) | 1:A:47:LEU:HD12 | 1:A:99:VAL:HG11 | 19 | 0.02 |
| (1,422) | 1:A:47:LEU:HD12 | 1:A:99:VAL:HG12 | 19 | 0.02 |
| (1,422) | 1:A:47:LEU:HD12 | 1:A:99:VAL:HG13 | 19 | 0.02 |
| (1,422) | 1:A:47:LEU:HD13 | 1:A:99:VAL:HG11 | 19 | 0.02 |
| (1,422) | 1:A:47:LEU:HD13 | 1:A:99:VAL:HG12 | 19 | 0.02 |
| (1,422) | 1:A:47:LEU:HD13 | 1:A:99:VAL:HG13 | 19 | 0.02 |
| (1,420) | 1:A:171:LEU:H | 1:A:171:LEU:HD21 | 10 | 0.02 |
| (1,420) | 1:A:171:LEU:H | 1:A:171:LEU:HD22 | 10 | 0.02 |



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

| (1,420) (1,419) (1,419) (1,419) | 1:A:171:LEU:H 1:A:169:ASN:H 1:A:169:ASN:H | 1:A:171:LEU:HD23 1:A:171:LEU:HD21 | 10 | 0.02 |
|--|---|---|----|------|
| (1,419) (1,419) | | 1:A:171:LEU:HD21 | | |
| (1,419) | 1:A:169:ASN:H | 111111111111111111111111111111111111111 | 11 | 0.02 |
| (' / | | 1:A:171:LEU:HD22 | 11 | 0.02 |
| | 1:A:169:ASN:H | 1:A:171:LEU:HD23 | 11 | 0.02 |
| (1,405) | 1:A:47:LEU:HD21 | 1:A:50:LEU:HD11 | 4 | 0.02 |
| (1,405) | 1:A:47:LEU:HD21 | 1:A:50:LEU:HD12 | 4 | 0.02 |
| (1,405) | 1:A:47:LEU:HD21 | 1:A:50:LEU:HD13 | 4 | 0.02 |
| (1,405) | 1:A:47:LEU:HD22 | 1:A:50:LEU:HD11 | 4 | 0.02 |
| (1,405) | 1:A:47:LEU:HD22 | 1:A:50:LEU:HD12 | 4 | 0.02 |
| (1,405) | 1:A:47:LEU:HD22 | 1:A:50:LEU:HD13 | 4 | 0.02 |
| (1,405) | 1:A:47:LEU:HD23 | 1:A:50:LEU:HD11 | 4 | 0.02 |
| (1,405) | 1:A:47:LEU:HD23 | 1:A:50:LEU:HD12 | 4 | 0.02 |
| (1,405) | 1:A:47:LEU:HD23 | 1:A:50:LEU:HD13 | 4 | 0.02 |
| (1,399) | 1:A:34:LEU:H | 1:A:99:VAL:HG21 | 2 | 0.02 |
| (1,399) | 1:A:34:LEU:H | 1:A:99:VAL:HG22 | 2 | 0.02 |
| (1,399) | 1:A:34:LEU:H | 1:A:99:VAL:HG23 | 2 | 0.02 |
| (1,392) | 1:A:63:GLY:H | 1:A:64:LEU:HD21 | 5 | 0.02 |
| (1,392) | 1:A:63:GLY:H | 1:A:64:LEU:HD22 | 5 | 0.02 |
| (1,392) | 1:A:63:GLY:H | 1:A:64:LEU:HD23 | 5 | 0.02 |
| (1,391) | 1:A:58:ASP:H | 1:A:64:LEU:HD21 | 7 | 0.02 |
| (1,391) | 1:A:58:ASP:H | 1:A:64:LEU:HD22 | 7 | 0.02 |
| (1,391) | 1:A:58:ASP:H | 1:A:64:LEU:HD23 | 7 | 0.02 |
| (1,391) | 1:A:58:ASP:H | 1:A:64:LEU:HD21 | 19 | 0.02 |
| (1,391) | 1:A:58:ASP:H | 1:A:64:LEU:HD22 | 19 | 0.02 |
| (1,391) | 1:A:58:ASP:H | 1:A:64:LEU:HD23 | 19 | 0.02 |
| (1,389) | 1:A:48:ALA:H | 1:A:50:LEU:HD21 | 3 | 0.02 |
| (1,389) | 1:A:48:ALA:H | 1:A:50:LEU:HD22 | 3 | 0.02 |
| (1,389) | 1:A:48:ALA:H | 1:A:50:LEU:HD23 | 3 | 0.02 |
| (1,389) | 1:A:48:ALA:H | 1:A:50:LEU:HD21 | 7 | 0.02 |
| (1,389) | 1:A:48:ALA:H | 1:A:50:LEU:HD22 | 7 | 0.02 |
| (1,389) | 1:A:48:ALA:H | 1:A:50:LEU:HD23 | 7 | 0.02 |
| (1,382) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:167:ILE:HD11 | 19 | 0.02 |
| (1,382) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:167:ILE:HD12 | 19 | 0.02 |
| (1,382) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:167:ILE:HD13 | 19 | 0.02 |
| (1,365) | 1:A:25:ALA:H | 1:A:128:ILE:HD11 | 19 | 0.02 |
| (1,365) | 1:A:25:ALA:H | 1:A:128:ILE:HD12 | 19 | 0.02 |
| (1,365) | 1:A:25:ALA:H | 1:A:128:ILE:HD13 | 19 | 0.02 |
| (1,358) | 1:A:90:ILE:HD11 | 1:A:113:LEU:HD11 | 14 | 0.02 |
| (1,358) | 1:A:90:ILE:HD11 | 1:A:113:LEU:HD12 | 14 | 0.02 |
| (1,358) | 1:A:90:ILE:HD11 | 1:A:113:LEU:HD13 | 14 | 0.02 |
| (1,358) | 1:A:90:ILE:HD12 | 1:A:113:LEU:HD11 | 14 | 0.02 |
| (1,358) | 1:A:90:ILE:HD12 | 1:A:113:LEU:HD12 | 14 | 0.02 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,358) | 1:A:90:ILE:HD12 | 1:A:113:LEU:HD13 | 14 | 0.02 |
| (1,358) | 1:A:90:ILE:HD13 | 1:A:113:LEU:HD11 | 14 | 0.02 |
| (1,358) | 1:A:90:ILE:HD13 | 1:A:113:LEU:HD12 | 14 | 0.02 |
| (1,358) | 1:A:90:ILE:HD13 | 1:A:113:LEU:HD13 | 14 | 0.02 |
| (1,35) | 1:A:87:ASP:H | 1:A:88:PHE:H | 18 | 0.02 |
| (1,346) | 1:A:175:LEU:HD21 | 1:A:184:LYS:H | 8 | 0.02 |
| (1,346) | 1:A:175:LEU:HD22 | 1:A:184:LYS:H | 8 | 0.02 |
| (1,346) | 1:A:175:LEU:HD23 | 1:A:184:LYS:H | 8 | 0.02 |
| (1,346) | 1:A:175:LEU:HD21 | 1:A:184:LYS:H | 16 | 0.02 |
| (1,346) | 1:A:175:LEU:HD22 | 1:A:184:LYS:H | 16 | 0.02 |
| (1,346) | 1:A:175:LEU:HD23 | 1:A:184:LYS:H | 16 | 0.02 |
| (1,338) | 1:A:48:ALA:H | 1:A:54:VAL:HG11 | 11 | 0.02 |
| (1,338) | 1:A:48:ALA:H | 1:A:54:VAL:HG12 | 11 | 0.02 |
| (1,338) | 1:A:48:ALA:H | 1:A:54:VAL:HG13 | 11 | 0.02 |
| (1,334) | 1:A:90:ILE:H | 1:A:91:VAL:HG21 | 3 | 0.02 |
| (1,334) | 1:A:90:ILE:H | 1:A:91:VAL:HG22 | 3 | 0.02 |
| (1,334) | 1:A:90:ILE:H | 1:A:91:VAL:HG23 | 3 | 0.02 |
| (1,333) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:139:TYR:H | 10 | 0.02 |
| (1,333) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:139:TYR:H | 10 | 0.02 |
| (1,333) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:139:TYR:H | 10 | 0.02 |
| (1,326) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:80:THR:H | 11 | 0.02 |
| (1,326) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:80:THR:H | 11 | 0.02 |
| (1,326) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:80:THR:H | 11 | 0.02 |
| (1,310) | 1:A:173:ARG:H | 1:A:187:LEU:HD11 | 8 | 0.02 |
| (1,310) | 1:A:173:ARG:H | 1:A:187:LEU:HD12 | 8 | 0.02 |
| (1,310) | 1:A:173:ARG:H | 1:A:187:LEU:HD13 | 8 | 0.02 |
| (1,310) | 1:A:173:ARG:H | 1:A:187:LEU:HD11 | 16 | 0.02 |
| (1,310) | 1:A:173:ARG:H | 1:A:187:LEU:HD12 | 16 | 0.02 |
| (1,310) | 1:A:173:ARG:H | 1:A:187:LEU:HD13 | 16 | 0.02 |
| (1,308) | 1:A:159:GLU:H | 1:A:165:TRP:HE1 | 8 | 0.02 |
| (1,304) | 1:A:91:VAL:HG11 | 1:A:93:ASP:H | 20 | 0.02 |
| (1,304) | 1:A:91:VAL:HG12 | 1:A:93:ASP:H | 20 | 0.02 |
| (1,304) | 1:A:91:VAL:HG13 | 1:A:93:ASP:H | 20 | 0.02 |
| (1,286) | 1:A:125:GLY:H | 1:A:194:LYS:H | 3 | 0.02 |
| (1,272) | 1:A:124:GLY:H | 1:A:163:LEU:HD21 | 9 | 0.02 |
| (1,272) | 1:A:124:GLY:H | 1:A:163:LEU:HD22 | 9 | 0.02 |
| (1,272) | 1:A:124:GLY:H | 1:A:163:LEU:HD23 | 9 | 0.02 |
| (1,265) | 1:A:72:GLN:H | 1:A:76:VAL:HG21 | 2 | 0.02 |
| (1,265) | 1:A:72:GLN:H | 1:A:76:VAL:HG22 | 2 | 0.02 |
| (1,265) | 1:A:72:GLN:H | 1:A:76:VAL:HG23 | 2 | 0.02 |
| (1,265) | 1:A:72:GLN:H | 1:A:76:VAL:HG21 | 10 | 0.02 |
| (1,265) | 1:A:72:GLN:H | 1:A:76:VAL:HG22 | 10 | 0.02 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,265) | 1:A:72:GLN:H | 1:A:76:VAL:HG23 | 10 | 0.02 |
| (1,265) | 1:A:72:GLN:H | 1:A:76:VAL:HG21 | 14 | 0.02 |
| (1,265) | 1:A:72:GLN:H | 1:A:76:VAL:HG22 | 14 | 0.02 |
| (1,265) | 1:A:72:GLN:H | 1:A:76:VAL:HG23 | 14 | 0.02 |
| (1,263) | 1:A:163:LEU:HD11 | 1:A:164:ASN:H | 6 | 0.02 |
| (1,263) | 1:A:163:LEU:HD12 | 1:A:164:ASN:H | 6 | 0.02 |
| (1,263) | 1:A:163:LEU:HD13 | 1:A:164:ASN:H | 6 | 0.02 |
| (1,263) | 1:A:163:LEU:HD11 | 1:A:164:ASN:H | 12 | 0.02 |
| (1,263) | 1:A:163:LEU:HD12 | 1:A:164:ASN:H | 12 | 0.02 |
| (1,263) | 1:A:163:LEU:HD13 | 1:A:164:ASN:H | 12 | 0.02 |
| (1,262) | 1:A:91:VAL:HG11 | 1:A:94:ALA:H | 3 | 0.02 |
| (1,262) | 1:A:91:VAL:HG12 | 1:A:94:ALA:H | 3 | 0.02 |
| (1,262) | 1:A:91:VAL:HG13 | 1:A:94:ALA:H | 3 | 0.02 |
| (1,260) | 1:A:171:LEU:HD21 | 1:A:189:GLN:H | 10 | 0.02 |
| (1,260) | 1:A:171:LEU:HD22 | 1:A:189:GLN:H | 10 | 0.02 |
| (1,260) | 1:A:171:LEU:HD23 | 1:A:189:GLN:H | 10 | 0.02 |
| (1,260) | 1:A:171:LEU:HD21 | 1:A:189:GLN:H | 11 | 0.02 |
| (1,260) | 1:A:171:LEU:HD22 | 1:A:189:GLN:H | 11 | 0.02 |
| (1,260) | 1:A:171:LEU:HD23 | 1:A:189:GLN:H | 11 | 0.02 |
| (1,236) | 1:A:21:LEU:HD11 | 1:A:25:ALA:H | 9 | 0.02 |
| (1,236) | 1:A:21:LEU:HD12 | 1:A:25:ALA:H | 9 | 0.02 |
| (1,236) | 1:A:21:LEU:HD13 | 1:A:25:ALA:H | 9 | 0.02 |
| (1,229) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:147:LEU:HD21 | 5 | 0.02 |
| (1,229) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:147:LEU:HD22 | 5 | 0.02 |
| (1,229) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:147:LEU:HD23 | 5 | 0.02 |
| (1,226) | 1:A:57:VAL:HG11 | 1:A:82:GLN:H | 17 | 0.02 |
| (1,226) | 1:A:57:VAL:HG12 | 1:A:82:GLN:H | 17 | 0.02 |
| (1,226) | 1:A:57:VAL:HG13 | 1:A:82:GLN:H | 17 | 0.02 |
| (1,224) | 1:A:56:ALA:H | 1:A:81:VAL:H | 16 | 0.02 |
| (1,221) | 1:A:160:LEU:HD21 | 1:A:165:TRP:HE1 | 19 | 0.02 |
| (1,221) | 1:A:160:LEU:HD22 | 1:A:165:TRP:HE1 | 19 | 0.02 |
| (1,221) | 1:A:160:LEU:HD23 | 1:A:165:TRP:HE1 | 19 | 0.02 |
| (1,212) | 1:A:86:ALA:H | 1:A:88:PHE:H | 7 | 0.02 |
| (1,212) | 1:A:86:ALA:H | 1:A:88:PHE:H | 15 | 0.02 |
| (1,211) | 1:A:85:LEU:H | 1:A:88:PHE:H | 20 | 0.02 |
| (1,207) | 1:A:60:SER:H | 1:A:64:LEU:HD11 | 4 | 0.02 |
| (1,207) | 1:A:60:SER:H | 1:A:64:LEU:HD12 | 4 | 0.02 |
| (1,207) | 1:A:60:SER:H | 1:A:64:LEU:HD13 | 4 | 0.02 |
| (1,207) | 1:A:60:SER:H | 1:A:64:LEU:HD11 | 5 | 0.02 |
| (1,207) | 1:A:60:SER:H | 1:A:64:LEU:HD12 | 5 | 0.02 |
| (1,207) | 1:A:60:SER:H | 1:A:64:LEU:HD13 | 5 | 0.02 |
| (1,206) | 1:A:60:SER:H | 1:A:62:VAL:HG21 | 6 | 0.02 |



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

| (1,206) 1:A:60:SER:H 1:A:62:VAL:HG22 6 (1,206) 1:A:60:SER:H 1:A:62:VAL:HG23 6 (1,205) 1:A:24:VAL:HG11 1:A:192:GLY:H 12 (1,205) 1:A:24:VAL:HG12 1:A:192:GLY:H 12 (1,205) 1:A:24:VAL:HG13 1:A:192:GLY:H 13 (1,205) 1:A:24:VAL:HG11 1:A:192:GLY:H 13 (1,205) 1:A:24:VAL:HG13 1:A:192:GLY:H 13 (1,205) 1:A:24:VAL:HG13 1:A:192:GLY:H 13 (1,205) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD21 12 (1,202) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD22 12 (1,202) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD23 12 (1,202) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD22 13 (1,202) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD23 13 (1,202) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD23 13 (1,192) 1:A:153:LEU:H 1:A:147:LEU:HD23 13 (1,192) 1:A:153:LEU:H 1:A:147:LEU:HD23 13 | 0.02 0.02 0.02 0.02 0.02 0.02 0.02 0.02 0.02 0.02 0.02 0.02 0.02 0.02 0.02 |
|---|--|
| (1,205) 1:A:24:VAL:HG11 1:A:192:GLY:H 12 (1,205) 1:A:24:VAL:HG12 1:A:192:GLY:H 12 (1,205) 1:A:24:VAL:HG13 1:A:192:GLY:H 12 (1,205) 1:A:24:VAL:HG11 1:A:192:GLY:H 13 (1,205) 1:A:24:VAL:HG12 1:A:192:GLY:H 13 (1,205) 1:A:24:VAL:HG13 1:A:192:GLY:H 13 (1,205) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD21 12 (1,202) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD22 12 (1,202) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD21 13 (1,202) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD21 13 (1,202) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD22 13 (1,202) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD23 13 (1,202) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD23 13 (1,202) 1:A:153:LEU:H 1:A:157:GLN:H 10 | 0.02 0.02 0.02 0.02 0.02 0.02 0.02 0.02 0.02 0.02 0.02 0.02 |
| (1,205) 1:A:24:VAL:HG12 1:A:192:GLY:H 12 (1,205) 1:A:24:VAL:HG13 1:A:192:GLY:H 12 (1,205) 1:A:24:VAL:HG11 1:A:192:GLY:H 13 (1,205) 1:A:24:VAL:HG12 1:A:192:GLY:H 13 (1,205) 1:A:24:VAL:HG13 1:A:192:GLY:H 13 (1,202) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD21 12 (1,202) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD22 12 (1,202) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD21 13 (1,202) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD21 13 (1,202) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD22 13 (1,202) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD23 13 (1,202) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD23 13 (1,202) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD23 13 (1,192) 1:A:153:LEU:H 1:A:157:GLN:H 10 | 0.02 0.02 0.02 0.02 0.02 0.02 0.02 0.02 0.02 0.02 0.02 |
| (1,205) 1:A:24:VAL:HG13 1:A:192:GLY:H 12 (1,205) 1:A:24:VAL:HG11 1:A:192:GLY:H 13 (1,205) 1:A:24:VAL:HG12 1:A:192:GLY:H 13 (1,205) 1:A:24:VAL:HG13 1:A:192:GLY:H 13 (1,205) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD21 12 (1,202) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD22 12 (1,202) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD23 12 (1,202) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD21 13 (1,202) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD22 13 (1,202) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD23 13 (1,202) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD23 13 (1,202) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD23 13 (1,192) 1:A:153:LEU:H 1:A:157:GLN:H 10 | 0.02 0.02 0.02 0.02 0.02 0.02 0.02 0.02 0.02 |
| (1,205) 1:A:24:VAL:HG11 1:A:192:GLY:H 13 (1,205) 1:A:24:VAL:HG12 1:A:192:GLY:H 13 (1,205) 1:A:24:VAL:HG13 1:A:192:GLY:H 13 (1,202) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD21 12 (1,202) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD22 12 (1,202) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD23 12 (1,202) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD21 13 (1,202) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD22 13 (1,202) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD23 13 (1,192) 1:A:153:LEU:H 1:A:157:GLN:H 10 | 0.02 0.02 0.02 0.02 0.02 0.02 0.02 0.02 0.02 |
| (1,205) 1:A:24:VAL:HG12 1:A:192:GLY:H 13 (1,205) 1:A:24:VAL:HG13 1:A:192:GLY:H 13 (1,202) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD21 12 (1,202) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD22 12 (1,202) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD23 12 (1,202) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD21 13 (1,202) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD22 13 (1,202) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD23 13 (1,192) 1:A:153:LEU:H 1:A:157:GLN:H 10 | 0.02 0.02 0.02 0.02 0.02 0.02 0.02 |
| (1,205) 1:A:24:VAL:HG13 1:A:192:GLY:H 13 (1,202) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD21 12 (1,202) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD22 12 (1,202) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD23 12 (1,202) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD21 13 (1,202) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD22 13 (1,202) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD23 13 (1,192) 1:A:153:LEU:H 1:A:157:GLN:H 10 | 0.02 0.02 0.02 0.02 0.02 0.02 0.02 |
| (1,202) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD21 12 (1,202) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD22 12 (1,202) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD23 12 (1,202) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD21 13 (1,202) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD22 13 (1,202) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD23 13 (1,192) 1:A:153:LEU:H 1:A:157:GLN:H 10 | 0.02 0.02 0.02 0.02 0.02 |
| (1,202) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD22 12 (1,202) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD23 12 (1,202) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD21 13 (1,202) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD22 13 (1,202) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD23 13 (1,192) 1:A:153:LEU:H 1:A:157:GLN:H 10 | 0.02 0.02 0.02 0.02 |
| (1,202) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD23 12 (1,202) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD21 13 (1,202) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD22 13 (1,202) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD23 13 (1,192) 1:A:153:LEU:H 1:A:157:GLN:H 10 | 0.02 0.02 0.02 |
| (1,202) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD21 13 (1,202) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD22 13 (1,202) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD23 13 (1,192) 1:A:153:LEU:H 1:A:157:GLN:H 10 | 0.02 0.02 |
| (1,202) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD22 13 (1,202) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD23 13 (1,192) 1:A:153:LEU:H 1:A:157:GLN:H 10 | 0.02 |
| (1,202) 1:A:138:GLN:H 1:A:147:LEU:HD23 13 (1,192) 1:A:153:LEU:H 1:A:157:GLN:H 10 | |
| (1,192) 1:A:153:LEU:H 1:A:157:GLN:H 10 | 0.02 |
| (1,192) 1:A:153:LEU:H 1:A:157:GLN:H 10 | |
| (1 107) 1 A CO VAT HOLL 1 A CAT DILLI | 0.02 |
| (1,187) 1:A:62:VAL:HG11 1:A:64:LEU:H 1 | 0.02 |
| (1,187) 1:A:62:VAL:HG12 1:A:64:LEU:H 1 | 0.02 |
| (1,187) 1:A:62:VAL:HG13 1:A:64:LEU:H 1 | 0.02 |
| (1,176) 1:A:186:ALA:H 1:A:187:LEU:HD21 6 | 0.02 |
| (1,176) 1:A:186:ALA:H 1:A:187:LEU:HD22 6 | 0.02 |
| (1,176) 1:A:186:ALA:H 1:A:187:LEU:HD23 6 | 0.02 |
| (1,176) 1:A:186:ALA:H 1:A:187:LEU:HD21 10 | 0.02 |
| (1,176) 1:A:186:ALA:H 1:A:187:LEU:HD22 10 | 0.02 |
| (1,176) 1:A:186:ALA:H 1:A:187:LEU:HD23 10 | 0.02 |
| (1,174) 1:A:61:SER:H 1:A:62:VAL:HG11 2 | 0.02 |
| (1,174) 1:A:61:SER:H 1:A:62:VAL:HG12 2 | 0.02 |
| (1,174) 1:A:61:SER:H 1:A:62:VAL:HG13 2 | 0.02 |
| (1,16) 1:A:145:LYS:H 1:A:146:ASP:H 9 | 0.02 |
| (1,155) 1:A:34:LEU:HD11 1:A:57:VAL:H 7 | 0.02 |
| (1,155) 1:A:34:LEU:HD12 1:A:57:VAL:H 7 | 0.02 |
| (1,155) 1:A:34:LEU:HD13 1:A:57:VAL:H 7 | 0.02 |
| (1,153) 1:A:57:VAL:H 1:A:81:VAL:HG21 11 | 0.02 |
| (1,153) 1:A:57:VAL:H 1:A:81:VAL:HG22 11 | 0.02 |
| (1,153) 1:A:57:VAL:H 1:A:81:VAL:HG23 11 | 0.02 |
| (1,123) 1:A:24:VAL:H 1:A:128:ILE:HD11 15 | 0.02 |
| (1,123) 1:A:24:VAL:H 1:A:128:ILE:HD12 15 | 0.02 |
| (1,123) 1:A:24:VAL:H 1:A:128:ILE:HD13 15 | 0.02 |
| (1,122) 1:A:24:VAL:H 1:A:191:LEU:HD21 8 | 0.02 |
| (1,122) 1:A:24:VAL:H 1:A:191:LEU:HD22 8 | 0.02 |
| (1,122) 1:A:24:VAL:H 1:A:191:LEU:HD23 8 | 0.02 |
| (1,114) 1:A:94:ALA:H 1:A:95:TRP:HE1 19 | 0.02 |
| (1,1116) 1:A:167:ILE:N 1:A:191:LEU:O 5 | 0.02 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,1105) | 1:A:102:PHE:H | 1:A:128:ILE:O | 12 | 0.02 |
| (1,1099) | 1:A:124:GLY:O | 1:A:98:ILE:H | 8 | 0.02 |
| (1,1099) | 1:A:124:GLY:O | 1:A:98:ILE:H | 9 | 0.02 |
| (1,1098) | 1:A:124:GLY:O | 1:A:98:ILE:N | 19 | 0.02 |
| (1,1085) | 1:A:154:GLU:O | 1:A:158:SER:N | 4 | 0.02 |
| (1,1085) | 1:A:154:GLU:O | 1:A:158:SER:N | 11 | 0.02 |
| (1,1070) | 1:A:108:SER:O | 1:A:112:GLN:H | 2 | 0.02 |
| (1,1050) | 1:A:62:VAL:O | 1:A:66:LYS:H | 6 | 0.02 |
| (1,1046) | 1:A:46:PHE:O | 1:A:50:LEU:H | 10 | 0.02 |
| (1,1046) | 1:A:46:PHE:O | 1:A:50:LEU:H | 17 | 0.02 |
| (1,1035) | 1:A:23:SER:O | 1:A:27:GLN:N | 20 | 0.02 |
| (1,1032) | 1:A:22:VAL:O | 1:A:26:ASN:H | 11 | 0.02 |
| (1,1027) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:90:ILE:HG21 | 15 | 0.02 |
| (1,1027) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:90:ILE:HG22 | 15 | 0.02 |
| (1,1027) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:90:ILE:HG23 | 15 | 0.02 |
| (1,1027) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:90:ILE:HG21 | 15 | 0.02 |
| (1,1027) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:90:ILE:HG22 | 15 | 0.02 |
| (1,1027) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:90:ILE:HG23 | 15 | 0.02 |
| (1,1027) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:90:ILE:HG21 | 15 | 0.02 |
| (1,1027) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:90:ILE:HG22 | 15 | 0.02 |
| (1,1027) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:90:ILE:HG23 | 15 | 0.02 |
| (1,1026) | 1:A:95:TRP:HE1 | 1:A:91:VAL:H | 16 | 0.02 |
| (1,1017) | 1:A:101:ILE:HA | 1:A:128:ILE:H | 6 | 0.02 |
| (1,989) | 1:A:163:LEU:HD11 | 1:A:165:TRP:HE1 | 6 | 0.01 |
| (1,989) | 1:A:163:LEU:HD12 | 1:A:165:TRP:HE1 | 6 | 0.01 |
| (1,989) | 1:A:163:LEU:HD13 | 1:A:165:TRP:HE1 | 6 | 0.01 |
| (1,989) | 1:A:163:LEU:HD11 | 1:A:165:TRP:HE1 | 14 | 0.01 |
| (1,989) | 1:A:163:LEU:HD12 | 1:A:165:TRP:HE1 | 14 | 0.01 |
| (1,989) | 1:A:163:LEU:HD13 | 1:A:165:TRP:HE1 | 14 | 0.01 |
| (1,988) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:H | 9 | 0.01 |
| (1,988) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:H | 9 | 0.01 |
| (1,988) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:H | 9 | 0.01 |
| (1,988) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:H | 17 | 0.01 |
| (1,988) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:H | 17 | 0.01 |
| (1,988) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:H | 17 | 0.01 |
| (1,971) | 1:A:160:LEU:HD11 | 1:A:163:LEU:H | 4 | 0.01 |
| (1,971) | 1:A:160:LEU:HD12 | 1:A:163:LEU:H | 4 | 0.01 |
| (1,971) | 1:A:160:LEU:HD13 | 1:A:163:LEU:H | 4 | 0.01 |
| (1,962) | 1:A:26:ASN:H | 1:A:28:ILE:HD11 | 5 | 0.01 |
| (1,962) | 1:A:26:ASN:H | 1:A:28:ILE:HD12 | 5 | 0.01 |
| (1,962) | 1:A:26:ASN:H | 1:A:28:ILE:HD13 | 5 | 0.01 |
| (1,962) | 1:A:26:ASN:H | 1:A:28:ILE:HD11 | 9 | 0.01 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,962) | 1:A:26:ASN:H | 1:A:28:ILE:HD12 | 9 | 0.01 |
| (1,962) | 1:A:26:ASN:H | 1:A:28:ILE:HD13 | 9 | 0.01 |
| (1,962) | 1:A:26:ASN:H | 1:A:28:ILE:HD11 | 11 | 0.01 |
| (1,962) | 1:A:26:ASN:H | 1:A:28:ILE:HD12 | 11 | 0.01 |
| (1,962) | 1:A:26:ASN:H | 1:A:28:ILE:HD13 | 11 | 0.01 |
| (1,954) | 1:A:70:LEU:H | 1:A:78:ILE:HD11 | 16 | 0.01 |
| (1,954) | 1:A:70:LEU:H | 1:A:78:ILE:HD12 | 16 | 0.01 |
| (1,954) | 1:A:70:LEU:H | 1:A:78:ILE:HD13 | 16 | 0.01 |
| (1,937) | 1:A:167:ILE:H | 1:A:191:LEU:HD21 | 2 | 0.01 |
| (1,937) | 1:A:167:ILE:H | 1:A:191:LEU:HD22 | 2 | 0.01 |
| (1,937) | 1:A:167:ILE:H | 1:A:191:LEU:HD23 | 2 | 0.01 |
| (1,931) | 1:A:73:GLU:H | 1:A:76:VAL:HG21 | 13 | 0.01 |
| (1,931) | 1:A:73:GLU:H | 1:A:76:VAL:HG22 | 13 | 0.01 |
| (1,931) | 1:A:73:GLU:H | 1:A:76:VAL:HG23 | 13 | 0.01 |
| (1,930) | 1:A:105:LEU:HD21 | 1:A:110:ARG:H | 5 | 0.01 |
| (1,930) | 1:A:105:LEU:HD22 | 1:A:110:ARG:H | 5 | 0.01 |
| (1,930) | 1:A:105:LEU:HD23 | 1:A:110:ARG:H | 5 | 0.01 |
| (1,921) | 1:A:164:ASN:H | 1:A:195:LEU:HD11 | 18 | 0.01 |
| (1,921) | 1:A:164:ASN:H | 1:A:195:LEU:HD12 | 18 | 0.01 |
| (1,921) | 1:A:164:ASN:H | 1:A:195:LEU:HD13 | 18 | 0.01 |
| (1,912) | 1:A:56:ALA:H | 1:A:81:VAL:HG21 | 15 | 0.01 |
| (1,912) | 1:A:56:ALA:H | 1:A:81:VAL:HG22 | 15 | 0.01 |
| (1,912) | 1:A:56:ALA:H | 1:A:81:VAL:HG23 | 15 | 0.01 |
| (1,911) | 1:A:56:ALA:H | 1:A:64:LEU:HD11 | 14 | 0.01 |
| (1,911) | 1:A:56:ALA:H | 1:A:64:LEU:HD12 | 14 | 0.01 |
| (1,911) | 1:A:56:ALA:H | 1:A:64:LEU:HD13 | 14 | 0.01 |
| (1,910) | 1:A:81:VAL:HG11 | 1:A:82:GLN:H | 12 | 0.01 |
| (1,910) | 1:A:81:VAL:HG12 | 1:A:82:GLN:H | 12 | 0.01 |
| (1,910) | 1:A:81:VAL:HG13 | 1:A:82:GLN:H | 12 | 0.01 |
| (1,91) | 1:A:112:GLN:H | 1:A:114:TYR:H | 1 | 0.01 |
| (1,907) | 1:A:33:ILE:H | 1:A:54:VAL:HG21 | 17 | 0.01 |
| (1,907) | 1:A:33:ILE:H | 1:A:54:VAL:HG22 | 17 | 0.01 |
| (1,907) | 1:A:33:ILE:H | 1:A:54:VAL:HG23 | 17 | 0.01 |
| (1,902) | 1:A:153:LEU:HD11 | 1:A:169:ASN:H | 9 | 0.01 |
| (1,902) | 1:A:153:LEU:HD12 | 1:A:169:ASN:H | 9 | 0.01 |
| (1,902) | 1:A:153:LEU:HD13 | 1:A:169:ASN:H | 9 | 0.01 |
| (1,891) | 1:A:125:GLY:H | 1:A:163:LEU:HD21 | 8 | 0.01 |
| (1,891) | 1:A:125:GLY:H | 1:A:163:LEU:HD22 | 8 | 0.01 |
| (1,891) | 1:A:125:GLY:H | 1:A:163:LEU:HD23 | 8 | 0.01 |
| (1,891) | 1:A:125:GLY:H | 1:A:163:LEU:HD21 | 14 | 0.01 |
| (1,891) | 1:A:125:GLY:H | 1:A:163:LEU:HD22 | 14 | 0.01 |
| (1,891) | 1:A:125:GLY:H | 1:A:163:LEU:HD23 | 14 | 0.01 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,880) | 1:A:109:LEU:HD21 | 1:A:113:LEU:H | 14 | 0.01 |
| (1,880) | 1:A:109:LEU:HD22 | 1:A:113:LEU:H | 14 | 0.01 |
| (1,880) | 1:A:109:LEU:HD23 | 1:A:113:LEU:H | 14 | 0.01 |
| (1,86) | 1:A:155:THR:H | 1:A:158:SER:H | 17 | 0.01 |
| (1,841) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:146:ASP:H | 13 | 0.01 |
| (1,841) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:146:ASP:H | 13 | 0.01 |
| (1,841) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:146:ASP:H | 13 | 0.01 |
| (1,831) | 1:A:117:VAL:HG11 | 1:A:118:TYR:H | 16 | 0.01 |
| (1,831) | 1:A:117:VAL:HG12 | 1:A:118:TYR:H | 16 | 0.01 |
| (1,831) | 1:A:117:VAL:HG13 | 1:A:118:TYR:H | 16 | 0.01 |
| (1,824) | 1:A:24:VAL:HG21 | 1:A:26:ASN:H | 19 | 0.01 |
| (1,824) | 1:A:24:VAL:HG22 | 1:A:26:ASN:H | 19 | 0.01 |
| (1,824) | 1:A:24:VAL:HG23 | 1:A:26:ASN:H | 19 | 0.01 |
| (1,820) | 1:A:75:GLY:H | 1:A:76:VAL:HG11 | 11 | 0.01 |
| (1,820) | 1:A:75:GLY:H | 1:A:76:VAL:HG12 | 11 | 0.01 |
| (1,820) | 1:A:75:GLY:H | 1:A:76:VAL:HG13 | 11 | 0.01 |
| (1,815) | 1:A:170:ASN:H | 1:A:171:LEU:HD21 | 2 | 0.01 |
| (1,815) | 1:A:170:ASN:H | 1:A:171:LEU:HD22 | 2 | 0.01 |
| (1,815) | 1:A:170:ASN:H | 1:A:171:LEU:HD23 | 2 | 0.01 |
| (1,815) | 1:A:170:ASN:H | 1:A:171:LEU:HD21 | 11 | 0.01 |
| (1,815) | 1:A:170:ASN:H | 1:A:171:LEU:HD22 | 11 | 0.01 |
| (1,815) | 1:A:170:ASN:H | 1:A:171:LEU:HD23 | 11 | 0.01 |
| (1,814) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:150:LEU:HD11 | 7 | 0.01 |
| (1,814) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:150:LEU:HD12 | 7 | 0.01 |
| (1,814) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:150:LEU:HD13 | 7 | 0.01 |
| (1,806) | 1:A:166:LEU:HD21 | 1:A:193:GLN:H | 10 | 0.01 |
| (1,806) | 1:A:166:LEU:HD22 | 1:A:193:GLN:H | 10 | 0.01 |
| (1,806) | 1:A:166:LEU:HD23 | 1:A:193:GLN:H | 10 | 0.01 |
| (1,801) | 1:A:113:LEU:HD11 | 1:A:116:LYS:H | 10 | 0.01 |
| (1,801) | 1:A:113:LEU:HD12 | 1:A:116:LYS:H | 10 | 0.01 |
| (1,801) | 1:A:113:LEU:HD13 | 1:A:116:LYS:H | 10 | 0.01 |
| (1,798) | 1:A:86:ALA:H | 1:A:109:LEU:HD11 | 2 | 0.01 |
| (1,798) | 1:A:86:ALA:H | 1:A:109:LEU:HD12 | 2 | 0.01 |
| (1,798) | 1:A:86:ALA:H | 1:A:109:LEU:HD13 | 2 | 0.01 |
| (1,794) | 1:A:148:ASP:H | 1:A:149:LEU:HD21 | 1 | 0.01 |
| (1,794) | 1:A:148:ASP:H | 1:A:149:LEU:HD22 | 1 | 0.01 |
| (1,794) | 1:A:148:ASP:H | 1:A:149:LEU:HD23 | 1 | 0.01 |
| (1,791) | 1:A:121:LEU:HD21 | 1:A:127:PHE:H | 20 | 0.01 |
| (1,791) | 1:A:121:LEU:HD22 | 1:A:127:PHE:H | 20 | 0.01 |
| (1,791) | 1:A:121:LEU:HD23 | 1:A:127:PHE:H | 20 | 0.01 |
| (1,79) | 1:A:175:LEU:HD21 | 1:A:185:ALA:H | 8 | 0.01 |
| (1,79) | 1:A:175:LEU:HD22 | 1:A:185:ALA:H | 8 | 0.01 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,79) | 1:A:175:LEU:HD23 | 1:A:185:ALA:H | 8 | 0.01 |
| (1,788) | 1:A:37:ALA:H | 1:A:85:LEU:HD21 | 7 | 0.01 |
| (1,788) | 1:A:37:ALA:H | 1:A:85:LEU:HD22 | 7 | 0.01 |
| (1,788) | 1:A:37:ALA:H | 1:A:85:LEU:HD23 | 7 | 0.01 |
| (1,781) | 1:A:126:VAL:HG11 | 1:A:194:LYS:H | 12 | 0.01 |
| (1,781) | 1:A:126:VAL:HG12 | 1:A:194:LYS:H | 12 | 0.01 |
| (1,781) | 1:A:126:VAL:HG13 | 1:A:194:LYS:H | 12 | 0.01 |
| (1,780) | 1:A:167:ILE:H | 1:A:191:LEU:HD11 | 16 | 0.01 |
| (1,780) | 1:A:167:ILE:H | 1:A:191:LEU:HD12 | 16 | 0.01 |
| (1,780) | 1:A:167:ILE:H | 1:A:191:LEU:HD13 | 16 | 0.01 |
| (1,778) | 1:A:166:LEU:H | 1:A:191:LEU:HD11 | 1 | 0.01 |
| (1,778) | 1:A:166:LEU:H | 1:A:191:LEU:HD12 | 1 | 0.01 |
| (1,778) | 1:A:166:LEU:H | 1:A:191:LEU:HD13 | 1 | 0.01 |
| (1,778) | 1:A:166:LEU:H | 1:A:191:LEU:HD11 | 4 | 0.01 |
| (1,778) | 1:A:166:LEU:H | 1:A:191:LEU:HD12 | 4 | 0.01 |
| (1,778) | 1:A:166:LEU:H | 1:A:191:LEU:HD13 | 4 | 0.01 |
| (1,77) | 1:A:173:ARG:H | 1:A:185:ALA:H | 2 | 0.01 |
| (1,769) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:121:LEU:HD11 | 19 | 0.01 |
| (1,769) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:121:LEU:HD12 | 19 | 0.01 |
| (1,769) | 1:A:98:ILE:HD11 | 1:A:121:LEU:HD13 | 19 | 0.01 |
| (1,769) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:121:LEU:HD11 | 19 | 0.01 |
| (1,769) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:121:LEU:HD12 | 19 | 0.01 |
| (1,769) | 1:A:98:ILE:HD12 | 1:A:121:LEU:HD13 | 19 | 0.01 |
| (1,769) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:121:LEU:HD11 | 19 | 0.01 |
| (1,769) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:121:LEU:HD12 | 19 | 0.01 |
| (1,769) | 1:A:98:ILE:HD13 | 1:A:121:LEU:HD13 | 19 | 0.01 |
| (1,733) | 1:A:129:LEU:HD21 | 1:A:156:LEU:HD11 | 16 | 0.01 |
| (1,733) | 1:A:129:LEU:HD21 | 1:A:156:LEU:HD12 | 16 | 0.01 |
| (1,733) | 1:A:129:LEU:HD21 | 1:A:156:LEU:HD13 | 16 | 0.01 |
| (1,733) | 1:A:129:LEU:HD22 | 1:A:156:LEU:HD11 | 16 | 0.01 |
| (1,733) | 1:A:129:LEU:HD22 | 1:A:156:LEU:HD12 | 16 | 0.01 |
| (1,733) | 1:A:129:LEU:HD22 | 1:A:156:LEU:HD13 | 16 | 0.01 |
| (1,733) | 1:A:129:LEU:HD23 | 1:A:156:LEU:HD11 | 16 | 0.01 |
| (1,733) | 1:A:129:LEU:HD23 | 1:A:156:LEU:HD12 | 16 | 0.01 |
| (1,733) | 1:A:129:LEU:HD23 | 1:A:156:LEU:HD13 | 16 | 0.01 |
| (1,718) | 1:A:166:LEU:HD21 | 1:A:191:LEU:HD11 | 3 | 0.01 |
| (1,718) | 1:A:166:LEU:HD21 | 1:A:191:LEU:HD12 | 3 | 0.01 |
| (1,718) | 1:A:166:LEU:HD21 | 1:A:191:LEU:HD13 | 3 | 0.01 |
| (1,718) | 1:A:166:LEU:HD22 | 1:A:191:LEU:HD11 | 3 | 0.01 |
| (1,718) | 1:A:166:LEU:HD22 | 1:A:191:LEU:HD12 | 3 | 0.01 |
| (1,718) | 1:A:166:LEU:HD22 | 1:A:191:LEU:HD13 | 3 | 0.01 |
| (1,718) | 1:A:166:LEU:HD23 | 1:A:191:LEU:HD11 | 3 | 0.01 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,718) | 1:A:166:LEU:HD23 | 1:A:191:LEU:HD12 | 3 | 0.01 |
| (1,718) | 1:A:166:LEU:HD23 | 1:A:191:LEU:HD13 | 3 | 0.01 |
| (1,702) | 1:A:137:LEU:HD11 | 1:A:147:LEU:HD11 | 19 | 0.01 |
| (1,702) | 1:A:137:LEU:HD11 | 1:A:147:LEU:HD12 | 19 | 0.01 |
| (1,702) | 1:A:137:LEU:HD11 | 1:A:147:LEU:HD13 | 19 | 0.01 |
| (1,702) | 1:A:137:LEU:HD12 | 1:A:147:LEU:HD11 | 19 | 0.01 |
| (1,702) | 1:A:137:LEU:HD12 | 1:A:147:LEU:HD12 | 19 | 0.01 |
| (1,702) | 1:A:137:LEU:HD12 | 1:A:147:LEU:HD13 | 19 | 0.01 |
| (1,702) | 1:A:137:LEU:HD13 | 1:A:147:LEU:HD11 | 19 | 0.01 |
| (1,702) | 1:A:137:LEU:HD13 | 1:A:147:LEU:HD12 | 19 | 0.01 |
| (1,702) | 1:A:137:LEU:HD13 | 1:A:147:LEU:HD13 | 19 | 0.01 |
| (1,674) | 1:A:57:VAL:HG11 | 1:A:81:VAL:HG11 | 2 | 0.01 |
| (1,674) | 1:A:57:VAL:HG11 | 1:A:81:VAL:HG12 | 2 | 0.01 |
| (1,674) | 1:A:57:VAL:HG11 | 1:A:81:VAL:HG13 | 2 | 0.01 |
| (1,674) | 1:A:57:VAL:HG12 | 1:A:81:VAL:HG11 | 2 | 0.01 |
| (1,674) | 1:A:57:VAL:HG12 | 1:A:81:VAL:HG12 | 2 | 0.01 |
| (1,674) | 1:A:57:VAL:HG12 | 1:A:81:VAL:HG13 | 2 | 0.01 |
| (1,674) | 1:A:57:VAL:HG13 | 1:A:81:VAL:HG11 | 2 | 0.01 |
| (1,674) | 1:A:57:VAL:HG13 | 1:A:81:VAL:HG12 | 2 | 0.01 |
| (1,674) | 1:A:57:VAL:HG13 | 1:A:81:VAL:HG13 | 2 | 0.01 |
| (1,674) | 1:A:57:VAL:HG11 | 1:A:81:VAL:HG11 | 15 | 0.01 |
| (1,674) | 1:A:57:VAL:HG11 | 1:A:81:VAL:HG12 | 15 | 0.01 |
| (1,674) | 1:A:57:VAL:HG11 | 1:A:81:VAL:HG13 | 15 | 0.01 |
| (1,674) | 1:A:57:VAL:HG12 | 1:A:81:VAL:HG11 | 15 | 0.01 |
| (1,674) | 1:A:57:VAL:HG12 | 1:A:81:VAL:HG12 | 15 | 0.01 |
| (1,674) | 1:A:57:VAL:HG12 | 1:A:81:VAL:HG13 | 15 | 0.01 |
| (1,674) | 1:A:57:VAL:HG13 | 1:A:81:VAL:HG11 | 15 | 0.01 |
| (1,674) | 1:A:57:VAL:HG13 | 1:A:81:VAL:HG12 | 15 | 0.01 |
| (1,674) | 1:A:57:VAL:HG13 | 1:A:81:VAL:HG13 | 15 | 0.01 |
| (1,628) | 1:A:145:LYS:H | 1:A:147:LEU:H | 9 | 0.01 |
| (1,603) | 1:A:58:ASP:H | 1:A:81:VAL:H | 11 | 0.01 |
| (1,586) | 1:A:171:LEU:H | 1:A:189:GLN:H | 19 | 0.01 |
| (1,579) | 1:A:169:ASN:H | 1:A:189:GLN:H | 9 | 0.01 |
| (1,579) | 1:A:169:ASN:H | 1:A:189:GLN:H | 12 | 0.01 |
| (1,579) | 1:A:169:ASN:H | 1:A:189:GLN:H | 15 | 0.01 |
| (1,570) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:145:LYS:H | 16 | 0.01 |
| (1,570) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:145:LYS:H | 16 | 0.01 |
| (1,570) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:145:LYS:H | 16 | 0.01 |
| (1,560) | 1:A:47:LEU:HD21 | 1:A:50:LEU:HD21 | 1 | 0.01 |
| (1,560) | 1:A:47:LEU:HD21 | 1:A:50:LEU:HD22 | 1 | 0.01 |
| (1,560) | 1:A:47:LEU:HD21 | 1:A:50:LEU:HD23 | 1 | 0.01 |
| (1,560) | 1:A:47:LEU:HD22 | 1:A:50:LEU:HD21 | 1 | 0.01 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,560) | 1:A:47:LEU:HD22 | 1:A:50:LEU:HD22 | 1 | 0.01 |
| (1,560) | 1:A:47:LEU:HD22 | 1:A:50:LEU:HD23 | 1 | 0.01 |
| (1,560) | 1:A:47:LEU:HD23 | 1:A:50:LEU:HD21 | 1 | 0.01 |
| (1,560) | 1:A:47:LEU:HD23 | 1:A:50:LEU:HD22 | 1 | 0.01 |
| (1,560) | 1:A:47:LEU:HD23 | 1:A:50:LEU:HD23 | 1 | 0.01 |
| (1,560) | 1:A:47:LEU:HD21 | 1:A:50:LEU:HD21 | 16 | 0.01 |
| (1,560) | 1:A:47:LEU:HD21 | 1:A:50:LEU:HD22 | 16 | 0.01 |
| (1,560) | 1:A:47:LEU:HD21 | 1:A:50:LEU:HD23 | 16 | 0.01 |
| (1,560) | 1:A:47:LEU:HD22 | 1:A:50:LEU:HD21 | 16 | 0.01 |
| (1,560) | 1:A:47:LEU:HD22 | 1:A:50:LEU:HD22 | 16 | 0.01 |
| (1,560) | 1:A:47:LEU:HD22 | 1:A:50:LEU:HD23 | 16 | 0.01 |
| (1,560) | 1:A:47:LEU:HD23 | 1:A:50:LEU:HD21 | 16 | 0.01 |
| (1,560) | 1:A:47:LEU:HD23 | 1:A:50:LEU:HD22 | 16 | 0.01 |
| (1,560) | 1:A:47:LEU:HD23 | 1:A:50:LEU:HD23 | 16 | 0.01 |
| (1,554) | 1:A:47:LEU:HD11 | 1:A:54:VAL:HG11 | 20 | 0.01 |
| (1,554) | 1:A:47:LEU:HD11 | 1:A:54:VAL:HG12 | 20 | 0.01 |
| (1,554) | 1:A:47:LEU:HD11 | 1:A:54:VAL:HG13 | 20 | 0.01 |
| (1,554) | 1:A:47:LEU:HD12 | 1:A:54:VAL:HG11 | 20 | 0.01 |
| (1,554) | 1:A:47:LEU:HD12 | 1:A:54:VAL:HG12 | 20 | 0.01 |
| (1,554) | 1:A:47:LEU:HD12 | 1:A:54:VAL:HG13 | 20 | 0.01 |
| (1,554) | 1:A:47:LEU:HD13 | 1:A:54:VAL:HG11 | 20 | 0.01 |
| (1,554) | 1:A:47:LEU:HD13 | 1:A:54:VAL:HG12 | 20 | 0.01 |
| (1,554) | 1:A:47:LEU:HD13 | 1:A:54:VAL:HG13 | 20 | 0.01 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD21 | 1:A:81:VAL:HG11 | 19 | 0.01 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD21 | 1:A:81:VAL:HG12 | 19 | 0.01 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD21 | 1:A:81:VAL:HG13 | 19 | 0.01 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD22 | 1:A:81:VAL:HG11 | 19 | 0.01 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD22 | 1:A:81:VAL:HG12 | 19 | 0.01 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD22 | 1:A:81:VAL:HG13 | 19 | 0.01 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD23 | 1:A:81:VAL:HG11 | 19 | 0.01 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD23 | 1:A:81:VAL:HG12 | 19 | 0.01 |
| (1,547) | 1:A:36:LEU:HD23 | 1:A:81:VAL:HG13 | 19 | 0.01 |
| (1,543) | 1:A:129:LEU:HD11 | 1:A:156:LEU:HD11 | 5 | 0.01 |
| (1,543) | 1:A:129:LEU:HD11 | 1:A:156:LEU:HD12 | 5 | 0.01 |
| (1,543) | 1:A:129:LEU:HD11 | 1:A:156:LEU:HD13 | 5 | 0.01 |
| (1,543) | 1:A:129:LEU:HD12 | 1:A:156:LEU:HD11 | 5 | 0.01 |
| (1,543) | 1:A:129:LEU:HD12 | 1:A:156:LEU:HD12 | 5 | 0.01 |
| (1,543) | 1:A:129:LEU:HD12 | 1:A:156:LEU:HD13 | 5 | 0.01 |
| (1,543) | 1:A:129:LEU:HD13 | 1:A:156:LEU:HD11 | 5 | 0.01 |
| (1,543) | 1:A:129:LEU:HD13 | 1:A:156:LEU:HD12 | 5 | 0.01 |
| (1,543) | 1:A:129:LEU:HD13 | 1:A:156:LEU:HD13 | 5 | 0.01 |
| (1,543) | 1:A:129:LEU:HD11 | 1:A:156:LEU:HD11 | 10 | 0.01 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|-----------------|
| (1,543) | 1:A:129:LEU:HD11 | 1:A:156:LEU:HD12 | 10 | 0.01 |
| (1,543) | 1:A:129:LEU:HD11 | 1:A:156:LEU:HD13 | 10 | 0.01 |
| (1,543) | 1:A:129:LEU:HD12 | 1:A:156:LEU:HD11 | 10 | 0.01 |
| (1,543) | 1:A:129:LEU:HD12 | 1:A:156:LEU:HD12 | 10 | 0.01 |
| (1,543) | 1:A:129:LEU:HD12 | 1:A:156:LEU:HD13 | 10 | 0.01 |
| (1,543) | 1:A:129:LEU:HD13 | 1:A:156:LEU:HD11 | 10 | 0.01 |
| (1,543) | 1:A:129:LEU:HD13 | 1:A:156:LEU:HD12 | 10 | 0.01 |
| (1,543) | 1:A:129:LEU:HD13 | 1:A:156:LEU:HD13 | 10 | 0.01 |
| (1,532) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:113:LEU:HD11 | 18 | 0.01 |
| (1,532) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:113:LEU:HD12 | 18 | 0.01 |
| (1,532) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:113:LEU:HD13 | 18 | 0.01 |
| (1,532) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:113:LEU:HD11 | 18 | 0.01 |
| (1,532) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:113:LEU:HD12 | 18 | 0.01 |
| (1,532) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:113:LEU:HD13 | 18 | 0.01 |
| (1,532) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:113:LEU:HD11 | 18 | 0.01 |
| (1,532) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:113:LEU:HD12 | 18 | 0.01 |
| (1,532) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:113:LEU:HD13 | 18 | 0.01 |
| (1,511) | 1:A:145:LYS:H | 1:A:149:LEU:HD21 | 9 | 0.01 |
| (1,511) | 1:A:145:LYS:H | 1:A:149:LEU:HD22 | 9 | 0.01 |
| (1,511) | 1:A:145:LYS:H | 1:A:149:LEU:HD23 | 9 | 0.01 |
| (1,507) | 1:A:37:ALA:H | 1:A:57:VAL:HG21 | 17 | 0.01 |
| (1,507) | 1:A:37:ALA:H | 1:A:57:VAL:HG22 | 17 | 0.01 |
| (1,507) | 1:A:37:ALA:H | 1:A:57:VAL:HG23 | 17 | 0.01 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:109:LEU:HD21 | 4 | 0.01 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:109:LEU:HD22 | 4 | 0.01 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:109:LEU:HD23 | 4 | 0.01 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:109:LEU:HD21 | 4 | 0.01 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:109:LEU:HD22 | 4 | 0.01 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:109:LEU:HD23 | 4 | 0.01 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:109:LEU:HD21 | 4 | 0.01 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:109:LEU:HD22 | 4 | 0.01 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:109:LEU:HD23 | 4 | 0.01 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:109:LEU:HD21 | 8 | 0.01 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:109:LEU:HD22 | 8 | 0.01 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:109:LEU:HD23 | 8 | 0.01 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:109:LEU:HD21 | 8 | 0.01 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:109:LEU:HD22 | 8 | 0.01 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:109:LEU:HD23 | 8 | 0.01 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:109:LEU:HD21 | 8 | 0.01 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:109:LEU:HD22 | 8 | 0.01 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:109:LEU:HD23 | 8 | 0.01 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:109:LEU:HD21 | 17 | 0.01 |
| (1,100) | | | | od on nort nage |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:109:LEU:HD22 | 17 | 0.01 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:109:LEU:HD23 | 17 | 0.01 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:109:LEU:HD21 | 17 | 0.01 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:109:LEU:HD22 | 17 | 0.01 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:109:LEU:HD23 | 17 | 0.01 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:109:LEU:HD21 | 17 | 0.01 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:109:LEU:HD22 | 17 | 0.01 |
| (1,490) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:109:LEU:HD23 | 17 | 0.01 |
| (1,489) | 1:A:147:LEU:HD21 | 1:A:150:LEU:HD11 | 10 | 0.01 |
| (1,489) | 1:A:147:LEU:HD21 | 1:A:150:LEU:HD12 | 10 | 0.01 |
| (1,489) | 1:A:147:LEU:HD21 | 1:A:150:LEU:HD13 | 10 | 0.01 |
| (1,489) | 1:A:147:LEU:HD22 | 1:A:150:LEU:HD11 | 10 | 0.01 |
| (1,489) | 1:A:147:LEU:HD22 | 1:A:150:LEU:HD12 | 10 | 0.01 |
| (1,489) | 1:A:147:LEU:HD22 | 1:A:150:LEU:HD13 | 10 | 0.01 |
| (1,489) | 1:A:147:LEU:HD23 | 1:A:150:LEU:HD11 | 10 | 0.01 |
| (1,489) | 1:A:147:LEU:HD23 | 1:A:150:LEU:HD12 | 10 | 0.01 |
| (1,489) | 1:A:147:LEU:HD23 | 1:A:150:LEU:HD13 | 10 | 0.01 |
| (1,480) | 1:A:57:VAL:HG11 | 1:A:81:VAL:HG21 | 18 | 0.01 |
| (1,480) | 1:A:57:VAL:HG11 | 1:A:81:VAL:HG22 | 18 | 0.01 |
| (1,480) | 1:A:57:VAL:HG11 | 1:A:81:VAL:HG23 | 18 | 0.01 |
| (1,480) | 1:A:57:VAL:HG12 | 1:A:81:VAL:HG21 | 18 | 0.01 |
| (1,480) | 1:A:57:VAL:HG12 | 1:A:81:VAL:HG22 | 18 | 0.01 |
| (1,480) | 1:A:57:VAL:HG12 | 1:A:81:VAL:HG23 | 18 | 0.01 |
| (1,480) | 1:A:57:VAL:HG13 | 1:A:81:VAL:HG21 | 18 | 0.01 |
| (1,480) | 1:A:57:VAL:HG13 | 1:A:81:VAL:HG22 | 18 | 0.01 |
| (1,480) | 1:A:57:VAL:HG13 | 1:A:81:VAL:HG23 | 18 | 0.01 |
| (1,478) | 1:A:81:VAL:HG21 | 1:A:82:GLN:H | 2 | 0.01 |
| (1,478) | 1:A:81:VAL:HG22 | 1:A:82:GLN:H | 2 | 0.01 |
| (1,478) | 1:A:81:VAL:HG23 | 1:A:82:GLN:H | 2 | 0.01 |
| (1,477) | 1:A:81:VAL:HG21 | 1:A:95:TRP:HE1 | 4 | 0.01 |
| (1,477) | 1:A:81:VAL:HG22 | 1:A:95:TRP:HE1 | 4 | 0.01 |
| (1,477) | 1:A:81:VAL:HG23 | 1:A:95:TRP:HE1 | 4 | 0.01 |
| (1,467) | 1:A:62:VAL:HG11 | 1:A:63:GLY:H | 15 | 0.01 |
| (1,467) | 1:A:62:VAL:HG12 | 1:A:63:GLY:H | 15 | 0.01 |
| (1,467) | 1:A:62:VAL:HG13 | 1:A:63:GLY:H | 15 | 0.01 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD11 | 1:A:117:VAL:HG11 | 16 | 0.01 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD11 | 1:A:117:VAL:HG12 | 16 | 0.01 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD11 | 1:A:117:VAL:HG13 | 16 | 0.01 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD12 | 1:A:117:VAL:HG11 | 16 | 0.01 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD12 | 1:A:117:VAL:HG12 | 16 | 0.01 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD12 | 1:A:117:VAL:HG13 | 16 | 0.01 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD13 | 1:A:117:VAL:HG11 | 16 | 0.01 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD13 | 1:A:117:VAL:HG12 | 16 | 0.01 |
| (1,466) | 1:A:113:LEU:HD13 | 1:A:117:VAL:HG13 | 16 | 0.01 |
| (1,462) | 1:A:129:LEU:HD11 | 1:A:153:LEU:HD21 | 3 | 0.01 |
| (1,462) | 1:A:129:LEU:HD11 | 1:A:153:LEU:HD22 | 3 | 0.01 |
| (1,462) | 1:A:129:LEU:HD11 | 1:A:153:LEU:HD23 | 3 | 0.01 |
| (1,462) | 1:A:129:LEU:HD12 | 1:A:153:LEU:HD21 | 3 | 0.01 |
| (1,462) | 1:A:129:LEU:HD12 | 1:A:153:LEU:HD22 | 3 | 0.01 |
| (1,462) | 1:A:129:LEU:HD12 | 1:A:153:LEU:HD23 | 3 | 0.01 |
| (1,462) | 1:A:129:LEU:HD13 | 1:A:153:LEU:HD21 | 3 | 0.01 |
| (1,462) | 1:A:129:LEU:HD13 | 1:A:153:LEU:HD22 | 3 | 0.01 |
| (1,462) | 1:A:129:LEU:HD13 | 1:A:153:LEU:HD23 | 3 | 0.01 |
| (1,455) | 1:A:121:LEU:HD21 | 1:A:160:LEU:HD21 | 2 | 0.01 |
| (1,455) | 1:A:121:LEU:HD21 | 1:A:160:LEU:HD22 | 2 | 0.01 |
| (1,455) | 1:A:121:LEU:HD21 | 1:A:160:LEU:HD23 | 2 | 0.01 |
| (1,455) | 1:A:121:LEU:HD22 | 1:A:160:LEU:HD21 | 2 | 0.01 |
| (1,455) | 1:A:121:LEU:HD22 | 1:A:160:LEU:HD22 | 2 | 0.01 |
| (1,455) | 1:A:121:LEU:HD22 | 1:A:160:LEU:HD23 | 2 | 0.01 |
| (1,455) | 1:A:121:LEU:HD23 | 1:A:160:LEU:HD21 | 2 | 0.01 |
| (1,455) | 1:A:121:LEU:HD23 | 1:A:160:LEU:HD22 | 2 | 0.01 |
| (1,455) | 1:A:121:LEU:HD23 | 1:A:160:LEU:HD23 | 2 | 0.01 |
| (1,450) | 1:A:21:LEU:HD11 | 1:A:47:LEU:HD21 | 7 | 0.01 |
| (1,450) | 1:A:21:LEU:HD11 | 1:A:47:LEU:HD22 | 7 | 0.01 |
| (1,450) | 1:A:21:LEU:HD11 | 1:A:47:LEU:HD23 | 7 | 0.01 |
| (1,450) | 1:A:21:LEU:HD12 | 1:A:47:LEU:HD21 | 7 | 0.01 |
| (1,450) | 1:A:21:LEU:HD12 | 1:A:47:LEU:HD22 | 7 | 0.01 |
| (1,450) | 1:A:21:LEU:HD12 | 1:A:47:LEU:HD23 | 7 | 0.01 |
| (1,450) | 1:A:21:LEU:HD13 | 1:A:47:LEU:HD21 | 7 | 0.01 |
| (1,450) | 1:A:21:LEU:HD13 | 1:A:47:LEU:HD22 | 7 | 0.01 |
| (1,450) | 1:A:21:LEU:HD13 | 1:A:47:LEU:HD23 | 7 | 0.01 |
| (1,446) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:36:LEU:HD21 | 20 | 0.01 |
| (1,446) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:36:LEU:HD22 | 20 | 0.01 |
| (1,446) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:36:LEU:HD23 | 20 | 0.01 |
| (1,446) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:36:LEU:HD21 | 20 | 0.01 |
| (1,446) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:36:LEU:HD22 | 20 | 0.01 |
| (1,446) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:36:LEU:HD23 | 20 | 0.01 |
| (1,446) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:36:LEU:HD21 | 20 | 0.01 |
| (1,446) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:36:LEU:HD22 | 20 | 0.01 |
| (1,446) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:36:LEU:HD23 | 20 | 0.01 |
| (1,443) | 1:A:153:LEU:HD21 | 1:A:190:LEU:HD21 | 7 | 0.01 |
| (1,443) | 1:A:153:LEU:HD21 | 1:A:190:LEU:HD22 | 7 | 0.01 |
| (1,443) | 1:A:153:LEU:HD21 | 1:A:190:LEU:HD23 | 7 | 0.01 |
| (1,443) | 1:A:153:LEU:HD22 | 1:A:190:LEU:HD21 | 7 | 0.01 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,443) | 1:A:153:LEU:HD22 | 1:A:190:LEU:HD22 | 7 | 0.01 |
| (1,443) | 1:A:153:LEU:HD22 | 1:A:190:LEU:HD23 | 7 | 0.01 |
| (1,443) | 1:A:153:LEU:HD23 | 1:A:190:LEU:HD21 | 7 | 0.01 |
| (1,443) | 1:A:153:LEU:HD23 | 1:A:190:LEU:HD22 | 7 | 0.01 |
| (1,443) | 1:A:153:LEU:HD23 | 1:A:190:LEU:HD23 | 7 | 0.01 |
| (1,425) | 1:A:24:VAL:HG11 | 1:A:191:LEU:HD21 | 9 | 0.01 |
| (1,425) | 1:A:24:VAL:HG11 | 1:A:191:LEU:HD22 | 9 | 0.01 |
| (1,425) | 1:A:24:VAL:HG11 | 1:A:191:LEU:HD23 | 9 | 0.01 |
| (1,425) | 1:A:24:VAL:HG12 | 1:A:191:LEU:HD21 | 9 | 0.01 |
| (1,425) | 1:A:24:VAL:HG12 | 1:A:191:LEU:HD22 | 9 | 0.01 |
| (1,425) | 1:A:24:VAL:HG12 | 1:A:191:LEU:HD23 | 9 | 0.01 |
| (1,425) | 1:A:24:VAL:HG13 | 1:A:191:LEU:HD21 | 9 | 0.01 |
| (1,425) | 1:A:24:VAL:HG13 | 1:A:191:LEU:HD22 | 9 | 0.01 |
| (1,425) | 1:A:24:VAL:HG13 | 1:A:191:LEU:HD23 | 9 | 0.01 |
| (1,410) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:150:LEU:HD21 | 4 | 0.01 |
| (1,410) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:150:LEU:HD22 | 4 | 0.01 |
| (1,410) | 1:A:137:LEU:HD21 | 1:A:150:LEU:HD23 | 4 | 0.01 |
| (1,410) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:150:LEU:HD21 | 4 | 0.01 |
| (1,410) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:150:LEU:HD22 | 4 | 0.01 |
| (1,410) | 1:A:137:LEU:HD22 | 1:A:150:LEU:HD23 | 4 | 0.01 |
| (1,410) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:150:LEU:HD21 | 4 | 0.01 |
| (1,410) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:150:LEU:HD22 | 4 | 0.01 |
| (1,410) | 1:A:137:LEU:HD23 | 1:A:150:LEU:HD23 | 4 | 0.01 |
| (1,405) | 1:A:47:LEU:HD21 | 1:A:50:LEU:HD11 | 15 | 0.01 |
| (1,405) | 1:A:47:LEU:HD21 | 1:A:50:LEU:HD12 | 15 | 0.01 |
| (1,405) | 1:A:47:LEU:HD21 | 1:A:50:LEU:HD13 | 15 | 0.01 |
| (1,405) | 1:A:47:LEU:HD22 | 1:A:50:LEU:HD11 | 15 | 0.01 |
| (1,405) | 1:A:47:LEU:HD22 | 1:A:50:LEU:HD12 | 15 | 0.01 |
| (1,405) | 1:A:47:LEU:HD22 | 1:A:50:LEU:HD13 | 15 | 0.01 |
| (1,405) | 1:A:47:LEU:HD23 | 1:A:50:LEU:HD11 | 15 | 0.01 |
| (1,405) | 1:A:47:LEU:HD23 | 1:A:50:LEU:HD12 | 15 | 0.01 |
| (1,405) | 1:A:47:LEU:HD23 | 1:A:50:LEU:HD13 | 15 | 0.01 |
| (1,398) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:36:LEU:HD21 | 1 | 0.01 |
| (1,398) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:36:LEU:HD22 | 1 | 0.01 |
| (1,398) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:36:LEU:HD23 | 1 | 0.01 |
| (1,398) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:36:LEU:HD21 | 1 | 0.01 |
| (1,398) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:36:LEU:HD22 | 1 | 0.01 |
| (1,398) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:36:LEU:HD23 | 1 | 0.01 |
| (1,398) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:36:LEU:HD21 | 1 | 0.01 |
| (1,398) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:36:LEU:HD22 | 1 | 0.01 |
| (1,398) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:36:LEU:HD23 | 1 | 0.01 |
| (1,392) | 1:A:63:GLY:H | 1:A:64:LEU:HD21 | 1 | 0.01 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|-----------------|------------------|-------|---------------|
| (1,392) | 1:A:63:GLY:H | 1:A:64:LEU:HD22 | 1 | 0.01 |
| (1,392) | 1:A:63:GLY:H | 1:A:64:LEU:HD23 | 1 | 0.01 |
| (1,391) | 1:A:58:ASP:H | 1:A:64:LEU:HD21 | 12 | 0.01 |
| (1,391) | 1:A:58:ASP:H | 1:A:64:LEU:HD22 | 12 | 0.01 |
| (1,391) | 1:A:58:ASP:H | 1:A:64:LEU:HD23 | 12 | 0.01 |
| (1,390) | 1:A:47:LEU:H | 1:A:50:LEU:HD21 | 2 | 0.01 |
| (1,390) | 1:A:47:LEU:H | 1:A:50:LEU:HD22 | 2 | 0.01 |
| (1,390) | 1:A:47:LEU:H | 1:A:50:LEU:HD23 | 2 | 0.01 |
| (1,382) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:167:ILE:HD11 | 3 | 0.01 |
| (1,382) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:167:ILE:HD12 | 3 | 0.01 |
| (1,382) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:167:ILE:HD13 | 3 | 0.01 |
| (1,376) | 1:A:33:ILE:HD11 | 1:A:50:LEU:HD11 | 16 | 0.01 |
| (1,376) | 1:A:33:ILE:HD11 | 1:A:50:LEU:HD12 | 16 | 0.01 |
| (1,376) | 1:A:33:ILE:HD11 | 1:A:50:LEU:HD13 | 16 | 0.01 |
| (1,376) | 1:A:33:ILE:HD12 | 1:A:50:LEU:HD11 | 16 | 0.01 |
| (1,376) | 1:A:33:ILE:HD12 | 1:A:50:LEU:HD12 | 16 | 0.01 |
| (1,376) | 1:A:33:ILE:HD12 | 1:A:50:LEU:HD13 | 16 | 0.01 |
| (1,376) | 1:A:33:ILE:HD13 | 1:A:50:LEU:HD11 | 16 | 0.01 |
| (1,376) | 1:A:33:ILE:HD13 | 1:A:50:LEU:HD12 | 16 | 0.01 |
| (1,376) | 1:A:33:ILE:HD13 | 1:A:50:LEU:HD13 | 16 | 0.01 |
| (1,371) | 1:A:28:ILE:HD11 | 1:A:47:LEU:HD11 | 12 | 0.01 |
| (1,371) | 1:A:28:ILE:HD11 | 1:A:47:LEU:HD12 | 12 | 0.01 |
| (1,371) | 1:A:28:ILE:HD11 | 1:A:47:LEU:HD13 | 12 | 0.01 |
| (1,371) | 1:A:28:ILE:HD12 | 1:A:47:LEU:HD11 | 12 | 0.01 |
| (1,371) | 1:A:28:ILE:HD12 | 1:A:47:LEU:HD12 | 12 | 0.01 |
| (1,371) | 1:A:28:ILE:HD12 | 1:A:47:LEU:HD13 | 12 | 0.01 |
| (1,371) | 1:A:28:ILE:HD13 | 1:A:47:LEU:HD11 | 12 | 0.01 |
| (1,371) | 1:A:28:ILE:HD13 | 1:A:47:LEU:HD12 | 12 | 0.01 |
| (1,371) | 1:A:28:ILE:HD13 | 1:A:47:LEU:HD13 | 12 | 0.01 |
| (1,367) | 1:A:21:LEU:HD11 | 1:A:128:ILE:HD11 | 13 | 0.01 |
| (1,367) | 1:A:21:LEU:HD11 | 1:A:128:ILE:HD12 | 13 | 0.01 |
| (1,367) | 1:A:21:LEU:HD11 | 1:A:128:ILE:HD13 | 13 | 0.01 |
| (1,367) | 1:A:21:LEU:HD12 | 1:A:128:ILE:HD11 | 13 | 0.01 |
| (1,367) | 1:A:21:LEU:HD12 | 1:A:128:ILE:HD12 | 13 | 0.01 |
| (1,367) | 1:A:21:LEU:HD12 | 1:A:128:ILE:HD13 | 13 | 0.01 |
| (1,367) | 1:A:21:LEU:HD13 | 1:A:128:ILE:HD11 | 13 | 0.01 |
| (1,367) | 1:A:21:LEU:HD13 | 1:A:128:ILE:HD12 | 13 | 0.01 |
| (1,367) | 1:A:21:LEU:HD13 | 1:A:128:ILE:HD13 | 13 | 0.01 |
| (1,36) | 1:A:88:PHE:H | 1:A:89:ASP:H | 16 | 0.01 |
| (1,359) | 1:A:90:ILE:HD11 | 1:A:117:VAL:HG21 | 4 | 0.01 |
| (1,359) | 1:A:90:ILE:HD11 | 1:A:117:VAL:HG22 | 4 | 0.01 |
| (1,359) | 1:A:90:ILE:HD11 | 1:A:117:VAL:HG23 | 4 | 0.01 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,359) | 1:A:90:ILE:HD12 | 1:A:117:VAL:HG21 | 4 | 0.01 |
| (1,359) | 1:A:90:ILE:HD12 | 1:A:117:VAL:HG22 | 4 | 0.01 |
| (1,359) | 1:A:90:ILE:HD12 | 1:A:117:VAL:HG23 | 4 | 0.01 |
| (1,359) | 1:A:90:ILE:HD13 | 1:A:117:VAL:HG21 | 4 | 0.01 |
| (1,359) | 1:A:90:ILE:HD13 | 1:A:117:VAL:HG22 | 4 | 0.01 |
| (1,359) | 1:A:90:ILE:HD13 | 1:A:117:VAL:HG23 | 4 | 0.01 |
| (1,359) | 1:A:90:ILE:HD11 | 1:A:117:VAL:HG21 | 8 | 0.01 |
| (1,359) | 1:A:90:ILE:HD11 | 1:A:117:VAL:HG22 | 8 | 0.01 |
| (1,359) | 1:A:90:ILE:HD11 | 1:A:117:VAL:HG23 | 8 | 0.01 |
| (1,359) | 1:A:90:ILE:HD12 | 1:A:117:VAL:HG21 | 8 | 0.01 |
| (1,359) | 1:A:90:ILE:HD12 | 1:A:117:VAL:HG22 | 8 | 0.01 |
| (1,359) | 1:A:90:ILE:HD12 | 1:A:117:VAL:HG23 | 8 | 0.01 |
| (1,359) | 1:A:90:ILE:HD13 | 1:A:117:VAL:HG21 | 8 | 0.01 |
| (1,359) | 1:A:90:ILE:HD13 | 1:A:117:VAL:HG22 | 8 | 0.01 |
| (1,359) | 1:A:90:ILE:HD13 | 1:A:117:VAL:HG23 | 8 | 0.01 |
| (1,359) | 1:A:90:ILE:HD11 | 1:A:117:VAL:HG21 | 16 | 0.01 |
| (1,359) | 1:A:90:ILE:HD11 | 1:A:117:VAL:HG22 | 16 | 0.01 |
| (1,359) | 1:A:90:ILE:HD11 | 1:A:117:VAL:HG23 | 16 | 0.01 |
| (1,359) | 1:A:90:ILE:HD12 | 1:A:117:VAL:HG21 | 16 | 0.01 |
| (1,359) | 1:A:90:ILE:HD12 | 1:A:117:VAL:HG22 | 16 | 0.01 |
| (1,359) | 1:A:90:ILE:HD12 | 1:A:117:VAL:HG23 | 16 | 0.01 |
| (1,359) | 1:A:90:ILE:HD13 | 1:A:117:VAL:HG21 | 16 | 0.01 |
| (1,359) | 1:A:90:ILE:HD13 | 1:A:117:VAL:HG22 | 16 | 0.01 |
| (1,359) | 1:A:90:ILE:HD13 | 1:A:117:VAL:HG23 | 16 | 0.01 |
| (1,35) | 1:A:87:ASP:H | 1:A:88:PHE:H | 17 | 0.01 |
| (1,345) | 1:A:34:LEU:H | 1:A:54:VAL:HG11 | 4 | 0.01 |
| (1,345) | 1:A:34:LEU:H | 1:A:54:VAL:HG12 | 4 | 0.01 |
| (1,345) | 1:A:34:LEU:H | 1:A:54:VAL:HG13 | 4 | 0.01 |
| (1,310) | 1:A:173:ARG:H | 1:A:187:LEU:HD11 | 15 | 0.01 |
| (1,310) | 1:A:173:ARG:H | 1:A:187:LEU:HD12 | 15 | 0.01 |
| (1,310) | 1:A:173:ARG:H | 1:A:187:LEU:HD13 | 15 | 0.01 |
| (1,304) | 1:A:91:VAL:HG11 | 1:A:93:ASP:H | 19 | 0.01 |
| (1,304) | 1:A:91:VAL:HG12 | 1:A:93:ASP:H | 19 | 0.01 |
| (1,304) | 1:A:91:VAL:HG13 | 1:A:93:ASP:H | 19 | 0.01 |
| (1,301) | 1:A:104:HIS:H | 1:A:105:LEU:HD21 | 18 | 0.01 |
| (1,301) | 1:A:104:HIS:H | 1:A:105:LEU:HD22 | 18 | 0.01 |
| (1,301) | 1:A:104:HIS:H | 1:A:105:LEU:HD23 | 18 | 0.01 |
| (1,289) | 1:A:101:ILE:HD11 | 1:A:128:ILE:H | 3 | 0.01 |
| (1,289) | 1:A:101:ILE:HD12 | 1:A:128:ILE:H | 3 | 0.01 |
| (1,289) | 1:A:101:ILE:HD13 | 1:A:128:ILE:H | 3 | 0.01 |
| (1,289) | 1:A:101:ILE:HD11 | 1:A:128:ILE:H | 12 | 0.01 |
| (1,289) | 1:A:101:ILE:HD12 | 1:A:128:ILE:H | 12 | 0.01 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,289) | 1:A:101:ILE:HD13 | 1:A:128:ILE:H | 12 | 0.01 |
| (1,286) | 1:A:125:GLY:H | 1:A:194:LYS:H | 15 | 0.01 |
| (1,274) | 1:A:91:VAL:H | 1:A:95:TRP:HE1 | 12 | 0.01 |
| (1,272) | 1:A:124:GLY:H | 1:A:163:LEU:HD21 | 11 | 0.01 |
| (1,272) | 1:A:124:GLY:H | 1:A:163:LEU:HD22 | 11 | 0.01 |
| (1,272) | 1:A:124:GLY:H | 1:A:163:LEU:HD23 | 11 | 0.01 |
| (1,267) | 1:A:118:TYR:H | 1:A:160:LEU:HD21 | 12 | 0.01 |
| (1,267) | 1:A:118:TYR:H | 1:A:160:LEU:HD22 | 12 | 0.01 |
| (1,267) | 1:A:118:TYR:H | 1:A:160:LEU:HD23 | 12 | 0.01 |
| (1,263) | 1:A:163:LEU:HD11 | 1:A:164:ASN:H | 1 | 0.01 |
| (1,263) | 1:A:163:LEU:HD12 | 1:A:164:ASN:H | 1 | 0.01 |
| (1,263) | 1:A:163:LEU:HD13 | 1:A:164:ASN:H | 1 | 0.01 |
| (1,263) | 1:A:163:LEU:HD11 | 1:A:164:ASN:H | 4 | 0.01 |
| (1,263) | 1:A:163:LEU:HD12 | 1:A:164:ASN:H | 4 | 0.01 |
| (1,263) | 1:A:163:LEU:HD13 | 1:A:164:ASN:H | 4 | 0.01 |
| (1,250) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:84:ASN:H | 13 | 0.01 |
| (1,250) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:84:ASN:H | 13 | 0.01 |
| (1,250) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:84:ASN:H | 13 | 0.01 |
| (1,243) | 1:A:133:ALA:H | 1:A:150:LEU:HD11 | 20 | 0.01 |
| (1,243) | 1:A:133:ALA:H | 1:A:150:LEU:HD12 | 20 | 0.01 |
| (1,243) | 1:A:133:ALA:H | 1:A:150:LEU:HD13 | 20 | 0.01 |
| (1,242) | 1:A:133:ALA:H | 1:A:147:LEU:HD21 | 1 | 0.01 |
| (1,242) | 1:A:133:ALA:H | 1:A:147:LEU:HD22 | 1 | 0.01 |
| (1,242) | 1:A:133:ALA:H | 1:A:147:LEU:HD23 | 1 | 0.01 |
| (1,236) | 1:A:21:LEU:HD11 | 1:A:25:ALA:H | 16 | 0.01 |
| (1,236) | 1:A:21:LEU:HD12 | 1:A:25:ALA:H | 16 | 0.01 |
| (1,236) | 1:A:21:LEU:HD13 | 1:A:25:ALA:H | 16 | 0.01 |
| (1,233) | 1:A:54:VAL:HG11 | 1:A:55:THR:H | 7 | 0.01 |
| (1,233) | 1:A:54:VAL:HG12 | 1:A:55:THR:H | 7 | 0.01 |
| (1,233) | 1:A:54:VAL:HG13 | 1:A:55:THR:H | 7 | 0.01 |
| (1,233) | 1:A:54:VAL:HG11 | 1:A:55:THR:H | 10 | 0.01 |
| (1,233) | 1:A:54:VAL:HG12 | 1:A:55:THR:H | 10 | 0.01 |
| (1,233) | 1:A:54:VAL:HG13 | 1:A:55:THR:H | 10 | 0.01 |
| (1,230) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:150:LEU:HD21 | 11 | 0.01 |
| (1,230) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:150:LEU:HD22 | 11 | 0.01 |
| (1,230) | 1:A:147:LEU:H | 1:A:150:LEU:HD23 | 11 | 0.01 |
| (1,221) | 1:A:160:LEU:HD21 | 1:A:165:TRP:HE1 | 20 | 0.01 |
| (1,221) | 1:A:160:LEU:HD22 | 1:A:165:TRP:HE1 | 20 | 0.01 |
| (1,221) | 1:A:160:LEU:HD23 | 1:A:165:TRP:HE1 | 20 | 0.01 |
| (1,212) | 1:A:86:ALA:H | 1:A:88:PHE:H | 1 | 0.01 |
| (1,208) | 1:A:60:SER:H | 1:A:64:LEU:HD21 | 9 | 0.01 |
| (1,208) | 1:A:60:SER:H | 1:A:64:LEU:HD22 | 9 | 0.01 |



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

| (1,208) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD21 19 0.01 (1,208) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD21 19 0.01 (1,208) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD23 19 0.01 (1,208) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD21 20 0.01 (1,208) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD22 20 0.01 (1,208) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD23 20 0.01 (1,208) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD23 20 0.01 (1,205) 1:A:24:VAL:HG11 1:A:64:LEU:HD23 20 0.01 (1,205) 1:A:24:VAL:HG12 1:A:64:LEU:H 1 0.01 (1,205) 1:A:24:VAL:HG21 1:A:64:LEU:H 6 0.01 (1,188) 1:A:66:VAL:HG23 1:A:64:LEU:H 6 0.01 (1,188) 1:A:62:VAL:HG23 1:A:64:LEU:H 6 0.01 (1,176) 1:A:186:ALA:H 1:A:187:LEU:HD21 18 0.01 (1,176) 1:A:186:ALA:H 1:A:187:LEU:HD22 | Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|--|---------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,208) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD22 19 0.01 (1,208) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD21 20 0.01 (1,208) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD21 20 0.01 (1,208) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD21 20 0.01 (1,208) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD22 20 0.01 (1,205) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD22 20 0.01 (1,205) 1:A:24:VAL:HG11 1:A:192:GLY:H 1 0.01 (1,205) 1:A:24:VAL:HG12 1:A:192:GLY:H 1 0.01 (1,205) 1:A:24:VAL:HG13 1:A:192:GLY:H 1 0.01 (1,188) 1:A:62:VAL:HG22 1:A:64:LEU:H 6 0.01 (1,188) 1:A:62:VAL:HG22 1:A:64:LEU:H 6 0.01 (1,188) 1:A:62:VAL:HG22 1:A:64:LEU:H 6 0.01 (1,188) 1:A:62:VAL:HG23 1:A:64:LEU:H 6 0.01 (1,176) 1:A:186:ALA:H 1:A:187:LEU:HD21 18 0.01 (1,176) 1:A:186:ALA:H 1:A:187:LEU:HD22 18 0.01 (1,176) 1:A:186:ALA:H 1:A:187:LEU:HD22 18 0.01 (1,169) 1:A:137:LEU:H 1:A:147:LEU:HD22 20 0.01 (1,169) 1:A:137:LEU:H 1:A:147:LEU:HD22 20 0.01 (1,169) 1:A:137:LEU:H 1:A:147:LEU:HD22 20 0.01 (1,164) 1:A:57:VAL:HG11 1:A:181:VAL:H 1 0.01 (1,164) 1:A:57:VAL:HG12 1:A:81:VAL:H 1 0.01 (1,164) 1:A:57:VAL:HG13 1:A:81:VAL:H 1 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:81:VAL:H 7 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD14 1:A:81:VAL:H 7 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD14 1:A:81:VAL:H 7 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:81:VAL:H 7 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:81:VAL:H 7 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:81:VAL:H 1 0.01 (1,159) 1:A:160:LEU:HD22 1:A:163:LEU:H 0 0.01 (1,159) 1:A:160:LEU:HD23 1:A:163:LEU:H 0 0.01 (1,159) 1:A:160:LEU:HD23 1:A:163:LEU:H 0 0.01 (1,159) 1:A:160:LEU:HD23 1:A:163:LEU:H 0 0.01 (1,159) | (1,208) | 1:A:60:SER:H | 1:A:64:LEU:HD23 | 9 | 0.01 |
| (1,208) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD23 19 0.01 (1,208) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD21 20 0.01 (1,208) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD22 20 0.01 (1,208) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD23 20 0.01 (1,208) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD23 20 0.01 (1,208) 1:A:24:VAL:HG11 1:A:192:GLY:H 1 0.01 (1,205) 1:A:24:VAL:HG12 1:A:192:GLY:H 1 0.01 (1,205) 1:A:24:VAL:HG13 1:A:192:GLY:H 1 0.01 (1,205) 1:A:24:VAL:HG13 1:A:192:GLY:H 1 0.01 (1,188) 1:A:62:VAL:HG21 1:A:64:LEU:H 6 0.01 (1,188) 1:A:62:VAL:HG22 1:A:64:LEU:H 6 0.01 (1,188) 1:A:62:VAL:HG22 1:A:64:LEU:H 6 0.01 (1,176) 1:A:186:ALA:H 1:A:187:LEU:HD21 18 0.01 (1,176) 1:A:186:ALA:H 1:A:187:LEU:HD22 18 0.01 (1,176) 1:A:186:ALA:H 1:A:187:LEU:HD22 18 0.01 (1,176) 1:A:137:LEU:H 1:A:147:LEU:HD22 20 0.01 (1,169) 1:A:137:LEU:H 1:A:147:LEU:HD21 20 0.01 (1,169) 1:A:137:LEU:H 1:A:147:LEU:HD21 20 0.01 (1,169) 1:A:137:LEU:H 1:A:147:LEU:HD21 20 0.01 (1,164) 1:A:57:VAL:HG11 1:A:81:VAL:H 1 0.01 (1,164) 1:A:57:VAL:HG11 1:A:81:VAL:H 1 0.01 (1,164) 1:A:64:LEU:HD11 1:A:81:VAL:H 1 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD11 1:A:81:VAL:H 1 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD11 1:A:81:VAL:H 7 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD11 1:A:81:VAL:H 7 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD11 1:A:81:VAL:H 7 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD12 1:A:81:VAL:H 6 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:81:VAL:H 7 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:81:VAL:H 7 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:81:VAL:H 10 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD14 1:A:81:VAL:H 10 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD15 1:A:81:VAL:H 10 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD11 1:A:81:VAL:H 10 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:63:LEU:H 00 0.01 (1,159) 1:A:160:LEU:HD23 1:A:163:LEU:H 00 0.01 (1,158) 1:A: | (1,208) | 1:A:60:SER:H | 1:A:64:LEU:HD21 | 19 | 0.01 |
| (1,208) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD21 20 0.01 (1,208) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD22 20 0.01 (1,208) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD23 20 0.01 (1,205) 1:A:24:VAL:HG11 1:A:192:GLY:H 1 0.01 (1,205) 1:A:24:VAL:HG12 1:A:192:GLY:H 1 0.01 (1,205) 1:A:24:VAL:HG13 1:A:192:GLY:H 1 0.01 (1,205) 1:A:24:VAL:HG13 1:A:192:GLY:H 1 0.01 (1,205) 1:A:24:VAL:HG21 1:A:64:LEU:H 6 0.01 (1,188) 1:A:62:VAL:HG21 1:A:64:LEU:H 6 0.01 (1,188) 1:A:62:VAL:HG22 1:A:64:LEU:H 6 0.01 (1,188) 1:A:62:VAL:HG23 1:A:64:LEU:H 6 0.01 (1,176) 1:A:186:ALA:H 1:A:187:LEU:HD21 18 0.01 (1,176) 1:A:186:ALA:H 1:A:187:LEU:HD22 18 0.01 (1,176) 1:A:186:ALA:H 1:A:187:LEU:HD22 18 0.01 (1,169) 1:A:137:LEU:H 1:A:147:LEU:HD23 18 0.01 (1,169) 1:A:137:LEU:H 1:A:147:LEU:HD22 20 0.01 (1,169) 1:A:137:LEU:H 1:A:147:LEU:HD22 20 0.01 (1,169) 1:A:137:LEU:H 1:A:147:LEU:HD23 20 0.01 (1,164) 1:A:57:VAL:HG11 1:A:81:VAL:H 1 0.01 (1,164) 1:A:57:VAL:HG11 1:A:81:VAL:H 1 0.01 (1,164) 1:A:57:VAL:HG12 1:A:81:VAL:H 1 0.01 (1,164) 1:A:67:VAL:HG13 1:A:81:VAL:H 1 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD11 1:A:81:VAL:H 1 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD11 1:A:81:VAL:H 7 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD12 1:A:81:VAL:H 1 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD11 1:A:81:VAL:H 7 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD12 1:A:81:VAL:H 1 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD12 1:A:81:VAL:H 1 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:81:VAL:H 1 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD11 1:A:81:VAL:H 1 0.01 (1,159) 1:A:160:LEU:HD23 1:A:163:LEU:H 6 0.01 (1,159) 1:A:160:LEU:HD23 1:A:163:LEU:H 6 0.01 (1,159) 1:A:160:LEU:HD23 1:A:163:LEU:H 6 0.01 (1,159) 1:A:160:LEU:HD21 1:A:163:LEU:H 20 0.01 (1,159) 1:A:160:LEU:HD22 1:A:163:LEU:H 20 0.01 (1,159) 1:A:160:LEU:HD23 1:A:163:LEU:H 20 0.01 (1,159) 1:A:160:LEU:HD23 1:A:163:LEU:H 6 0.01 (1,159) 1:A:160:LEU:HD23 1:A:163:LEU:H 20 0.01 (1,159) 1:A:160:LEU:HD23 1:A:163:LEU:H 20 0.01 (1,159) 1:A:160:LEU:HD23 1:A:163:LEU:H 6 0.01 (1, | (1,208) | 1:A:60:SER:H | 1:A:64:LEU:HD22 | 19 | 0.01 |
| (1,208) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD22 20 0.01 (1,208) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD23 20 0.01 (1,205) 1:A:24:VAL:HG11 1:A:192:GLY:H 1 0.01 (1,205) 1:A:24:VAL:HG12 1:A:192:GLY:H 1 0.01 (1,205) 1:A:24:VAL:HG12 1:A:192:GLY:H 1 0.01 (1,205) 1:A:24:VAL:HG13 1:A:192:GLY:H 1 0.01 (1,205) 1:A:24:VAL:HG13 1:A:192:GLY:H 1 0.01 (1,188) 1:A:62:VAL:HG22 1:A:64:LEU:H 6 0.01 (1,188) 1:A:62:VAL:HG22 1:A:64:LEU:H 6 0.01 (1,188) 1:A:62:VAL:HG22 1:A:64:LEU:H 6 0.01 (1,188) 1:A:62:VAL:HG23 1:A:64:LEU:H 6 0.01 (1,176) 1:A:186:ALA:H 1:A:187:LEU:HD21 18 0.01 (1,176) 1:A:186:ALA:H 1:A:187:LEU:HD21 18 0.01 (1,176) 1:A:186:ALA:H 1:A:187:LEU:HD22 18 0.01 (1,169) 1:A:137:LEU:H 1:A:147:LEU:HD23 18 0.01 (1,169) 1:A:137:LEU:H 1:A:147:LEU:HD23 20 0.01 (1,169) 1:A:137:LEU:H 1:A:147:LEU:HD22 20 0.01 (1,169) 1:A:137:LEU:H 1:A:147:LEU:HD23 20 0.01 (1,164) 1:A:57:VAL:HG11 1:A:81:VAL:H 1 0.01 (1,164) 1:A:57:VAL:HG11 1:A:81:VAL:H 1 0.01 (1,164) 1:A:57:VAL:HG11 1:A:81:VAL:H 1 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD11 1:A:81:VAL:H 1 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD11 1:A:81:VAL:H 1 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD11 1:A:81:VAL:H 7 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD12 1:A:81:VAL:H 7 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:81:VAL:H 7 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:81:VAL:H 1 0.01 (1,163) 1:A:66:LEU:HD22 1:A:163:LEU:H 6 0.01 (1,159) 1:A:160:LEU:HD22 1:A:163:LEU:H 6 0.01 (1,159) 1:A:160:LEU:HD23 1:A:163:LEU:H 6 0.01 (1,159) 1:A:160 | (1,208) | 1:A:60:SER:H | 1:A:64:LEU:HD23 | 19 | 0.01 |
| (1,208) 1:A:60:SER:H 1:A:64:LEU:HD23 20 0.01 (1,205) 1:A:24:VAL:HG11 1:A:192:GLY:H 1 0.01 (1,205) 1:A:24:VAL:HG12 1:A:192:GLY:H 1 0.01 (1,205) 1:A:24:VAL:HG13 1:A:192:GLY:H 1 0.01 (1,205) 1:A:24:VAL:HG13 1:A:192:GLY:H 1 0.01 (1,188) 1:A:62:VAL:HG21 1:A:64:LEU:H 6 0.01 (1,188) 1:A:62:VAL:HG22 1:A:64:LEU:H 6 0.01 (1,188) 1:A:62:VAL:HG22 1:A:64:LEU:H 6 0.01 (1,188) 1:A:62:VAL:HG23 1:A:64:LEU:H 6 0.01 (1,176) 1:A:186:ALA:H 1:A:187:LEU:HD21 18 0.01 (1,176) 1:A:186:ALA:H 1:A:187:LEU:HD22 18 0.01 (1,176) 1:A:186:ALA:H 1:A:187:LEU:HD22 18 0.01 (1,169) 1:A:137:LEU:H 1:A:147:LEU:HD23 18 0.01 (1,169) 1:A:137:LEU:H 1:A:147:LEU:HD21 20 0.01 (1,169) 1:A:137:LEU:H 1:A:147:LEU:HD21 20 0.01 (1,169) 1:A:137:LEU:H 1:A:147:LEU:HD22 20 0.01 (1,164) 1:A:57:VAL:HG11 1:A:81:VAL:H 1 0.01 (1,164) 1:A:57:VAL:HG11 1:A:81:VAL:H 1 0.01 (1,164) 1:A:57:VAL:HG12 1:A:81:VAL:H 1 0.01 (1,164) 1:A:64:LEU:HD11 1:A:81:VAL:H 7 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD11 1:A:81:VAL:H 1 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD11 1:A:81:VAL:H 6 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD12 1:A:81:VAL:H 1 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD11 1:A:81:VAL:H 1 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD12 1:A:81:VAL:H 1 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD11 1:A:81:VAL:H 1 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD11 1:A:81:VAL:H 1 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD12 1:A:81:VAL:H 1 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD11 1:A:81:VAL:H 1 0.01 (1,159) 1:A:160:LEU:HD22 1:A:163:LEU:H 6 0.01 (1,159) 1:A:160:LEU:HD21 1:A:163:LEU:H 6 0.01 (1,159) 1:A:160:LEU:HD22 1:A:163:LEU:H 6 0.01 (1,159) 1:A:160:LEU:HD21 1:A:163:LEU:H 6 0.01 (1,159) 1:A:160:LEU:HD22 1:A:163:LEU:H 6 0.01 (1,159) 1:A:160:LEU:HD23 1:A:163:LEU:H 6 0.01 (1,159) 1:A:160: | (1,208) | 1:A:60:SER:H | 1:A:64:LEU:HD21 | 20 | 0.01 |
| (1,205) 1:A:24:VAL:HG11 1:A:192:GLY:H 1 0.01 (1,205) 1:A:24:VAL:HG12 1:A:192:GLY:H 1 0.01 (1,205) 1:A:24:VAL:HG13 1:A:192:GLY:H 1 0.01 (1,188) 1:A:62:VAL:HG21 1:A:64:LEU:H 6 0.01 (1,188) 1:A:62:VAL:HG22 1:A:64:LEU:H 6 0.01 (1,188) 1:A:62:VAL:HG23 1:A:64:LEU:H 6 0.01 (1,188) 1:A:62:VAL:HG23 1:A:64:LEU:H 6 0.01 (1,176) 1:A:186:ALA:H 1:A:187:LEU:HD21 18 0.01 (1,176) 1:A:136:ALA:H 1:A:187:LEU:HD22 18 0.01 (1,169) 1:A:137:LEU:H 1:A:147:LEU:HD23 18 0.01 (1,169) 1:A:137:LEU:H 1:A:147:LEU:HD21 20 0.01 (1,169) 1:A:137:LEU:H 1:A:147:LEU:HD23 20 0.01 (1,164) 1:A:57:VAL:HG11 1:A:18:VAL:H 1 0.01 (1,164) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:81:VAL:H | (1,208) | 1:A:60:SER:H | 1:A:64:LEU:HD22 | 20 | 0.01 |
| (1,205) | (1,208) | 1:A:60:SER:H | 1:A:64:LEU:HD23 | 20 | 0.01 |
| (1,205) 1:A:24:VAL:HG13 1:A:192:GLY:H 1 0.01 (1,188) 1:A:62:VAL:HG21 1:A:64:LEU:H 6 0.01 (1,188) 1:A:62:VAL:HG22 1:A:64:LEU:H 6 0.01 (1,188) 1:A:62:VAL:HG23 1:A:64:LEU:H 6 0.01 (1,176) 1:A:186:ALA:H 1:A:187:LEU:HD22 18 0.01 (1,169) 1:A:137:LEU:H 1:A:147:LEU:HD22 20 0.01 (1,169) 1:A:137:LEU:H 1:A:147:LEU:HD22 20 0.01 (1,169) 1:A:137:LEU:H 1:A:147:LEU:HD22 20 0.01 (1,169) 1:A:317:LEU:H 1:A:147:LEU:HD22 20 0.01 (1,169) 1:A:317:LEU:H 1:A:147:LEU:HD22 20 0.01 (1,160) 1:A:163:LEU:H 1:A:163:LEU:HD2 | (1,205) | 1:A:24:VAL:HG11 | 1:A:192:GLY:H | 1 | 0.01 |
| (1,188) 1:A:62:VAL:HG21 1:A:64:LEU:H 6 0.01 (1,188) 1:A:62:VAL:HG22 1:A:64:LEU:H 6 0.01 (1,188) 1:A:62:VAL:HG23 1:A:64:LEU:H 6 0.01 (1,176) 1:A:186:ALA:H 1:A:187:LEU:HD21 18 0.01 (1,176) 1:A:186:ALA:H 1:A:187:LEU:HD22 18 0.01 (1,176) 1:A:186:ALA:H 1:A:187:LEU:HD23 18 0.01 (1,169) 1:A:137:LEU:H 1:A:147:LEU:HD23 18 0.01 (1,169) 1:A:137:LEU:H 1:A:147:LEU:HD21 20 0.01 (1,169) 1:A:137:LEU:H 1:A:147:LEU:HD23 20 0.01 (1,169) 1:A:137:LEU:H 1:A:147:LEU:HD23 20 0.01 (1,164) 1:A:57:VAL:HG11 1:A:81:VAL:H 1 0.01 (1,164) 1:A:57:VAL:HG13 1:A:81:VAL:H 1 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD11 1:A:81:VAL:H 7 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:81:VAL:H | (1,205) | 1:A:24:VAL:HG12 | 1:A:192:GLY:H | 1 | 0.01 |
| (1,188) 1:A:62:VAL:HG22 1:A:64:LEU:H 6 0.01 (1,188) 1:A:62:VAL:HG23 1:A:64:LEU:H 6 0.01 (1,176) 1:A:186:ALA:H 1:A:187:LEU:HD21 18 0.01 (1,176) 1:A:186:ALA:H 1:A:187:LEU:HD22 18 0.01 (1,176) 1:A:186:ALA:H 1:A:187:LEU:HD23 18 0.01 (1,169) 1:A:137:LEU:H 1:A:147:LEU:HD21 20 0.01 (1,169) 1:A:137:LEU:H 1:A:147:LEU:HD22 20 0.01 (1,169) 1:A:137:LEU:H 1:A:147:LEU:HD23 20 0.01 (1,169) 1:A:137:LEU:H 1:A:147:LEU:HD23 20 0.01 (1,169) 1:A:137:VAL:HG11 1:A:147:LEU:HD23 20 0.01 (1,164) 1:A:57:VAL:HG11 1:A:81:VAL:H 1 0.01 (1,164) 1:A:57:VAL:HG11 1:A:81:VAL:H 1 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD11 1:A:81:VAL:H 7 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:81:VAL:H </td <td>(1,205)</td> <td>1:A:24:VAL:HG13</td> <td>1:A:192:GLY:H</td> <td>1</td> <td>0.01</td> | (1,205) | 1:A:24:VAL:HG13 | 1:A:192:GLY:H | 1 | 0.01 |
| (1,188) 1:A:62:VAL:HG23 1:A:64:LEU:H 6 0.01 (1,176) 1:A:186:ALA:H 1:A:187:LEU:HD21 18 0.01 (1,176) 1:A:186:ALA:H 1:A:187:LEU:HD22 18 0.01 (1,176) 1:A:186:ALA:H 1:A:187:LEU:HD23 18 0.01 (1,169) 1:A:137:LEU:H 1:A:147:LEU:HD21 20 0.01 (1,169) 1:A:137:LEU:H 1:A:147:LEU:HD22 20 0.01 (1,169) 1:A:137:LEU:H 1:A:147:LEU:HD23 20 0.01 (1,169) 1:A:137:LEU:H 1:A:147:LEU:HD23 20 0.01 (1,169) 1:A:137:VAL:HG11 1:A:81:VAL:H 1 0.01 (1,164) 1:A:57:VAL:HG11 1:A:81:VAL:H 1 0.01 (1,164) 1:A:57:VAL:HG12 1:A:81:VAL:H 1 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD11 1:A:81:VAL:H 7 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:81:VAL:H 7 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:81:VAL:H | (1,188) | 1:A:62:VAL:HG21 | 1:A:64:LEU:H | 6 | 0.01 |
| (1,176) 1:A:186:ALA:H 1:A:187:LEU:HD21 18 0.01 (1,176) 1:A:186:ALA:H 1:A:187:LEU:HD22 18 0.01 (1,176) 1:A:186:ALA:H 1:A:187:LEU:HD23 18 0.01 (1,169) 1:A:137:LEU:H 1:A:147:LEU:HD21 20 0.01 (1,169) 1:A:137:LEU:H 1:A:147:LEU:HD22 20 0.01 (1,169) 1:A:137:LEU:H 1:A:147:LEU:HD23 20 0.01 (1,164) 1:A:57:VAL:HG11 1:A:147:LEU:HD23 20 0.01 (1,164) 1:A:57:VAL:HG12 1:A:81:VAL:H 1 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:81:VAL:H 7 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:81:VAL:H 12 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:81:V | (1,188) | 1:A:62:VAL:HG22 | 1:A:64:LEU:H | 6 | 0.01 |
| (1,176) 1:A:186:ALA:H 1:A:187:LEU:HD22 18 0.01 (1,176) 1:A:186:ALA:H 1:A:187:LEU:HD23 18 0.01 (1,169) 1:A:137:LEU:H 1:A:147:LEU:HD21 20 0.01 (1,169) 1:A:137:LEU:H 1:A:147:LEU:HD22 20 0.01 (1,169) 1:A:37:VAL:HG11 1:A:481:VAL:H 1 0.01 (1,164) 1:A:57:VAL:HG12 1:A:81:VAL:H 1 0.01 (1,164) 1:A:57:VAL:HG13 1:A:81:VAL:H 1 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD11 1:A:81:VAL:H 7 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD12 1:A:81:VAL:H 7 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:81:VAL:H 7 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD14 1:A:81:VAL:H 12 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:81:VAL:H 12 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:81:VAL:H 12 0.01 (1,159) 1:A:160:LEU:HD12 1:A:163:LEU:H | (1,188) | 1:A:62:VAL:HG23 | 1:A:64:LEU:H | 6 | 0.01 |
| (1,176) 1:A:186:ALA:H 1:A:187:LEU:HD23 18 0.01 (1,169) 1:A:137:LEU:H 1:A:147:LEU:HD21 20 0.01 (1,169) 1:A:137:LEU:H 1:A:147:LEU:HD22 20 0.01 (1,169) 1:A:37:VAL:HG11 1:A:81:VAL:H 1 0.01 (1,164) 1:A:57:VAL:HG12 1:A:81:VAL:H 1 0.01 (1,164) 1:A:57:VAL:HG13 1:A:81:VAL:H 1 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD11 1:A:81:VAL:H 7 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD12 1:A:81:VAL:H 7 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:81:VAL:H 7 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:81:VAL:H 7 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:81:VAL:H 12 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:81:VAL:H 12 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:81:VAL:H 12 0.01 (1,159) 1:A:160:LEU:HD21 1:A:163:LEU:H < | (1,176) | 1:A:186:ALA:H | 1:A:187:LEU:HD21 | 18 | 0.01 |
| (1,169) 1:A:137:LEU:H 1:A:147:LEU:HD21 20 0.01 (1,169) 1:A:137:LEU:H 1:A:147:LEU:HD22 20 0.01 (1,169) 1:A:137:LEU:H 1:A:147:LEU:HD23 20 0.01 (1,164) 1:A:57:VAL:HG11 1:A:81:VAL:H 1 0.01 (1,164) 1:A:57:VAL:HG12 1:A:81:VAL:H 1 0.01 (1,164) 1:A:57:VAL:HG13 1:A:81:VAL:H 1 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD11 1:A:81:VAL:H 7 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD12 1:A:81:VAL:H 7 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:81:VAL:H 7 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD11 1:A:81:VAL:H 12 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD12 1:A:81:VAL:H 12 0.01 (1,163) 1:A:66:LEU:HD13 1:A:81:VAL:H 12 0.01 (1,159) 1:A:160:LEU:HD21 1:A:163:LEU:H 6 0.01 (1,159) 1:A:160:LEU:HD22 1:A:163:LEU:H | (1,176) | 1:A:186:ALA:H | 1:A:187:LEU:HD22 | 18 | 0.01 |
| (1,169) 1:A:137:LEU:H 1:A:147:LEU:HD22 20 0.01 (1,169) 1:A:137:LEU:H 1:A:147:LEU:HD23 20 0.01 (1,164) 1:A:57:VAL:HG11 1:A:81:VAL:H 1 0.01 (1,164) 1:A:57:VAL:HG12 1:A:81:VAL:H 1 0.01 (1,164) 1:A:57:VAL:HG13 1:A:81:VAL:H 1 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD11 1:A:81:VAL:H 7 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD12 1:A:81:VAL:H 7 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:81:VAL:H 7 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:81:VAL:H 7 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:81:VAL:H 12 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD12 1:A:81:VAL:H 12 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD12 1:A:81:VAL:H 12 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:81:VAL:H 12 0.01 (1,163) 1:A:160:LEU:HD13 1:A:163:LEU:H <th< td=""><td>(1,176)</td><td>1:A:186:ALA:H</td><td>1:A:187:LEU:HD23</td><td>18</td><td>0.01</td></th<> | (1,176) | 1:A:186:ALA:H | 1:A:187:LEU:HD23 | 18 | 0.01 |
| (1,169) 1:A:137:LEU:H 1:A:147:LEU:HD23 20 0.01 (1,164) 1:A:57:VAL:HG11 1:A:81:VAL:H 1 0.01 (1,164) 1:A:57:VAL:HG12 1:A:81:VAL:H 1 0.01 (1,164) 1:A:57:VAL:HG13 1:A:81:VAL:H 1 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD11 1:A:81:VAL:H 7 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD12 1:A:81:VAL:H 7 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:81:VAL:H 7 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:81:VAL:H 12 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD12 1:A:81:VAL:H 12 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD12 1:A:81:VAL:H 12 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD12 1:A:81:VAL:H 12 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:81:VAL:H 12 0.01 (1,159) 1:A:160:LEU:HD21 1:A:163:LEU:H 6 0.01 (1,159) 1:A:160:LEU:HD23 1:A:163:LEU:H <th< td=""><td>(1,169)</td><td>1:A:137:LEU:H</td><td>1:A:147:LEU:HD21</td><td>20</td><td>0.01</td></th<> | (1,169) | 1:A:137:LEU:H | 1:A:147:LEU:HD21 | 20 | 0.01 |
| (1,164) 1:A:57:VAL:HG11 1:A:81:VAL:H 1 0.01 (1,164) 1:A:57:VAL:HG12 1:A:81:VAL:H 1 0.01 (1,164) 1:A:57:VAL:HG13 1:A:81:VAL:H 1 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD11 1:A:81:VAL:H 7 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD12 1:A:81:VAL:H 7 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:81:VAL:H 7 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD11 1:A:81:VAL:H 12 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD12 1:A:81:VAL:H 12 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD12 1:A:81:VAL:H 12 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:163:LEU:H 12 0.01 (1,159) 1:A:160:LEU:HD21 1:A:163:LEU:H 6 0.01 (1,159) 1:A:160:LEU:HD23 1:A:163:LEU:H 6 0.01 (1,159) 1:A:160:LEU:HD23 1:A:163:LEU:H 20 0.01 (1,159) 1:A:160:LEU:HD23 1:A:163:LEU:H < | (1,169) | 1:A:137:LEU:H | 1:A:147:LEU:HD22 | 20 | 0.01 |
| (1,164) 1:A:57:VAL:HG12 1:A:81:VAL:H 1 0.01 (1,164) 1:A:57:VAL:HG13 1:A:81:VAL:H 1 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD11 1:A:81:VAL:H 7 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD12 1:A:81:VAL:H 7 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:81:VAL:H 7 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD11 1:A:81:VAL:H 12 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD12 1:A:81:VAL:H 12 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD12 1:A:163:LEU:H 12 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD12 1:A:163:LEU:H 6 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:163:LEU:H 6 0.01 (1,159) 1:A:160:LEU:HD21 1:A:163:LEU:H 6 0.01 (1,159) 1:A:160:LEU:HD23 1:A:163:LEU:H 6 0.01 (1,159) 1:A:160:LEU:HD23 1:A:163:LEU:H 20 0.01 (1,158) 1:A:163:LEU:H 1:A:163:LEU:H <td< td=""><td>(1,169)</td><td>1:A:137:LEU:H</td><td>1:A:147:LEU:HD23</td><td>20</td><td>0.01</td></td<> | (1,169) | 1:A:137:LEU:H | 1:A:147:LEU:HD23 | 20 | 0.01 |
| (1,164) 1:A:57:VAL:HG13 1:A:81:VAL:H 1 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD11 1:A:81:VAL:H 7 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD12 1:A:81:VAL:H 7 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:81:VAL:H 7 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD11 1:A:81:VAL:H 12 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD12 1:A:81:VAL:H 12 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD12 1:A:81:VAL:H 12 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD12 1:A:81:VAL:H 12 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:81:VAL:H 12 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:81:VAL:H 12 0.01 (1,159) 1:A:160:LEU:HD21 1:A:163:LEU:H 6 0.01 (1,159) 1:A:160:LEU:HD23 1:A:163:LEU:H 20 0.01 (1,159) 1:A:160:LEU:HD22 1:A:163:LEU:H 20 0.01 (1,159) 1:A:163:LEU:H 1:A:163:LEU:H <t< td=""><td>(1,164)</td><td>1:A:57:VAL:HG11</td><td>1:A:81:VAL:H</td><td>1</td><td>0.01</td></t<> | (1,164) | 1:A:57:VAL:HG11 | 1:A:81:VAL:H | 1 | 0.01 |
| (1,163) 1:A:64:LEU:HD11 1:A:81:VAL:H 7 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD12 1:A:81:VAL:H 7 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:81:VAL:H 7 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD11 1:A:81:VAL:H 12 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD12 1:A:81:VAL:H 12 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:81:VAL:H 12 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:81:VAL:H 12 0.01 (1,163) 1:A:66:LEU:HD13 1:A:163:LEU:H 6 0.01 (1,159) 1:A:160:LEU:HD22 1:A:163:LEU:H 6 0.01 (1,159) 1:A:160:LEU:HD23 1:A:163:LEU:H 20 0.01 (1,159) 1:A:160:LEU:HD22 1:A:163:LEU:H 20 0.01 (1,159) 1:A:160:LEU:HD23 1:A:163:LEU:H 20 0.01 (1,159) 1:A:160:LEU:HD23 1:A:163:LEU:H 20 0.01 (1,158) 1:A:163:LEU:H 1:A:195:LEU:HD21 | (1,164) | 1:A:57:VAL:HG12 | 1:A:81:VAL:H | 1 | 0.01 |
| (1,163) 1:A:64:LEU:HD12 1:A:81:VAL:H 7 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:81:VAL:H 7 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD11 1:A:81:VAL:H 12 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD12 1:A:81:VAL:H 12 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:81:VAL:H 12 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:81:VAL:H 12 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:163:LEU:H 6 0.01 (1,159) 1:A:160:LEU:HD21 1:A:163:LEU:H 6 0.01 (1,159) 1:A:160:LEU:HD23 1:A:163:LEU:H 20 0.01 (1,159) 1:A:160:LEU:HD22 1:A:163:LEU:H 20 0.01 (1,159) 1:A:160:LEU:HD23 1:A:163:LEU:H 20 0.01 (1,159) 1:A:160:LEU:HD23 1:A:163:LEU:H 20 0.01 (1,158) 1:A:163:LEU:H 1:A:195:LEU:HD21 15 0.01 (1,158) 1:A:163:LEU:H 1:A:195:LEU:HD22 | (1,164) | 1:A:57:VAL:HG13 | 1:A:81:VAL:H | 1 | 0.01 |
| (1,163) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:81:VAL:H 7 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD11 1:A:81:VAL:H 12 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD12 1:A:81:VAL:H 12 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:81:VAL:H 12 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:81:VAL:H 12 0.01 (1,159) 1:A:160:LEU:HD21 1:A:163:LEU:H 6 0.01 (1,159) 1:A:160:LEU:HD23 1:A:163:LEU:H 6 0.01 (1,159) 1:A:160:LEU:HD21 1:A:163:LEU:H 20 0.01 (1,159) 1:A:160:LEU:HD22 1:A:163:LEU:H 20 0.01 (1,159) 1:A:160:LEU:HD23 1:A:163:LEU:H 20 0.01 (1,158) 1:A:163:LEU:H 15 0.01 (1,158) 1:A:163:LEU:H 1:A:195:LEU:HD22 15 0.01 (1,158) 1:A:163:LEU:H 1:A:195:LEU:HD23 15 0.01 (1,158) 1:A:34:LEU:HD11 1:A:57:VAL:H 6 | (1,163) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:81:VAL:H | 7 | 0.01 |
| (1,163) 1:A:64:LEU:HD11 1:A:81:VAL:H 12 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD12 1:A:81:VAL:H 12 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:81:VAL:H 12 0.01 (1,159) 1:A:160:LEU:HD21 1:A:163:LEU:H 6 0.01 (1,159) 1:A:160:LEU:HD22 1:A:163:LEU:H 6 0.01 (1,159) 1:A:160:LEU:HD23 1:A:163:LEU:H 20 0.01 (1,159) 1:A:160:LEU:HD21 1:A:163:LEU:H 20 0.01 (1,159) 1:A:160:LEU:HD22 1:A:163:LEU:H 20 0.01 (1,159) 1:A:160:LEU:HD23 1:A:163:LEU:H 20 0.01 (1,159) 1:A:163:LEU:HD23 1:A:163:LEU:H 20 0.01 (1,158) 1:A:163:LEU:H 1:A:195:LEU:HD21 15 0.01 (1,158) 1:A:163:LEU:H 1:A:195:LEU:HD22 15 0.01 (1,158) 1:A:163:LEU:H 1:A:195:LEU:HD23 15 0.01 (1,155) 1:A:34:LEU:HD11 1:A:57:VAL | (1,163) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:81:VAL:H | 7 | 0.01 |
| (1,163) 1:A:64:LEU:HD12 1:A:81:VAL:H 12 0.01 (1,163) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:81:VAL:H 12 0.01 (1,159) 1:A:160:LEU:HD21 1:A:163:LEU:H 6 0.01 (1,159) 1:A:160:LEU:HD22 1:A:163:LEU:H 6 0.01 (1,159) 1:A:160:LEU:HD23 1:A:163:LEU:H 20 0.01 (1,159) 1:A:160:LEU:HD21 1:A:163:LEU:H 20 0.01 (1,159) 1:A:160:LEU:HD22 1:A:163:LEU:H 20 0.01 (1,159) 1:A:160:LEU:HD23 1:A:163:LEU:H 20 0.01 (1,159) 1:A:160:LEU:HD23 1:A:195:LEU:HD21 15 0.01 (1,158) 1:A:163:LEU:H 1:A:195:LEU:HD22 15 0.01 (1,158) 1:A:163:LEU:H 1:A:195:LEU:HD23 15 0.01 (1,155) 1:A:34:LEU:HD11 1:A:57:VAL:H 6 0.01 (1,155) 1:A:34:LEU:HD13 1:A:57:VAL:H 6 0.01 (1,123) 1:A:24:VAL:H 1:A:128:ILE:HD | (1,163) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:81:VAL:H | 7 | 0.01 |
| (1,163) 1:A:64:LEU:HD13 1:A:81:VAL:H 12 0.01 (1,159) 1:A:160:LEU:HD21 1:A:163:LEU:H 6 0.01 (1,159) 1:A:160:LEU:HD22 1:A:163:LEU:H 6 0.01 (1,159) 1:A:160:LEU:HD23 1:A:163:LEU:H 20 0.01 (1,159) 1:A:160:LEU:HD22 1:A:163:LEU:H 20 0.01 (1,159) 1:A:160:LEU:HD22 1:A:163:LEU:H 20 0.01 (1,159) 1:A:160:LEU:HD23 1:A:163:LEU:H 20 0.01 (1,158) 1:A:163:LEU:H 1:A:195:LEU:HD21 15 0.01 (1,158) 1:A:163:LEU:H 1:A:195:LEU:HD22 15 0.01 (1,158) 1:A:163:LEU:H 1:A:195:LEU:HD23 15 0.01 (1,155) 1:A:34:LEU:HD11 1:A:57:VAL:H 6 0.01 (1,155) 1:A:34:LEU:HD13 1:A:57:VAL:H 6 0.01 (1,123) 1:A:24:VAL:H 1:A:128:ILE:HD11 2 0.01 | (1,163) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:81:VAL:H | 12 | 0.01 |
| (1,159) 1:A:160:LEU:HD21 1:A:163:LEU:H 6 0.01 (1,159) 1:A:160:LEU:HD22 1:A:163:LEU:H 6 0.01 (1,159) 1:A:160:LEU:HD23 1:A:163:LEU:H 6 0.01 (1,159) 1:A:160:LEU:HD21 1:A:163:LEU:H 20 0.01 (1,159) 1:A:160:LEU:HD22 1:A:163:LEU:H 20 0.01 (1,159) 1:A:160:LEU:HD23 1:A:163:LEU:H 20 0.01 (1,158) 1:A:163:LEU:H 1:A:195:LEU:HD21 15 0.01 (1,158) 1:A:163:LEU:H 1:A:195:LEU:HD22 15 0.01 (1,158) 1:A:163:LEU:H 1:A:195:LEU:HD23 15 0.01 (1,155) 1:A:34:LEU:HD11 1:A:57:VAL:H 6 0.01 (1,155) 1:A:34:LEU:HD12 1:A:57:VAL:H 6 0.01 (1,155) 1:A:34:LEU:HD13 1:A:57:VAL:H 6 0.01 (1,123) 1:A:24:VAL:H 1:A:128:ILE:HD11 2 0.01 | (1,163) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:81:VAL:H | 12 | 0.01 |
| (1,159) 1:A:160:LEU:HD22 1:A:163:LEU:H 6 0.01 (1,159) 1:A:160:LEU:HD23 1:A:163:LEU:H 6 0.01 (1,159) 1:A:160:LEU:HD21 1:A:163:LEU:H 20 0.01 (1,159) 1:A:160:LEU:HD22 1:A:163:LEU:H 20 0.01 (1,159) 1:A:160:LEU:HD23 1:A:163:LEU:H 20 0.01 (1,159) 1:A:160:LEU:HD23 1:5 0.01 (1,158) 1:A:163:LEU:H 1:A:195:LEU:HD21 15 0.01 (1,158) 1:A:163:LEU:H 1:A:195:LEU:HD22 15 0.01 (1,158) 1:A:163:LEU:H 1:A:195:LEU:HD23 15 0.01 (1,155) 1:A:34:LEU:HD11 1:A:57:VAL:H 6 0.01 (1,155) 1:A:34:LEU:HD12 1:A:57:VAL:H 6 0.01 (1,155) 1:A:34:LEU:HD13 1:A:57:VAL:H 6 0.01 (1,123) 1:A:24:VAL:H 1:A:128:ILE:HD11 2 0.01 | (1,163) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:81:VAL:H | 12 | 0.01 |
| (1,159) 1:A:160:LEU:HD23 1:A:163:LEU:H 6 0.01 (1,159) 1:A:160:LEU:HD21 1:A:163:LEU:H 20 0.01 (1,159) 1:A:160:LEU:HD22 1:A:163:LEU:H 20 0.01 (1,159) 1:A:160:LEU:HD23 1:A:163:LEU:H 20 0.01 (1,158) 1:A:163:LEU:H 1:A:195:LEU:HD21 15 0.01 (1,158) 1:A:163:LEU:H 1:A:195:LEU:HD22 15 0.01 (1,158) 1:A:163:LEU:H 1:A:195:LEU:HD23 15 0.01 (1,155) 1:A:34:LEU:HD11 1:A:57:VAL:H 6 0.01 (1,155) 1:A:34:LEU:HD12 1:A:57:VAL:H 6 0.01 (1,155) 1:A:34:LEU:HD13 1:A:57:VAL:H 6 0.01 (1,123) 1:A:24:VAL:H 1:A:128:ILE:HD11 2 0.01 | (1,159) | 1:A:160:LEU:HD21 | 1:A:163:LEU:H | 6 | 0.01 |
| (1,159) 1:A:160:LEU:HD21 1:A:163:LEU:H 20 0.01 (1,159) 1:A:160:LEU:HD22 1:A:163:LEU:H 20 0.01 (1,159) 1:A:160:LEU:HD23 1:A:163:LEU:H 20 0.01 (1,158) 1:A:163:LEU:H 1:A:195:LEU:HD21 15 0.01 (1,158) 1:A:163:LEU:H 1:A:195:LEU:HD22 15 0.01 (1,158) 1:A:163:LEU:H 1:A:195:LEU:HD23 15 0.01 (1,155) 1:A:34:LEU:HD11 1:A:57:VAL:H 6 0.01 (1,155) 1:A:34:LEU:HD12 1:A:57:VAL:H 6 0.01 (1,155) 1:A:34:LEU:HD13 1:A:57:VAL:H 6 0.01 (1,123) 1:A:24:VAL:H 1:A:128:ILE:HD11 2 0.01 | (1,159) | 1:A:160:LEU:HD22 | 1:A:163:LEU:H | 6 | 0.01 |
| (1,159) 1:A:160:LEU:HD22 1:A:163:LEU:H 20 0.01 (1,159) 1:A:160:LEU:HD23 1:A:163:LEU:H 20 0.01 (1,158) 1:A:163:LEU:H 1:A:195:LEU:HD21 15 0.01 (1,158) 1:A:163:LEU:H 1:A:195:LEU:HD22 15 0.01 (1,158) 1:A:163:LEU:H 1:A:195:LEU:HD23 15 0.01 (1,155) 1:A:34:LEU:HD11 1:A:57:VAL:H 6 0.01 (1,155) 1:A:34:LEU:HD12 1:A:57:VAL:H 6 0.01 (1,155) 1:A:34:LEU:HD13 1:A:57:VAL:H 6 0.01 (1,123) 1:A:24:VAL:H 1:A:128:ILE:HD11 2 0.01 | (1,159) | 1:A:160:LEU:HD23 | 1:A:163:LEU:H | 6 | 0.01 |
| (1,159) 1:A:160:LEU:HD23 1:A:163:LEU:H 20 0.01 (1,158) 1:A:163:LEU:H 1:A:195:LEU:HD21 15 0.01 (1,158) 1:A:163:LEU:H 1:A:195:LEU:HD22 15 0.01 (1,158) 1:A:163:LEU:H 1:A:195:LEU:HD23 15 0.01 (1,155) 1:A:34:LEU:HD11 1:A:57:VAL:H 6 0.01 (1,155) 1:A:34:LEU:HD12 1:A:57:VAL:H 6 0.01 (1,155) 1:A:34:LEU:HD13 1:A:57:VAL:H 6 0.01 (1,123) 1:A:24:VAL:H 1:A:128:ILE:HD11 2 0.01 | (1,159) | 1:A:160:LEU:HD21 | 1:A:163:LEU:H | 20 | 0.01 |
| (1,159) 1:A:160:LEU:HD23 1:A:163:LEU:H 20 0.01 (1,158) 1:A:163:LEU:H 1:A:195:LEU:HD21 15 0.01 (1,158) 1:A:163:LEU:H 1:A:195:LEU:HD22 15 0.01 (1,158) 1:A:163:LEU:H 1:A:195:LEU:HD23 15 0.01 (1,155) 1:A:34:LEU:HD11 1:A:57:VAL:H 6 0.01 (1,155) 1:A:34:LEU:HD12 1:A:57:VAL:H 6 0.01 (1,155) 1:A:34:LEU:HD13 1:A:57:VAL:H 6 0.01 (1,123) 1:A:24:VAL:H 1:A:128:ILE:HD11 2 0.01 | , , | 1:A:160:LEU:HD22 | 1:A:163:LEU:H | 20 | 0.01 |
| (1,158) 1:A:163:LEU:H 1:A:195:LEU:HD21 15 0.01 (1,158) 1:A:163:LEU:H 1:A:195:LEU:HD22 15 0.01 (1,158) 1:A:163:LEU:H 1:A:195:LEU:HD23 15 0.01 (1,155) 1:A:34:LEU:HD11 1:A:57:VAL:H 6 0.01 (1,155) 1:A:34:LEU:HD12 1:A:57:VAL:H 6 0.01 (1,155) 1:A:34:LEU:HD13 1:A:57:VAL:H 6 0.01 (1,123) 1:A:24:VAL:H 1:A:128:ILE:HD11 2 0.01 | · · / | 1:A:160:LEU:HD23 | 1:A:163:LEU:H | 20 | 0.01 |
| (1,158) 1:A:163:LEU:H 1:A:195:LEU:HD22 15 0.01 (1,158) 1:A:163:LEU:H 1:A:195:LEU:HD23 15 0.01 (1,155) 1:A:34:LEU:HD11 1:A:57:VAL:H 6 0.01 (1,155) 1:A:34:LEU:HD12 1:A:57:VAL:H 6 0.01 (1,155) 1:A:34:LEU:HD13 1:A:57:VAL:H 6 0.01 (1,155) 1:A:34:LEU:HD13 1:A:57:VAL:H 6 0.01 (1,123) 1:A:24:VAL:H 1:A:128:ILE:HD11 2 0.01 | | 1:A:163:LEU:H | 1:A:195:LEU:HD21 | 15 | 0.01 |
| (1,158) 1:A:163:LEU:H 1:A:195:LEU:HD23 15 0.01 (1,155) 1:A:34:LEU:HD11 1:A:57:VAL:H 6 0.01 (1,155) 1:A:34:LEU:HD12 1:A:57:VAL:H 6 0.01 (1,155) 1:A:34:LEU:HD13 1:A:57:VAL:H 6 0.01 (1,123) 1:A:24:VAL:H 1:A:128:ILE:HD11 2 0.01 | | 1:A:163:LEU:H | 1:A:195:LEU:HD22 | 15 | 0.01 |
| (1,155) 1:A:34:LEU:HD11 1:A:57:VAL:H 6 0.01 (1,155) 1:A:34:LEU:HD12 1:A:57:VAL:H 6 0.01 (1,155) 1:A:34:LEU:HD13 1:A:57:VAL:H 6 0.01 (1,123) 1:A:24:VAL:H 1:A:128:ILE:HD11 2 0.01 | | 1:A:163:LEU:H | 1:A:195:LEU:HD23 | 15 | 0.01 |
| (1,155) 1:A:34:LEU:HD12 1:A:57:VAL:H 6 0.01 (1,155) 1:A:34:LEU:HD13 1:A:57:VAL:H 6 0.01 (1,123) 1:A:24:VAL:H 1:A:128:ILE:HD11 2 0.01 | | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:57:VAL:H | 6 | 0.01 |
| (1,155) 1:A:34:LEU:HD13 1:A:57:VAL:H 6 0.01 (1,123) 1:A:24:VAL:H 1:A:128:ILE:HD11 2 0.01 | , , , | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:57:VAL:H | 6 | 0.01 |
| (1,123) 1:A:24:VAL:H 1:A:128:ILE:HD11 2 0.01 | | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:57:VAL:H | 6 | 0.01 |
| | · · / | 1:A:24:VAL:H | 1:A:128:ILE:HD11 | 2 | 0.01 |
| (1,120) $1.11.27.7111.11$ $1.11.120.1111.1111111$ $1.11.120.1111.11$ | (1,123) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:128:ILE:HD12 | 2 | 0.01 |



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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|-------|---------------|
| (1,123) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:128:ILE:HD13 | 2 | 0.01 |
| (1,123) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:128:ILE:HD11 | 4 | 0.01 |
| (1,123) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:128:ILE:HD12 | 4 | 0.01 |
| (1,123) | 1:A:24:VAL:H | 1:A:128:ILE:HD13 | 4 | 0.01 |
| (1,1117) | 1:A:167:ILE:H | 1:A:191:LEU:O | 19 | 0.01 |
| (1,1109) | 1:A:129:LEU:H | 1:A:190:LEU:O | 11 | 0.01 |
| (1,1099) | 1:A:124:GLY:O | 1:A:98:ILE:H | 17 | 0.01 |
| (1,107) | 1:A:146:ASP:H | 1:A:148:ASP:H | 19 | 0.01 |
| (1,1038) | 1:A:42:ARG:O | 1:A:46:PHE:H | 6 | 0.01 |
| (1,1026) | 1:A:95:TRP:HE1 | 1:A:91:VAL:H | 5 | 0.01 |
| (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:85:LEU:HD21 | 6 | 0.01 |
| (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:85:LEU:HD22 | 6 | 0.01 |
| (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD11 | 1:A:85:LEU:HD23 | 6 | 0.01 |
| (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:85:LEU:HD21 | 6 | 0.01 |
| (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:85:LEU:HD22 | 6 | 0.01 |
| (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD12 | 1:A:85:LEU:HD23 | 6 | 0.01 |
| (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:85:LEU:HD21 | 6 | 0.01 |
| (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:85:LEU:HD22 | 6 | 0.01 |
| (1,1023) | 1:A:105:LEU:HD13 | 1:A:85:LEU:HD23 | 6 | 0.01 |
| (1,1022) | 1:A:113:LEU:HD11 | 1:A:85:LEU:HD21 | 7 | 0.01 |
| (1,1022) | 1:A:113:LEU:HD11 | 1:A:85:LEU:HD22 | 7 | 0.01 |
| (1,1022) | 1:A:113:LEU:HD11 | 1:A:85:LEU:HD23 | 7 | 0.01 |
| (1,1022) | 1:A:113:LEU:HD12 | 1:A:85:LEU:HD21 | 7 | 0.01 |
| (1,1022) | 1:A:113:LEU:HD12 | 1:A:85:LEU:HD22 | 7 | 0.01 |
| (1,1022) | 1:A:113:LEU:HD12 | 1:A:85:LEU:HD23 | 7 | 0.01 |
| (1,1022) | 1:A:113:LEU:HD13 | 1:A:85:LEU:HD21 | 7 | 0.01 |
| (1,1022) | 1:A:113:LEU:HD13 | 1:A:85:LEU:HD22 | 7 | 0.01 |
| (1,1022) | 1:A:113:LEU:HD13 | 1:A:85:LEU:HD23 | 7 | 0.01 |
| (1,1021) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:90:ILE:HD11 | 4 | 0.01 |
| (1,1021) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:90:ILE:HD12 | 4 | 0.01 |
| (1,1021) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:90:ILE:HD13 | 4 | 0.01 |
| (1,1021) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:90:ILE:HD11 | 4 | 0.01 |
| (1,1021) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:90:ILE:HD12 | 4 | 0.01 |
| (1,1021) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:90:ILE:HD13 | 4 | 0.01 |
| (1,1021) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:90:ILE:HD11 | 4 | 0.01 |
| (1,1021) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:90:ILE:HD12 | 4 | 0.01 |
| (1,1021) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:90:ILE:HD13 | 4 | 0.01 |
| (1,1021) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:90:ILE:HD11 | 8 | 0.01 |
| (1,1021) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:90:ILE:HD12 | 8 | 0.01 |
| (1,1021) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:90:ILE:HD13 | 8 | 0.01 |
| (1,1021) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:90:ILE:HD11 | 8 | 0.01 |
| (1,1021) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:90:ILE:HD12 | 8 | 0.01 |



| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|-------|---------------|
| (1,1021) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:90:ILE:HD13 | 8 | 0.01 |
| (1,1021) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:90:ILE:HD11 | 8 | 0.01 |
| (1,1021) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:90:ILE:HD12 | 8 | 0.01 |
| (1,1021) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:90:ILE:HD13 | 8 | 0.01 |
| (1,1021) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:90:ILE:HD11 | 16 | 0.01 |
| (1,1021) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:90:ILE:HD12 | 16 | 0.01 |
| (1,1021) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:90:ILE:HD13 | 16 | 0.01 |
| (1,1021) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:90:ILE:HD11 | 16 | 0.01 |
| (1,1021) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:90:ILE:HD12 | 16 | 0.01 |
| (1,1021) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:90:ILE:HD13 | 16 | 0.01 |
| (1,1021) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:90:ILE:HD11 | 16 | 0.01 |
| (1,1021) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:90:ILE:HD12 | 16 | 0.01 |
| (1,1021) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:90:ILE:HD13 | 16 | 0.01 |
| (1,1017) | 1:A:101:ILE:HA | 1:A:128:ILE:H | 11 | 0.01 |
| (1,1016) | 1:A:165:TRP:HZ3 | 1:A:127:PHE:HZ | 8 | 0.01 |
| (1,101) | 1:A:135:GLU:H | 1:A:138:GLN:H | 11 | 0.01 |
| (1,1003) | 1:A:59:GLN:H | 1:A:37:ALA:H | 19 | 0.01 |



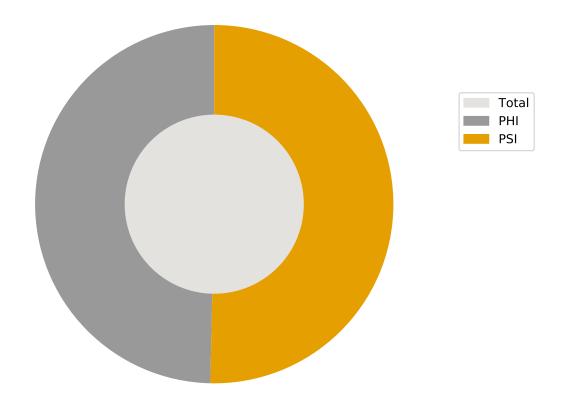
9 Dihedral angle restraints analysis

9.1 Dihedral angle restraints summary

| Angle name | Count | % |
|------------|-------|-------|
| PHI | 143 | 49.7 |
| PSI | 145 | 50.3 |
| Total | 288 | 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.

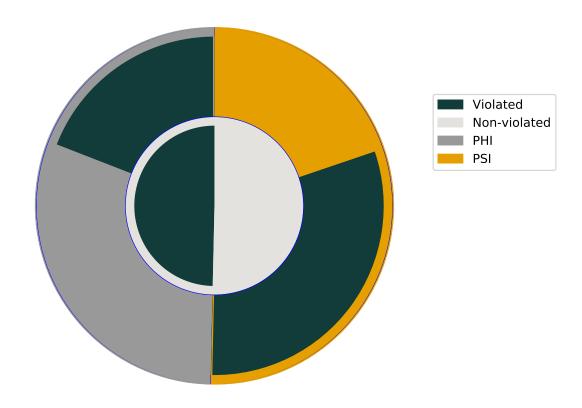
| Angle name | Count | $\%^1$ | $\%^2$ |
|------------|-------|--------|--------|
| PHI | 55 | 38.5 | 38.5 |
| PSI | 88 | 60.7 | 61.5 |



| Angle name | Count | $\%^1$ | $\%^2$ |
|------------|-------|--------|--------|
| Total | 143 | 49.7 | 100.0 |

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

9.2.1 Pie chart: Dihedral angle violations



9.3 Consistent dihedral angle violations

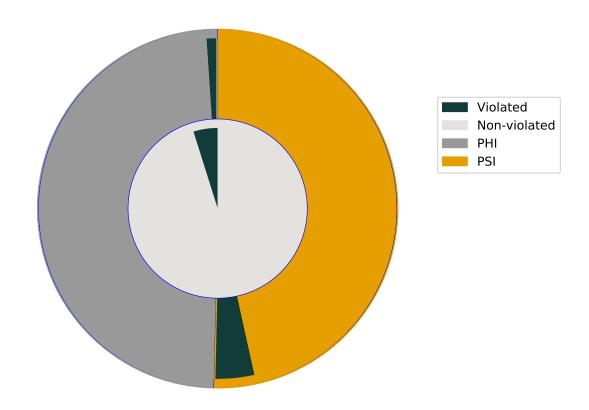
The following table provides the summary of consistently violated restraints. Restraints that are violated in all models are counted as consistently violated.

| Angle name | Count | $\%^1$ | $\%^2$ |
|------------|-------|--------|--------|
| PHI | 3 | 2.1 | 21.4 |
| PSI | 11 | 7.6 | 78.6 |
| Total | 14 | 4.9 | 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 | 35.6 | 5.0 |
| 5.0-10.0 | 7.7 | 10.0 |
| 10.0-20.0 | 5.6 | 19.91 |
| 20.0-40.0 | 5.8 | 39.36 |
| 40.0-80.0 | 6.3 | 75.88 |
| 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.

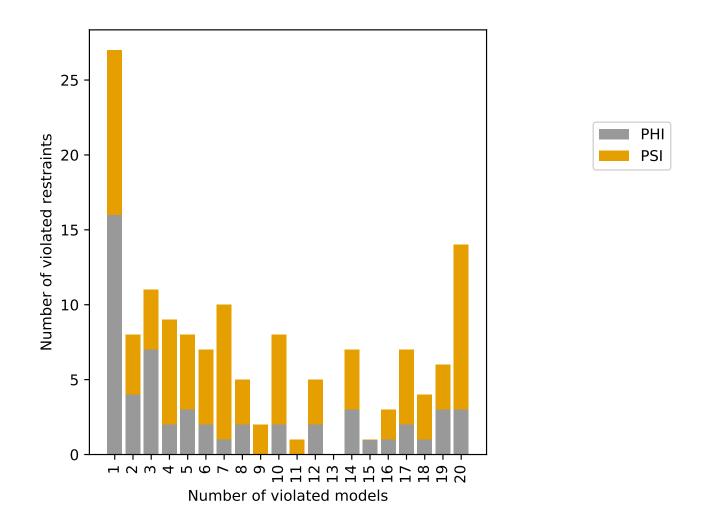
| No. | of vic | lated restraints | No. of violated models |
|-----|--------|------------------|------------------------|
| PHI | PSI | Total | No. of violated models |
| 16 | 11 | 27 | 1 |



| | | $\overline{ m plated\ restraints}$ | | | |
|-----|-----|------------------------------------|------------------------|--|--|
| PHI | PSI | Total | No. of violated models | | |
| 4 | 4 | 8 | 2 | | |
| 7 | 4 | 11 | 3 | | |
| 2 | 7 | 9 | 4 | | |
| 3 | 5 | 8 | 5 | | |
| 2 | 5 | 7 | 6 | | |
| 1 | 9 | 10 | 7 | | |
| 2 | 3 | 5 | 8 | | |
| 0 | 2 | 2 | 9 | | |
| 2 | 6 | 8 | 10 | | |
| 0 | 1 | 1 | 11 | | |
| 2 | 3 | 5 | 12 | | |
| 0 | 0 | 0 | 13 | | |
| 3 | 4 | 7 | 14 | | |
| 1 | 0 | 1 | 15 | | |
| 1 | 2 | 3 | 16 | | |
| 2 | 5 | 7 | 17 | | |
| 1 | 3 | 4 | 18 | | |
| 3 | 3 | 6 | 19 | | |
| 3 | 11 | 14 | 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

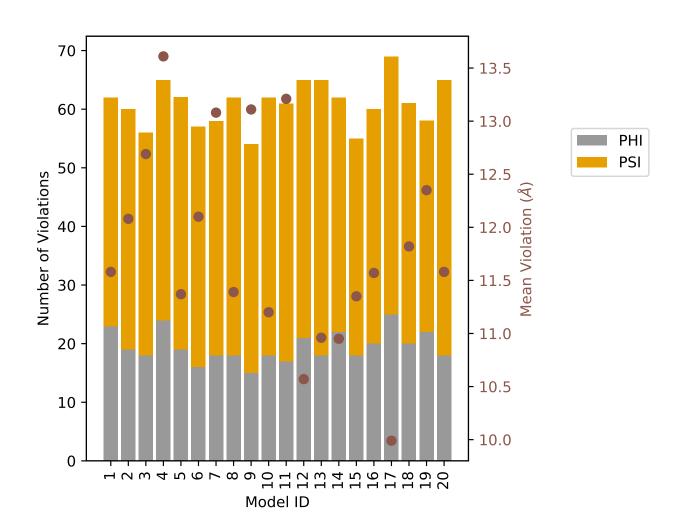
| Model ID | No. of violations | | | Moon (a) | Max (∘) |
|----------|-------------------|-----|-------|----------------------------|---------|
| Model 1D | PHI | PSI | Total | $\mathbf{Mean} \; (\circ)$ | Max (0) |
| 1 | 23 | 39 | 62 | 11.58 | 59.97 |
| 2 | 19 | 41 | 60 | 12.08 | 65.53 |
| 3 | 18 | 38 | 56 | 12.69 | 69.26 |
| 4 | 24 | 41 | 65 | 13.61 | 74.13 |
| 5 | 19 | 43 | 62 | 11.37 | 68.24 |
| 6 | 16 | 41 | 57 | 12.1 | 66.95 |
| 7 | 18 | 40 | 58 | 13.08 | 64.7 |
| 8 | 18 | 44 | 62 | 11.39 | 64.72 |
| 9 | 15 | 39 | 54 | 13.11 | 64.24 |



Continued from previous page...

| Model ID | No. of violations | | | Moon (a) | Mov (a) | |
|-----------|-------------------|-----|-------|-----------------------------------|-----------------------------|--|
| Wiodei 1D | PHI | PSI | Total | $\mathbf{Mean} \; (\; \circ \;)$ | $\operatorname{Max}(\circ)$ | |
| 10 | 18 | 44 | 62 | 11.2 | 62.65 | |
| 11 | 17 | 44 | 61 | 13.21 | 75.88 | |
| 12 | 21 | 44 | 65 | 10.57 | 68.68 | |
| 13 | 18 | 47 | 65 | 10.96 | 66.85 | |
| 14 | 22 | 40 | 62 | 10.95 | 69.29 | |
| 15 | 18 | 37 | 55 | 11.35 | 59.15 | |
| 16 | 20 | 40 | 60 | 11.57 | 64.17 | |
| 17 | 25 | 44 | 69 | 9.99 | 61.68 | |
| 18 | 20 | 41 | 61 | 11.82 | 68.73 | |
| 19 | 22 | 36 | 58 | 12.35 | 63.53 | |
| 20 | 18 | 47 | 65 | 11.58 | 69.67 | |

9.6.1 Bar graph: Violations in each model

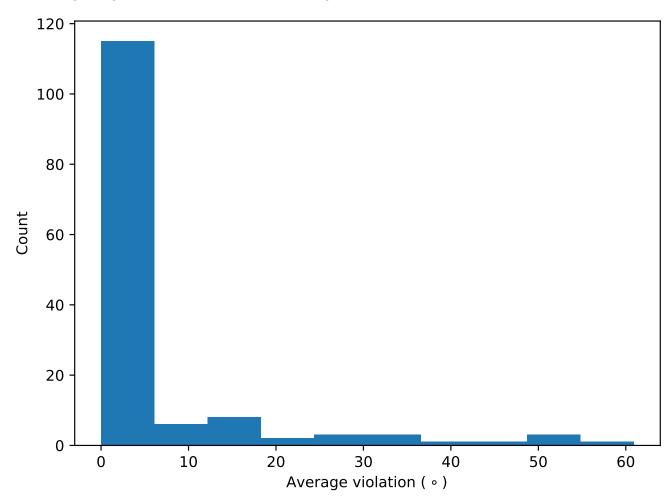




9.7 Most violated dihedral angle restraints

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 | Mean (o) | Max (°) |
|---------|---------------|----------------|---------------|---------------|--------|------------|-----------|
| (1,133) | 1:A:95:TRP:N | 1:A:95:TRP:CA | 1:A:95:TRP:C | 1:A:96:GLU:N | 20 | 41.6 | 69.67 |
| (1,256) | 1:A:171:LEU:N | 1:A:171:LEU:CA | 1:A:171:LEU:C | 1:A:172:GLU:N | 20 | 54.63 | 65.97 |
| (1,214) | 1:A:143:GLY:N | 1:A:143:GLY:CA | 1:A:143:GLY:C | 1:A:144:PRO:N | 18 | 32.72 | 64.25 |
| (1,141) | 1:A:101:ILE:N | 1:A:101:ILE:CA | 1:A:101:ILE:C | 1:A:102:PHE:N | 20 | 53.26 | 62.41 |
| (1,196) | 1:A:131:GLY:N | 1:A:131:GLY:CA | 1:A:131:GLY:C | 1:A:132:PHE:N | 19 | 47.92 | 59.02 |
| (1,30) | 1:A:36:LEU:N | 1:A:36:LEU:CA | 1:A:36:LEU:C | 1:A:37:ALA:N | 20 | 33.16 | 52.98 |
| (1,20) | 1:A:31:GLY:N | 1:A:31:GLY:CA | 1:A:31:GLY:C | 1:A:32:LYS:N | 14 | 13.56 | 47.35 |
| (1,177) | 1:A:121:LEU:N | 1:A:121:LEU:CA | 1:A:121:LEU:C | 1:A:122:LYS:N | 20 | 19.42 | 45.28 |
| (1,64) | 1:A:58:ASP:N | 1:A:58:ASP:CA | 1:A:58:ASP:C | 1:A:59:GLN:N | 20 | 25.97 | 38.71 |
| (1,116) | 1:A:84:ASN:N | 1:A:84:ASN:CA | 1:A:84:ASN:C | 1:A:85:LEU:N | 5 | 26.36 | 37.61 |



| | ed from previous po | | | | | | |
|-------------------|---------------------|----------------|----------------|-----------------|--------|-----------------------------------|---------|
| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Models | $\mathbf{Mean} \; (\; \circ \;)$ | Max (∘) |
| (1,266) | 1:A:184:LYS:N | 1:A:184:LYS:CA | 1:A:184:LYS:C | 1:A:185:ALA:N | 17 | 17.23 | 36.43 |
| (1,108) | 1:A:80:THR:N | 1:A:80:THR:CA | 1:A:80:THR:C | 1:A:81:VAL:N | 20 | 14.96 | 32.55 |
| (1,200) | 1:A:133:ALA:N | 1:A:133:ALA:CA | 1:A:133:ALA:C | 1:A:134:PRO:N | 20 | 21.02 | 32.11 |
| (1,102) | 1:A:77:LYS:N | 1:A:77:LYS:CA | 1:A:77:LYS:C | 1:A:78:ILE:N | 20 | 15.96 | 26.09 |
| (1,240) | 1:A:163:LEU:N | 1:A:163:LEU:CA | 1:A:163:LEU:C | 1:A:164:ASN:N | 20 | 17.53 | 21.9 |
| (1,100) | 1:A:76:VAL:N | 1:A:76:VAL:CA | 1:A:76:VAL:C | 1:A:77:LYS:N | 17 | 8.2 | 19.75 |
| (1,278) | 1:A:190:LEU:N | 1:A:190:LEU:CA | 1:A:190:LEU:C | 1:A:191:LEU:N | 18 | 7.89 | 17.15 |
| (1,143) | 1:A:102:PHE:N | 1:A:102:PHE:CA | 1:A:102:PHE:C | 1:A:103:CYS:N | 19 | 6.93 | 12.0 |
| (1,147) | 1:A:104:HIS:N | 1:A:104:HIS:CA | 1:A:104:HIS:C | 1:A:105:LEU:N | 20 | 6.88 | 11.3 |
| (1,218) | 1:A:149:LEU:N | 1:A:149:LEU:CA | 1:A:149:LEU:C | 1:A:150:LEU:N | 4 | 6.95 | 8.68 |
| (1,145) | 1:A:103:CYS:N | 1:A:103:CYS:CA | 1:A:103:CYS:C | 1:A:104:HIS:N | 12 | 2.67 | 8.45 |
| (1,288) | 1:A:195:LEU:N | 1:A:195:LEU:CA | 1:A:195:LEU:C | 1:A:196:GLU:N | 5 | 4.96 | 8.36 |
| (1,114) | 1:A:83:SER:N | 1:A:83:SER:CA | 1:A:83:SER:C | 1:A:84:ASN:N | 8 | 4.86 | 8.14 |
| (1,2) | 1:A:21:LEU:N | 1:A:21:LEU:CA | 1:A:21:LEU:C | 1:A:22:VAL:N | 7 | 4.2 | 8.07 |
| (1,284) | 1:A:193:GLN:N | 1:A:193:GLN:CA | 1:A:193:GLN:C | 1:A:194:LYS:N | 17 | 4.72 | 7.94 |
| (1,180) | 1:A:123:PRO:N | 1:A:123:PRO:CA | 1:A:123:PRO:C | 1:A:124:GLY:N | 10 | 2.51 | 7.64 |
| (1,194) | 1:A:130:GLU:N | 1:A:130:GLU:CA | 1:A:130:GLU:C | 1:A:131:GLY:N | 17 | 3.83 | 6.86 |
| (1,198) | 1:A:132:PHE:N | 1:A:132:PHE:CA | 1:A:132:PHE:C | 1:A:133:ALA:N | 7 | 4.0 | 6.47 |
| (1,188) | 1:A:127:PHE:N | 1:A:127:PHE:CA | 1:A:127:PHE:C | 1:A:128:ILE:N | 18 | 1.96 | 6.4 |
| (1,173) | 1:A:118:TYR:N | 1:A:118:TYR:CA | 1:A:118:TYR:C | 1:A:119:GLN:N | 12 | 3.09 | 6.05 |
| (1,212) | 1:A:141:THR:N | 1:A:141:THR:CA | 1:A:141:THR:C | 1:A:142:GLY:N | 6 | 2.43 | 5.91 |
| (1,118) | 1:A:85:LEU:N | 1:A:85:LEU:CA | 1:A:85:LEU:C | 1:A:86:ALA:N | 10 | 2.36 | 5.87 |
| (1,268) | 1:A:185:ALA:N | 1:A:185:ALA:CA | 1:A:185:ALA:C | 1:A:186:ALA:N | 17 | 3.13 | 5.87 |
| (1,106) | 1:A:79:THR:N | 1:A:79:THR:CA | 1:A:79:THR:C | 1:A:80:THR:N | 16 | 3.38 | 5.47 |
| (1,18) | 1:A:30:GLN:N | 1:A:30:GLN:CA | 1:A:30:GLN:C | 1:A:31:GLY:N | 19 | 2.01 | 5.47 |
| (1,137) | 1:A:99:VAL:N | 1:A:99:VAL:CA | 1:A:99:VAL:C | 1:A:100:SER:N | 4 | 3.02 | 5.35 |
| (1,62) | 1:A:57:VAL:N | 1:A:57:VAL:CA | 1:A:57:VAL:C | 1:A:58:ASP:N | 7 | 2.74 | 5.28 |
| (1,171) | 1:A:117:VAL:N | 1:A:117:VAL:CA | 1:A:117:VAL:C | 1:A:118:TYR:N | 6 | 3.36 | 5.18 |
| (1,22) | 1:A:32:LYS:N | 1:A:32:LYS:CA | 1:A:32:LYS:C | 1:A:33:ILE:N | 12 | 2.24 | 5.02 |
| (1,260) | 1:A:173:ARG:N | 1:A:173:ARG:CA | 1:A:173:ARG:C | 1:A:174:ASN:N | 8 | 2.42 | 4.87 |
| (1,139) | 1:A:100:SER:N | 1:A:100:SER:CA | 1:A:100:SER:C | 1:A:101:ILE:N | 6 | 2.19 | 4.77 |
| (1,270) | 1:A:186:ALA:N | 1:A:186:ALA:CA | 1:A:186:ALA:C | 1:A:187:LEU:N | 4 | 2.44 | 4.76 |
| (1,258) | 1:A:172:GLU:N | 1:A:172:GLU:CA | 1:A:172:GLU:C | 1:A:173:ARG:N | 9 | 2.29 | 4.67 |
| (1,156) | 1:A:109:LEU:N | 1:A:109:LEU:CA | 1:A:109:LEU:C | 1:A:110:ARG:N | 10 | 1.74 | 4.54 |
| (1,28) | 1:A:35:CYS:N | 1:A:35:CYS:CA | 1:A:35:CYS:C | 1:A:36:LEU:N | 7 | 2.29 | 4.34 |
| (1,54) | 1:A:53:GLU:N | 1:A:53:GLU:CA | 1:A:53:GLU:C | 1:A:54:VAL:N | 14 | 1.85 | 4.3 |
| (1,202) | 1:A:135:GLU:N | 1:A:135:GLU:CA | 1:A:135:GLU:C | 1:A:136:GLN:N | 7 | 1.65 | 4.22 |
| (1,274) | 1:A:188:ILE:N | 1:A:188:ILE:CA | 1:A:188:ILE:C | 1:A:189:GLN:N | 10 | 2.64 | 4.06 |
| (1,169) | 1:A:116:LYS:N | 1:A:116:LYS:CA | 1:A:116:LYS:C | 1:A:117:VAL:N | 7 | 1.61 | 4.02 |
| (1,122) | 1:A:88:PHE:N | 1:A:88:PHE:CA | 1:A:88:PHE:C | 1:A:89:ASP:N | 2 | 2.71 | 3.9 |
| (1,122) $(1,264)$ | 1:A:175:LEU:N | 1:A:175:LEU:CA | 1:A:175:LEU:C | 1:A:176:ASP:N | 9 | 2.58 | 3.9 |
| (1,127) | 1:A:92:ALA:N | 1:A:92:ALA:CA | 1:A:92:ALA:C | 1:A:93:ASP:N | 10 | 1.89 | 3.89 |
| (1,112) | 1:A:82:GLN:N | 1:A:82:GLN:CA | 1:A:82:GLN:C | 1:A:83:SER:N | 4 | 1.43 | 3.6 |
| (1,112) $(1,206)$ | 1:A:137:LEU:N | 1:A:137:LEU:CA | 1:A:137:LEU:C | 1:A:138:GLN:N | 7 | 1.57 | 3.5 |
| (1,182) | 1:A:124:GLY:N | 1:A:124:GLY:CA | 1:A:124:GLY:C | 1:A:125:GLY:N | 11 | 1.86 | 3.38 |
| (1,162) $(1,262)$ | 1:A:174:ASN:N | 1:A:174:ASN:CA | 1:A:174:ASN:C | 1:A:175:LEU:N | 7 | 1.62 | 3.3 |
| (1,202) $(1,179)$ | 1:A:122:LYS:N | 1:A:122:LYS:CA | 1:A:122:LYS:C | 1:A:123:PRO:N | 1 | 3.14 | 3.14 |
| (1,179) $(1,190)$ | 1:A:128:ILE:N | 1:A:128:ILE:CA | 1:A:128:ILE:C | 1:A:129:LEU:N | 16 | 1.49 | 3.03 |
| (1,186) $(1,186)$ | 1:A:126:VAL:N | 1:A:126:VAL:CA | 1:A:126:VAL:C | 1:A:127:PHE:N | 14 | 1.63 | 2.93 |
| (1,160) $(1,46)$ | 1:A:49:SER:N | 1:A:49:SER:CA | 1:A:49:SER:C | 1:A:50:LEU:N | 6 | 1.62 | 2.86 |
| (1,40) $(1,6)$ | 1:A:23:SER:N | 1:A:23:SER:CA | 1:A:23:SER:C | 1:A:24:VAL:N | 10 | 1.02 | 2.78 |
| (1,0) | 1.11.20.01216.11 | 1.71.20.0DH.OA | 1.11.20.0111.0 | 1.11.24. VAL.IV | 10 | Continued on | |



| | ed from previous pe | | Atom 2 | Atom 1 | Modela | Mass (a) | Mar (a) |
|---------|---------------------|----------------|----------------|---------------|--------|--------------|-----------|
| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Models | Mean (∘) | Max (°) |
| (1,226) | 1:A:155:THR:N | 1:A:155:THR:CA | 1:A:155:THR:C | 1:A:156:LEU:N | 6 | 1.07 | 2.77 |
| (1,234) | 1:A:159:GLU:N | 1:A:159:GLU:CA | 1:A:159:GLU:C | 1:A:160:LEU:N | 1 | 2.75 | 2.75 |
| (1,175) | 1:A:119:GLN:N | 1:A:119:GLN:CA | 1:A:119:GLN:C | 1:A:120:GLY:N | 7 | 1.68 | 2.61 |
| (1,24) | 1:A:33:ILE:N | 1:A:33:ILE:CA | 1:A:33:ILE:C | 1:A:34:LEU:N | 2 | 1.7 | 2.56 |
| (1,280) | 1:A:191:LEU:N | 1:A:191:LEU:CA | 1:A:191:LEU:C | 1:A:192:GLY:N | 14 | 1.01 | 2.44 |
| (1,150) | 1:A:106:PRO:N | 1:A:106:PRO:CA | 1:A:106:PRO:C | 1:A:107:SER:N | 4 | 1.05 | 2.23 |
| (1,90) | 1:A:71:ALA:N | 1:A:71:ALA:CA | 1:A:71:ALA:C | 1:A:72:GLN:N | 8 | 1.06 | 2.23 |
| (1,58) | 1:A:55:THR:N | 1:A:55:THR:CA | 1:A:55:THR:C | 1:A:56:ALA:N | 5 | 1.13 | 2.03 |
| (1,160) | 1:A:111:GLN:N | 1:A:111:GLN:CA | 1:A:111:GLN:C | 1:A:112:GLN:N | 5 | 1.18 | 1.98 |
| (1,204) | 1:A:136:GLN:N | 1:A:136:GLN:CA | 1:A:136:GLN:C | 1:A:137:LEU:N | 5 | 1.67 | 1.91 |
| (1,88) | 1:A:70:LEU:N | 1:A:70:LEU:CA | 1:A:70:LEU:C | 1:A:71:ALA:N | 3 | 0.97 | 1.59 |
| (1,70) | 1:A:61:SER:N | 1:A:61:SER:CA | 1:A:61:SER:C | 1:A:62:VAL:N | 4 | 0.91 | 1.52 |
| (1,164) | 1:A:113:LEU:N | 1:A:113:LEU:CA | 1:A:113:LEU:C | 1:A:114:TYR:N | 2 | 0.96 | 1.47 |
| (1,104) | 1:A:78:ILE:N | 1:A:78:ILE:CA | 1:A:78:ILE:C | 1:A:79:THR:N | 3 | 0.79 | 1.46 |
| (1,154) | 1:A:108:SER:N | 1:A:108:SER:CA | 1:A:108:SER:C | 1:A:109:LEU:N | 4 | 1.04 | 1.45 |
| (1,38) | 1:A:45:CYS:N | 1:A:45:CYS:CA | 1:A:45:CYS:C | 1:A:46:PHE:N | 1 | 1.42 | 1.42 |
| (1,272) | 1:A:187:LEU:N | 1:A:187:LEU:CA | 1:A:187:LEU:C | 1:A:188:ILE:N | 2 | 0.6 | 1.11 |
| (1,192) | 1:A:129:LEU:N | 1:A:129:LEU:CA | 1:A:129:LEU:C | 1:A:130:GLU:N | 3 | 0.67 | 1.1 |
| (1,224) | 1:A:154:GLU:N | 1:A:154:GLU:CA | 1:A:154:GLU:C | 1:A:155:THR:N | 1 | 0.88 | 0.88 |
| (1,120) | 1:A:86:ALA:N | 1:A:86:ALA:CA | 1:A:86:ALA:C | 1:A:87:ASP:N | 1 | 0.83 | 0.83 |
| (1,238) | 1:A:162:SER:N | 1:A:162:SER:CA | 1:A:162:SER:C | 1:A:163:LEU:N | 3 | 0.49 | 0.66 |
| (1,94) | 1:A:73:GLU:N | 1:A:73:GLU:CA | 1:A:73:GLU:C | 1:A:74:LYS:N | 1 | 0.62 | 0.62 |
| (1,96) | 1:A:74:LYS:N | 1:A:74:LYS:CA | 1:A:74:LYS:C | 1:A:75:GLY:N | 1 | 0.61 | 0.61 |
| (1,92) | 1:A:72:GLN:N | 1:A:72:GLN:CA | 1:A:72:GLN:C | 1:A:73:GLU:N | 1 | 0.26 | 0.26 |
| (1,129) | 1:A:93:ASP:N | 1:A:93:ASP:CA | 1:A:93:ASP:C | 1:A:94:ALA:N | 1 | 0.16 | 0.16 |
| (1,254) | 1:A:170:ASN:N | 1:A:170:ASN:CA | 1:A:170:ASN:C | 1:A:171:LEU:N | 1 | 0.08 | 0.08 |
| (1,158) | 1:A:110:ARG:N | 1:A:110:ARG:CA | 1:A:110:ARG:C | 1:A:111:GLN:N | 1 | 0.03 | 0.03 |
| (1,121) | 1:A:86:ALA:C | 1:A:87:ASP:N | 1:A:87:ASP:CA | 1:A:87:ASP:C | 20 | 50.09 | 75.88 |
| (1,213) | 1:A:142:GLY:C | 1:A:143:GLY:N | 1:A:143:GLY:CA | 1:A:143:GLY:C | 19 | 34.48 | 69.59 |
| (1,63) | 1:A:57:VAL:C | 1:A:58:ASP:N | 1:A:58:ASP:CA | 1:A:58:ASP:C | 20 | 60.9 | 69.26 |
| (1,195) | 1:A:130:GLU:C | 1:A:131:GLY:N | 1:A:131:GLY:CA | 1:A:131:GLY:C | 18 | 14.1 | 62.94 |
| (1,113) | 1:A:82:GLN:C | 1:A:83:SER:N | 1:A:83:SER:CA | 1:A:83:SER:C | 20 | 26.08 | 45.99 |
| (1,219) | 1:A:149:LEU:C | 1:A:150:LEU:N | 1:A:150:LEU:CA | 1:A:150:LEU:C | 19 | 16.99 | 36.13 |
| (1,201) | 1:A:134:PRO:C | 1:A:135:GLU:N | 1:A:135:GLU:CA | 1:A:135:GLU:C | 6 | 4.15 | 13.42 |
| (1,181) | 1:A:123:PRO:C | 1:A:124:GLY:N | 1:A:124:GLY:CA | 1:A:124:GLY:C | 19 | 6.93 | 13.32 |
| (1,199) | 1:A:132:PHE:C | 1:A:133:ALA:N | 1:A:133:ALA:CA | 1:A:133:ALA:C | 1 | 12.91 | 12.91 |
| (1,111) | 1:A:81:VAL:C | 1:A:82:GLN:N | 1:A:82:GLN:CA | 1:A:82:GLN:C | 15 | 4.35 | 9.28 |
| (1,283) | 1:A:192:GLY:C | 1:A:193:GLN:N | 1:A:193:GLN:CA | 1:A:193:GLN:C | 12 | 2.75 | 6.55 |
| (1,142) | 1:A:101:ILE:C | 1:A:102:PHE:N | 1:A:102:PHE:CA | 1:A:102:PHE:C | 17 | 3.26 | 6.4 |
| (1,211) | 1:A:140:ASN:C | 1:A:141:THR:N | 1:A:141:THR:CA | 1:A:141:THR:C | 10 | 2.3 | 5.78 |
| (1,115) | 1:A:83:SER:C | 1:A:84:ASN:N | 1:A:84:ASN:CA | 1:A:84:ASN:C | 17 | 2.24 | 5.63 |
| (1,285) | 1:A:193:GLN:C | 1:A:194:LYS:N | 1:A:194:LYS:CA | 1:A:194:LYS:C | 14 | 3.05 | 5.51 |
| (1,3) | 1:A:21:LEU:C | 1:A:22:VAL:N | 1:A:22:VAL:CA | 1:A:22:VAL:C | 5 | 2.28 | 5.06 |
| (1,185) | 1:A:125:GLY:C | 1:A:126:VAL:N | 1:A:126:VAL:CA | 1:A:126:VAL:C | 16 | 1.85 | 4.95 |
| (1,119) | 1:A:85:LEU:C | 1:A:86:ALA:N | 1:A:86:ALA:CA | 1:A:86:ALA:C | 2 | 2.61 | 4.67 |
| (1,123) | 1:A:88:PHE:C | 1:A:89:ASP:N | 1:A:89:ASP:CA | 1:A:89:ASP:C | 3 | 2.86 | 4.64 |
| (1,239) | 1:A:162:SER:C | 1:A:163:LEU:N | 1:A:163:LEU:CA | 1:A:163:LEU:C | 4 | 2.27 | 4.61 |
| (1,189) | 1:A:127:PHE:C | 1:A:128:ILE:N | 1:A:128:ILE:CA | 1:A:128:ILE:C | 8 | 1.83 | 3.87 |
| (1,170) | 1:A:116:LYS:C | 1:A:117:VAL:N | 1:A:117:VAL:CA | 1:A:117:VAL:C | 8 | 1.54 | 3.77 |
| (1,174) | 1:A:118:TYR:C | 1:A:119:GLN:N | 1:A:119:GLN:CA | 1:A:119:GLN:C | 1 | 3.46 | 3.46 |
| (1,57) | 1:A:54:VAL:C | 1:A:55:THR:N | 1:A:55:THR:CA | 1:A:55:THR:C | 14 | 1.65 | 3.4 |
| (/ '/ | | · | | L | L | Continued on | |



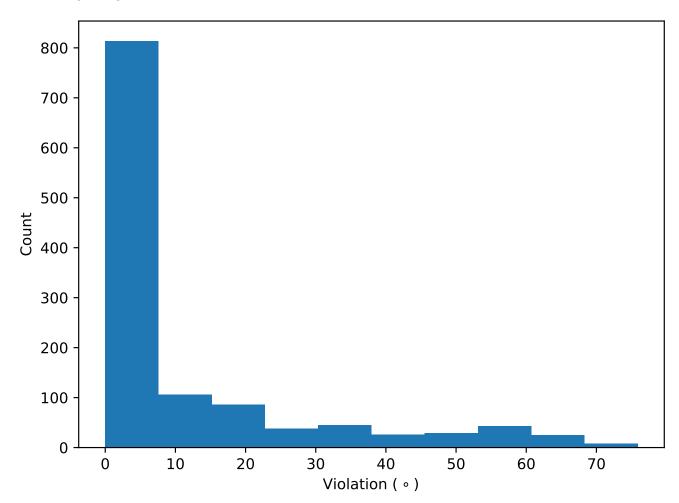
| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Models | Mean (o) | Max (°) |
|---------|---------------|---------------|----------------|---------------|--------|------------|-----------|
| (1,126) | 1:A:91:VAL:C | 1:A:92:ALA:N | 1:A:92:ALA:CA | 1:A:92:ALA:C | 4 | 2.31 | 3.35 |
| (1,193) | 1:A:129:LEU:C | 1:A:130:GLU:N | 1:A:130:GLU:CA | 1:A:130:GLU:C | 3 | 1.69 | 3.14 |
| (1,237) | 1:A:161:PRO:C | 1:A:162:SER:N | 1:A:162:SER:CA | 1:A:162:SER:C | 7 | 1.58 | 3.08 |
| (1,117) | 1:A:84:ASN:C | 1:A:85:LEU:N | 1:A:85:LEU:CA | 1:A:85:LEU:C | 3 | 2.11 | 2.89 |
| (1,23) | 1:A:32:LYS:C | 1:A:33:ILE:N | 1:A:33:ILE:CA | 1:A:33:ILE:C | 5 | 1.34 | 2.71 |
| (1,205) | 1:A:136:GLN:C | 1:A:137:LEU:N | 1:A:137:LEU:CA | 1:A:137:LEU:C | 2 | 1.83 | 2.71 |
| (1,281) | 1:A:191:LEU:C | 1:A:192:GLY:N | 1:A:192:GLY:CA | 1:A:192:GLY:C | 12 | 1.1 | 2.69 |
| (1,109) | 1:A:80:THR:C | 1:A:81:VAL:N | 1:A:81:VAL:CA | 1:A:81:VAL:C | 2 | 2.31 | 2.66 |
| (1,107) | 1:A:79:THR:C | 1:A:80:THR:N | 1:A:80:THR:CA | 1:A:80:THR:C | 3 | 1.16 | 2.66 |
| (1,69) | 1:A:60:SER:C | 1:A:61:SER:N | 1:A:61:SER:CA | 1:A:61:SER:C | 3 | 1.86 | 2.6 |
| (1,247) | 1:A:166:LEU:C | 1:A:167:ILE:N | 1:A:167:ILE:CA | 1:A:167:ILE:C | 14 | 1.01 | 2.45 |
| (1,31) | 1:A:41:GLY:C | 1:A:42:ARG:N | 1:A:42:ARG:CA | 1:A:42:ARG:C | 2 | 1.49 | 2.44 |
| (1,148) | 1:A:104:HIS:C | 1:A:105:LEU:N | 1:A:105:LEU:CA | 1:A:105:LEU:C | 1 | 2.24 | 2.24 |
| (1,21) | 1:A:31:GLY:C | 1:A:32:LYS:N | 1:A:32:LYS:CA | 1:A:32:LYS:C | 1 | 2.16 | 2.16 |
| (1,259) | 1:A:172:GLU:C | 1:A:173:ARG:N | 1:A:173:ARG:CA | 1:A:173:ARG:C | 3 | 1.84 | 2.14 |
| (1,267) | 1:A:184:LYS:C | 1:A:185:ALA:N | 1:A:185:ALA:CA | 1:A:185:ALA:C | 1 | 2.1 | 2.1 |
| (1,249) | 1:A:167:ILE:C | 1:A:168:ALA:N | 1:A:168:ALA:CA | 1:A:168:ALA:C | 10 | 1.02 | 1.97 |
| (1,176) | 1:A:120:GLY:C | 1:A:121:LEU:N | 1:A:121:LEU:CA | 1:A:121:LEU:C | 3 | 1.16 | 1.8 |
| (1,197) | 1:A:131:GLY:C | 1:A:132:PHE:N | 1:A:132:PHE:CA | 1:A:132:PHE:C | 1 | 1.69 | 1.69 |
| (1,187) | 1:A:126:VAL:C | 1:A:127:PHE:N | 1:A:127:PHE:CA | 1:A:127:PHE:C | 6 | 0.72 | 1.51 |
| (1,138) | 1:A:99:VAL:C | 1:A:100:SER:N | 1:A:100:SER:CA | 1:A:100:SER:C | 5 | 0.93 | 1.4 |
| (1,172) | 1:A:117:VAL:C | 1:A:118:TYR:N | 1:A:118:TYR:CA | 1:A:118:TYR:C | 1 | 0.98 | 0.98 |
| (1,155) | 1:A:108:SER:C | 1:A:109:LEU:N | 1:A:109:LEU:CA | 1:A:109:LEU:C | 1 | 0.84 | 0.84 |
| (1,163) | 1:A:112:GLN:C | 1:A:113:LEU:N | 1:A:113:LEU:CA | 1:A:113:LEU:C | 1 | 0.69 | 0.69 |
| (1,168) | 1:A:115:PRO:C | 1:A:116:LYS:N | 1:A:116:LYS:CA | 1:A:116:LYS:C | 1 | 0.68 | 0.68 |
| (1,130) | 1:A:93:ASP:C | 1:A:94:ALA:N | 1:A:94:ALA:CA | 1:A:94:ALA:C | 1 | 0.43 | 0.43 |
| (1,151) | 1:A:106:PRO:C | 1:A:107:SER:N | 1:A:107:SER:CA | 1:A:107:SER:C | 1 | 0.42 | 0.42 |
| (1,73) | 1:A:62:VAL:C | 1:A:63:GLY:N | 1:A:63:GLY:CA | 1:A:63:GLY:C | 1 | 0.38 | 0.38 |
| (1,269) | 1:A:185:ALA:C | 1:A:186:ALA:N | 1:A:186:ALA:CA | 1:A:186:ALA:C | 1 | 0.31 | 0.31 |
| (1,105) | 1:A:78:ILE:C | 1:A:79:THR:N | 1:A:79:THR:CA | 1:A:79:THR:C | 1 | 0.27 | 0.27 |
| (1,227) | 1:A:155:THR:C | 1:A:156:LEU:N | 1:A:156:LEU:CA | 1:A:156:LEU:C | 1 | 0.1 | 0.1 |



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\)$ |
|---------|---------------|---------------|----------------|---------------|-------|------------------------------------|
| (1,121) | 1:A:86:ALA:C | 1:A:87:ASP:N | 1:A:87:ASP:CA | 1:A:87:ASP:C | 11 | 75.88 |
| (1,121) | 1:A:86:ALA:C | 1:A:87:ASP:N | 1:A:87:ASP:CA | 1:A:87:ASP:C | 4 | 74.13 |
| (1,133) | 1:A:95:TRP:N | 1:A:95:TRP:CA | 1:A:95:TRP:C | 1:A:96:GLU:N | 20 | 69.67 |
| (1,213) | 1:A:142:GLY:C | 1:A:143:GLY:N | 1:A:143:GLY:CA | 1:A:143:GLY:C | 4 | 69.59 |
| (1,133) | 1:A:95:TRP:N | 1:A:95:TRP:CA | 1:A:95:TRP:C | 1:A:96:GLU:N | 14 | 69.29 |
| (1,63) | 1:A:57:VAL:C | 1:A:58:ASP:N | 1:A:58:ASP:CA | 1:A:58:ASP:C | 3 | 69.26 |
| (1,63) | 1:A:57:VAL:C | 1:A:58:ASP:N | 1:A:58:ASP:CA | 1:A:58:ASP:C | 18 | 68.73 |
| (1,63) | 1:A:57:VAL:C | 1:A:58:ASP:N | 1:A:58:ASP:CA | 1:A:58:ASP:C | 12 | 68.68 |
| (1,213) | 1:A:142:GLY:C | 1:A:143:GLY:N | 1:A:143:GLY:CA | 1:A:143:GLY:C | 5 | 68.24 |
| (1,63) | 1:A:57:VAL:C | 1:A:58:ASP:N | 1:A:58:ASP:CA | 1:A:58:ASP:C | 4 | 67.91 |



| Key | $\frac{d\ from\ previous\ po}{\mathbf{Atom-1}}$ | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model | Violation (o) |
|-------------------|---|----------------|----------------|---------------|-------|-----------------|
| (1,63) | 1:A:57:VAL:C | 1:A:58:ASP:N | 1:A:58:ASP:CA | 1:A:58:ASP:C | 6 | 66.95 |
| (1,121) | 1:A:86:ALA:C | 1:A:87:ASP:N | 1:A:87:ASP:CA | 1:A:87:ASP:C | 13 | 66.85 |
| (1,256) | 1:A:171:LEU:N | 1:A:171:LEU:CA | 1:A:171:LEU:C | 1:A:172:GLU:N | 3 | 65.97 |
| (1,256) | 1:A:171:LEU:N | 1:A:171:LEU:CA | 1:A:171:LEU:C | 1:A:172:GLU:N | 5 | 65.59 |
| (1,63) | 1:A:57:VAL:C | 1:A:58:ASP:N | 1:A:58:ASP:CA | 1:A:58:ASP:C | 2 | 65.53 |
| (1,133) | 1:A:95:TRP:N | 1:A:95:TRP:CA | 1:A:95:TRP:C | 1:A:96:GLU:N | 8 | 64.72 |
| (1,63) | 1:A:57:VAL:C | 1:A:58:ASP:N | 1:A:58:ASP:CA | 1:A:58:ASP:C | 7 | 64.7 |
| (1,63) | 1:A:57:VAL:C | 1:A:58:ASP:N | 1:A:58:ASP:CA | 1:A:58:ASP:C | 13 | 64.64 |
| (1,256) | 1:A:171:LEU:N | 1:A:171:LEU:CA | 1:A:171:LEU:C | 1:A:172:GLU:N | 13 | 64.47 |
| (1,214) | 1:A:143:GLY:N | 1:A:143:GLY:CA | 1:A:143:GLY:C | 1:A:144:PRO:N | 11 | 64.25 |
| (1,256) | 1:A:171:LEU:N | 1:A:171:LEU:CA | 1:A:171:LEU:C | 1:A:172:GLU:N | 9 | 64.24 |
| (1,121) | 1:A:86:ALA:C | 1:A:87:ASP:N | 1:A:87:ASP:CA | 1:A:87:ASP:C | 16 | 64.17 |
| (1,214) | 1:A:143:GLY:N | 1:A:143:GLY:CA | 1:A:143:GLY:C | 1:A:144:PRO:N | 5 | 63.68 |
| (1,63) | 1:A:57:VAL:C | 1:A:58:ASP:N | 1:A:58:ASP:CA | 1:A:58:ASP:C | 19 | 63.53 |
| (1,121) | 1:A:86:ALA:C | 1:A:87:ASP:N | 1:A:87:ASP:CA | 1:A:87:ASP:C | 2 | 63.52 |
| (1,195) | 1:A:130:GLU:C | 1:A:131:GLY:N | 1:A:131:GLY:CA | 1:A:131:GLY:C | 18 | 62.94 |
| (1,63) | 1:A:57:VAL:C | 1:A:58:ASP:N | 1:A:58:ASP:CA | 1:A:58:ASP:C | 10 | 62.65 |
| (1,141) | 1:A:101:ILE:N | 1:A:101:ILE:CA | 1:A:101:ILE:C | 1:A:102:PHE:N | 7 | 62.41 |
| (1,141) | 1:A:101:ILE:N | 1:A:101:ILE:CA | 1:A:101:ILE:C | 1:A:102:PHE:N | 4 | 62.24 |
| (1,141) | 1:A:101:ILE:N | 1:A:101:ILE:CA | 1:A:101:ILE:C | 1:A:102:PHE:N | 20 | 61.93 |
| (1,214) | 1:A:143:GLY:N | 1:A:143:GLY:CA | 1:A:143:GLY:C | 1:A:144:PRO:N | 16 | 61.91 |
| (1,63) | 1:A:57:VAL:C | 1:A:58:ASP:N | 1:A:58:ASP:CA | 1:A:58:ASP:C | 17 | 61.68 |
| (1,141) | 1:A:101:ILE:N | 1:A:101:ILE:CA | 1:A:101:ILE:C | 1:A:102:PHE:N | 9 | 60.72 |
| (1,256) | 1:A:171:LEU:N | 1:A:171:LEU:CA | 1:A:171:LEU:C | 1:A:172:GLU:N | 6 | 60.38 |
| (1,256) | 1:A:171:LEU:N | 1:A:171:LEU:CA | 1:A:171:LEU:C | 1:A:172:GLU:N | 11 | 60.07 |
| (1,141) | 1:A:101:ILE:N | 1:A:101:ILE:CA | 1:A:101:ILE:C | 1:A:102:PHE:N | 12 | 60.06 |
| (1,141) | 1:A:101:ILE:N | 1:A:101:ILE:CA | 1:A:101:ILE:C | 1:A:102:PHE:N | 1 | 59.97 |
| (1,63) | 1:A:57:VAL:C | 1:A:58:ASP:N | 1:A:58:ASP:CA | 1:A:58:ASP:C | 14 | 59.77 |
| (1,213) | 1:A:142:GLY:C | 1:A:143:GLY:N | 1:A:143:GLY:CA | 1:A:143:GLY:C | 16 | 59.46 |
| (1,141) | 1:A:101:ILE:N | 1:A:101:ILE:CA | 1:A:101:ILE:C | 1:A:102:PHE:N | 10 | 59.31 |
| (1,256) | 1:A:171:LEU:N | 1:A:171:LEU:CA | 1:A:171:LEU:C | 1:A:172:GLU:N | 8 | 59.17 |
| (1,63) | 1:A:57:VAL:C | 1:A:58:ASP:N | 1:A:58:ASP:CA | 1:A:58:ASP:C | 15 | 59.15 |
| (1,256) | 1:A:171:LEU:N | 1:A:171:LEU:CA | 1:A:171:LEU:C | 1:A:172:GLU:N | 1 | 59.11 |
| (1,133) | 1:A:95:TRP:N | 1:A:95:TRP:CA | 1:A:95:TRP:C | 1:A:96:GLU:N | 19 | 59.11 |
| | 1:A:131:GLY:N | 1:A:131:GLY:CA | 1:A:131:GLY:C | 1:A:132:PHE:N | 11 | 59.02 |
| (1,213) | 1:A:142:GLY:C | 1:A:143:GLY:N | 1:A:143:GLY:CA | 1:A:143:GLY:C | 7 | 59.0 |
| (1,256) | 1:A:171:LEU:N | 1:A:171:LEU:CA | 1:A:171:LEU:C | 1:A:172:GLU:N | 16 | 58.72 |
| (1,133) | 1:A:95:TRP:N | 1:A:95:TRP:CA | 1:A:95:TRP:C | 1:A:96:GLU:N | 3 | 58.72 |
| (1,63) | 1:A:57:VAL:C | 1:A:58:ASP:N | 1:A:58:ASP:CA | 1:A:58:ASP:C | 11 | 58.64 |
| (1,141) | 1:A:101:ILE:N | 1:A:101:ILE:CA | 1:A:101:ILE:C | 1:A:102:PHE:N | 2 | 58.49 |
| (1,196) | 1:A:131:GLY:N | 1:A:131:GLY:CA | 1:A:131:GLY:C | 1:A:132:PHE:N | 20 | 58.44 |
| (1,63) | 1:A:57:VAL:C | 1:A:58:ASP:N | 1:A:58:ASP:CA | 1:A:58:ASP:C | 9 | 58.17 |
| (1,213) | 1:A:142:GLY:C | 1:A:143:GLY:N | 1:A:143:GLY:CA | 1:A:143:GLY:C | 6 | 57.83 |
| (1,121) | 1:A:86:ALA:C | 1:A:87:ASP:N | 1:A:87:ASP:CA | 1:A:87:ASP:C | 15 | 57.83 |
| (1,256) | 1:A:171:LEU:N | 1:A:171:LEU:CA | 1:A:171:LEU:C | 1:A:172:GLU:N | 2 | 57.74 |
| (1,141) | 1:A:101:ILE:N | 1:A:101:ILE:CA | 1:A:101:ILE:C | 1:A:102:PHE:N | 19 | 57.33 |
| (1,121) | 1:A:86:ALA:C | 1:A:87:ASP:N | 1:A:87:ASP:CA | 1:A:87:ASP:C | 8 | 56.98 |
| (1,256) | 1:A:171:LEU:N | 1:A:171:LEU:CA | 1:A:171:LEU:C | 1:A:172:GLU:N | 18 | 56.81 |
| (1,214) | 1:A:143:GLY:N | 1:A:143:GLY:CA | 1:A:143:GLY:C | 1:A:144:PRO:N | 1 | 56.74 |
| (+,4++) | | | | | | |
| (1,214) $(1,141)$ | 1:A:101:ILE:N | 1:A:101:ILE:CA | 1:A:101:ILE:C | 1:A:102:PHE:N | 3 | 56.69 |



| | 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) |
|--|-------|---|----------------|---------------|--------------|-------|-----------------|
| (1.214) | | | | | | | , , |
| (1.214) | · · / | | | | | | |
| (1.196) I.A.; I.B.; I.A.; | · · / | | | | | | |
| (1,141) 1:A-101:ILEN | / | | | | | | |
| (1,196 | () / | | | | | | |
| (1,141) 1:A:36:ALA:C | / | | | | | | |
| (1,44) | · · / | | | | | | |
| (1,256 1:A:57:VALC 1:A:58:ASP:A 1:A:58:ASP:C 1:A:58:ASP:C 8 54.86 (1,256 1:A:171:LEU:N 1:A:171:LEU:C 1:A:171:LEU:C 1:A:172:GU:N 10 54.22 (1,256 1:A:171:LEU:N 1:A:95:TRP:C 1:A:95:TRP:C 1:A:95:GU:N 4 54.09 (1,256 1:A:171:LEU:N 1:A:171:LEU:C 1:A:171:LEU:C 1:A:172:GU:N 4 54.09 (1,256 1:A:171:LEU:N 1:A:171:LEU:C 1:A:171:LEU:C 1:A:172:GU:N 4 54.05 (1,233 1:A:95:TRP:N 1:A:95:TRP:C 1:A:95:TRP:C 1:A:96:GU:N 16 53.97 (1,256 1:A:171:LEU:N 1:A:171:LEU:C 1:A:171:LEU:C 1:A:172:GU:N 20 53.86 (1,213 1:A:42:GIY:C 1:A:143:GIY:C 1:A:143:GIY:C 3 53.51 (1,230 1:A:36:LEU:N 1:A:36:LEU:C 1:A:143:GIY:C 1:A:143:GIY:C 3 53.51 (1,30 1:A:36:LEU:N 1:A:36:LEU:C 1:A:36:ABP:C 1:A:36:ABP:C 3 53.51 (1,30 1:A:36:LEU:N 1:A:101:ILE:C 1:A:171:LEU:C 1:A:171:LE | · · / | 1:A:101:ILE:N | | 1:A:101:ILE:C | | | |
| (1,256) | · · / | 1:A:57:VAL:C | | | | | |
| (1,33) 1:A-95:TRP-N | · · / | 1:A:171:LEU:N | 1:A:171:LEU:CA | | | | |
| | · · / | | | | | | |
| (1,256) 1:A:195:TRP:N 1:A:96:TRP:CA 1:A:95:TRP:C 1:A:96:GLU:N 16 53.97 | (, , | | | | | | |
| (1,256) | (' / | | | | | | |
| (1,213) 1:A:142:GLY:C | (' / | | | | | | |
| (1,30) | (' / | | | | | | |
| | (, , | | | | | | |
| (1,63) 1:A:57:VAL:C 1:A:58:ASP:N 1:A:58:ASP:CA 1:A:58:ASP:C 1 52.71 | · · / | | | | | | |
| (1,256) 1:A:171:LEU:N | · · / | | | | | | |
| (1,196) 1:A:131:GLY:N 1:A:131:GLY:CA 1:A:131:GLY:C 1:A:132:PHE:N 6 52.2 (1,63) 1:A:57:VAL:C 1:A:58:ASP:N 1:A:58:ASP:CA 1:A:332:PHE:N 6 52.17 (1,196) 1:A:131:GLY:N 1:A:131:GLY:CA 1:A:131:GLY:C 1:A:32:PHE:N 4 51.73 (1,141) 1:A:101:ILE:N 1:A:101:ILE:CA 1:A:101:ILE:C 1:A:102:PHE:N 8 51.37 (1,41) 1:A:101:ILE:N 1:A:101:ILE:CA 1:A:101:ILE:C 1:A:102:PHE:N 6 51.31 (1,63) 1:A:57:VAL:C 1:A:58:ASP:N 1:A:58:ASP:CA 1:A:102:PHE:N 6 51.31 (1,141) 1:A:101:ILE:C 1:A:101:ILE:C 1:A:102:PHE:N 17 50.84 (1,141) 1:A:131:GLY:N 1:A:131:GLY:CA 1:A:131:GLY:C 1:A:36:DEPHE:N 17 50.84 (1,141) 1:A:131:GLY:N 1:A:131:GLY:CA 1:A:131:GLY:C 1:A:36:GUU:N 9 50.28 (1,121) 1:A:36:ALA:C 1:A:37:ASP:N 1:A:37:ASP:CA 1:A:37:ASP:C 20 <th< td=""><td>· · /</td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td></th<> | · · / | | | | | | |
| (1,63) 1:A:57:VAL:C 1:A:58:ASP:N 1:A:58:ASP:CA 1:A:58:ASP:C 5 52.17 (1,196) 1:A:131:GLY:N 1:A:131:GLY:CA 1:A:131:GLY:C 1:A:132:PHE:N 4 51.73 (1,141) 1:A:101:ILE:N 1:A:101:ILE:CA 1:A:101:ILE:C 1:A:102:PHE:N 8 51.37 (1,141) 1:A:101:ILE:N 1:A:101:ILE:CA 1:A:101:ILE:C 1:A:102:PHE:N 6 51.31 (1,63) 1:A:57:VAL:C 1:A:58:ASP:N 1:A:58:ASP:CA 1:A:58:ASP:C 20 51.17 (1,414) 1:A:101:ILE:N 1:A:101:ILE:CA 1:A:101:ILE:C 1:A:102:PHE:N 17 50.84 (1,196) 1:A:31:GLY:N 1:A:131:GLY:CA 1:A:131:GLY:C 1:A:313:GLY:N 1 50.74 (1,133) 1:A:36:ALA:C 1:A:87:ASP:N 1:A:87:ASP:CA 1:A:87:ASP:C 20 49.95 (1,121) 1:A:36:LEU:N 1:A:36:LEU:CA 1:A:31:GLY:C 1:A:37:ALA:N 7 48.14 (1,296) 1:A:31:GLY:N 1:A:31:GLY:CA 1:A:31:GLY:C 1:A:13:32:PHE:N | · · / | | | | | | |
| (1,196) 1:A:131:GLY:N 1:A:131:GLY:CA 1:A:131:GLY:C 1:A:132:PHE:N 4 51.73 (1,141) 1:A:101:ILE:N 1:A:101:ILE:CA 1:A:101:ILE:C 1:A:102:PHE:N 8 51.37 (1,141) 1:A:101:ILE:N 1:A:101:ILE:CA 1:A:101:ILE:C 1:A:102:PHE:N 6 51.31 (1,63) 1:A:57:VALC 1:A:58:ASP:N 1:A:58:ASP:CA 1:A:45:ASP:C 20 51.17 (1,141) 1:A:310:ILE:N 1:A:101:ILE:CA 1:A:101:ILE:C 1:A:102:PHE:N 17 50.84 (1,196) 1:A:31:GLY:N 1:A:131:GLY:CA 1:A:30:ILE:C 1:A:30:Q:PHE:N 17 50.84 (1,196) 1:A:31:GLY:N 1:A:131:GLY:CA 1:A:313:GLY:C 1:A:36:GLU:N 9 50.28 (1,121) 1:A:86:ALA:C 1:A:87:ASP:N 1:A:87:ASP:CA 1:A:87:ASP:C 20 49.95 (1,121) 1:A:36:LEU:N 1:A:36:LEU:CA 1:A:37:ALA:N 7 48.31 (1,256) 1:A:171:LEU:N 1:A:171:LEU:CA 1:A:171:LEU:C 1:A:171:LEU:C 1:A:171:LEU:C <td>· · /</td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> | · · / | | | | | | |
| (1,141) 1:A:101:ILE:N 1:A:101:ILE:CA 1:A:101:ILE:C 1:A:102:PHE:N 8 51.37 (1,141) 1:A:101:ILE:N 1:A:101:ILE:CA 1:A:101:ILE:C 1:A:102:PHE:N 6 51.31 (1,63) 1:A:57-VAL:C 1:A:58:ASP:N 1:A:58:ASP:CA 1:A:59:TRP:CN 1:A:59:TRP:CA 1:A:495:TRP:C 1:A:496:GLU:N 9 50.28 (1,121) 1:A:86:ALA:C 1:A:87:ASP:N 1:A:87:ASP:CA 1:A:87: | · · / | | | | | | |
| (1,141) 1:A:101:ILE:N 1:A:101:ILE:CA 1:A:101:ILE:C 1:A:102:PHE:N 6 51.31 (1,63) 1:A:57:VAL:C 1:A:58:ASP:N 1:A:58:ASP:CA 1:A:58:ASP:C 20 51.17 (1,141) 1:A:101:ILE:N 1:A:101:ILE:CA 1:A:101:ILE:C 1:A:58:ASP:C 20 51.17 (1,196) 1:A:131:GLY:N 1:A:101:ILE:CA 1:A:101:ILE:C 1:A:102:PHE:N 17 50.84 (1,196) 1:A:131:GLY:N 1:A:131:GLY:CA 1:A:131:GLY:N 1 50.74 (1,133) 1:A:36:ALA:C 1:A:87:ASP:N 1:A:87:ASP:CA 1:A:87:ASP:C 20 49.95 (1,21) 1:A:86:ALA:C 1:A:87:ASP:N 1:A:87:ASP:CA 1:A:87:ASP:C 19 49.44 (1,30) 1:A:31:GLY:N 1:A:131:GLY:CA 1:A:131:GLY:C 1:A:131:GLY:N 7 48.14 (1,196) 1:A:131:GLY:N 1:A:131:GLY:CA 1:A:131:GLY:C 1:A:131:GLY:N 7 48.14 (1,121) 1:A:86:ALA:C 1:A:87:ASP:N 1:A:87:ASP:CA 1:A:87:ASP:C 17 4 | (/ / | | | | | | |
| (1,63) 1:A:57:VAL:C 1:A:58:ASP:N 1:A:58:ASP:CA 1:A:58:ASP:C 20 51.17 (1,141) 1:A:101:ILE:N 1:A:101:ILE:CA 1:A:101:ILE:C 1:A:102:PHE:N 17 50.84 (1,196) 1:A:131:GLY:N 1:A:131:GLY:CA 1:A:131:GLY:C 1:A:132:PHE:N 1 50.74 (1,133) 1:A:95:TRP:N 1:A:35:TRP:CA 1:A:495:TRP:C 1:A:496:GLU:N 9 50.28 (1,121) 1:A:86:ALA:C 1:A:87:ASP:N 1:A:87:ASP:CA 1:A:87:ASP:C 20 49.95 (1,121) 1:A:86:ALA:C 1:A:87:ASP:N 1:A:87:ASP:CA 1:A:87:ASP:C 19 49.44 (1,30) 1:A:36:LEU:N 1:A:36:LEU:CA 1:A:36:LEU:C 1:A:37:ALA:N 7 48.31 (1,256) 1:A:171:LEU:N 1:A:131:GLY:CA 1:A:131:GLY:C 1:A:37:ALA:N 7 48.14 (1,196) 1:A:31:GLY:N 1:A:31:GLY:CA 1:A:37:ALA:N 7 48.14 (1,191) 1:A:86:ALA:C 1:A:87:ASP:N 1:A:87:ASP:CA 1:A:87:ASP:C 17 47.98 <td>_ ` '</td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> | _ ` ' | | | | | | |
| (1,141) 1:A:101:ILE:N 1:A:101:ILE:CA 1:A:101:ILE:C 1:A:102:PHE:N 17 50.84 (1,196) 1:A:131:GLY:N 1:A:131:GLY:CA 1:A:131:GLY:C 1:A:132:PHE:N 1 50.74 (1,133) 1:A:95:TRP:N 1:A:95:TRP:CA 1:A:95:TRP:C 1:A:96:GU:N 9 50.28 (1,121) 1:A:86:ALA:C 1:A:87:ASP:N 1:A:87:ASP:CA 1:A:487:ASP:C 20 49.95 (1,121) 1:A:86:ALA:C 1:A:87:ASP:N 1:A:87:ASP:CA 1:A:87:ASP:C 20 49.95 (1,211) 1:A:86:ALA:C 1:A:87:ASP:N 1:A:87:ASP:CA 1:A:87:ASP:C 19 49.44 (1,30) 1:A:36:LEU:N 1:A:171:LEU:CA 1:A:171:LEU:C 1:A:172:GLU:N 7 48.31 (1,256) 1:A:171:LEU:N 1:A:131:GLY:CA 1:A:131:GLY:C 1:A:131:GLY:N 7 48.14 (1,196) 1:A:36:ALA:C 1:A:87:ASP:N 1:A:87:ASP:CA 1:A:87:ASP:C 17 47.98 (1,141) 1:A:101:ILE:N 1:A:101:ILE:CA 1:A:101:ILE:C 1:A:87:ASP:C | / | | | | | | |
| (1,196) 1:A:131:GLY:N 1:A:131:GLY:CA 1:A:131:GLY:C 1:A:132:PHE:N 1 50.74 (1,133) 1:A:95:TRP:N 1:A:95:TRP:CA 1:A:95:TRP:C 1:A:96:GLU:N 9 50.28 (1,121) 1:A:86:ALA:C 1:A:87:ASP:N 1:A:87:ASP:CA 1:A:87:ASP:C 20 49.95 (1,121) 1:A:86:ALA:C 1:A:87:ASP:N 1:A:87:ASP:CA 1:A:87:ASP:C 20 49.95 (1,121) 1:A:86:ALA:C 1:A:87:ASP:N 1:A:87:ASP:CA 1:A:87:ASP:C 19 49.44 (1,30) 1:A:36:LEU:CA 1:A:36:LEU:CA 1:A:36:LEU:C 1:A:37:ALA:N 7 48.31 (1,256) 1:A:171:LEU:N 1:A:171:LEU:CA 1:A:311:GLY:C 1:A:312:PHE:N 7 48.14 (1,196) 1:A:31:GLY:N 1:A:31:GLY:CA 1:A:31:GLY:C 1:A:487:ASP:C 17 47.98 (1,121) 1:A:86:ALA:C 1:A:87:ASP:N 1:A:87:ASP:CA 1:A:87:ASP:C 17 47.96 (1,141) 1:A:101:ILE:N 1:A:101:ILE:CA 1:A:101:ILE:C 1:A:101:ILE:C | _ ` ′ | | | | | | |
| (1,133) 1:A:95:TRP:N 1:A:95:TRP:CA 1:A:95:TRP:C 1:A:96:GLU:N 9 50.28 (1,121) 1:A:86:ALA:C 1:A:87:ASP:N 1:A:87:ASP:CA 1:A:87:ASP:C 20 49.95 (1,121) 1:A:86:ALA:C 1:A:87:ASP:N 1:A:87:ASP:CA 1:A:87:ASP:C 20 49.95 (1,121) 1:A:86:ALA:C 1:A:87:ASP:N 1:A:87:ASP:CA 1:A:87:ASP:C 19 49.44 (1,300) 1:A:36:LEU:N 1:A:36:LEU:CA 1:A:36:LEU:C 1:A:37:ALA:N 7 48.31 (1,256) 1:A:171:LEU:N 1:A:171:LEU:CA 1:A:171:LEU:C 1:A:37:ALA:N 7 48.14 (1,196) 1:A:31:GLY:N 1:A:131:GLY:CA 1:A:131:GLY:C 1:A:31:GLY:N 7 48.14 (1,121) 1:A:86:ALA:C 1:A:87:ASP:N 1:A:87:ASP:CA 1:A:87:ASP:C 17 47.98 (1,121) 1:A:86:ALA:C 1:A:31:GLY:CA 1:A:31:GLY:C 1:A:37:ASP:C 7 47.76 (1,141) 1:A:101:LE:N 1:A:31:GLY:CA 1:A:31:GLY:C 1:A:37:ASP:C 7 <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> | | | | | | | |
| (1,121) 1:A:86:ALA:C 1:A:87:ASP:N 1:A:87:ASP:CA 1:A:87:ASP:C 20 49.95 (1,121) 1:A:86:ALA:C 1:A:87:ASP:N 1:A:87:ASP:CA 1:A:87:ASP:C 19 49.44 (1,30) 1:A:36:LEU:N 1:A:36:LEU:CA 1:A:36:LEU:C 1:A:37:ALA:N 7 48.31 (1,256) 1:A:171:LEU:N 1:A:171:LEU:CA 1:A:31:GLY:C 1:A:171:LEU:N 7 48.14 (1,196) 1:A:131:GLY:N 1:A:131:GLY:CA 1:A:131:GLY:C 1:A:131:QLY:D 7 48.14 (1,121) 1:A:86:ALA:C 1:A:87:ASP:N 1:A:87:ASP:CA 1:A:87:ASP:C 17 47.98 (1,121) 1:A:86:ALA:C 1:A:87:ASP:N 1:A:87:ASP:CA 1:A:87:ASP:C 7 47.76 (1,141) 1:A:101:ILE:N 1:A:101:ILE:CA 1:A:101:ILE:C 1:A:102:PHE:N 13 47.42 (1,23) 1:A:57:VAL:C 1:A:36:LEU:CA 1:A:36:LEU:C 1:A:37:ALA:N 3 46.54 (1,411) 1:A:101:ILE:N 1:A:143:GLY:CA 1:A:143:GLY:CA 1:A:143:GLY:CA | | | | | | | |
| (1,121) 1:A:86:ALA:C 1:A:87:ASP:N 1:A:87:ASP:CA 1:A:87:ASP:C 19 49.44 (1,30) 1:A:36:LEU:N 1:A:36:LEU:CA 1:A:36:LEU:C 1:A:37:ALA:N 7 48.31 (1,256) 1:A:171:LEU:N 1:A:171:LEU:CA 1:A:171:LEU:C 1:A:172:GLU:N 7 48.14 (1,196) 1:A:131:GLY:N 1:A:131:GLY:CA 1:A:131:GLY:C 1:A:132:PHE:N 7 48.14 (1,121) 1:A:86:ALA:C 1:A:87:ASP:N 1:A:87:ASP:CA 1:A:87:ASP:C 17 47.98 (1,121) 1:A:86:ALA:C 1:A:87:ASP:N 1:A:87:ASP:CA 1:A:87:ASP:C 7 47.76 (1,141) 1:A:101:ILE:N 1:A:101:ILE:CA 1:A:101:ILE:C 1:A:301:ILE:C 1:A:42 (1,20) 1:A:31:GLY:N 1:A:36:LEU:CA 1:A:36:LEU:C 1:A:35:ASP:C 16 47.01 (1,30) 1:A:36:LEU:N 1:A:36:LEU:CA 1:A:36:LEU:C 1:A:37:ALA:N 3 46.54 (1,141) 1:A:101:ILE:N 1:A:101:ILE:CA 1:A:101:ILE:C 1:A:143:GLY:C 18 | (, , | | | | | | |
| (1,30) 1:A:36:LEU:N 1:A:36:LEU:CA 1:A:36:LEU:C 1:A:37:ALA:N 7 48.31 (1,256) 1:A:171:LEU:N 1:A:171:LEU:CA 1:A:171:LEU:C 1:A:172:GLU:N 7 48.14 (1,196) 1:A:131:GLY:N 1:A:131:GLY:CA 1:A:131:GLY:C 1:A:33:PHE:N 7 48.14 (1,121) 1:A:86:ALA:C 1:A:87:ASP:N 1:A:87:ASP:CA 1:A:87:ASP:C 17 47.98 (1,121) 1:A:86:ALA:C 1:A:87:ASP:N 1:A:87:ASP:CA 1:A:87:ASP:C 7 47.76 (1,141) 1:A:101:ILE:N 1:A:101:ILE:CA 1:A:101:ILE:C 1:A:102:PHE:N 13 47.42 (1,20) 1:A:31:GLY:N 1:A:36:ILE:CA 1:A:36:ILE:C 1:A:32:LYS:N 4 47.35 (1,30) 1:A:36:LEU:N 1:A:36:LEU:CA 1:A:36:LEU:C 1:A:37:ALA:N 3 46.54 (1,141) 1:A:101:ILE:N 1:A:101:ILE:CA 1:A:101:ILE:C 1:A:102:PHE:N 15 46.45 (1,213) 1:A:142:GLY:C 1:A:143:GLY:N 1:A:143:GLY:CA 1:A:143:GLY:C | (' / | | | | | 19 | |
| (1,256) 1:A:171:LEU:N 1:A:171:LEU:CA 1:A:171:LEU:C 1:A:172:GLU:N 7 48.14 (1,196) 1:A:131:GLY:N 1:A:131:GLY:CA 1:A:131:GLY:C 1:A:132:PHE:N 7 48.14 (1,121) 1:A:86:ALA:C 1:A:87:ASP:N 1:A:87:ASP:CA 1:A:87:ASP:C 17 47.98 (1,121) 1:A:86:ALA:C 1:A:87:ASP:N 1:A:87:ASP:CA 1:A:87:ASP:C 7 47.76 (1,141) 1:A:101:ILE:N 1:A:101:ILE:CA 1:A:101:ILE:C 1:A:4102:PHE:N 13 47.42 (1,20) 1:A:31:GLY:N 1:A:31:GLY:CA 1:A:31:GLY:C 1:A:32:LYS:N 4 47.35 (1,63) 1:A:57:VAL:C 1:A:58:ASP:N 1:A:58:ASP:CA 1:A:58:ASP:C 16 47.01 (1,30) 1:A:36:LEU:N 1:A:36:LEU:CA 1:A:31:GLY:C 1:A:31:GLY:CA 1:A:4101:ILE:C 1:A:4102:PHE:N 3 46.54 (1,213) 1:A:142:GLY:C 1:A:143:GLY:CA 1:A:4143:GLY:CA 1:A:4143:GLY:CA 1:A:4143:GLY:C 18 46.44 (1,213) 1:A:131:GLY:C <td>(' /</td> <td>1:A:36:LEU:N</td> <td>1:A:36:LEU:CA</td> <td>1:A:36:LEU:C</td> <td></td> <td>7</td> <td>48.31</td> | (' / | 1:A:36:LEU:N | 1:A:36:LEU:CA | 1:A:36:LEU:C | | 7 | 48.31 |
| (1,196) 1:A:131:GLY:N 1:A:131:GLY:CA 1:A:131:GLY:C 1:A:132:PHE:N 7 48.14 (1,121) 1:A:86:ALA:C 1:A:87:ASP:N 1:A:87:ASP:CA 1:A:87:ASP:C 17 47.98 (1,121) 1:A:86:ALA:C 1:A:87:ASP:N 1:A:87:ASP:CA 1:A:87:ASP:C 7 47.76 (1,141) 1:A:101:ILE:N 1:A:101:ILE:CA 1:A:101:ILE:C 1:A:102:PHE:N 13 47.42 (1,20) 1:A:31:GLY:N 1:A:31:GLY:CA 1:A:31:GLY:C 1:A:32:LYS:N 4 47.35 (1,63) 1:A:57:VAL:C 1:A:58:ASP:N 1:A:58:ASP:CA 1:A:58:ASP:C 16 47.01 (1,30) 1:A:36:LEU:N 1:A:46:LEU:CA 1:A:101:ILE:C 1:A:37:ALA:N 3 46.54 (1,141) 1:A:101:ILE:N 1:A:101:ILE:CA 1:A:101:ILE:C 1:A:102:PHE:N 15 46.45 (1,213) 1:A:142:GLY:C 1:A:143:GLY:N 1:A:143:GLY:CA 1:A:143:GLY:CA 1:A:143:GLY:C 1 46.12 (1,196) 1:A:131:GLY:N 1:A:131:GLY:CA 1:A:131:GLY:C | · · / | 1:A:171:LEU:N | 1:A:171:LEU:CA | 1:A:171:LEU:C | | 7 | |
| (1,121) 1:A:86:ALA:C 1:A:87:ASP:N 1:A:87:ASP:CA 1:A:87:ASP:C 17 47.98 (1,121) 1:A:86:ALA:C 1:A:87:ASP:N 1:A:87:ASP:CA 1:A:87:ASP:C 7 47.76 (1,141) 1:A:101:ILE:N 1:A:101:ILE:CA 1:A:101:ILE:C 1:A:102:PHE:N 13 47.42 (1,20) 1:A:31:GLY:N 1:A:31:GLY:CA 1:A:31:GLY:C 1:A:32:LYS:N 4 47.35 (1,63) 1:A:57:VAL:C 1:A:58:ASP:N 1:A:58:ASP:CA 1:A:58:ASP:C 16 47.01 (1,30) 1:A:36:LEU:N 1:A:36:LEU:CA 1:A:36:LEU:C 1:A:37:ALA:N 3 46.54 (1,141) 1:A:101:ILE:N 1:A:101:ILE:CA 1:A:101:ILE:C 1:A:102:PHE:N 15 46.45 (1,213) 1:A:412:GLY:C 1:A:143:GLY:N 1:A:143:GLY:CA 1:A:143:GLY:CA 1:A:143:GLY:C 17 46.02 (1,196) 1:A:131:GLY:N 1:A:131:GLY:CA 1:A:131:GLY:CA 1:A:131:GLY:CA 1:A:131:GLY:CA 1:A:131:GLY:CA 1:A:131:GLY:CA 1:A:131:GLY:CA 1:A:131:GLY:CA 1:A:131:G | (' / | | | | | 7 | 48.14 |
| (1,121) 1:A:86:ALA:C 1:A:87:ASP:N 1:A:87:ASP:CA 1:A:87:ASP:C 7 47.76 (1,141) 1:A:101:ILE:N 1:A:101:ILE:CA 1:A:101:ILE:C 1:A:102:PHE:N 13 47.42 (1,20) 1:A:31:GLY:N 1:A:31:GLY:CA 1:A:31:GLY:C 1:A:32:LYS:N 4 47.35 (1,63) 1:A:57:VAL:C 1:A:58:ASP:N 1:A:58:ASP:CA 1:A:58:ASP:C 16 47.01 (1,30) 1:A:36:LEU:N 1:A:36:LEU:CA 1:A:36:LEU:C 1:A:37:ALA:N 3 46.54 (1,141) 1:A:101:ILE:N 1:A:101:ILE:CA 1:A:101:ILE:C 1:A:102:PHE:N 15 46.45 (1,213) 1:A:142:GLY:C 1:A:143:GLY:N 1:A:143:GLY:CA 1:A:143:GLY:C 18 46.44 (1,213) 1:A:142:GLY:C 1:A:143:GLY:N 1:A:143:GLY:CA 1:A:143:GLY:CA 1:A:143:GLY:C 17 46.12 (1,196) 1:A:131:GLY:N 1:A:83:SER:N 1:A:83:SER:CA 1:A:132:PHE:N 17 46.0 (1,141) 1:A:131:GLY:N 1:A:131:GLY:CA 1:A:131:GLY:C | · · / | 1:A:86:ALA:C | 1:A:87:ASP:N | 1:A:87:ASP:CA | 1:A:87:ASP:C | 17 | 47.98 |
| (1,141) 1:A:101:ILE:N 1:A:101:ILE:CA 1:A:101:ILE:C 1:A:102:PHE:N 13 47.42 (1,20) 1:A:31:GLY:N 1:A:31:GLY:CA 1:A:31:GLY:C 1:A:32:LYS:N 4 47.35 (1,63) 1:A:57:VAL:C 1:A:58:ASP:N 1:A:58:ASP:CA 1:A:58:ASP:C 16 47.01 (1,30) 1:A:36:LEU:N 1:A:36:LEU:CA 1:A:36:LEU:C 1:A:37:ALA:N 3 46.54 (1,141) 1:A:101:ILE:N 1:A:101:ILE:CA 1:A:101:ILE:C 1:A:102:PHE:N 15 46.45 (1,213) 1:A:142:GLY:C 1:A:143:GLY:N 1:A:143:GLY:CA 1:A:143:GLY:C 18 46.44 (1,213) 1:A:142:GLY:C 1:A:143:GLY:N 1:A:143:GLY:CA 1:A:143:GLY:C 17 46.12 (1,196) 1:A:131:GLY:N 1:A:131:GLY:CA 1:A:131:GLY:C 1:A:131:GLY:CA 1:A:83:SER:C 10 45.99 (1,141) 1:A:101:ILE:N 1:A:101:ILE:CA 1:A:101:ILE:C 1:A:131:GLY:CA 1:A:131:GLY:CA 1:A:131:GLY:CA 1:A:131:GLY:CA 1:A:143:GLY:CA 1:A:143:GLY:CA 1: | | 1:A:86:ALA:C | 1:A:87:ASP:N | 1:A:87:ASP:CA | 1:A:87:ASP:C | 7 | 47.76 |
| (1,20) 1:A:31:GLY:N 1:A:31:GLY:CA 1:A:31:GLY:C 1:A:32:LYS:N 4 47.35 (1,63) 1:A:57:VAL:C 1:A:58:ASP:N 1:A:58:ASP:CA 1:A:58:ASP:C 16 47.01 (1,30) 1:A:36:LEU:N 1:A:36:LEU:CA 1:A:36:LEU:C 1:A:37:ALA:N 3 46.54 (1,141) 1:A:101:ILE:N 1:A:101:ILE:CA 1:A:101:ILE:C 1:A:102:PHE:N 15 46.45 (1,213) 1:A:142:GLY:C 1:A:143:GLY:N 1:A:143:GLY:CA 1:A:143:GLY:C 18 46.44 (1,213) 1:A:142:GLY:C 1:A:143:GLY:N 1:A:143:GLY:CA 1:A:143:GLY:C 17 46.12 (1,196) 1:A:131:GLY:N 1:A:131:GLY:CA 1:A:131:GLY:C 1:A:132:PHE:N 17 46.0 (1,113) 1:A:82:GLN:C 1:A:83:SER:N 1:A:83:SER:CA 1:A:83:SER:C 10 45.99 (1,414) 1:A:101:ILE:N 1:A:101:ILE:CA 1:A:101:ILE:C 1:A:102:PHE:N 18 45.51 (1,196) 1:A:131:GLY:N 1:A:131:GLY:C 1:A:132:PHE:N 13 <td< td=""><td></td><td></td><td></td><td>1:A:101:ILE:C</td><td></td><td>13</td><td></td></td<> | | | | 1:A:101:ILE:C | | 13 | |
| (1,63) 1:A:57:VAL:C 1:A:58:ASP:N 1:A:58:ASP:CA 1:A:58:ASP:C 16 47.01 (1,30) 1:A:36:LEU:N 1:A:36:LEU:CA 1:A:36:LEU:C 1:A:37:ALA:N 3 46.54 (1,141) 1:A:101:ILE:N 1:A:101:ILE:CA 1:A:101:ILE:C 1:A:102:PHE:N 15 46.45 (1,213) 1:A:142:GLY:C 1:A:143:GLY:N 1:A:143:GLY:CA 1:A:143:GLY:C 18 46.44 (1,213) 1:A:142:GLY:C 1:A:143:GLY:N 1:A:143:GLY:CA 1:A:143:GLY:C 17 46.12 (1,196) 1:A:131:GLY:N 1:A:131:GLY:CA 1:A:131:GLY:C 1:A:83:SER:C 10 45.99 (1,141) 1:A:101:ILE:N 1:A:101:ILE:CA 1:A:101:ILE:C 1:A:102:PHE:N 18 45.51 (1,196) 1:A:131:GLY:N 1:A:131:GLY:CA 1:A:131:GLY:C 1:A:132:PHE:N 13 45.39 (1,177) 1:A:121:LEU:N 1:A:131:GLY:CA 1:A:121:LEU:C 1:A:144:PRO:N 7 44.79 (1,30) 1:A:36:LEU:N 1:A:171:LEU:CA 1:A:171:LEU:C 1:A:171:LEU | · · / | 1:A:31:GLY:N | 1:A:31:GLY:CA | 1:A:31:GLY:C | 1:A:32:LYS:N | 4 | 47.35 |
| (1,30) 1:A:36:LEU:N 1:A:36:LEU:CA 1:A:36:LEU:C 1:A:37:ALA:N 3 46.54 (1,141) 1:A:101:ILE:N 1:A:101:ILE:CA 1:A:101:ILE:C 1:A:102:PHE:N 15 46.45 (1,213) 1:A:142:GLY:C 1:A:143:GLY:N 1:A:143:GLY:CA 1:A:143:GLY:C 18 46.44 (1,213) 1:A:142:GLY:C 1:A:143:GLY:N 1:A:143:GLY:CA 1:A:143:GLY:C 17 46.12 (1,196) 1:A:131:GLY:N 1:A:131:GLY:CA 1:A:131:GLY:C 1:A:132:PHE:N 17 46.0 (1,113) 1:A:82:GLN:C 1:A:83:SER:N 1:A:83:SER:CA 1:A:83:SER:C 10 45.99 (1,141) 1:A:101:ILE:N 1:A:101:ILE:CA 1:A:101:ILE:C 1:A:102:PHE:N 18 45.51 (1,196) 1:A:131:GLY:N 1:A:131:GLY:CA 1:A:131:GLY:C 1:A:132:PHE:N 13 45.39 (1,177) 1:A:121:LEU:N 1:A:121:LEU:CA 1:A:143:GLY:C 1:A:142:LEU:C 1:A:144:PRO:N 7 44.79 (1,30) 1:A:36:LEU:N 1:A:171:LEU:CA 1:A:171:LE | . , | 1:A:57:VAL:C | 1:A:58:ASP:N | 1:A:58:ASP:CA | 1:A:58:ASP:C | 16 | 47.01 |
| (1,141) 1:A:101:ILE:N 1:A:101:ILE:CA 1:A:101:ILE:C 1:A:102:PHE:N 15 46.45 (1,213) 1:A:142:GLY:C 1:A:143:GLY:N 1:A:143:GLY:CA 1:A:143:GLY:C 18 46.44 (1,213) 1:A:142:GLY:C 1:A:143:GLY:N 1:A:143:GLY:CA 1:A:143:GLY:C 17 46.12 (1,196) 1:A:131:GLY:N 1:A:131:GLY:CA 1:A:131:GLY:C 1:A:132:PHE:N 17 46.0 (1,113) 1:A:82:GLN:C 1:A:83:SER:N 1:A:83:SER:CA 1:A:83:SER:C 10 45.99 (1,141) 1:A:101:ILE:N 1:A:101:ILE:CA 1:A:101:ILE:C 1:A:102:PHE:N 18 45.51 (1,196) 1:A:131:GLY:N 1:A:131:GLY:CA 1:A:131:GLY:C 1:A:132:PHE:N 13 45.39 (1,177) 1:A:121:LEU:N 1:A:121:LEU:CA 1:A:121:LEU:C 1:A:122:LYS:N 17 45.28 (1,214) 1:A:143:GLY:N 1:A:143:GLY:CA 1:A:143:GLY:C 1:A:144:PRO:N 7 44.79 (1,30) 1:A:36:LEU:N 1:A:171:LEU:CA 1:A:171:LEU:C 1:A: | · · / | 1:A:36:LEU:N | 1:A:36:LEU:CA | 1:A:36:LEU:C | 1:A:37:ALA:N | 3 | 46.54 |
| (1,213) 1:A:142:GLY:C 1:A:143:GLY:N 1:A:143:GLY:CA 1:A:143:GLY:C 18 46.44 (1,213) 1:A:142:GLY:C 1:A:143:GLY:N 1:A:143:GLY:CA 1:A:143:GLY:C 17 46.12 (1,196) 1:A:131:GLY:N 1:A:131:GLY:CA 1:A:131:GLY:C 1:A:132:PHE:N 17 46.0 (1,113) 1:A:82:GLN:C 1:A:83:SER:N 1:A:83:SER:CA 1:A:83:SER:C 10 45.99 (1,141) 1:A:101:ILE:N 1:A:101:ILE:CA 1:A:101:ILE:C 1:A:102:PHE:N 18 45.51 (1,196) 1:A:131:GLY:N 1:A:131:GLY:CA 1:A:131:GLY:C 1:A:132:PHE:N 13 45.39 (1,177) 1:A:121:LEU:N 1:A:131:GLY:CA 1:A:131:GLY:C 1:A:122:LYS:N 17 45.28 (1,214) 1:A:143:GLY:N 1:A:143:GLY:CA 1:A:143:GLY:C 1:A:144:PRO:N 7 44.79 (1,30) 1:A:36:LEU:N 1:A:171:LEU:CA 1:A:171:LEU:C 1:A:172:GLU:N 12 43.36 | | | | | | | |
| (1,213) 1:A:142:GLY:C 1:A:143:GLY:N 1:A:143:GLY:CA 1:A:143:GLY:C 17 46.12 (1,196) 1:A:131:GLY:N 1:A:131:GLY:CA 1:A:131:GLY:C 1:A:132:PHE:N 17 46.0 (1,113) 1:A:82:GLN:C 1:A:83:SER:N 1:A:83:SER:CA 1:A:83:SER:C 10 45.99 (1,141) 1:A:101:ILE:N 1:A:101:ILE:CA 1:A:101:ILE:C 1:A:102:PHE:N 18 45.51 (1,196) 1:A:131:GLY:N 1:A:131:GLY:CA 1:A:131:GLY:C 1:A:132:PHE:N 13 45.39 (1,177) 1:A:121:LEU:N 1:A:121:LEU:CA 1:A:121:LEU:C 1:A:122:LYS:N 17 45.28 (1,214) 1:A:143:GLY:N 1:A:143:GLY:CA 1:A:143:GLY:C 1:A:144:PRO:N 7 44.79 (1,30) 1:A:36:LEU:N 1:A:36:LEU:CA 1:A:37:ALA:N 4 44.31 (1,256) 1:A:171:LEU:N 1:A:171:LEU:CA 1:A:171:LEU:C 1:A:172:GLU:N 12 43.36 | | | | | | | |
| (1,196) 1:A:131:GLY:N 1:A:131:GLY:CA 1:A:131:GLY:C 1:A:132:PHE:N 17 46.0 (1,113) 1:A:82:GLN:C 1:A:83:SER:N 1:A:83:SER:CA 1:A:83:SER:C 10 45.99 (1,141) 1:A:101:ILE:N 1:A:101:ILE:CA 1:A:101:ILE:C 1:A:102:PHE:N 18 45.51 (1,196) 1:A:131:GLY:N 1:A:131:GLY:CA 1:A:131:GLY:C 1:A:132:PHE:N 13 45.39 (1,177) 1:A:121:LEU:N 1:A:121:LEU:CA 1:A:121:LEU:C 1:A:122:LYS:N 17 45.28 (1,214) 1:A:143:GLY:N 1:A:143:GLY:CA 1:A:143:GLY:C 1:A:144:PRO:N 7 44.79 (1,30) 1:A:36:LEU:N 1:A:36:LEU:CA 1:A:37:ALA:N 4 44.31 (1,256) 1:A:171:LEU:N 1:A:171:LEU:CA 1:A:171:LEU:C 1:A:172:GLU:N 12 43.36 | | | | | | | |
| (1,113) 1:A:82:GLN:C 1:A:83:SER:N 1:A:83:SER:CA 1:A:83:SER:C 10 45.99 (1,141) 1:A:101:ILE:N 1:A:101:ILE:CA 1:A:101:ILE:C 1:A:102:PHE:N 18 45.51 (1,196) 1:A:131:GLY:N 1:A:131:GLY:CA 1:A:131:GLY:C 1:A:132:PHE:N 13 45.39 (1,177) 1:A:121:LEU:N 1:A:121:LEU:CA 1:A:121:LEU:C 1:A:122:LYS:N 17 45.28 (1,214) 1:A:143:GLY:N 1:A:143:GLY:CA 1:A:143:GLY:C 1:A:144:PRO:N 7 44.79 (1,30) 1:A:36:LEU:N 1:A:36:LEU:CA 1:A:36:LEU:C 1:A:37:ALA:N 4 44.31 (1,256) 1:A:171:LEU:N 1:A:171:LEU:CA 1:A:171:LEU:C 1:A:171:LEU:N 12 43.36 | | | | | | | |
| (1,141) 1:A:101:ILE:N 1:A:101:ILE:CA 1:A:101:ILE:C 1:A:102:PHE:N 18 45.51 (1,196) 1:A:131:GLY:N 1:A:131:GLY:CA 1:A:131:GLY:C 1:A:132:PHE:N 13 45.39 (1,177) 1:A:121:LEU:N 1:A:121:LEU:CA 1:A:121:LEU:C 1:A:122:LYS:N 17 45.28 (1,214) 1:A:143:GLY:N 1:A:143:GLY:CA 1:A:143:GLY:C 1:A:144:PRO:N 7 44.79 (1,30) 1:A:36:LEU:N 1:A:36:LEU:CA 1:A:36:LEU:C 1:A:37:ALA:N 4 44.31 (1,256) 1:A:171:LEU:N 1:A:171:LEU:CA 1:A:171:LEU:C 1:A:172:GLU:N 12 43.36 | _ ` ' | | | | | | |
| (1,196) 1:A:131:GLY:N 1:A:131:GLY:CA 1:A:131:GLY:C 1:A:132:PHE:N 13 45.39 (1,177) 1:A:121:LEU:N 1:A:121:LEU:CA 1:A:121:LEU:C 1:A:122:LYS:N 17 45.28 (1,214) 1:A:143:GLY:N 1:A:143:GLY:CA 1:A:143:GLY:C 1:A:144:PRO:N 7 44.79 (1,30) 1:A:36:LEU:N 1:A:36:LEU:CA 1:A:36:LEU:C 1:A:37:ALA:N 4 44.31 (1,256) 1:A:171:LEU:N 1:A:171:LEU:CA 1:A:171:LEU:C 1:A:172:GLU:N 12 43.36 | | | | | | | |
| (1,177) 1:A:121:LEU:N 1:A:121:LEU:CA 1:A:121:LEU:C 1:A:122:LYS:N 17 45.28 (1,214) 1:A:143:GLY:N 1:A:143:GLY:CA 1:A:143:GLY:C 1:A:144:PRO:N 7 44.79 (1,30) 1:A:36:LEU:N 1:A:36:LEU:CA 1:A:36:LEU:C 1:A:37:ALA:N 4 44.31 (1,256) 1:A:171:LEU:N 1:A:171:LEU:CA 1:A:171:LEU:C 1:A:172:GLU:N 12 43.36 | | | | | | | |
| (1,214) 1:A:143:GLY:N 1:A:143:GLY:CA 1:A:143:GLY:C 1:A:144:PRO:N 7 44.79 (1,30) 1:A:36:LEU:N 1:A:36:LEU:CA 1:A:36:LEU:C 1:A:37:ALA:N 4 44.31 (1,256) 1:A:171:LEU:N 1:A:171:LEU:CA 1:A:171:LEU:C 1:A:172:GLU:N 12 43.36 | | | | | | | |
| (1,30) 1:A:36:LEU:N 1:A:36:LEU:CA 1:A:36:LEU:C 1:A:37:ALA:N 4 44.31 (1,256) 1:A:171:LEU:N 1:A:171:LEU:CA 1:A:171:LEU:C 1:A:172:GLU:N 12 43.36 | · · / | | | | | | |
| (1,256) 1:A:171:LEU:N 1:A:171:LEU:CA 1:A:171:LEU:C 1:A:172:GLU:N 12 43.36 | (' / | | | | | | |
| | · · / | | | | | | |
| | · · / | | | | | | |



| | ed from previous pe | | | | | |
|---------|---------------------|----------------|----------------|---------------|-------|---------------------|
| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model | Violation (\circ) |
| (1,133) | 1:A:95:TRP:N | 1:A:95:TRP:CA | 1:A:95:TRP:C | 1:A:96:GLU:N | 17 | 43.28 |
| (1,196) | 1:A:131:GLY:N | 1:A:131:GLY:CA | 1:A:131:GLY:C | 1:A:132:PHE:N | 2 | 43.06 |
| (1,121) | 1:A:86:ALA:C | 1:A:87:ASP:N | 1:A:87:ASP:CA | 1:A:87:ASP:C | 14 | 43.06 |
| (1,256) | 1:A:171:LEU:N | 1:A:171:LEU:CA | 1:A:171:LEU:C | 1:A:172:GLU:N | 19 | 43.04 |
| (1,196) | 1:A:131:GLY:N | 1:A:131:GLY:CA | 1:A:131:GLY:C | 1:A:132:PHE:N | 3 | 42.28 |
| (1,196) | 1:A:131:GLY:N | 1:A:131:GLY:CA | 1:A:131:GLY:C | 1:A:132:PHE:N | 14 | 42.27 |
| (1,196) | 1:A:131:GLY:N | 1:A:131:GLY:CA | 1:A:131:GLY:C | 1:A:132:PHE:N | 18 | 42.04 |
| (1,133) | 1:A:95:TRP:N | 1:A:95:TRP:CA | 1:A:95:TRP:C | 1:A:96:GLU:N | 18 | 42.02 |
| (1,133) | 1:A:95:TRP:N | 1:A:95:TRP:CA | 1:A:95:TRP:C | 1:A:96:GLU:N | 7 | 41.11 |
| (1,121) | 1:A:86:ALA:C | 1:A:87:ASP:N | 1:A:87:ASP:CA | 1:A:87:ASP:C | 12 | 40.76 |
| (1,113) | 1:A:82:GLN:C | 1:A:83:SER:N | 1:A:83:SER:CA | 1:A:83:SER:C | 1 | 40.53 |
| (1,30) | 1:A:36:LEU:N | 1:A:36:LEU:CA | 1:A:36:LEU:C | 1:A:37:ALA:N | 17 | 40.41 |
| (1,177) | 1:A:121:LEU:N | 1:A:121:LEU:CA | 1:A:121:LEU:C | 1:A:122:LYS:N | 2 | 40.24 |
| (1,196) | 1:A:131:GLY:N | 1:A:131:GLY:CA | 1:A:131:GLY:C | 1:A:132:PHE:N | 15 | 40.09 |
| (1,121) | 1:A:86:ALA:C | 1:A:87:ASP:N | 1:A:87:ASP:CA | 1:A:87:ASP:C | 18 | 39.36 |
| (1,196) | 1:A:131:GLY:N | 1:A:131:GLY:CA | 1:A:131:GLY:C | 1:A:132:PHE:N | 9 | 38.97 |
| (1,64) | 1:A:58:ASP:N | 1:A:58:ASP:CA | 1:A:58:ASP:C | 1:A:59:GLN:N | 14 | 38.71 |
| (1,213) | 1:A:142:GLY:C | 1:A:143:GLY:N | 1:A:143:GLY:CA | 1:A:143:GLY:C | 11 | 38.33 |
| (1,177) | 1:A:121:LEU:N | 1:A:121:LEU:CA | 1:A:121:LEU:C | 1:A:122:LYS:N | 8 | 38.22 |
| (1,113) | 1:A:82:GLN:C | 1:A:83:SER:N | 1:A:83:SER:CA | 1:A:83:SER:C | 8 | 37.63 |
| (1,116) | 1:A:84:ASN:N | 1:A:84:ASN:CA | 1:A:84:ASN:C | 1:A:85:LEU:N | 8 | 37.61 |
| (1,213) | 1:A:142:GLY:C | 1:A:143:GLY:N | 1:A:143:GLY:CA | 1:A:143:GLY:C | 20 | 37.49 |
| (1,133) | 1:A:95:TRP:N | 1:A:95:TRP:CA | 1:A:95:TRP:C | 1:A:96:GLU:N | 10 | 37.48 |
| (1,214) | 1:A:143:GLY:N | 1:A:143:GLY:CA | 1:A:143:GLY:C | 1:A:144:PRO:N | 12 | 37.4 |
| (1,30) | 1:A:36:LEU:N | 1:A:36:LEU:CA | 1:A:36:LEU:C | 1:A:37:ALA:N | 15 | 37.31 |
| (1,64) | 1:A:58:ASP:N | 1:A:58:ASP:CA | 1:A:58:ASP:C | 1:A:59:GLN:N | 13 | 37.07 |
| (1,30) | 1:A:36:LEU:N | 1:A:36:LEU:CA | 1:A:36:LEU:C | 1:A:37:ALA:N | 2 | 37.02 |
| (1,30) | 1:A:36:LEU:N | 1:A:36:LEU:CA | 1:A:36:LEU:C | 1:A:37:ALA:N | 18 | 36.97 |
| (1,121) | 1:A:86:ALA:C | 1:A:87:ASP:N | 1:A:87:ASP:CA | 1:A:87:ASP:C | 5 | 36.75 |
| (1,121) | 1:A:86:ALA:C | 1:A:87:ASP:N | 1:A:87:ASP:CA | 1:A:87:ASP:C | 9 | 36.5 |
| (1,266) | 1:A:184:LYS:N | 1:A:184:LYS:CA | 1:A:184:LYS:C | 1:A:185:ALA:N | 9 | 36.43 |
| (1,64) | 1:A:58:ASP:N | 1:A:58:ASP:CA | 1:A:58:ASP:C | 1:A:59:GLN:N | 6 | 36.2 |
| (1,219) | 1:A:149:LEU:C | 1:A:150:LEU:N | 1:A:150:LEU:CA | 1:A:150:LEU:C | 19 | 36.13 |
| (1,30) | 1:A:36:LEU:N | 1:A:36:LEU:CA | 1:A:36:LEU:C | 1:A:37:ALA:N | 6 | 35.98 |
| (1,266) | 1:A:184:LYS:N | 1:A:184:LYS:CA | 1:A:184:LYS:C | 1:A:185:ALA:N | 7 | 35.96 |
| (1,177) | 1:A:121:LEU:N | 1:A:121:LEU:CA | 1:A:121:LEU:C | 1:A:122:LYS:N | 19 | 35.94 |
| (1,256) | 1:A:171:LEU:N | 1:A:171:LEU:CA | 1:A:171:LEU:C | 1:A:172:GLU:N | 17 | 35.92 |
| (1,113) | 1:A:82:GLN:C | 1:A:83:SER:N | 1:A:83:SER:CA | 1:A:83:SER:C | 9 | 35.86 |
| (1,266) | 1:A:184:LYS:N | 1:A:184:LYS:CA | 1:A:184:LYS:C | 1:A:185:ALA:N | 11 | 35.49 |
| (1,177) | 1:A:121:LEU:N | 1:A:121:LEU:CA | 1:A:121:LEU:C | 1:A:122:LYS:N | 15 | 35.37 |
| (1,256) | 1:A:171:LEU:N | 1:A:171:LEU:CA | 1:A:171:LEU:C | 1:A:172:GLU:N | 15 | 35.16 |
| (1,121) | 1:A:86:ALA:C | 1:A:87:ASP:N | 1:A:87:ASP:CA | 1:A:87:ASP:C | 3 | 35.01 |
| (1,113) | 1:A:82:GLN:C | 1:A:83:SER:N | 1:A:83:SER:CA | 1:A:83:SER:C | 20 | 34.95 |
| (1,64) | 1:A:58:ASP:N | 1:A:58:ASP:CA | 1:A:58:ASP:C | 1:A:59:GLN:N | 19 | 34.66 |
| (1,30) | 1:A:36:LEU:N | 1:A:36:LEU:CA | 1:A:36:LEU:C | 1:A:37:ALA:N | 9 | 34.56 |
| (1,214) | 1:A:143:GLY:N | 1:A:143:GLY:CA | 1:A:143:GLY:C | 1:A:144:PRO:N | 3 | 34.02 |
| (1,64) | 1:A:58:ASP:N | 1:A:58:ASP:CA | 1:A:58:ASP:C | 1:A:59:GLN:N | 16 | 33.47 |
| (1,64) | 1:A:58:ASP:N | 1:A:58:ASP:CA | 1:A:58:ASP:C | 1:A:59:GLN:N | 4 | 33.46 |
| (1,214) | 1:A:143:GLY:N | 1:A:143:GLY:CA | 1:A:143:GLY:C | 1:A:144:PRO:N | 4 | 33.19 |
| (1,30) | 1:A:36:LEU:N | 1:A:36:LEU:CA | 1:A:36:LEU:C | 1:A:37:ALA:N | 14 | 33.05 |
| (1,133) | 1:A:95:TRP:N | 1:A:95:TRP:CA | 1:A:95:TRP:C | 1:A:96:GLU:N | 2 | 32.95 |



| | ed from previous pe | • | | | | |
|---------|---------------------|----------------|----------------|---------------|-------|---------------------|
| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model | Violation (\circ) |
| (1,64) | 1:A:58:ASP:N | 1:A:58:ASP:CA | 1:A:58:ASP:C | 1:A:59:GLN:N | 11 | 32.7 |
| (1,20) | 1:A:31:GLY:N | 1:A:31:GLY:CA | 1:A:31:GLY:C | 1:A:32:LYS:N | 10 | 32.69 |
| (1,108) | 1:A:80:THR:N | 1:A:80:THR:CA | 1:A:80:THR:C | 1:A:81:VAL:N | 16 | 32.55 |
| (1,113) | 1:A:82:GLN:C | 1:A:83:SER:N | 1:A:83:SER:CA | 1:A:83:SER:C | 15 | 32.51 |
| (1,200) | 1:A:133:ALA:N | 1:A:133:ALA:CA | 1:A:133:ALA:C | 1:A:134:PRO:N | 14 | 32.11 |
| (1,121) | 1:A:86:ALA:C | 1:A:87:ASP:N | 1:A:87:ASP:CA | 1:A:87:ASP:C | 1 | 32.0 |
| (1,177) | 1:A:121:LEU:N | 1:A:121:LEU:CA | 1:A:121:LEU:C | 1:A:122:LYS:N | 10 | 31.89 |
| (1,116) | 1:A:84:ASN:N | 1:A:84:ASN:CA | 1:A:84:ASN:C | 1:A:85:LEU:N | 1 | 31.85 |
| (1,64) | 1:A:58:ASP:N | 1:A:58:ASP:CA | 1:A:58:ASP:C | 1:A:59:GLN:N | 12 | 31.38 |
| (1,133) | 1:A:95:TRP:N | 1:A:95:TRP:CA | 1:A:95:TRP:C | 1:A:96:GLU:N | 6 | 31.17 |
| (1,219) | 1:A:149:LEU:C | 1:A:150:LEU:N | 1:A:150:LEU:CA | 1:A:150:LEU:C | 14 | 30.91 |
| (1,30) | 1:A:36:LEU:N | 1:A:36:LEU:CA | 1:A:36:LEU:C | 1:A:37:ALA:N | 13 | 30.54 |
| (1,113) | 1:A:82:GLN:C | 1:A:83:SER:N | 1:A:83:SER:CA | 1:A:83:SER:C | 2 | 30.49 |
| (1,200) | 1:A:133:ALA:N | 1:A:133:ALA:CA | 1:A:133:ALA:C | 1:A:134:PRO:N | 17 | 30.19 |
| (1,64) | 1:A:58:ASP:N | 1:A:58:ASP:CA | 1:A:58:ASP:C | 1:A:59:GLN:N | 15 | 29.48 |
| (1,200) | 1:A:133:ALA:N | 1:A:133:ALA:CA | 1:A:133:ALA:C | 1:A:134:PRO:N | 20 | 29.41 |
| (1,219) | 1:A:149:LEU:C | 1:A:150:LEU:N | 1:A:150:LEU:CA | 1:A:150:LEU:C | 20 | 29.08 |
| (1,133) | 1:A:95:TRP:N | 1:A:95:TRP:CA | 1:A:95:TRP:C | 1:A:96:GLU:N | 1 | 29.06 |
| (1,113) | 1:A:82:GLN:C | 1:A:83:SER:N | 1:A:83:SER:CA | 1:A:83:SER:C | 4 | 28.85 |
| (1,121) | 1:A:86:ALA:C | 1:A:87:ASP:N | 1:A:87:ASP:CA | 1:A:87:ASP:C | 10 | 28.73 |
| (1,116) | 1:A:84:ASN:N | 1:A:84:ASN:CA | 1:A:84:ASN:C | 1:A:85:LEU:N | 9 | 28.22 |
| (1,64) | 1:A:58:ASP:N | 1:A:58:ASP:CA | 1:A:58:ASP:C | 1:A:59:GLN:N | 1 | 27.99 |
| (1,30) | 1:A:36:LEU:N | 1:A:36:LEU:CA | 1:A:36:LEU:C | 1:A:37:ALA:N | 1 | 27.76 |
| (1,133) | 1:A:95:TRP:N | 1:A:95:TRP:CA | 1:A:95:TRP:C | 1:A:96:GLU:N | 15 | 27.52 |
| (1,133) | 1:A:95:TRP:N | 1:A:95:TRP:CA | 1:A:95:TRP:C | 1:A:96:GLU:N | 13 | 27.03 |
| (1,266) | 1:A:184:LYS:N | 1:A:184:LYS:CA | 1:A:184:LYS:C | 1:A:185:ALA:N | 5 | 26.93 |
| (1,200) | 1:A:133:ALA:N | 1:A:133:ALA:CA | 1:A:133:ALA:C | 1:A:134:PRO:N | 1 | 26.92 |
| (1,113) | 1:A:82:GLN:C | 1:A:83:SER:N | 1:A:83:SER:CA | 1:A:83:SER:C | 11 | 26.91 |
| (1,113) | 1:A:82:GLN:C | 1:A:83:SER:N | 1:A:83:SER:CA | 1:A:83:SER:C | 5 | 26.49 |
| (1,266) | 1:A:184:LYS:N | 1:A:184:LYS:CA | 1:A:184:LYS:C | 1:A:185:ALA:N | 20 | 26.38 |
| (1,64) | 1:A:58:ASP:N | 1:A:58:ASP:CA | 1:A:58:ASP:C | 1:A:59:GLN:N | 7 | 26.32 |
| (1,108) | 1:A:80:THR:N | 1:A:80:THR:CA | 1:A:80:THR:C | 1:A:81:VAL:N | 6 | 26.27 |
| (1,113) | 1:A:82:GLN:C | 1:A:83:SER:N | 1:A:83:SER:CA | 1:A:83:SER:C | 13 | 26.1 |
| (1,102) | 1:A:77:LYS:N | 1:A:77:LYS:CA | 1:A:77:LYS:C | 1:A:78:ILE:N | 20 | 26.09 |
| (1,196) | 1:A:131:GLY:N | 1:A:131:GLY:CA | 1:A:131:GLY:C | 1:A:132:PHE:N | 8 | 25.99 |
| (1,30) | 1:A:36:LEU:N | 1:A:36:LEU:CA | 1:A:36:LEU:C | 1:A:37:ALA:N | 11 | 25.95 |
| (1,30) | 1:A:36:LEU:N | 1:A:36:LEU:CA | 1:A:36:LEU:C | 1:A:37:ALA:N | 19 | 25.52 |
| (1,200) | 1:A:133:ALA:N | 1:A:133:ALA:CA | 1:A:133:ALA:C | 1:A:134:PRO:N | 3 | 24.98 |
| (1,113) | 1:A:82:GLN:C | 1:A:83:SER:N | 1:A:83:SER:CA | 1:A:83:SER:C | 3 | 24.66 |
| (1,177) | 1:A:121:LEU:N | 1:A:121:LEU:CA | 1:A:121:LEU:C | 1:A:122:LYS:N | 20 | 24.65 |
| (1,102) | 1:A:77:LYS:N | 1:A:77:LYS:CA | 1:A:77:LYS:C | 1:A:78:ILE:N | 19 | 24.53 |
| (1,64) | 1:A:58:ASP:N | 1:A:58:ASP:CA | 1:A:58:ASP:C | 1:A:59:GLN:N | 8 | 24.24 |
| (1,30) | 1:A:36:LEU:N | 1:A:36:LEU:CA | 1:A:36:LEU:C | 1:A:37:ALA:N | 5 | 24.21 |
| (1,113) | 1:A:82:GLN:C | 1:A:83:SER:N | 1:A:83:SER:CA | 1:A:83:SER:C | 18 | 24.17 |
| (1,213) | 1:A:142:GLY:C | 1:A:143:GLY:N | 1:A:143:GLY:CA | 1:A:143:GLY:C | 12 | 24.15 |
| (1,64) | 1:A:58:ASP:N | 1:A:58:ASP:CA | 1:A:58:ASP:C | 1:A:59:GLN:N | 18 | 23.81 |
| (1,64) | 1:A:58:ASP:N | 1:A:58:ASP:CA | 1:A:58:ASP:C | 1:A:59:GLN:N | 17 | 23.34 |
| (1,116) | 1:A:84:ASN:N | 1:A:84:ASN:CA | 1:A:84:ASN:C | 1:A:85:LEU:N | 20 | 23.33 |
| (1,102) | 1:A:77:LYS:N | 1:A:77:LYS:CA | 1:A:77:LYS:C | 1:A:78:ILE:N | 9 | 23.07 |
| (1,113) | 1:A:82:GLN:C | 1:A:83:SER:N | 1:A:83:SER:CA | 1:A:83:SER:C | 7 | 22.93 |
| (1,64) | 1:A:58:ASP:N | 1:A:58:ASP:CA | 1:A:58:ASP:C | 1:A:59:GLN:N | 3 | 22.83 |



| | d from previous pe | | A | A | N.C. 1.1 | T 7* 1 () |
|-------------------|--------------------|----------------|----------------|---|----------|--------------------------|
| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model | Violation (°) |
| (/ / | 1:A:133:ALA:N | 1:A:133:ALA:CA | 1:A:133:ALA:C | 1:A:134:PRO:N | 9 | 22.59 |
| (1,177) | 1:A:121:LEU:N | 1:A:121:LEU:CA | 1:A:121:LEU:C | 1:A:122:LYS:N | 4 | 22.58 |
| (1,102) | 1:A:77:LYS:N | 1:A:77:LYS:CA | 1:A:77:LYS:C | 1:A:78:ILE:N | 3 | 22.56 |
| (1,20) | 1:A:31:GLY:N | 1:A:31:GLY:CA | 1:A:31:GLY:C | 1:A:32:LYS:N | 7 | 22.27 |
| (1,213) | 1:A:142:GLY:C | 1:A:143:GLY:N | 1:A:143:GLY:CA | 1:A:143:GLY:C | 2 | 22.24 |
| (1,219) | 1:A:149:LEU:C | 1:A:150:LEU:N | 1:A:150:LEU:CA | 1:A:150:LEU:C | 2 | 22.08 |
| ()) | 1:A:149:LEU:C | 1:A:150:LEU:N | 1:A:150:LEU:CA | 1:A:150:LEU:C | 4 | 22.08 |
| (1,240) | 1:A:163:LEU:N | 1:A:163:LEU:CA | 1:A:163:LEU:C | 1:A:164:ASN:N | 4 | 21.9 |
| (1,113) | 1:A:82:GLN:C | 1:A:83:SER:N | 1:A:83:SER:CA | 1:A:83:SER:C | 6 | 21.79 |
| (1,200) | 1:A:133:ALA:N | 1:A:133:ALA:CA | 1:A:133:ALA:C | 1:A:134:PRO:N | 8 | 21.67 |
| (1,102) | 1:A:77:LYS:N | 1:A:77:LYS:CA | 1:A:77:LYS:C | 1:A:78:ILE:N | 12 | 21.66 |
| (1,266) | 1:A:184:LYS:N | 1:A:184:LYS:CA | 1:A:184:LYS:C | 1:A:185:ALA:N | 8 | 21.65 |
| (1,200) | 1:A:133:ALA:N | 1:A:133:ALA:CA | 1:A:133:ALA:C | 1:A:134:PRO:N | 15 | 21.54 |
| (1,133) | 1:A:95:TRP:N | 1:A:95:TRP:CA | 1:A:95:TRP:C | 1:A:96:GLU:N | 12 | 21.51 |
| (1,108) | 1:A:80:THR:N | 1:A:80:THR:CA | 1:A:80:THR:C | 1:A:81:VAL:N | 20 | 21.28 |
| (1,102) | 1:A:77:LYS:N | 1:A:77:LYS:CA | 1:A:77:LYS:C | 1:A:78:ILE:N | 11 | 21.28 |
| (1,108) | 1:A:80:THR:N | 1:A:80:THR:CA | 1:A:80:THR:C | 1:A:81:VAL:N | 13 | 21.22 |
| (1,200) | 1:A:133:ALA:N | 1:A:133:ALA:CA | 1:A:133:ALA:C | 1:A:134:PRO:N | 2 | 21.2 |
| (1,102) | 1:A:77:LYS:N | 1:A:77:LYS:CA | 1:A:77:LYS:C | 1:A:78:ILE:N | 18 | 21.09 |
| (1,200) | 1:A:133:ALA:N | 1:A:133:ALA:CA | 1:A:133:ALA:C | 1:A:134:PRO:N | 4 | 20.96 |
| (1,219) | 1:A:149:LEU:C | 1:A:150:LEU:N | 1:A:150:LEU:CA | 1:A:150:LEU:C | 15 | 20.95 |
| (1,219) | 1:A:149:LEU:C | 1:A:150:LEU:N | 1:A:150:LEU:CA | 1:A:150:LEU:C | 1 | 20.57 |
| (1,30) | 1:A:36:LEU:N | 1:A:36:LEU:CA | 1:A:36:LEU:C | 1:A:37:ALA:N | 20 | 20.45 |
| (1,200) | 1:A:133:ALA:N | 1:A:133:ALA:CA | 1:A:133:ALA:C | 1:A:134:PRO:N | 16 | 20.43 |
| (1,200) | 1:A:133:ALA:N | 1:A:133:ALA:CA | 1:A:133:ALA:C | 1:A:134:PRO:N | 12 | 20.35 |
| (1,214) | 1:A:143:GLY:N | 1:A:143:GLY:CA | 1:A:143:GLY:C | 1:A:144:PRO:N | 2 | 20.29 |
| (1,266) | 1:A:184:LYS:N | 1:A:184:LYS:CA | 1:A:184:LYS:C | 1:A:185:ALA:N | 13 | 20.11 |
| (1,200) | 1:A:133:ALA:N | 1:A:133:ALA:CA | 1:A:133:ALA:C | 1:A:134:PRO:N | 11 | 19.91 |
| (1,240) | 1:A:163:LEU:N | 1:A:163:LEU:CA | 1:A:163:LEU:C | 1:A:164:ASN:N | 15 | 19.8 |
| (1,100) | 1:A:76:VAL:N | 1:A:76:VAL:CA | 1:A:76:VAL:C | 1:A:77:LYS:N | 13 | 19.75 |
| (1,108) | 1:A:80:THR:N | 1:A:80:THR:CA | 1:A:80:THR:C | 1:A:81:VAL:N | 5 | 19.73 |
| (1,20) | 1:A:31:GLY:N | 1:A:31:GLY:CA | 1:A:31:GLY:C | 1:A:32:LYS:N | 9 | 19.64 |
| (1,219) | 1:A:149:LEU:C | 1:A:150:LEU:N | 1:A:150:LEU:CA | 1:A:150:LEU:C | 9 | 19.58 |
| (1,240) | 1:A:163:LEU:N | 1:A:163:LEU:CA | 1:A:163:LEU:C | 1:A:164:ASN:N | 3 | 19.32 |
| (1,240) | 1:A:163:LEU:N | 1:A:163:LEU:CA | 1:A:163:LEU:C | 1:A:164:ASN:N | 7 | 19.15 |
| (1,266) | 1:A:184:LYS:N | 1:A:184:LYS:CA | 1:A:184:LYS:C | 1:A:185:ALA:N | 18 | 18.93 |
| (1,177) | 1:A:121:LEU:N | 1:A:121:LEU:CA | 1:A:121:LEU:C | 1:A:122:LYS:N | 11 | 18.84 |
| (1,102) | 1:A:77:LYS:N | 1:A:77:LYS:CA | 1:A:77:LYS:C | 1:A:78:ILE:N | 16 | 18.68 |
| (1,240) | 1:A:163:LEU:N | 1:A:163:LEU:CA | 1:A:163:LEU:C | 1:A:164:ASN:N | 12 | 18.64 |
| (1,113) | 1:A:82:GLN:C | 1:A:83:SER:N | 1:A:83:SER:CA | 1:A:83:SER:C | 19 | 18.54 |
| (1,240) | 1:A:163:LEU:N | 1:A:163:LEU:CA | 1:A:163:LEU:C | 1:A:164:ASN:N | 18 | 18.52 |
| (1,108) | 1:A:80:THR:N | 1:A:80:THR:CA | 1:A:80:THR:C | 1:A:81:VAL:N | 19 | 18.49 |
| (1,64) | 1:A:58:ASP:N | 1:A:58:ASP:CA | 1:A:58:ASP:C | 1:A:59:GLN:N | 2 | 18.23 |
| (1,240) | 1:A:163:LEU:N | 1:A:163:LEU:CA | 1:A:163:LEU:C | 1:A:164:ASN:N | 6 | 18.23 |
| (1,64) | 1:A:58:ASP:N | 1:A:58:ASP:CA | 1:A:58:ASP:C | 1:A:59:GLN:N | 5 | 18.13 |
| (1,219) | 1:A:149:LEU:C | 1:A:150:LEU:N | 1:A:150:LEU:CA | 1:A:150:LEU:C | 10 | 18.09 |
| (1,102) | 1:A:77:LYS:N | 1:A:77:LYS:CA | 1:A:77:LYS:C | 1:A:78:ILE:N | 6 | 18.04 |
| (1,100) | 1:A:76:VAL:N | 1:A:76:VAL:CA | 1:A:76:VAL:C | 1:A:77:LYS:N | 4 | 18.0 |
| | 1:A:163:LEU:N | 1:A:163:LEU:CA | 1:A:163:LEU:C | 1:A:164:ASN:N | 17 | 17.97 |
| (1,240) | | | | i e e e e e e e e e e e e e e e e e e e | | |
| (1,240) $(1,240)$ | 1:A:163:LEU:N | 1:A:163:LEU:CA | 1:A:163:LEU:C | 1:A:164:ASN:N | 13 | 17.96 |



| Key | $rac{ed\ from\ previous\ po}{\mathbf{Atom-1}}$ | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model | Violation (o) |
|-------------------|---|---------------------------------|---------------------------------|--------------------------------|-------|-----------------|
| (1,240) | 1:A:163:LEU:N | 1:A:163:LEU:CA | 1:A:163:LEU:C | 1:A:164:ASN:N | 1 | 17.87 |
| (1,200) | 1:A:133:ALA:N | 1:A:133:ALA:CA | 1:A:133:ALA:C | 1:A:134:PRO:N | 7 | 17.78 |
| (1,240) | 1:A:163:LEU:N | 1:A:163:LEU:CA | 1:A:163:LEU:C | 1:A:164:ASN:N | 8 | 17.38 |
| (1,240) | 1:A:163:LEU:N | 1:A:163:LEU:CA | 1:A:163:LEU:C | 1:A:164:ASN:N | 14 | 17.36 |
| (1,195) | 1:A:130:GLU:C | 1:A:131:GLY:N | 1:A:131:GLY:CA | 1:A:131:GLY:C | 9 | 17.34 |
| (1,195) | 1:A:130:GLU:C | 1:A:131:GLY:N | 1:A:131:GLY:CA | 1:A:131:GLY:C | 15 | 17.32 |
| (1,195) | 1:A:130:GLU:C | 1:A:131:GLY:N | 1:A:131:GLY:CA | 1:A:131:GLY:C | 2 | 17.29 |
| (1,278) | 1:A:190:LEU:N | 1:A:190:LEU:CA | 1:A:190:LEU:C | 1:A:191:LEU:N | 18 | 17.15 |
| (1,108) | 1:A:80:THR:N | 1:A:80:THR:CA | 1:A:80:THR:C | 1:A:81:VAL:N | 4 | 17.15 |
| (1,240) | 1:A:163:LEU:N | 1:A:163:LEU:CA | 1:A:163:LEU:C | 1:A:164:ASN:N | 5 | 17.06 |
| (1,240) | 1:A:163:LEU:N | 1:A:163:LEU:CA | 1:A:163:LEU:C | 1:A:164:ASN:N | 11 | 17.01 |
| (1,278) | 1:A:190:LEU:N | 1:A:190:LEU:CA | 1:A:190:LEU:C | 1:A:191:LEU:N | 11 | 16.9 |
| (1,108) | 1:A:80:THR:N | 1:A:80:THR:CA | 1:A:80:THR:C | 1:A:81:VAL:N | 7 | 16.9 |
| (1,200) | 1:A:133:ALA:N | 1:A:133:ALA:CA | 1:A:133:ALA:C | 1:A:134:PRO:N | 19 | 16.85 |
| (1,219) | 1:A:149:LEU:C | 1:A:150:LEU:N | 1:A:150:LEU:CA | 1:A:150:LEU:C | 11 | 16.83 |
| (1,108) | 1:A:80:THR:N | 1:A:80:THR:CA | 1:A:80:THR:C | 1:A:81:VAL:N | 15 | 16.74 |
| (1,240) | 1:A:163:LEU:N | 1:A:163:LEU:CA | 1:A:163:LEU:C | 1:A:164:ASN:N | 10 | 16.69 |
| (1,210) $(1,177)$ | 1:A:121:LEU:N | 1:A:121:LEU:CA | 1:A:121:LEU:C | 1:A:122:LYS:N | 9 | 16.62 |
| (1,213) | 1:A:142:GLY:C | 1:A:143:GLY:N | 1:A:143:GLY:CA | 1:A:143:GLY:C | 10 | 16.55 |
| (1,213) $(1,108)$ | 1:A:80:THR:N | 1:A:80:THR:CA | 1:A:80:THR:C | 1:A:81:VAL:N | 14 | 16.47 |
| (1,100) $(1,102)$ | 1:A:77:LYS:N | 1:A:77:LYS:CA | 1:A:77:LYS:C | 1:A:78:ILE:N | 5 | 16.44 |
| (1,102) $(1,240)$ | 1:A:163:LEU:N | 1:A:163:LEU:CA | 1:A:163:LEU:C | 1:A:164:ASN:N | 16 | 16.39 |
| (1,240) $(1,195)$ | 1:A:130:GLU:C | 1:A:131:GLY:N | 1:A:131:GLY:CA | 1:A:131:GLY:C | 6 | 16.32 |
| (1,133) $(1,213)$ | 1:A:142:GLY:C | 1:A:143:GLY:N | 1:A:143:GLY:CA | 1:A:143:GLY:C | 14 | 16.3 |
| (1,213) $(1,30)$ | 1:A:36:LEU:N | 1:A:36:LEU:CA | 1:A:36:LEU:C | 1:A:37:ALA:N | 8 | 15.89 |
| (1,30) $(1,102)$ | 1:A:77:LYS:N | 1:A:77:LYS:CA | 1:A:77:LYS:C | 1:A:78:ILE:N | 1 | 15.86 |
| (1,102) $(1,102)$ | 1:A:77:LYS:N | 1:A:77:LYS:CA | 1:A:77:LYS:C | 1:A:78:ILE:N | 14 | 15.8 |
| (1,102) $(1,108)$ | 1:A:80:THR:N | 1:A:80:THR:CA | 1:A:80:THR:C | 1:A:81:VAL:N | 17 | 15.77 |
| (1,108) $(1,266)$ | 1:A:184:LYS:N | 1:A:184:LYS:CA | 1:A:184:LYS:C | 1:A:185:ALA:N | 4 | 15.76 |
| (1,200) $(1,177)$ | 1:A:121:LEU:N | 1:A:121:LEU:CA | 1:A:121:LEU:C | 1:A:122:LYS:N | 12 | 15.70 |
| (1,177) $(1,240)$ | 1:A:163:LEU:N | 1:A:163:LEU:CA | 1:A:163:LEU:C | 1:A:164:ASN:N | 9 | 15.48 |
| (1,240) $(1,195)$ | 1:A:130:GLU:C | 1:A:131:GLY:N | 1:A:131:GLY:CA | 1:A:131:GLY:C | 1 | 15.41 |
| (1,193) $(1,200)$ | 1:A:130:GLU:C 1:A:133:ALA:N | 1:A:131:GL1:N | 1:A:131:GL1:CA 1:A:133:ALA:C | 1:A:131:GL1:C 1:A:134:PRO:N | 13 | 15.36 |
| · · / | 1:A:130:GLU:C | 1:A:131:GLY:N | 1:A:131:GLY:CA | 1:A:131:GLY:C | 3 | 15.31 |
| (1,195) | 1:A:130:GLU:C 1:A:133:ALA:N | 1:A:131:GL1:N 1:A:133:ALA:CA | 1:A:131:GL1:CA 1:A:133:ALA:C | | 18 | 15.24 |
| (1,200) | 1:A:135:ALA:N 1:A:80:THR:N | 1:A:135:ALA:CA 1:A:80:THR:CA | 1:A:135:ALA:C 1:A:80:THR:C | 1:A:134:PRO:N | 8 | |
| (1,108) | | | | 1:A:81:VAL:N | _ | 15.13 |
| (1,195) | 1:A:130:GLU:C | 1:A:131:GLY:N | 1:A:131:GLY:CA | 1:A:131:GLY:C | 12 | 15.05 |
| (1,278) | 1:A:190:LEU:N | 1:A:190:LEU:CA | 1:A:190:LEU:C | 1:A:191:LEU:N | 19 | 14.81 |
| (1,100) | 1:A:76:VAL:N | 1:A:76:VAL:CA | 1:A:76:VAL:C | 1:A:77:LYS:N | 1 | 14.77 |
| (1,240) | 1:A:163:LEU:N | 1:A:163:LEU:CA | 1:A:163:LEU:C | 1:A:164:ASN:N | 20 | 14.74 |
| (1,240) | 1:A:163:LEU:N | 1:A:163:LEU:CA | 1:A:163:LEU:C | 1:A:164:ASN:N | 19 | 14.7 |
| (1,219) | 1:A:149:LEU:C | 1:A:150:LEU:N | 1:A:150:LEU:CA | 1:A:150:LEU:C | 3 | 14.49 |
| (1,240) | 1:A:163:LEU:N | 1:A:163:LEU:CA | 1:A:163:LEU:C | 1:A:164:ASN:N | 2 | 14.37 |
| (1,20) | 1:A:31:GLY:N | 1:A:31:GLY:CA | 1:A:31:GLY:C | 1:A:32:LYS:N | 3 | 14.23 |
| (1,64) | 1:A:58:ASP:N | 1:A:58:ASP:CA | 1:A:58:ASP:C | 1:A:59:GLN:N | 9 | 13.77 |
| (1,113) | 1:A:82:GLN:C | 1:A:83:SER:N | 1:A:83:SER:CA | 1:A:83:SER:C | 12 | 13.77 |
| (1,201) | 1:A:134:PRO:C | 1:A:135:GLU:N | 1:A:135:GLU:CA | 1:A:135:GLU:C | 18 | 13.42 |
| (1,214) | 1:A:143:GLY:N | 1:A:143:GLY:CA | 1:A:143:GLY:C | 1:A:144:PRO:N | 10 | 13.37 |
| (1,181) | 1:A:123:PRO:C | 1:A:124:GLY:N | 1:A:124:GLY:CA | 1:A:124:GLY:C | 17 | 13.32 |
| (1,213) | 1:A:142:GLY:C | 1:A:143:GLY:N | 1:A:143:GLY:CA | 1:A:143:GLY:C | 15 | 13.0 |
| (1,266) | 1:A:184:LYS:N | 1:A:184:LYS:CA | 1:A:184:LYS:C | 1:A:185:ALA:N | 10 | 12.97 |



| 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) |
|-------------------|---|-----------------|----------------|---------------|-------|-----------------|
| (1,219) | 1:A:149:LEU:C | 1:A:150:LEU:N | 1:A:150:LEU:CA | 1:A:150:LEU:C | 7 | 12.93 |
| (1,219) | 1:A:149:LEU:C | 1:A:150:LEU:N | 1:A:150:LEU:CA | 1:A:150:LEU:C | 16 | 12.92 |
| (1,199) | 1:A:132:PHE:C | 1:A:133:ALA:N | 1:A:133:ALA:CA | 1:A:133:ALA:C | 19 | 12.91 |
| (1,100) | 1:A:76:VAL:N | 1:A:76:VAL:CA | 1:A:76:VAL:C | 1:A:77:LYS:N | 14 | 12.89 |
| (1,102) | 1:A:77:LYS:N | 1:A:77:LYS:CA | 1:A:77:LYS:C | 1:A:78:ILE:N | 2 | 12.82 |
| (1,200) | 1:A:133:ALA:N | 1:A:133:ALA:CA | 1:A:133:ALA:C | 1:A:134:PRO:N | 10 | 12.75 |
| (1,219) | 1:A:149:LEU:C | 1:A:150:LEU:N | 1:A:150:LEU:CA | 1:A:150:LEU:C | 12 | 12.44 |
| (1,20) | 1:A:31:GLY:N | 1:A:31:GLY:CA | 1:A:31:GLY:C | 1:A:32:LYS:N | 11 | 12.42 |
| (1,214) | 1:A:143:GLY:N | 1:A:143:GLY:CA | 1:A:143:GLY:C | 1:A:144:PRO:N | 9 | 12.39 |
| (1,102) | 1:A:77:LYS:N | 1:A:77:LYS:CA | 1:A:77:LYS:C | 1:A:78:ILE:N | 8 | 12.32 |
| (1,113) | 1:A:82:GLN:C | 1:A:83:SER:N | 1:A:83:SER:CA | 1:A:83:SER:C | 16 | 12.28 |
| (1,195) | 1:A:130:GLU:C | 1:A:131:GLY:N | 1:A:131:GLY:CA | 1:A:131:GLY:C | 13 | 12.25 |
| (1,195) | 1:A:130:GLU:C | 1:A:131:GLY:N | 1:A:131:GLY:CA | 1:A:131:GLY:C | 5 | 12.22 |
| (1,200) | 1:A:133:ALA:N | 1:A:133:ALA:CA | 1:A:133:ALA:C | 1:A:134:PRO:N | 6 | 12.18 |
| (1,278) | 1:A:190:LEU:N | 1:A:190:LEU:CA | 1:A:190:LEU:C | 1:A:191:LEU:N | 17 | 12.16 |
| (1,102) | 1:A:77:LYS:N | 1:A:77:LYS:CA | 1:A:77:LYS:C | 1:A:78:ILE:N | 7 | 12.06 |
| (1,143) | 1:A:102:PHE:N | 1:A:102:PHE:CA | 1:A:102:PHE:C | 1:A:103:CYS:N | 11 | 12.0 |
| (1,214) | 1:A:143:GLY:N | 1:A:143:GLY:CA | 1:A:143:GLY:C | 1:A:144:PRO:N | 15 | 11.86 |
| (1,271) $(1,278)$ | 1:A:190:LEU:N | 1:A:190:LEU:CA | 1:A:190:LEU:C | 1:A:191:LEU:N | 12 | 11.6 |
| (1,266) | 1:A:184:LYS:N | 1:A:184:LYS:CA | 1:A:184:LYS:C | 1:A:185:ALA:N | 16 | 11.37 |
| (1,177) | 1:A:121:LEU:N | 1:A:121:LEU:CA | 1:A:121:LEU:C | 1:A:122:LYS:N | 18 | 11.37 |
| (1,181) | 1:A:123:PRO:C | 1:A:124:GLY:N | 1:A:124:GLY:CA | 1:A:124:GLY:C | 6 | 11.32 |
| (1,177) | 1:A:121:LEU:N | 1:A:121:LEU:CA | 1:A:121:LEU:C | 1:A:122:LYS:N | 14 | 11.32 |
| (1,147) | 1:A:104:HIS:N | 1:A:104:HIS:CA | 1:A:104:HIS:C | 1:A:105:LEU:N | 2 | 11.3 |
| (1,214) | 1:A:143:GLY:N | 1:A:143:GLY:CA | 1:A:143:GLY:C | 1:A:144:PRO:N | 6 | 11.19 |
| (1,211) $(1,20)$ | 1:A:31:GLY:N | 1:A:31:GLY:CA | 1:A:31:GLY:C | 1:A:32:LYS:N | 14 | 10.98 |
| (1,143) | 1:A:102:PHE:N | 1:A:102:PHE:CA | 1:A:102:PHE:C | 1:A:103:CYS:N | 20 | 10.87 |
| (1,116) | 1:A:84:ASN:N | 1:A:84:ASN:CA | 1:A:84:ASN:C | 1:A:85:LEU:N | 10 | 10.8 |
| (1,278) | 1:A:190:LEU:N | 1:A:190:LEU:CA | 1:A:190:LEU:C | 1:A:191:LEU:N | 6 | 10.68 |
| (1,195) | 1:A:130:GLU:C | 1:A:131:GLY:N | 1:A:131:GLY:CA | 1:A:131:GLY:C | 17 | 10.54 |
| (1,213) | 1:A:142:GLY:C | 1:A:143:GLY:N | 1:A:143:GLY:CA | 1:A:143:GLY:C | 8 | 10.51 |
| (1,100) | 1:A:76:VAL:N | 1:A:76:VAL:CA | 1:A:76:VAL:C | 1:A:77:LYS:N | 15 | 10.45 |
| (1,177) | 1:A:121:LEU:N | 1:A:121:LEU:CA | 1:A:121:LEU:C | 1:A:122:LYS:N | 1 | 10.25 |
| (1,113) | 1:A:82:GLN:C | 1:A:83:SER:N | 1:A:83:SER:CA | 1:A:83:SER:C | 17 | 10.2 |
| (1,219) | 1:A:149:LEU:C | 1:A:150:LEU:N | 1:A:150:LEU:CA | 1:A:150:LEU:C | 13 | 10.19 |
| (1,108) | 1:A:80:THR:N | 1:A:80:THR:CA | 1:A:80:THR:C | 1:A:81:VAL:N | 11 | 10.19 |
| (1,219) | 1:A:149:LEU:C | 1:A:150:LEU:N | 1:A:150:LEU:CA | 1:A:150:LEU:C | 5 | 10.12 |
| (1,195) | 1:A:130:GLU:C | 1:A:131:GLY:N | 1:A:131:GLY:CA | 1:A:131:GLY:C | 16 | 10.0 |
| (1,20) | 1:A:31:GLY:N | 1:A:31:GLY:CA | 1:A:31:GLY:C | 1:A:32:LYS:N | 19 | 9.86 |
| (1,133) | 1:A:95:TRP:N | 1:A:95:TRP:CA | 1:A:95:TRP:C | 1:A:96:GLU:N | 5 | 9.86 |
| (1,102) | 1:A:77:LYS:N | 1:A:77:LYS:CA | 1:A:77:LYS:C | 1:A:78:ILE:N | 17 | 9.86 |
| (1,100) | 1:A:76:VAL:N | 1:A:76:VAL:CA | 1:A:76:VAL:C | 1:A:77:LYS:N | 16 | 9.84 |
| (1,141) | 1:A:101:ILE:N | 1:A:101:ILE:CA | 1:A:101:ILE:C | 1:A:102:PHE:N | 16 | 9.76 |
| (1,102) | 1:A:77:LYS:N | 1:A:77:LYS:CA | 1:A:77:LYS:C | 1:A:78:ILE:N | 4 | 9.72 |
| (1,143) | 1:A:102:PHE:N | 1:A:102:PHE:CA | 1:A:102:PHE:C | 1:A:103:CYS:N | 9 | 9.64 |
| (1,108) | 1:A:80:THR:N | 1:A:80:THR:CA | 1:A:80:THR:C | 1:A:81:VAL:N | 12 | 9.63 |
| (1,180) $(1,181)$ | 1:A:123:PRO:C | 1:A:124:GLY:N | 1:A:124:GLY:CA | 1:A:124:GLY:C | 18 | 9.46 |
| (1,177) | 1:A:121:LEU:N | 1:A:121:LEU:CA | 1:A:121:LEU:C | 1:A:122:LYS:N | 13 | 9.41 |
| (1,111) | 1:A:81:VAL:C | 1:A:82:GLN:N | 1:A:82:GLN:CA | 1:A:82:GLN:C | 14 | 9.28 |
| (1,278) | 1:A:190:LEU:N | 1:A:190:LEU:CA | 1:A:190:LEU:C | 1:A:191:LEU:N | 8 | 9.16 |
| (1,181) | 1:A:123:PRO:C | 1:A:124:GLY:N | 1:A:124:GLY:CA | 1:A:124:GLY:C | 8 | 9.12 |
| (1,101) | 1.11.120.110.0 | 1.11.121.GE1.11 | | 121.011.0 | | ed on nert nage |



| | ed from previous po | | | | | |
|---------|---------------------|----------------|----------------|---------------|---------|-------------------------------------|
| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model | $\textbf{Violation} \ (\ \circ \)$ |
| (1,133) | 1:A:95:TRP:N | 1:A:95:TRP:CA | 1:A:95:TRP:C | 1:A:96:GLU:N | 11 | 9.12 |
| (1,102) | 1:A:77:LYS:N | 1:A:77:LYS:CA | 1:A:77:LYS:C | 1:A:78:ILE:N | 15 | 9.1 |
| (1,181) | 1:A:123:PRO:C | 1:A:124:GLY:N | 1:A:124:GLY:CA | 1:A:124:GLY:C | 14 | 8.91 |
| (1,143) | 1:A:102:PHE:N | 1:A:102:PHE:CA | 1:A:102:PHE:C | 1:A:103:CYS:N | 8 | 8.85 |
| (1,147) | 1:A:104:HIS:N | 1:A:104:HIS:CA | 1:A:104:HIS:C | 1:A:105:LEU:N | 5 | 8.83 |
| (1,147) | 1:A:104:HIS:N | 1:A:104:HIS:CA | 1:A:104:HIS:C | 1:A:105:LEU:N | 11 | 8.79 |
| (1,108) | 1:A:80:THR:N | 1:A:80:THR:CA | 1:A:80:THR:C | 1:A:81:VAL:N | 2 | 8.79 |
| (1,218) | 1:A:149:LEU:N | 1:A:149:LEU:CA | 1:A:149:LEU:C | 1:A:150:LEU:N | 6 | 8.68 |
| (1,195) | 1:A:130:GLU:C | 1:A:131:GLY:N | 1:A:131:GLY:CA | 1:A:131:GLY:C | 11 | 8.63 |
| (1,143) | 1:A:102:PHE:N | 1:A:102:PHE:CA | 1:A:102:PHE:C | 1:A:103:CYS:N | 10 | 8.63 |
| (1,143) | 1:A:102:PHE:N | 1:A:102:PHE:CA | 1:A:102:PHE:C | 1:A:103:CYS:N | 14 | 8.57 |
| (1,147) | 1:A:104:HIS:N | 1:A:104:HIS:CA | 1:A:104:HIS:C | 1:A:105:LEU:N | 10 | 8.56 |
| (1,64) | 1:A:58:ASP:N | 1:A:58:ASP:CA | 1:A:58:ASP:C | 1:A:59:GLN:N | 10 | 8.48 |
| (1,181) | 1:A:123:PRO:C | 1:A:124:GLY:N | 1:A:124:GLY:CA | 1:A:124:GLY:C | 3 | 8.47 |
| (1,145) | 1:A:103:CYS:N | 1:A:103:CYS:CA | 1:A:103:CYS:C | 1:A:104:HIS:N | 16 | 8.45 |
| (1,195) | 1:A:130:GLU:C | 1:A:131:GLY:N | 1:A:131:GLY:CA | 1:A:131:GLY:C | 4 | 8.37 |
| (1,288) | 1:A:195:LEU:N | 1:A:195:LEU:CA | 1:A:195:LEU:C | 1:A:196:GLU:N | 7 | 8.36 |
| (1,213) | 1:A:142:GLY:C | 1:A:143:GLY:N | 1:A:143:GLY:CA | 1:A:143:GLY:C | 19 | 8.3 |
| (1,181) | 1:A:123:PRO:C | 1:A:124:GLY:N | 1:A:124:GLY:CA | 1:A:124:GLY:C | 1 | 8.24 |
| (1,108) | 1:A:80:THR:N | 1:A:80:THR:CA | 1:A:80:THR:C | 1:A:81:VAL:N | 10 | 8.15 |
| (1,114) | 1:A:83:SER:N | 1:A:83:SER:CA | 1:A:83:SER:C | 1:A:84:ASN:N | 9 | 8.14 |
| (1,147) | 1:A:104:HIS:N | 1:A:104:HIS:CA | 1:A:104:HIS:C | 1:A:105:LEU:N | 4 | 8.13 |
| (1,278) | 1:A:190:LEU:N | 1:A:190:LEU:CA | 1:A:190:LEU:C | 1:A:191:LEU:N | 16 | 8.11 |
| (1,2) | 1:A:21:LEU:N | 1:A:21:LEU:CA | 1:A:21:LEU:C | 1:A:22:VAL:N | 1 | 8.07 |
| (1,143) | 1:A:102:PHE:N | 1:A:102:PHE:CA | 1:A:102:PHE:C | 1:A:103:CYS:N | 18 | 8.02 |
| (1,195) | 1:A:130:GLU:C | 1:A:131:GLY:N | 1:A:131:GLY:CA | 1:A:131:GLY:C | 10 | 8.01 |
| (1,284) | 1:A:193:GLN:N | 1:A:193:GLN:CA | 1:A:193:GLN:C | 1:A:194:LYS:N | 14 | 7.94 |
| (1,181) | 1:A:123:PRO:C | 1:A:124:GLY:N | 1:A:124:GLY:CA | 1:A:124:GLY:C | 15 | 7.91 |
| (1,147) | 1:A:104:HIS:N | 1:A:104:HIS:CA | 1:A:104:HIS:C | 1:A:105:LEU:N | 1 | 7.9 |
| (1,213) | 1:A:142:GLY:C | 1:A:143:GLY:N | 1:A:143:GLY:CA | 1:A:143:GLY:C | 1 | 7.85 |
| (1,147) | 1:A:104:HIS:N | 1:A:104:HIS:CA | 1:A:104:HIS:C | 1:A:105:LEU:N | 13 | 7.84 |
| (1,284) | 1:A:193:GLN:N | 1:A:193:GLN:CA | 1:A:193:GLN:C | 1:A:194:LYS:N | 16 | 7.83 |
| (1,143) | 1:A:102:PHE:N | 1:A:102:PHE:CA | 1:A:102:PHE:C | 1:A:103:CYS:N | 6 | 7.8 |
| (1,111) | 1:A:81:VAL:C | 1:A:82:GLN:N | 1:A:82:GLN:CA | 1:A:82:GLN:C | 11 | 7.73 |
| (1,111) | 1:A:81:VAL:C | 1:A:82:GLN:N | 1:A:82:GLN:CA | 1:A:82:GLN:C | 12 | 7.7 |
| (1,114) | 1:A:83:SER:N | 1:A:83:SER:CA | 1:A:83:SER:C | 1:A:84:ASN:N | 1 | 7.65 |
| (1,214) | 1:A:143:GLY:N | 1:A:143:GLY:CA | 1:A:143:GLY:C | 1:A:144:PRO:N | 18 | 7.64 |
| (1,180) | 1:A:123:PRO:N | 1:A:123:PRO:CA | 1:A:123:PRO:C | 1:A:124:GLY:N | 10 | 7.64 |
| (1,284) | 1:A:193:GLN:N | 1:A:193:GLN:CA | 1:A:193:GLN:C | 1:A:194:LYS:N | 1 | 7.61 |
| (1,100) | 1:A:76:VAL:N | 1:A:76:VAL:CA | 1:A:76:VAL:C | 1:A:77:LYS:N | 2 | 7.56 |
| (1,181) | 1:A:123:PRO:C | 1:A:124:GLY:N | 1:A:124:GLY:CA | 1:A:124:GLY:C | 4 | 7.54 |
| (1,143) | 1:A:102:PHE:N | 1:A:102:PHE:CA | 1:A:102:PHE:C | 1:A:103:CYS:N | 13 | 7.53 |
| (1,100) | 1:A:76:VAL:N | 1:A:76:VAL:CA | 1:A:76:VAL:C | 1:A:77:LYS:N | 12 | 7.47 |
| (1,278) | 1:A:190:LEU:N | 1:A:190:LEU:CA | 1:A:190:LEU:C | 1:A:191:LEU:N | 9 | 7.43 |
| (1,147) | 1:A:104:HIS:N | 1:A:104:HIS:CA | 1:A:104:HIS:C | 1:A:105:LEU:N | 8 | 7.43 |
| (1,177) | 1:A:121:LEU:N | 1:A:121:LEU:CA | 1:A:121:LEU:C | 1:A:122:LYS:N | 5 | 7.42 |
| (1,147) | 1:A:104:HIS:N | 1:A:104:HIS:CA | 1:A:104:HIS:C | 1:A:105:LEU:N | 3 | 7.42 |
| (1,147) | 1:A:104:HIS:N | 1:A:104:HIS:CA | 1:A:104:HIS:C | 1:A:105:LEU:N | 7 | 7.36 |
| (1,266) | 1:A:184:LYS:N | 1:A:184:LYS:CA | 1:A:184:LYS:C | 1:A:185:ALA:N | 14 | 7.35 |
| (1,284) | 1:A:193:GLN:N | 1:A:193:GLN:CA | 1:A:193:GLN:C | 1:A:194:LYS:N | 2 | 7.27 |
| (1,181) | 1:A:123:PRO:C | 1:A:124:GLY:N | 1:A:124:GLY:CA | 1:A:124:GLY:C | 9 | 7.2 |
| | · · · | <u> </u> | 1 | <u> </u> | Continu | ed on next page |



| 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) |
|---------|---|----------------|----------------|---------------|-------|-----------------|
| (1,20) | 1:A:31:GLY:N | 1:A:31:GLY:CA | 1:A:31:GLY:C | 1:A:32:LYS:N | 18 | 7.17 |
| (1,284) | 1:A:193:GLN:N | 1:A:193:GLN:CA | 1:A:193:GLN:C | 1:A:194:LYS:N | 11 | 7.16 |
| (1,266) | 1:A:184:LYS:N | 1:A:184:LYS:CA | 1:A:184:LYS:C | 1:A:185:ALA:N | 3 | 7.13 |
| (1,147) | 1:A:104:HIS:N | 1:A:104:HIS:CA | 1:A:104:HIS:C | 1:A:105:LEU:N | 19 | 7.09 |
| (1,288) | 1:A:195:LEU:N | 1:A:195:LEU:CA | 1:A:195:LEU:C | 1:A:196:GLU:N | 19 | 7.0 |
| (1,143) | 1:A:102:PHE:N | 1:A:102:PHE:CA | 1:A:102:PHE:C | 1:A:103:CYS:N | 7 | 6.97 |
| (1,284) | 1:A:193:GLN:N | 1:A:193:GLN:CA | 1:A:193:GLN:C | 1:A:194:LYS:N | 13 | 6.95 |
| (1,113) | 1:A:82:GLN:C | 1:A:83:SER:N | 1:A:83:SER:CA | 1:A:83:SER:C | 14 | 6.93 |
| (1,108) | 1:A:80:THR:N | 1:A:80:THR:CA | 1:A:80:THR:C | 1:A:81:VAL:N | 18 | 6.93 |
| (1,194) | 1:A:130:GLU:N | 1:A:130:GLU:CA | 1:A:130:GLU:C | 1:A:131:GLY:N | 2 | 6.86 |
| (1,111) | 1:A:81:VAL:C | 1:A:82:GLN:N | 1:A:82:GLN:CA | 1:A:82:GLN:C | 7 | 6.84 |
| (1,147) | 1:A:104:HIS:N | 1:A:104:HIS:CA | 1:A:104:HIS:C | 1:A:105:LEU:N | 12 | 6.81 |
| (1,102) | 1:A:77:LYS:N | 1:A:77:LYS:CA | 1:A:77:LYS:C | 1:A:78:ILE:N | 13 | 6.8 |
| (1,114) | 1:A:83:SER:N | 1:A:83:SER:CA | 1:A:83:SER:C | 1:A:84:ASN:N | 20 | 6.79 |
| (1,218) | 1:A:149:LEU:N | 1:A:149:LEU:CA | 1:A:149:LEU:C | 1:A:150:LEU:N | 17 | 6.77 |
| (1,147) | 1:A:104:HIS:N | 1:A:104:HIS:CA | 1:A:104:HIS:C | 1:A:105:LEU:N | 6 | 6.77 |
| (1,143) | 1:A:102:PHE:N | 1:A:102:PHE:CA | 1:A:102:PHE:C | 1:A:103:CYS:N | 19 | 6.69 |
| (1,111) | 1:A:81:VAL:C | 1:A:82:GLN:N | 1:A:82:GLN:CA | 1:A:82:GLN:C | 6 | 6.65 |
| (1,278) | 1:A:190:LEU:N | 1:A:190:LEU:CA | 1:A:190:LEU:C | 1:A:191:LEU:N | 15 | 6.64 |
| (1,284) | 1:A:193:GLN:N | 1:A:193:GLN:CA | 1:A:193:GLN:C | 1:A:194:LYS:N | 7 | 6.59 |
| (1,218) | 1:A:149:LEU:N | 1:A:149:LEU:CA | 1:A:149:LEU:C | 1:A:150:LEU:N | 18 | 6.56 |
| (1,283) | 1:A:192:GLY:C | 1:A:193:GLN:N | 1:A:193:GLN:CA | 1:A:193:GLN:C | 19 | 6.55 |
| (1,111) | 1:A:81:VAL:C | 1:A:82:GLN:N | 1:A:82:GLN:CA | 1:A:82:GLN:C | 19 | 6.54 |
| (1,143) | 1:A:102:PHE:N | 1:A:102:PHE:CA | 1:A:102:PHE:C | 1:A:103:CYS:N | 12 | 6.53 |
| (1,278) | 1:A:190:LEU:N | 1:A:190:LEU:CA | 1:A:190:LEU:C | 1:A:191:LEU:N | 4 | 6.52 |
| (1,143) | 1:A:102:PHE:N | 1:A:102:PHE:CA | 1:A:102:PHE:C | 1:A:103:CYS:N | 15 | 6.51 |
| (1,201) | 1:A:134:PRO:C | 1:A:135:GLU:N | 1:A:135:GLU:CA | 1:A:135:GLU:C | 19 | 6.5 |
| (1,198) | 1:A:132:PHE:N | 1:A:132:PHE:CA | 1:A:132:PHE:C | 1:A:133:ALA:N | 6 | 6.47 |
| (1,108) | 1:A:80:THR:N | 1:A:80:THR:CA | 1:A:80:THR:C | 1:A:81:VAL:N | 9 | 6.46 |
| (1,188) | 1:A:127:PHE:N | 1:A:127:PHE:CA | 1:A:127:PHE:C | 1:A:128:ILE:N | 2 | 6.4 |
| (1,142) | 1:A:101:ILE:C | 1:A:102:PHE:N | 1:A:102:PHE:CA | 1:A:102:PHE:C | 9 | 6.4 |
| (1,142) | 1:A:101:ILE:C | 1:A:102:PHE:N | 1:A:102:PHE:CA | 1:A:102:PHE:C | 20 | 6.37 |
| (1,100) | 1:A:76:VAL:N | 1:A:76:VAL:CA | 1:A:76:VAL:C | 1:A:77:LYS:N | 10 | 6.31 |
| (1,143) | 1:A:102:PHE:N | 1:A:102:PHE:CA | 1:A:102:PHE:C | 1:A:103:CYS:N | 17 | 6.28 |
| (1,20) | 1:A:31:GLY:N | 1:A:31:GLY:CA | 1:A:31:GLY:C | 1:A:32:LYS:N | 13 | 6.25 |
| (1,284) | 1:A:193:GLN:N | 1:A:193:GLN:CA | 1:A:193:GLN:C | 1:A:194:LYS:N | 19 | 6.23 |
| (1,181) | 1:A:123:PRO:C | 1:A:124:GLY:N | 1:A:124:GLY:CA | 1:A:124:GLY:C | 11 | 6.21 |
| (1,219) | 1:A:149:LEU:C | 1:A:150:LEU:N | 1:A:150:LEU:CA | 1:A:150:LEU:C | 8 | 6.19 |
| (1,278) | 1:A:190:LEU:N | 1:A:190:LEU:CA | 1:A:190:LEU:C | 1:A:191:LEU:N | 7 | 6.1 |
| (1,100) | 1:A:76:VAL:N | 1:A:76:VAL:CA | 1:A:76:VAL:C | 1:A:77:LYS:N | 19 | 6.08 |
| (1,173) | 1:A:118:TYR:N | 1:A:118:TYR:CA | 1:A:118:TYR:C | 1:A:119:GLN:N | 2 | 6.05 |
| (1,194) | 1:A:130:GLU:N | 1:A:130:GLU:CA | 1:A:130:GLU:C | 1:A:131:GLY:N | 13 | 6.03 |
| (1,108) | 1:A:80:THR:N | 1:A:80:THR:CA | 1:A:80:THR:C | 1:A:81:VAL:N | 1 | 6.03 |
| (1,177) | 1:A:121:LEU:N | 1:A:121:LEU:CA | 1:A:121:LEU:C | 1:A:122:LYS:N | 6 | 6.0 |
| (1,284) | 1:A:193:GLN:N | 1:A:193:GLN:CA | 1:A:193:GLN:C | 1:A:194:LYS:N | 12 | 5.98 |
| (1,147) | 1:A:104:HIS:N | 1:A:104:HIS:CA | 1:A:104:HIS:C | 1:A:105:LEU:N | 17 | 5.97 |
| (1,114) | 1:A:83:SER:N | 1:A:83:SER:CA | 1:A:83:SER:C | 1:A:84:ASN:N | 10 | 5.97 |
| (1,266) | 1:A:184:LYS:N | 1:A:184:LYS:CA | 1:A:184:LYS:C | 1:A:185:ALA:N | 1 | 5.96 |
| (1,212) | 1:A:141:THR:N | 1:A:141:THR:CA | 1:A:141:THR:C | 1:A:142:GLY:N | 5 | 5.91 |
| (1,268) | 1:A:185:ALA:N | 1:A:185:ALA:CA | 1:A:185:ALA:C | 1:A:186:ALA:N | 18 | 5.87 |
| (1,118) | 1:A:85:LEU:N | 1:A:85:LEU:CA | 1:A:85:LEU:C | 1:A:86:ALA:N | 1 | 5.87 |



| | ed from previous po | | | | | |
|---------|---------------------|----------------|----------------|---------------|-------|-------------------------------------|
| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model | $\textbf{Violation} \ (\ \circ \)$ |
| (1,181) | 1:A:123:PRO:C | 1:A:124:GLY:N | 1:A:124:GLY:CA | 1:A:124:GLY:C | 5 | 5.82 |
| (1,218) | 1:A:149:LEU:N | 1:A:149:LEU:CA | 1:A:149:LEU:C | 1:A:150:LEU:N | 8 | 5.81 |
| (1,194) | 1:A:130:GLU:N | 1:A:130:GLU:CA | 1:A:130:GLU:C | 1:A:131:GLY:N | 10 | 5.79 |
| (1,211) | 1:A:140:ASN:C | 1:A:141:THR:N | 1:A:141:THR:CA | 1:A:141:THR:C | 9 | 5.78 |
| (1,147) | 1:A:104:HIS:N | 1:A:104:HIS:CA | 1:A:104:HIS:C | 1:A:105:LEU:N | 20 | 5.77 |
| (1,100) | 1:A:76:VAL:N | 1:A:76:VAL:CA | 1:A:76:VAL:C | 1:A:77:LYS:N | 17 | 5.72 |
| (1,194) | 1:A:130:GLU:N | 1:A:130:GLU:CA | 1:A:130:GLU:C | 1:A:131:GLY:N | 15 | 5.66 |
| (1,115) | 1:A:83:SER:C | 1:A:84:ASN:N | 1:A:84:ASN:CA | 1:A:84:ASN:C | 8 | 5.63 |
| (1,145) | 1:A:103:CYS:N | 1:A:103:CYS:CA | 1:A:103:CYS:C | 1:A:104:HIS:N | 2 | 5.6 |
| (1,181) | 1:A:123:PRO:C | 1:A:124:GLY:N | 1:A:124:GLY:CA | 1:A:124:GLY:C | 16 | 5.59 |
| (1,194) | 1:A:130:GLU:N | 1:A:130:GLU:CA | 1:A:130:GLU:C | 1:A:131:GLY:N | 3 | 5.55 |
| (1,194) | 1:A:130:GLU:N | 1:A:130:GLU:CA | 1:A:130:GLU:C | 1:A:131:GLY:N | 1 | 5.52 |
| (1,285) | 1:A:193:GLN:C | 1:A:194:LYS:N | 1:A:194:LYS:CA | 1:A:194:LYS:C | 13 | 5.51 |
| (1,18) | 1:A:30:GLN:N | 1:A:30:GLN:CA | 1:A:30:GLN:C | 1:A:31:GLY:N | 2 | 5.47 |
| (1,106) | 1:A:79:THR:N | 1:A:79:THR:CA | 1:A:79:THR:C | 1:A:80:THR:N | 11 | 5.47 |
| (1,2) | 1:A:21:LEU:N | 1:A:21:LEU:CA | 1:A:21:LEU:C | 1:A:22:VAL:N | 17 | 5.37 |
| (1,137) | 1:A:99:VAL:N | 1:A:99:VAL:CA | 1:A:99:VAL:C | 1:A:100:SER:N | 17 | 5.35 |
| (1,62) | 1:A:57:VAL:N | 1:A:57:VAL:CA | 1:A:57:VAL:C | 1:A:58:ASP:N | 20 | 5.28 |
| (1,143) | 1:A:102:PHE:N | 1:A:102:PHE:CA | 1:A:102:PHE:C | 1:A:103:CYS:N | 4 | 5.28 |
| (1,147) | 1:A:104:HIS:N | 1:A:104:HIS:CA | 1:A:104:HIS:C | 1:A:105:LEU:N | 18 | 5.26 |
| (1,108) | 1:A:80:THR:N | 1:A:80:THR:CA | 1:A:80:THR:C | 1:A:81:VAL:N | 3 | 5.26 |
| (1,288) | 1:A:195:LEU:N | 1:A:195:LEU:CA | 1:A:195:LEU:C | 1:A:196:GLU:N | 4 | 5.21 |
| (1,181) | 1:A:123:PRO:C | 1:A:124:GLY:N | 1:A:124:GLY:CA | 1:A:124:GLY:C | 12 | 5.21 |
| (1,173) | 1:A:118:TYR:N | 1:A:118:TYR:CA | 1:A:118:TYR:C | 1:A:119:GLN:N | 8 | 5.21 |
| (1,114) | 1:A:83:SER:N | 1:A:83:SER:CA | 1:A:83:SER:C | 1:A:84:ASN:N | 8 | 5.2 |
| (1,2) | 1:A:21:LEU:N | 1:A:21:LEU:CA | 1:A:21:LEU:C | 1:A:22:VAL:N | 12 | 5.19 |
| (1,194) | 1:A:130:GLU:N | 1:A:130:GLU:CA | 1:A:130:GLU:C | 1:A:131:GLY:N | 4 | 5.19 |
| (1,171) | 1:A:117:VAL:N | 1:A:117:VAL:CA | 1:A:117:VAL:C | 1:A:118:TYR:N | 2 | 5.18 |
| (1,142) | 1:A:101:ILE:C | 1:A:102:PHE:N | 1:A:102:PHE:CA | 1:A:102:PHE:C | 19 | 5.14 |
| (1,194) | 1:A:130:GLU:N | 1:A:130:GLU:CA | 1:A:130:GLU:C | 1:A:131:GLY:N | 5 | 5.12 |
| (1,64) | 1:A:58:ASP:N | 1:A:58:ASP:CA | 1:A:58:ASP:C | 1:A:59:GLN:N | 20 | 5.11 |
| (1,198) | 1:A:132:PHE:N | 1:A:132:PHE:CA | 1:A:132:PHE:C | 1:A:133:ALA:N | 8 | 5.1 |
| (1,198) | 1:A:132:PHE:N | 1:A:132:PHE:CA | 1:A:132:PHE:C | 1:A:133:ALA:N | 17 | 5.07 |
| (1,181) | 1:A:123:PRO:C | 1:A:124:GLY:N | 1:A:124:GLY:CA | 1:A:124:GLY:C | 7 | 5.07 |
| (1,3) | 1:A:21:LEU:C | 1:A:22:VAL:N | 1:A:22:VAL:CA | 1:A:22:VAL:C | 16 | 5.06 |
| (1,2) | 1:A:21:LEU:N | 1:A:21:LEU:CA | 1:A:21:LEU:C | 1:A:22:VAL:N | 7 | 5.05 |
| (1,22) | 1:A:32:LYS:N | 1:A:32:LYS:CA | 1:A:32:LYS:C | 1:A:33:ILE:N | 1 | 5.02 |
| (1,268) | 1:A:185:ALA:N | 1:A:185:ALA:CA | 1:A:185:ALA:C | 1:A:186:ALA:N | 20 | 5.0 |
| (1,188) | 1:A:127:PHE:N | 1:A:127:PHE:CA | 1:A:127:PHE:C | 1:A:128:ILE:N | 13 | 5.0 |
| (1,111) | 1:A:81:VAL:C | 1:A:82:GLN:N | 1:A:82:GLN:CA | 1:A:82:GLN:C | 4 | 4.99 |
| (1,100) | 1:A:76:VAL:N | 1:A:76:VAL:CA | 1:A:76:VAL:C | 1:A:77:LYS:N | 18 | 4.98 |
| (1,100) | 1:A:76:VAL:N | 1:A:76:VAL:CA | 1:A:76:VAL:C | 1:A:77:LYS:N | 7 | 4.96 |
| (1,185) | 1:A:125:GLY:C | 1:A:126:VAL:N | 1:A:126:VAL:CA | 1:A:126:VAL:C | 7 | 4.95 |
| (1,266) | 1:A:184:LYS:N | 1:A:184:LYS:CA | 1:A:184:LYS:C | 1:A:185:ALA:N | 12 | 4.93 |
| (1,266) | 1:A:184:LYS:N | 1:A:184:LYS:CA | 1:A:184:LYS:C | 1:A:185:ALA:N | 19 | 4.88 |
| (1,260) | 1:A:173:ARG:N | 1:A:173:ARG:CA | 1:A:173:ARG:C | 1:A:174:ASN:N | 19 | 4.87 |
| (1,268) | 1:A:185:ALA:N | 1:A:185:ALA:CA | 1:A:185:ALA:C | 1:A:186:ALA:N | 2 | 4.85 |
| (1,180) | 1:A:123:PRO:N | 1:A:123:PRO:CA | 1:A:123:PRO:C | 1:A:124:GLY:N | 19 | 4.85 |
| (1,100) | 1:A:76:VAL:N | 1:A:76:VAL:CA | 1:A:76:VAL:C | 1:A:77:LYS:N | 9 | 4.85 |
| (1,118) | 1:A:85:LEU:N | 1:A:85:LEU:CA | 1:A:85:LEU:C | 1:A:86:ALA:N | 3 | 4.82 |
| (1,171) | 1:A:117:VAL:N | 1:A:117:VAL:CA | 1:A:117:VAL:C | 1:A:118:TYR:N | 5 | 4.77 |



| | ed from previous pe | | | | | |
|---------|---------------------|----------------|----------------|---------------|-------|---------------------|
| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model | Violation (\circ) |
| (1,139) | 1:A:100:SER:N | 1:A:100:SER:CA | 1:A:100:SER:C | 1:A:101:ILE:N | 11 | 4.77 |
| (1,270) | 1:A:186:ALA:N | 1:A:186:ALA:CA | 1:A:186:ALA:C | 1:A:187:LEU:N | 12 | 4.76 |
| (1,142) | 1:A:101:ILE:C | 1:A:102:PHE:N | 1:A:102:PHE:CA | 1:A:102:PHE:C | 2 | 4.75 |
| (1,268) | 1:A:185:ALA:N | 1:A:185:ALA:CA | 1:A:185:ALA:C | 1:A:186:ALA:N | 13 | 4.71 |
| (1,284) | 1:A:193:GLN:N | 1:A:193:GLN:CA | 1:A:193:GLN:C | 1:A:194:LYS:N | 4 | 4.68 |
| (1,181) | 1:A:123:PRO:C | 1:A:124:GLY:N | 1:A:124:GLY:CA | 1:A:124:GLY:C | 20 | 4.68 |
| (1,143) | 1:A:102:PHE:N | 1:A:102:PHE:CA | 1:A:102:PHE:C | 1:A:103:CYS:N | 2 | 4.68 |
| (1,106) | 1:A:79:THR:N | 1:A:79:THR:CA | 1:A:79:THR:C | 1:A:80:THR:N | 12 | 4.68 |
| (1,258) | 1:A:172:GLU:N | 1:A:172:GLU:CA | 1:A:172:GLU:C | 1:A:173:ARG:N | 17 | 4.67 |
| (1,188) | 1:A:127:PHE:N | 1:A:127:PHE:CA | 1:A:127:PHE:C | 1:A:128:ILE:N | 8 | 4.67 |
| (1,173) | 1:A:118:TYR:N | 1:A:118:TYR:CA | 1:A:118:TYR:C | 1:A:119:GLN:N | 5 | 4.67 |
| (1,119) | 1:A:85:LEU:C | 1:A:86:ALA:N | 1:A:86:ALA:CA | 1:A:86:ALA:C | 12 | 4.67 |
| (1,285) | 1:A:193:GLN:C | 1:A:194:LYS:N | 1:A:194:LYS:CA | 1:A:194:LYS:C | 11 | 4.66 |
| (1,285) | 1:A:193:GLN:C | 1:A:194:LYS:N | 1:A:194:LYS:CA | 1:A:194:LYS:C | 4 | 4.65 |
| (1,123) | 1:A:88:PHE:C | 1:A:89:ASP:N | 1:A:89:ASP:CA | 1:A:89:ASP:C | 17 | 4.64 |
| (1,115) | 1:A:83:SER:C | 1:A:84:ASN:N | 1:A:84:ASN:CA | 1:A:84:ASN:C | 14 | 4.62 |
| (1,239) | 1:A:162:SER:C | 1:A:163:LEU:N | 1:A:163:LEU:CA | 1:A:163:LEU:C | 17 | 4.61 |
| (1,212) | 1:A:141:THR:N | 1:A:141:THR:CA | 1:A:141:THR:C | 1:A:142:GLY:N | 11 | 4.58 |
| (1,20) | 1:A:31:GLY:N | 1:A:31:GLY:CA | 1:A:31:GLY:C | 1:A:32:LYS:N | 15 | 4.56 |
| (1,156) | 1:A:109:LEU:N | 1:A:109:LEU:CA | 1:A:109:LEU:C | 1:A:110:ARG:N | 18 | 4.54 |
| (1,143) | 1:A:102:PHE:N | 1:A:102:PHE:CA | 1:A:102:PHE:C | 1:A:103:CYS:N | 5 | 4.49 |
| (1,173) | 1:A:118:TYR:N | 1:A:118:TYR:CA | 1:A:118:TYR:C | 1:A:119:GLN:N | 1 | 4.46 |
| (1,106) | 1:A:79:THR:N | 1:A:79:THR:CA | 1:A:79:THR:C | 1:A:80:THR:N | 4 | 4.4 |
| (1,106) | 1:A:79:THR:N | 1:A:79:THR:CA | 1:A:79:THR:C | 1:A:80:THR:N | 20 | 4.4 |
| (1,142) | 1:A:101:ILE:C | 1:A:102:PHE:N | 1:A:102:PHE:CA | 1:A:102:PHE:C | 13 | 4.38 |
| (1,147) | 1:A:104:HIS:N | 1:A:104:HIS:CA | 1:A:104:HIS:C | 1:A:105:LEU:N | 9 | 4.35 |
| (1,28) | 1:A:35:CYS:N | 1:A:35:CYS:CA | 1:A:35:CYS:C | 1:A:36:LEU:N | 5 | 4.34 |
| (1,142) | 1:A:101:ILE:C | 1:A:102:PHE:N | 1:A:102:PHE:CA | 1:A:102:PHE:C | 5 | 4.32 |
| (1,54) | 1:A:53:GLU:N | 1:A:53:GLU:CA | 1:A:53:GLU:C | 1:A:54:VAL:N | 18 | 4.3 |
| (1,22) | 1:A:32:LYS:N | 1:A:32:LYS:CA | 1:A:32:LYS:C | 1:A:33:ILE:N | 2 | 4.27 |
| (1,147) | 1:A:104:HIS:N | 1:A:104:HIS:CA | 1:A:104:HIS:C | 1:A:105:LEU:N | 16 | 4.27 |
| (1,278) | 1:A:190:LEU:N | 1:A:190:LEU:CA | 1:A:190:LEU:C | 1:A:191:LEU:N | 3 | 4.25 |
| (1,142) | 1:A:101:ILE:C | 1:A:102:PHE:N | 1:A:102:PHE:CA | 1:A:102:PHE:C | 14 | 4.24 |
| (1,202) | 1:A:135:GLU:N | 1:A:135:GLU:CA | 1:A:135:GLU:C | 1:A:136:GLN:N | 19 | 4.22 |
| (1,145) | 1:A:103:CYS:N | 1:A:103:CYS:CA | 1:A:103:CYS:C | 1:A:104:HIS:N | 10 | 4.18 |
| (1,115) | 1:A:83:SER:C | 1:A:84:ASN:N | 1:A:84:ASN:CA | 1:A:84:ASN:C | 9 | 4.17 |
| (1,270) | 1:A:186:ALA:N | 1:A:186:ALA:CA | 1:A:186:ALA:C | 1:A:187:LEU:N | 8 | 4.12 |
| (1,106) | 1:A:79:THR:N | 1:A:79:THR:CA | 1:A:79:THR:C | 1:A:80:THR:N | 5 | 4.12 |
| (1,156) | 1:A:109:LEU:N | 1:A:109:LEU:CA | 1:A:109:LEU:C | 1:A:110:ARG:N | 15 | 4.11 |
| (1,106) | 1:A:79:THR:N | 1:A:79:THR:CA | 1:A:79:THR:C | 1:A:80:THR:N | 7 | 4.11 |
| (1,285) | 1:A:193:GLN:C | 1:A:194:LYS:N | 1:A:194:LYS:CA | 1:A:194:LYS:C | 1 | 4.1 |
| (1,181) | 1:A:123:PRO:C | 1:A:124:GLY:N | 1:A:124:GLY:CA | 1:A:124:GLY:C | 2 | 4.09 |
| (1,219) | 1:A:149:LEU:C | 1:A:150:LEU:N | 1:A:150:LEU:CA | 1:A:150:LEU:C | 17 | 4.08 |
| (1,114) | 1:A:83:SER:N | 1:A:83:SER:CA | 1:A:83:SER:C | 1:A:84:ASN:N | 14 | 4.07 |
| (1,274) | 1:A:188:ILE:N | 1:A:188:ILE:CA | 1:A:188:ILE:C | 1:A:189:GLN:N | 2 | 4.06 |
| (1,106) | 1:A:79:THR:N | 1:A:79:THR:CA | 1:A:79:THR:C | 1:A:80:THR:N | 19 | 4.04 |
| (1,169) | 1:A:116:LYS:N | 1:A:116:LYS:CA | 1:A:116:LYS:C | 1:A:117:VAL:N | 16 | 4.02 |
| (1,285) | 1:A:193:GLN:C | 1:A:194:LYS:N | 1:A:194:LYS:CA | 1:A:194:LYS:C | 18 | 4.01 |
| (1,100) | 1:A:76:VAL:N | 1:A:76:VAL:CA | 1:A:76:VAL:C | 1:A:77:LYS:N | 11 | 4.01 |
| (1,285) | 1:A:193:GLN:C | 1:A:194:LYS:N | 1:A:194:LYS:CA | 1:A:194:LYS:C | 14 | 3.98 |
| (1,283) | 1:A:192:GLY:C | 1:A:193:GLN:N | 1:A:193:GLN:CA | 1:A:193:GLN:C | 20 | 3.98 |
| | | | | | | ed on nert nage |



| | ed from previous pe | | | | | |
|---------|---------------------|----------------|----------------|---------------|-------|-----------------------|
| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model | Violation (\circ) |
| (1,268) | 1:A:185:ALA:N | 1:A:185:ALA:CA | 1:A:185:ALA:C | 1:A:186:ALA:N | 15 | 3.98 |
| (1,198) | 1:A:132:PHE:N | 1:A:132:PHE:CA | 1:A:132:PHE:C | 1:A:133:ALA:N | 16 | 3.98 |
| (1,211) | 1:A:140:ASN:C | 1:A:141:THR:N | 1:A:141:THR:CA | 1:A:141:THR:C | 15 | 3.95 |
| (1,147) | 1:A:104:HIS:N | 1:A:104:HIS:CA | 1:A:104:HIS:C | 1:A:105:LEU:N | 14 | 3.92 |
| (1,274) | 1:A:188:ILE:N | 1:A:188:ILE:CA | 1:A:188:ILE:C | 1:A:189:GLN:N | 5 | 3.91 |
| (1,195) | 1:A:130:GLU:C | 1:A:131:GLY:N | 1:A:131:GLY:CA | 1:A:131:GLY:C | 20 | 3.91 |
| (1,268) | 1:A:185:ALA:N | 1:A:185:ALA:CA | 1:A:185:ALA:C | 1:A:186:ALA:N | 10 | 3.9 |
| (1,264) | 1:A:175:LEU:N | 1:A:175:LEU:CA | 1:A:175:LEU:C | 1:A:176:ASP:N | 8 | 3.9 |
| (1,18) | 1:A:30:GLN:N | 1:A:30:GLN:CA | 1:A:30:GLN:C | 1:A:31:GLY:N | 7 | 3.9 |
| (1,122) | 1:A:88:PHE:N | 1:A:88:PHE:CA | 1:A:88:PHE:C | 1:A:89:ASP:N | 12 | 3.9 |
| (1,127) | 1:A:92:ALA:N | 1:A:92:ALA:CA | 1:A:92:ALA:C | 1:A:93:ASP:N | 2 | 3.89 |
| (1,189) | 1:A:127:PHE:C | 1:A:128:ILE:N | 1:A:128:ILE:CA | 1:A:128:ILE:C | 5 | 3.87 |
| (1,147) | 1:A:104:HIS:N | 1:A:104:HIS:CA | 1:A:104:HIS:C | 1:A:105:LEU:N | 15 | 3.86 |
| (1,274) | 1:A:188:ILE:N | 1:A:188:ILE:CA | 1:A:188:ILE:C | 1:A:189:GLN:N | 4 | 3.84 |
| (1,264) | 1:A:175:LEU:N | 1:A:175:LEU:CA | 1:A:175:LEU:C | 1:A:176:ASP:N | 11 | 3.83 |
| (1,18) | 1:A:30:GLN:N | 1:A:30:GLN:CA | 1:A:30:GLN:C | 1:A:31:GLY:N | 9 | 3.8 |
| (1,170) | 1:A:116:LYS:C | 1:A:117:VAL:N | 1:A:117:VAL:CA | 1:A:117:VAL:C | 8 | 3.77 |
| (1,283) | 1:A:192:GLY:C | 1:A:193:GLN:N | 1:A:193:GLN:CA | 1:A:193:GLN:C | 1 | 3.74 |
| (1,194) | 1:A:130:GLU:N | 1:A:130:GLU:CA | 1:A:130:GLU:C | 1:A:131:GLY:N | 11 | 3.74 |
| (1,258) | 1:A:172:GLU:N | 1:A:172:GLU:CA | 1:A:172:GLU:C | 1:A:173:ARG:N | 2 | 3.72 |
| (1,285) | 1:A:193:GLN:C | 1:A:194:LYS:N | 1:A:194:LYS:CA | 1:A:194:LYS:C | 16 | 3.71 |
| (1,274) | 1:A:188:ILE:N | 1:A:188:ILE:CA | 1:A:188:ILE:C | 1:A:189:GLN:N | 17 | 3.71 |
| (1,260) | 1:A:173:ARG:N | 1:A:173:ARG:CA | 1:A:173:ARG:C | 1:A:174:ASN:N | 13 | 3.7 |
| (1,127) | 1:A:92:ALA:N | 1:A:92:ALA:CA | 1:A:92:ALA:C | 1:A:93:ASP:N | 16 | 3.66 |
| (1,258) | 1:A:172:GLU:N | 1:A:172:GLU:CA | 1:A:172:GLU:C | 1:A:173:ARG:N | 18 | 3.63 |
| (1,111) | 1:A:81:VAL:C | 1:A:82:GLN:N | 1:A:82:GLN:CA | 1:A:82:GLN:C | 13 | 3.62 |
| (1,112) | 1:A:82:GLN:N | 1:A:82:GLN:CA | 1:A:82:GLN:C | 1:A:83:SER:N | 20 | 3.6 |
| (1,54) | 1:A:53:GLU:N | 1:A:53:GLU:CA | 1:A:53:GLU:C | 1:A:54:VAL:N | 5 | 3.59 |
| (1,268) | 1:A:185:ALA:N | 1:A:185:ALA:CA | 1:A:185:ALA:C | 1:A:186:ALA:N | 17 | 3.58 |
| (1,189) | 1:A:127:PHE:C | 1:A:128:ILE:N | 1:A:128:ILE:CA | 1:A:128:ILE:C | 1 | 3.57 |
| (1,62) | 1:A:57:VAL:N | 1:A:57:VAL:CA | 1:A:57:VAL:C | 1:A:58:ASP:N | 3 | 3.55 |
| (1,106) | 1:A:79:THR:N | 1:A:79:THR:CA | 1:A:79:THR:C | 1:A:80:THR:N | 6 | 3.55 |
| (1,106) | 1:A:79:THR:N | 1:A:79:THR:CA | 1:A:79:THR:C | 1:A:80:THR:N | 15 | 3.52 |
| (1,62) | 1:A:57:VAL:N | 1:A:57:VAL:CA | 1:A:57:VAL:C | 1:A:58:ASP:N | 9 | 3.51 |
| (1,54) | 1:A:53:GLU:N | 1:A:53:GLU:CA | 1:A:53:GLU:C | 1:A:54:VAL:N | 8 | 3.51 |
| (1,115) | 1:A:83:SER:C | 1:A:84:ASN:N | 1:A:84:ASN:CA | 1:A:84:ASN:C | 11 | 3.51 |
| (1,206) | 1:A:137:LEU:N | 1:A:137:LEU:CA | 1:A:137:LEU:C | 1:A:138:GLN:N | 9 | 3.5 |
| (1,171) | 1:A:117:VAL:N | 1:A:117:VAL:CA | 1:A:117:VAL:C | 1:A:118:TYR:N | 13 | 3.5 |
| (1,274) | 1:A:188:ILE:N | 1:A:188:ILE:CA | 1:A:188:ILE:C | 1:A:189:GLN:N | 11 | 3.49 |
| (1,111) | 1:A:81:VAL:C | 1:A:82:GLN:N | 1:A:82:GLN:CA | 1:A:82:GLN:C | 15 | 3.49 |
| (1,174) | 1:A:118:TYR:C | 1:A:119:GLN:N | 1:A:119:GLN:CA | 1:A:119:GLN:C | 10 | 3.46 |
| (1,28) | 1:A:35:CYS:N | 1:A:35:CYS:CA | 1:A:35:CYS:C | 1:A:36:LEU:N | 17 | 3.43 |
| (1,284) | 1:A:193:GLN:N | 1:A:193:GLN:CA | 1:A:193:GLN:C | 1:A:194:LYS:N | 8 | 3.42 |
| (1,2) | 1:A:21:LEU:N | 1:A:21:LEU:CA | 1:A:21:LEU:C | 1:A:22:VAL:N | 13 | 3.42 |
| (1,111) | 1:A:81:VAL:C | 1:A:82:GLN:N | 1:A:82:GLN:CA | 1:A:82:GLN:C | 16 | 3.42 |
| (1,57) | 1:A:54:VAL:C | 1:A:55:THR:N | 1:A:55:THR:CA | 1:A:55:THR:C | 12 | 3.4 |
| (1,260) | 1:A:173:ARG:N | 1:A:173:ARG:CA | 1:A:173:ARG:C | 1:A:174:ASN:N | 3 | 3.39 |
| (1,18) | 1:A:30:GLN:N | 1:A:30:GLN:CA | 1:A:30:GLN:C | 1:A:31:GLY:N | 4 | 3.39 |
| (1,182) | 1:A:124:GLY:N | 1:A:124:GLY:CA | 1:A:124:GLY:C | 1:A:125:GLY:N | 16 | 3.38 |
| (1,288) | 1:A:195:LEU:N | 1:A:195:LEU:CA | 1:A:195:LEU:C | 1:A:196:GLU:N | 10 | 3.36 |
| (1,182) | 1:A:124:GLY:N | 1:A:124:GLY:CA | 1:A:124:GLY:C | 1:A:125:GLY:N | 10 | 3.36 |



| | ed from previous po | | | | | |
|---------|---------------------|----------------|----------------|---------------|-------|-------------------------------------|
| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model | $\textbf{Violation} \ (\ \circ \)$ |
| (1,283) | 1:A:192:GLY:C | 1:A:193:GLN:N | 1:A:193:GLN:CA | 1:A:193:GLN:C | 2 | 3.35 |
| (1,126) | 1:A:91:VAL:C | 1:A:92:ALA:N | 1:A:92:ALA:CA | 1:A:92:ALA:C | 20 | 3.35 |
| (1,118) | 1:A:85:LEU:N | 1:A:85:LEU:CA | 1:A:85:LEU:C | 1:A:86:ALA:N | 9 | 3.34 |
| (1,3) | 1:A:21:LEU:C | 1:A:22:VAL:N | 1:A:22:VAL:CA | 1:A:22:VAL:C | 13 | 3.33 |
| (1,198) | 1:A:132:PHE:N | 1:A:132:PHE:CA | 1:A:132:PHE:C | 1:A:133:ALA:N | 20 | 3.32 |
| (1,139) | 1:A:100:SER:N | 1:A:100:SER:CA | 1:A:100:SER:C | 1:A:101:ILE:N | 8 | 3.31 |
| (1,115) | 1:A:83:SER:C | 1:A:84:ASN:N | 1:A:84:ASN:CA | 1:A:84:ASN:C | 2 | 3.31 |
| (1,262) | 1:A:174:ASN:N | 1:A:174:ASN:CA | 1:A:174:ASN:C | 1:A:175:LEU:N | 10 | 3.3 |
| (1,260) | 1:A:173:ARG:N | 1:A:173:ARG:CA | 1:A:173:ARG:C | 1:A:174:ASN:N | 2 | 3.27 |
| (1,185) | 1:A:125:GLY:C | 1:A:126:VAL:N | 1:A:126:VAL:CA | 1:A:126:VAL:C | 12 | 3.21 |
| (1,106) | 1:A:79:THR:N | 1:A:79:THR:CA | 1:A:79:THR:C | 1:A:80:THR:N | 16 | 3.21 |
| (1,177) | 1:A:121:LEU:N | 1:A:121:LEU:CA | 1:A:121:LEU:C | 1:A:122:LYS:N | 16 | 3.2 |
| (1,189) | 1:A:127:PHE:C | 1:A:128:ILE:N | 1:A:128:ILE:CA | 1:A:128:ILE:C | 12 | 3.19 |
| (1,219) | 1:A:149:LEU:C | 1:A:150:LEU:N | 1:A:150:LEU:CA | 1:A:150:LEU:C | 6 | 3.18 |
| (1,18) | 1:A:30:GLN:N | 1:A:30:GLN:CA | 1:A:30:GLN:C | 1:A:31:GLY:N | 3 | 3.17 |
| (1,22) | 1:A:32:LYS:N | 1:A:32:LYS:CA | 1:A:32:LYS:C | 1:A:33:ILE:N | 8 | 3.15 |
| (1,193) | 1:A:129:LEU:C | 1:A:130:GLU:N | 1:A:130:GLU:CA | 1:A:130:GLU:C | 19 | 3.14 |
| (1,179) | 1:A:122:LYS:N | 1:A:122:LYS:CA | 1:A:122:LYS:C | 1:A:123:PRO:N | 6 | 3.14 |
| (1,106) | 1:A:79:THR:N | 1:A:79:THR:CA | 1:A:79:THR:C | 1:A:80:THR:N | 14 | 3.11 |
| (1,264) | 1:A:175:LEU:N | 1:A:175:LEU:CA | 1:A:175:LEU:C | 1:A:176:ASP:N | 4 | 3.09 |
| (1,264) | 1:A:175:LEU:N | 1:A:175:LEU:CA | 1:A:175:LEU:C | 1:A:176:ASP:N | 20 | 3.09 |
| (1,22) | 1:A:32:LYS:N | 1:A:32:LYS:CA | 1:A:32:LYS:C | 1:A:33:ILE:N | 12 | 3.09 |
| (1,237) | 1:A:161:PRO:C | 1:A:162:SER:N | 1:A:162:SER:CA | 1:A:162:SER:C | 6 | 3.08 |
| (1,194) | 1:A:130:GLU:N | 1:A:130:GLU:CA | 1:A:130:GLU:C | 1:A:131:GLY:N | 17 | 3.07 |
| (1,268) | 1:A:185:ALA:N | 1:A:185:ALA:CA | 1:A:185:ALA:C | 1:A:186:ALA:N | 3 | 3.05 |
| (1,284) | 1:A:193:GLN:N | 1:A:193:GLN:CA | 1:A:193:GLN:C | 1:A:194:LYS:N | 20 | 3.04 |
| (1,190) | 1:A:128:ILE:N | 1:A:128:ILE:CA | 1:A:128:ILE:C | 1:A:129:LEU:N | 14 | 3.03 |
| (1,180) | 1:A:123:PRO:N | 1:A:123:PRO:CA | 1:A:123:PRO:C | 1:A:124:GLY:N | 2 | 3.03 |
| (1,57) | 1:A:54:VAL:C | 1:A:55:THR:N | 1:A:55:THR:CA | 1:A:55:THR:C | 18 | 3.01 |
| (1,173) | 1:A:118:TYR:N | 1:A:118:TYR:CA | 1:A:118:TYR:C | 1:A:119:GLN:N | 15 | 2.99 |
| (1,264) | 1:A:175:LEU:N | 1:A:175:LEU:CA | 1:A:175:LEU:C | 1:A:176:ASP:N | 2 | 2.95 |
| (1,137) | 1:A:99:VAL:N | 1:A:99:VAL:CA | 1:A:99:VAL:C | 1:A:100:SER:N | 6 | 2.95 |
| (1,106) | 1:A:79:THR:N | 1:A:79:THR:CA | 1:A:79:THR:C | 1:A:80:THR:N | 8 | 2.95 |
| (1,258) | 1:A:172:GLU:N | 1:A:172:GLU:CA | 1:A:172:GLU:C | 1:A:173:ARG:N | 19 | 2.94 |
| (1,54) | 1:A:53:GLU:N | 1:A:53:GLU:CA | 1:A:53:GLU:C | 1:A:54:VAL:N | 6 | 2.93 |
| (1,186) | 1:A:126:VAL:N | 1:A:126:VAL:CA | 1:A:126:VAL:C | 1:A:127:PHE:N | 13 | 2.93 |
| (1,214) | 1:A:143:GLY:N | 1:A:143:GLY:CA | 1:A:143:GLY:C | 1:A:144:PRO:N | 8 | 2.92 |
| (1,285) | 1:A:193:GLN:C | 1:A:194:LYS:N | 1:A:194:LYS:CA | 1:A:194:LYS:C | 12 | 2.9 |
| (1,285) | 1:A:193:GLN:C | 1:A:194:LYS:N | 1:A:194:LYS:CA | 1:A:194:LYS:C | 17 | 2.89 |
| (1,117) | 1:A:84:ASN:C | 1:A:85:LEU:N | 1:A:85:LEU:CA | 1:A:85:LEU:C | 17 | 2.89 |
| (1,46) | 1:A:49:SER:N | 1:A:49:SER:CA | 1:A:49:SER:C | 1:A:50:LEU:N | 11 | 2.86 |
| (1,274) | 1:A:188:ILE:N | 1:A:188:ILE:CA | 1:A:188:ILE:C | 1:A:189:GLN:N | 16 | 2.86 |
| (1,142) | 1:A:101:ILE:C | 1:A:102:PHE:N | 1:A:102:PHE:CA | 1:A:102:PHE:C | 11 | 2.86 |
| (1,186) | 1:A:126:VAL:N | 1:A:126:VAL:CA | 1:A:126:VAL:C | 1:A:127:PHE:N | 7 | 2.85 |
| (1,188) | 1:A:127:PHE:N | 1:A:127:PHE:CA | 1:A:127:PHE:C | 1:A:128:ILE:N | 14 | 2.83 |
| (1,106) | 1:A:79:THR:N | 1:A:79:THR:CA | 1:A:79:THR:C | 1:A:80:THR:N | 9 | 2.83 |
| (1,283) | 1:A:192:GLY:C | 1:A:193:GLN:N | 1:A:193:GLN:CA | 1:A:193:GLN:C | 16 | 2.82 |
| (1,182) | 1:A:124:GLY:N | 1:A:124:GLY:CA | 1:A:124:GLY:C | 1:A:125:GLY:N | 12 | 2.82 |
| (1,145) | 1:A:103:CYS:N | 1:A:103:CYS:CA | 1:A:103:CYS:C | 1:A:104:HIS:N | 8 | 2.82 |
| (1,137) | 1:A:99:VAL:N | 1:A:99:VAL:CA | 1:A:99:VAL:C | 1:A:100:SER:N | 11 | 2.81 |
| (1,22) | 1:A:32:LYS:N | 1:A:32:LYS:CA | 1:A:32:LYS:C | 1:A:33:ILE:N | 17 | 2.8 |



| + Koy $+$ Atom-1 $+$ Atom 2 $+$ Atom 2 | | 1 774 1 . 4 / \ |
|--|------------|-----------------|
| · · | om-4 Mod | () |
| | 7:PHE:N 19 | 2.8 |
| | :VAL:N 3 | 2.78 |
| | 6:LEU:N 13 | 2.77 |
| () / | B:ILE:N 6 | 2.77 |
| | 4:HIS:N 11 | 2.77 |
| | 8:ASP:N 13 | 2.75 |
| | 0:LEU:N 11 | 2.75 |
| | 7:VAL:C 2 | 2.75 |
| | 6:ALA:N 16 | 2.74 |
| | 2:PHE:C 6 | 2.74 |
| | 2:PHE:C 8 | 2.74 |
| | 6:ASP:N 16 | 2.73 |
| | 1:GLY:N 8 | 2.72 |
| (1,173) 1:A:118:TYR:N 1:A:118:TYR:CA 1:A:118:TYR:C 1:A:119 | 9:GLN:N 14 | 2.72 |
| (1,23) 1:A:32:LYS:C 1:A:33:ILE:N 1:A:33:ILE:CA 1:A:33 | B:ILE:C 4 | 2.71 |
| (1,205) 1:A:136:GLN:C 1:A:137:LEU:N 1:A:137:LEU:CA 1:A:13 | 7:LEU:C 20 | 2.71 |
| (1,127) 1:A:92:ALA:N 1:A:92:ALA:CA 1:A:92:ALA:C 1:A:93 | 3:ASP:N 7 | 2.71 |
| (1,281) 1:A:191:LEU:C 1:A:192:GLY:N 1:A:192:GLY:CA 1:A:19 | 2:GLY:C 17 | 2.69 |
| (1,118) 1:A:85:LEU:N 1:A:85:LEU:CA 1:A:85:LEU:C 1:A:86 | :ALA:N 12 | 2.69 |
| (1,54) 1:A:53:GLU:N 1:A:53:GLU:CA 1:A:53:GLU:C 1:A:54 | :VAL:N 15 | 2.67 |
| (1,185) 1:A:125:GLY:C 1:A:126:VAL:N 1:A:126:VAL:CA 1:A:12 | 6:VAL:C 6 | 2.67 |
| (1,190) 1:A:128:ILE:N 1:A:128:ILE:CA 1:A:128:ILE:C 1:A:12 | 9:LEU:N 2 | 2.66 |
| (1,109) 1:A:80:THR:C 1:A:81:VAL:N 1:A:81:VAL:CA 1:A:81 | :VAL:C 18 | 2.66 |
| (1,107) 1:A:79:THR:C 1:A:80:THR:N 1:A:80:THR:CA 1:A:80 | :THR:C 17 | 2.66 |
| (1,283) 1:A:192:GLY:C 1:A:193:GLN:N 1:A:193:GLN:CA 1:A:193 | B:GLN:C 12 | 2.64 |
| (1,237) 1:A:161:PRO:C 1:A:162:SER:N 1:A:162:SER:CA 1:A:16 | 2:SER:C 12 | 2.64 |
| (1,186) 1:A:126:VAL:N 1:A:126:VAL:CA 1:A:126:VAL:C 1:A:12 | 7:PHE:N 14 | 2.64 |
| (1,54) 1:A:53:GLU:N 1:A:53:GLU:CA 1:A:53:GLU:C 1:A:54 | :VAL:N 11 | 2.63 |
| (1,278) 1:A:190:LEU:N 1:A:190:LEU:CA 1:A:190:LEU:C 1:A:19 | 1:LEU:N 5 | 2.63 |
| (1,268) 1:A:185:ALA:N 1:A:185:ALA:CA 1:A:185:ALA:C 1:A:186 | 6:ALA:N 4 | 2.63 |
| (1,182) 1:A:124:GLY:N 1:A:124:GLY:CA 1:A:124:GLY:C 1:A:12 | 5:GLY:N 4 | 2.61 |
| (1,18) 1:A:30:GLN:N 1:A:30:GLN:CA 1:A:30:GLN:C 1:A:31 | :GLY:N 10 | 2.61 |
| (1,175) 1:A:119:GLN:N 1:A:119:GLN:CA 1:A:119:GLN:C 1:A:12 | 0:GLY:N 5 | 2.61 |
| (1,115) 1:A:83:SER:C 1:A:84:ASN:N 1:A:84:ASN:CA 1:A:84 | :ASN:C 5 | 2.61 |
| (1,69) 1:A:60:SER:C 1:A:61:SER:N 1:A:61:SER:CA 1:A:61 | :SER:C 8 | 2.6 |
| (1,268) 1:A:185:ALA:N 1:A:185:ALA:CA 1:A:185:ALA:C 1:A:186 | 6:ALA:N 1 | 2.6 |
| (1,185) 1:A:125:GLY:C 1:A:126:VAL:N 1:A:126:VAL:CA 1:A:12 | 6:VAL:C 17 | 2.6 |
| (1,171) 1:A:117:VAL:N 1:A:117:VAL:CA 1:A:117:VAL:C 1:A:118 | 8:TYR:N 8 | 2.57 |
| (1,106) 1:A:79:THR:N 1:A:79:THR:CA 1:A:79:THR:C 1:A:80 | :THR:N 10 | 2.57 |
| (1,24) 1:A:33:ILE:N 1:A:33:ILE:CA 1:A:33:ILE:C 1:A:34 | :LEU:N 17 | 2.56 |
| (1,111) 1:A:81:VAL:C 1:A:82:GLN:N 1:A:82:GLN:CA 1:A:82 | :GLN:C 2 | 2.55 |
| (1,278) 1:A:190:LEU:N 1:A:190:LEU:CA 1:A:190:LEU:C 1:A:19 | 1:LEU:N 2 | 2.53 |
| (1,194) 1:A:130:GLU:N 1:A:130:GLU:CA 1:A:130:GLU:C 1:A:13 | 1:GLY:N 6 | 2.53 |
| (1,46) 1:A:49:SER:N 1:A:49:SER:CA 1:A:49:SER:C 1:A:50 | :LEU:N 17 | 2.52 |
| (1,211) 1:A:140:ASN:C 1:A:141:THR:N 1:A:141:THR:CA 1:A:14 | 1:THR:C 20 | 2.51 |
| (1,115) 1:A:83:SER:C 1:A:84:ASN:N 1:A:84:ASN:CA 1:A:84 | :ASN:C 1 | 2.51 |
| (1,57) 1:A:54:VAL:C 1:A:55:THR:N 1:A:55:THR:CA 1:A:55 | :THR:C 7 | 2.48 |
| (1,206) 1:A:137:LEU:N 1:A:137:LEU:CA 1:A:137:LEU:C 1:A:138 | 8:GLN:N 7 | 2.48 |
| | 2:PHE:C 17 | 2.48 |
| (1,239) 1:A:162:SER:C 1:A:163:LEU:N 1:A:163:LEU:CA 1:A:16 | 3:LEU:C 14 | 2.47 |
| (1,211) 1:A:140:ASN:C 1:A:141:THR:N 1:A:141:THR:CA 1:A:14 | 1:THR:C 3 | 2.46 |



| | ed from previous po | | | | | |
|---------|---------------------|----------------|----------------|---------------|-------|-----------------------|
| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model | Violation (\circ) |
| (1,247) | 1:A:166:LEU:C | 1:A:167:ILE:N | 1:A:167:ILE:CA | 1:A:167:ILE:C | 3 | 2.45 |
| (1,31) | 1:A:41:GLY:C | 1:A:42:ARG:N | 1:A:42:ARG:CA | 1:A:42:ARG:C | 19 | 2.44 |
| (1,280) | 1:A:191:LEU:N | 1:A:191:LEU:CA | 1:A:191:LEU:C | 1:A:192:GLY:N | 12 | 2.44 |
| (1,268) | 1:A:185:ALA:N | 1:A:185:ALA:CA | 1:A:185:ALA:C | 1:A:186:ALA:N | 14 | 2.43 |
| (1,258) | 1:A:172:GLU:N | 1:A:172:GLU:CA | 1:A:172:GLU:C | 1:A:173:ARG:N | 7 | 2.42 |
| (1,171) | 1:A:117:VAL:N | 1:A:117:VAL:CA | 1:A:117:VAL:C | 1:A:118:TYR:N | 1 | 2.42 |
| (1,28) | 1:A:35:CYS:N | 1:A:35:CYS:CA | 1:A:35:CYS:C | 1:A:36:LEU:N | 4 | 2.41 |
| (1,18) | 1:A:30:GLN:N | 1:A:30:GLN:CA | 1:A:30:GLN:C | 1:A:31:GLY:N | 1 | 2.41 |
| (1,284) | 1:A:193:GLN:N | 1:A:193:GLN:CA | 1:A:193:GLN:C | 1:A:194:LYS:N | 6 | 2.4 |
| (1,18) | 1:A:30:GLN:N | 1:A:30:GLN:CA | 1:A:30:GLN:C | 1:A:31:GLY:N | 6 | 2.4 |
| (1,6) | 1:A:23:SER:N | 1:A:23:SER:CA | 1:A:23:SER:C | 1:A:24:VAL:N | 17 | 2.39 |
| (1,57) | 1:A:54:VAL:C | 1:A:55:THR:N | 1:A:55:THR:CA | 1:A:55:THR:C | 10 | 2.39 |
| (1,198) | 1:A:132:PHE:N | 1:A:132:PHE:CA | 1:A:132:PHE:C | 1:A:133:ALA:N | 18 | 2.39 |
| (1,211) | 1:A:140:ASN:C | 1:A:141:THR:N | 1:A:141:THR:CA | 1:A:141:THR:C | 8 | 2.38 |
| (1,126) | 1:A:91:VAL:C | 1:A:92:ALA:N | 1:A:92:ALA:CA | 1:A:92:ALA:C | 17 | 2.37 |
| (1,285) | 1:A:193:GLN:C | 1:A:194:LYS:N | 1:A:194:LYS:CA | 1:A:194:LYS:C | 20 | 2.36 |
| (1,173) | 1:A:118:TYR:N | 1:A:118:TYR:CA | 1:A:118:TYR:C | 1:A:119:GLN:N | 18 | 2.36 |
| (1,123) | 1:A:88:PHE:C | 1:A:89:ASP:N | 1:A:89:ASP:CA | 1:A:89:ASP:C | 16 | 2.36 |
| (1,180) | 1:A:123:PRO:N | 1:A:123:PRO:CA | 1:A:123:PRO:C | 1:A:124:GLY:N | 17 | 2.33 |
| (1,278) | 1:A:190:LEU:N | 1:A:190:LEU:CA | 1:A:190:LEU:C | 1:A:191:LEU:N | 10 | 2.32 |
| (1,22) | 1:A:32:LYS:N | 1:A:32:LYS:CA | 1:A:32:LYS:C | 1:A:33:ILE:N | 5 | 2.31 |
| (1,18) | 1:A:30:GLN:N | 1:A:30:GLN:CA | 1:A:30:GLN:C | 1:A:31:GLY:N | 14 | 2.31 |
| (1,173) | 1:A:118:TYR:N | 1:A:118:TYR:CA | 1:A:118:TYR:C | 1:A:119:GLN:N | 13 | 2.29 |
| (1,115) | 1:A:83:SER:C | 1:A:84:ASN:N | 1:A:84:ASN:CA | 1:A:84:ASN:C | 15 | 2.29 |
| (1,202) | 1:A:135:GLU:N | 1:A:135:GLU:CA | 1:A:135:GLU:C | 1:A:136:GLN:N | 3 | 2.28 |
| (1,28) | 1:A:35:CYS:N | 1:A:35:CYS:CA | 1:A:35:CYS:C | 1:A:36:LEU:N | 20 | 2.27 |
| (1,185) | 1:A:125:GLY:C | 1:A:126:VAL:N | 1:A:126:VAL:CA | 1:A:126:VAL:C | 14 | 2.27 |
| (1,115) | 1:A:83:SER:C | 1:A:84:ASN:N | 1:A:84:ASN:CA | 1:A:84:ASN:C | 20 | 2.27 |
| (1,211) | 1:A:140:ASN:C | 1:A:141:THR:N | 1:A:141:THR:CA | 1:A:141:THR:C | 4 | 2.26 |
| (1,190) | 1:A:128:ILE:N | 1:A:128:ILE:CA | 1:A:128:ILE:C | 1:A:129:LEU:N | 4 | 2.25 |
| (1,185) | 1:A:125:GLY:C | 1:A:126:VAL:N | 1:A:126:VAL:CA | 1:A:126:VAL:C | 19 | 2.25 |
| (1,117) | 1:A:84:ASN:C | 1:A:85:LEU:N | 1:A:85:LEU:CA | 1:A:85:LEU:C | 16 | 2.25 |
| (1,268) | 1:A:185:ALA:N | 1:A:185:ALA:CA | 1:A:185:ALA:C | 1:A:186:ALA:N | 11 | 2.24 |
| (1,148) | 1:A:104:HIS:C | 1:A:105:LEU:N | 1:A:105:LEU:CA | 1:A:105:LEU:C | 16 | 2.24 |
| (1,90) | 1:A:71:ALA:N | 1:A:71:ALA:CA | 1:A:71:ALA:C | 1:A:72:GLN:N | 8 | 2.23 |
| (1,150) | 1:A:106:PRO:N | 1:A:106:PRO:CA | 1:A:106:PRO:C | 1:A:107:SER:N | 9 | 2.23 |
| (1,54) | 1:A:53:GLU:N | 1:A:53:GLU:CA | 1:A:53:GLU:C | 1:A:54:VAL:N | 10 | 2.22 |
| (1,142) | 1:A:101:ILE:C | 1:A:102:PHE:N | 1:A:102:PHE:CA | 1:A:102:PHE:C | 4 | 2.22 |
| (1,188) | 1:A:127:PHE:N | 1:A:127:PHE:CA | 1:A:127:PHE:C | 1:A:128:ILE:N | 10 | 2.21 |
| (1,195) | 1:A:130:GLU:C | 1:A:131:GLY:N | 1:A:131:GLY:CA | 1:A:131:GLY:C | 8 | 2.2 |
| (1,177) | 1:A:121:LEU:N | 1:A:121:LEU:CA | 1:A:121:LEU:C | 1:A:122:LYS:N | 3 | 2.2 |
| (1,173) | 1:A:118:TYR:N | 1:A:118:TYR:CA | 1:A:118:TYR:C | 1:A:119:GLN:N | 10 | 2.2 |
| (1,262) | 1:A:174:ASN:N | 1:A:174:ASN:CA | 1:A:174:ASN:C | 1:A:175:LEU:N | 13 | 2.19 |
| (1,177) | 1:A:121:LEU:N | 1:A:121:LEU:CA | 1:A:121:LEU:C | 1:A:122:LYS:N | 7 | 2.18 |
| (1,194) | 1:A:130:GLU:N | 1:A:130:GLU:CA | 1:A:130:GLU:C | 1:A:131:GLY:N | 7 | 2.17 |
| (1,21) | 1:A:31:GLY:C | 1:A:32:LYS:N | 1:A:32:LYS:CA | 1:A:32:LYS:C | 4 | 2.16 |
| (1,259) | 1:A:172:GLU:C | 1:A:173:ARG:N | 1:A:173:ARG:CA | 1:A:173:ARG:C | 10 | 2.14 |
| (1,189) | 1:A:127:PHE:C | 1:A:128:ILE:N | 1:A:128:ILE:CA | 1:A:128:ILE:C | 7 | 2.14 |
| (1,6) | 1:A:23:SER:N | 1:A:23:SER:CA | 1:A:23:SER:C | 1:A:24:VAL:N | 11 | 2.13 |
| (1,145) | 1:A:103:CYS:N | 1:A:103:CYS:CA | 1:A:103:CYS:C | 1:A:104:HIS:N | 13 | 2.11 |
| (1,267) | 1:A:184:LYS:C | 1:A:185:ALA:N | 1:A:185:ALA:CA | 1:A:185:ALA:C | 17 | 2.1 |



| | ed from previous pe | | | | | |
|---------|---------------------|----------------|----------------|---------------|-------|-------------------------------------|
| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model | $\textbf{Violation} \ (\ \circ \)$ |
| (1,259) | 1:A:172:GLU:C | 1:A:173:ARG:N | 1:A:173:ARG:CA | 1:A:173:ARG:C | 19 | 2.1 |
| (1,173) | 1:A:118:TYR:N | 1:A:118:TYR:CA | 1:A:118:TYR:C | 1:A:119:GLN:N | 16 | 2.1 |
| (1,188) | 1:A:127:PHE:N | 1:A:127:PHE:CA | 1:A:127:PHE:C | 1:A:128:ILE:N | 17 | 2.09 |
| (1,278) | 1:A:190:LEU:N | 1:A:190:LEU:CA | 1:A:190:LEU:C | 1:A:191:LEU:N | 14 | 2.08 |
| (1,268) | 1:A:185:ALA:N | 1:A:185:ALA:CA | 1:A:185:ALA:C | 1:A:186:ALA:N | 6 | 2.07 |
| (1,20) | 1:A:31:GLY:N | 1:A:31:GLY:CA | 1:A:31:GLY:C | 1:A:32:LYS:N | 17 | 2.07 |
| (1,156) | 1:A:109:LEU:N | 1:A:109:LEU:CA | 1:A:109:LEU:C | 1:A:110:ARG:N | 6 | 2.07 |
| (1,212) | 1:A:141:THR:N | 1:A:141:THR:CA | 1:A:141:THR:C | 1:A:142:GLY:N | 1 | 2.05 |
| (1,143) | 1:A:102:PHE:N | 1:A:102:PHE:CA | 1:A:102:PHE:C | 1:A:103:CYS:N | 3 | 2.04 |
| (1,127) | 1:A:92:ALA:N | 1:A:92:ALA:CA | 1:A:92:ALA:C | 1:A:93:ASP:N | 5 | 2.04 |
| (1,58) | 1:A:55:THR:N | 1:A:55:THR:CA | 1:A:55:THR:C | 1:A:56:ALA:N | 6 | 2.03 |
| (1,268) | 1:A:185:ALA:N | 1:A:185:ALA:CA | 1:A:185:ALA:C | 1:A:186:ALA:N | 5 | 2.03 |
| (1,127) | 1:A:92:ALA:N | 1:A:92:ALA:CA | 1:A:92:ALA:C | 1:A:93:ASP:N | 13 | 2.03 |
| (1,54) | 1:A:53:GLU:N | 1:A:53:GLU:CA | 1:A:53:GLU:C | 1:A:54:VAL:N | 3 | 2.02 |
| (1,30) | 1:A:36:LEU:N | 1:A:36:LEU:CA | 1:A:36:LEU:C | 1:A:37:ALA:N | 16 | 2.02 |
| (1,126) | 1:A:91:VAL:C | 1:A:92:ALA:N | 1:A:92:ALA:CA | 1:A:92:ALA:C | 11 | 2.02 |
| (1,194) | 1:A:130:GLU:N | 1:A:130:GLU:CA | 1:A:130:GLU:C | 1:A:131:GLY:N | 9 | 2.0 |
| (1,186) | 1:A:126:VAL:N | 1:A:126:VAL:CA | 1:A:126:VAL:C | 1:A:127:PHE:N | 10 | 2.0 |
| (1,22) | 1:A:32:LYS:N | 1:A:32:LYS:CA | 1:A:32:LYS:C | 1:A:33:ILE:N | 20 | 1.99 |
| (1,185) | 1:A:125:GLY:C | 1:A:126:VAL:N | 1:A:126:VAL:CA | 1:A:126:VAL:C | 1 | 1.99 |
| (1,190) | 1:A:128:ILE:N | 1:A:128:ILE:CA | 1:A:128:ILE:C | 1:A:129:LEU:N | 17 | 1.98 |
| (1,160) | 1:A:111:GLN:N | 1:A:111:GLN:CA | 1:A:111:GLN:C | 1:A:112:GLN:N | 9 | 1.98 |
| (1,142) | 1:A:101:ILE:C | 1:A:102:PHE:N | 1:A:102:PHE:CA | 1:A:102:PHE:C | 15 | 1.98 |
| (1,249) | 1:A:167:ILE:C | 1:A:168:ALA:N | 1:A:168:ALA:CA | 1:A:168:ALA:C | 13 | 1.97 |
| (1,180) | 1:A:123:PRO:N | 1:A:123:PRO:CA | 1:A:123:PRO:C | 1:A:124:GLY:N | 13 | 1.97 |
| (1,3) | 1:A:21:LEU:C | 1:A:22:VAL:N | 1:A:22:VAL:CA | 1:A:22:VAL:C | 1 | 1.96 |
| (1,175) | 1:A:119:GLN:N | 1:A:119:GLN:CA | 1:A:119:GLN:C | 1:A:120:GLY:N | 8 | 1.96 |
| (1,283) | 1:A:192:GLY:C | 1:A:193:GLN:N | 1:A:193:GLN:CA | 1:A:193:GLN:C | 11 | 1.95 |
| (1,206) | 1:A:137:LEU:N | 1:A:137:LEU:CA | 1:A:137:LEU:C | 1:A:138:GLN:N | 18 | 1.95 |
| (1,109) | 1:A:80:THR:C | 1:A:81:VAL:N | 1:A:81:VAL:CA | 1:A:81:VAL:C | 17 | 1.95 |
| (1,175) | 1:A:119:GLN:N | 1:A:119:GLN:CA | 1:A:119:GLN:C | 1:A:120:GLY:N | 13 | 1.94 |
| (1,115) | 1:A:83:SER:C | 1:A:84:ASN:N | 1:A:84:ASN:CA | 1:A:84:ASN:C | 18 | 1.94 |
| (1,142) | 1:A:101:ILE:C | 1:A:102:PHE:N | 1:A:102:PHE:CA | 1:A:102:PHE:C | 7 | 1.93 |
| (1,127) | 1:A:92:ALA:N | 1:A:92:ALA:CA | 1:A:92:ALA:C | 1:A:93:ASP:N | 14 | 1.93 |
| (1,280) | 1:A:191:LEU:N | 1:A:191:LEU:CA | 1:A:191:LEU:C | 1:A:192:GLY:N | 7 | 1.92 |
| (1,204) | 1:A:136:GLN:N | 1:A:136:GLN:CA | 1:A:136:GLN:C | 1:A:137:LEU:N | 10 | 1.91 |
| (1,170) | 1:A:116:LYS:C | 1:A:117:VAL:N | 1:A:117:VAL:CA | 1:A:117:VAL:C | 20 | 1.91 |
| (1,194) | 1:A:130:GLU:N | 1:A:130:GLU:CA | 1:A:130:GLU:C | 1:A:131:GLY:N | 12 | 1.9 |
| (1,139) | 1:A:100:SER:N | 1:A:100:SER:CA | 1:A:100:SER:C | 1:A:101:ILE:N | 18 | 1.9 |
| (1,262) | 1:A:174:ASN:N | 1:A:174:ASN:CA | 1:A:174:ASN:C | 1:A:175:LEU:N | 14 | 1.89 |
| (1,190) | 1:A:128:ILE:N | 1:A:128:ILE:CA | 1:A:128:ILE:C | 1:A:129:LEU:N | 5 | 1.89 |
| (1,28) | 1:A:35:CYS:N | 1:A:35:CYS:CA | 1:A:35:CYS:C | 1:A:36:LEU:N | 19 | 1.88 |
| (1,204) | 1:A:136:GLN:N | 1:A:136:GLN:CA | 1:A:136:GLN:C | 1:A:137:LEU:N | 19 | 1.88 |
| (1,202) | 1:A:135:GLU:N | 1:A:135:GLU:CA | 1:A:135:GLU:C | 1:A:136:GLN:N | 18 | 1.88 |
| (1,201) | 1:A:134:PRO:C | 1:A:135:GLU:N | 1:A:135:GLU:CA | 1:A:135:GLU:C | 1 | 1.87 |
| (1,190) | 1:A:128:ILE:N | 1:A:128:ILE:CA | 1:A:128:ILE:C | 1:A:129:LEU:N | 6 | 1.87 |
| (1,58) | 1:A:55:THR:N | 1:A:55:THR:CA | 1:A:55:THR:C | 1:A:56:ALA:N | 15 | 1.86 |
| (1,283) | 1:A:192:GLY:C | 1:A:193:GLN:N | 1:A:193:GLN:CA | 1:A:193:GLN:C | 9 | 1.85 |
| (1,283) | 1:A:192:GLY:C | 1:A:193:GLN:N | 1:A:193:GLN:CA | 1:A:193:GLN:C | 10 | 1.85 |
| (1,262) | 1:A:174:ASN:N | 1:A:174:ASN:CA | 1:A:174:ASN:C | 1:A:175:LEU:N | 5 | 1.84 |
| (1,181) | 1:A:123:PRO:C | 1:A:124:GLY:N | 1:A:124:GLY:CA | 1:A:124:GLY:C | 13 | 1.84 |
| | | | | | 01: | ed on nert nage |



| | ed from previous pe | • | | | | |
|---------|---------------------|----------------|----------------|---------------|-------|-------------------------------------|
| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model | $\textbf{Violation} \ (\ \circ \)$ |
| (1,285) | 1:A:193:GLN:C | 1:A:194:LYS:N | 1:A:194:LYS:CA | 1:A:194:LYS:C | 8 | 1.83 |
| (1,57) | 1:A:54:VAL:C | 1:A:55:THR:N | 1:A:55:THR:CA | 1:A:55:THR:C | 17 | 1.82 |
| (1,188) | 1:A:127:PHE:N | 1:A:127:PHE:CA | 1:A:127:PHE:C | 1:A:128:ILE:N | 5 | 1.82 |
| (1,285) | 1:A:193:GLN:C | 1:A:194:LYS:N | 1:A:194:LYS:CA | 1:A:194:LYS:C | 3 | 1.81 |
| (1,249) | 1:A:167:ILE:C | 1:A:168:ALA:N | 1:A:168:ALA:CA | 1:A:168:ALA:C | 4 | 1.81 |
| (1,190) | 1:A:128:ILE:N | 1:A:128:ILE:CA | 1:A:128:ILE:C | 1:A:129:LEU:N | 1 | 1.81 |
| (1,182) | 1:A:124:GLY:N | 1:A:124:GLY:CA | 1:A:124:GLY:C | 1:A:125:GLY:N | 20 | 1.81 |
| (1,176) | 1:A:120:GLY:C | 1:A:121:LEU:N | 1:A:121:LEU:CA | 1:A:121:LEU:C | 15 | 1.8 |
| (1,204) | 1:A:136:GLN:N | 1:A:136:GLN:CA | 1:A:136:GLN:C | 1:A:137:LEU:N | 7 | 1.79 |
| (1,100) | 1:A:76:VAL:N | 1:A:76:VAL:CA | 1:A:76:VAL:C | 1:A:77:LYS:N | 3 | 1.79 |
| (1,62) | 1:A:57:VAL:N | 1:A:57:VAL:CA | 1:A:57:VAL:C | 1:A:58:ASP:N | 12 | 1.78 |
| (1,283) | 1:A:192:GLY:C | 1:A:193:GLN:N | 1:A:193:GLN:CA | 1:A:193:GLN:C | 5 | 1.78 |
| (1,281) | 1:A:191:LEU:C | 1:A:192:GLY:N | 1:A:192:GLY:CA | 1:A:192:GLY:C | 5 | 1.78 |
| (1,206) | 1:A:137:LEU:N | 1:A:137:LEU:CA | 1:A:137:LEU:C | 1:A:138:GLN:N | 20 | 1.77 |
| (1,69) | 1:A:60:SER:C | 1:A:61:SER:N | 1:A:61:SER:CA | 1:A:61:SER:C | 18 | 1.76 |
| (1,57) | 1:A:54:VAL:C | 1:A:55:THR:N | 1:A:55:THR:CA | 1:A:55:THR:C | 11 | 1.75 |
| (1,18) | 1:A:30:GLN:N | 1:A:30:GLN:CA | 1:A:30:GLN:C | 1:A:31:GLY:N | 11 | 1.75 |
| (1,169) | 1:A:116:LYS:N | 1:A:116:LYS:CA | 1:A:116:LYS:C | 1:A:117:VAL:N | 17 | 1.75 |
| (1,175) | 1:A:119:GLN:N | 1:A:119:GLN:CA | 1:A:119:GLN:C | 1:A:120:GLY:N | 4 | 1.74 |
| (1,57) | 1:A:54:VAL:C | 1:A:55:THR:N | 1:A:55:THR:CA | 1:A:55:THR:C | 2 | 1.73 |
| (1,190) | 1:A:128:ILE:N | 1:A:128:ILE:CA | 1:A:128:ILE:C | 1:A:129:LEU:N | 8 | 1.73 |
| (1,186) | 1:A:126:VAL:N | 1:A:126:VAL:CA | 1:A:126:VAL:C | 1:A:127:PHE:N | 15 | 1.73 |
| (1,185) | 1:A:125:GLY:C | 1:A:126:VAL:N | 1:A:126:VAL:CA | 1:A:126:VAL:C | 20 | 1.72 |
| (1,171) | 1:A:117:VAL:N | 1:A:117:VAL:CA | 1:A:117:VAL:C | 1:A:118:TYR:N | 12 | 1.72 |
| (1,2) | 1:A:21:LEU:N | 1:A:21:LEU:CA | 1:A:21:LEU:C | 1:A:22:VAL:N | 16 | 1.71 |
| (1,118) | 1:A:85:LEU:N | 1:A:85:LEU:CA | 1:A:85:LEU:C | 1:A:86:ALA:N | 10 | 1.71 |
| (1,201) | 1:A:134:PRO:C | 1:A:135:GLU:N | 1:A:135:GLU:CA | 1:A:135:GLU:C | 4 | 1.7 |
| (1,197) | 1:A:131:GLY:C | 1:A:132:PHE:N | 1:A:132:PHE:CA | 1:A:132:PHE:C | 19 | 1.69 |
| (1,173) | 1:A:118:TYR:N | 1:A:118:TYR:CA | 1:A:118:TYR:C | 1:A:119:GLN:N | 12 | 1.69 |
| (1,283) | 1:A:192:GLY:C | 1:A:193:GLN:N | 1:A:193:GLN:CA | 1:A:193:GLN:C | 7 | 1.68 |
| (1,249) | 1:A:167:ILE:C | 1:A:168:ALA:N | 1:A:168:ALA:CA | 1:A:168:ALA:C | 2 | 1.68 |
| (1,181) | 1:A:123:PRO:C | 1:A:124:GLY:N | 1:A:124:GLY:CA | 1:A:124:GLY:C | 19 | 1.68 |
| (1,198) | 1:A:132:PHE:N | 1:A:132:PHE:CA | 1:A:132:PHE:C | 1:A:133:ALA:N | 12 | 1.67 |
| (1,185) | 1:A:125:GLY:C | 1:A:126:VAL:N | 1:A:126:VAL:CA | 1:A:126:VAL:C | 5 | 1.64 |
| (1,142) | 1:A:101:ILE:C | 1:A:102:PHE:N | 1:A:102:PHE:CA | 1:A:102:PHE:C | 1 | 1.62 |
| (1,28) | 1:A:35:CYS:N | 1:A:35:CYS:CA | 1:A:35:CYS:C | 1:A:36:LEU:N | 12 | 1.61 |
| (1,188) | 1:A:127:PHE:N | 1:A:127:PHE:CA | 1:A:127:PHE:C | 1:A:128:ILE:N | 19 | 1.61 |
| (1,180) | 1:A:123:PRO:N | 1:A:123:PRO:CA | 1:A:123:PRO:C | 1:A:124:GLY:N | 11 | 1.61 |
| (1,156) | 1:A:109:LEU:N | 1:A:109:LEU:CA | 1:A:109:LEU:C | 1:A:110:ARG:N | 5 | 1.61 |
| (1,249) | 1:A:167:ILE:C | 1:A:168:ALA:N | 1:A:168:ALA:CA | 1:A:168:ALA:C | 14 | 1.6 |
| (1,180) | 1:A:123:PRO:N | 1:A:123:PRO:CA | 1:A:123:PRO:C | 1:A:124:GLY:N | 20 | 1.6 |
| (1,88) | 1:A:70:LEU:N | 1:A:70:LEU:CA | 1:A:70:LEU:C | 1:A:71:ALA:N | 6 | 1.59 |
| (1,247) | 1:A:166:LEU:C | 1:A:167:ILE:N | 1:A:167:ILE:CA | 1:A:167:ILE:C | 11 | 1.59 |
| (1,190) | 1:A:128:ILE:N | 1:A:128:ILE:CA | 1:A:128:ILE:C | 1:A:129:LEU:N | 20 | 1.59 |
| (1,123) | 1:A:88:PHE:C | 1:A:89:ASP:N | 1:A:89:ASP:CA | 1:A:89:ASP:C | 14 | 1.59 |
| (1,182) | 1:A:124:GLY:N | 1:A:124:GLY:CA | 1:A:124:GLY:C | 1:A:125:GLY:N | 5 | 1.58 |
| (1,175) | 1:A:119:GLN:N | 1:A:119:GLN:CA | 1:A:119:GLN:C | 1:A:120:GLY:N | 1 | 1.57 |
| (1,115) | 1:A:83:SER:C | 1:A:84:ASN:N | 1:A:84:ASN:CA | 1:A:84:ASN:C | 13 | 1.57 |
| (1,284) | 1:A:193:GLN:N | 1:A:193:GLN:CA | 1:A:193:GLN:C | 1:A:194:LYS:N | 18 | 1.56 |
| (1,247) | 1:A:166:LEU:C | 1:A:167:ILE:N | 1:A:167:ILE:CA | 1:A:167:ILE:C | 1 | 1.56 |
| (1,90) | 1:A:71:ALA:N | 1:A:71:ALA:CA | 1:A:71:ALA:C | 1:A:72:GLN:N | 16 | 1.54 |



| | ed from previous po | | | - | | |
|---------|---------------------|----------------|----------------|---------------|-------|--|
| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model | $\textbf{Violation} \; (\; \circ \;)$ |
| (1,212) | 1:A:141:THR:N | 1:A:141:THR:CA | 1:A:141:THR:C | 1:A:142:GLY:N | 13 | 1.53 |
| (1,190) | 1:A:128:ILE:N | 1:A:128:ILE:CA | 1:A:128:ILE:C | 1:A:129:LEU:N | 10 | 1.53 |
| (1,70) | 1:A:61:SER:N | 1:A:61:SER:CA | 1:A:61:SER:C | 1:A:62:VAL:N | 9 | 1.52 |
| (1,280) | 1:A:191:LEU:N | 1:A:191:LEU:CA | 1:A:191:LEU:C | 1:A:192:GLY:N | 13 | 1.52 |
| (1,280) | 1:A:191:LEU:N | 1:A:191:LEU:CA | 1:A:191:LEU:C | 1:A:192:GLY:N | 16 | 1.52 |
| (1,186) | 1:A:126:VAL:N | 1:A:126:VAL:CA | 1:A:126:VAL:C | 1:A:127:PHE:N | 5 | 1.52 |
| (1,186) | 1:A:126:VAL:N | 1:A:126:VAL:CA | 1:A:126:VAL:C | 1:A:127:PHE:N | 18 | 1.52 |
| (1,169) | 1:A:116:LYS:N | 1:A:116:LYS:CA | 1:A:116:LYS:C | 1:A:117:VAL:N | 20 | 1.52 |
| (1,122) | 1:A:88:PHE:N | 1:A:88:PHE:CA | 1:A:88:PHE:C | 1:A:89:ASP:N | 17 | 1.52 |
| (1,237) | 1:A:161:PRO:C | 1:A:162:SER:N | 1:A:162:SER:CA | 1:A:162:SER:C | 8 | 1.51 |
| (1,187) | 1:A:126:VAL:C | 1:A:127:PHE:N | 1:A:127:PHE:CA | 1:A:127:PHE:C | 4 | 1.51 |
| (1,126) | 1:A:91:VAL:C | 1:A:92:ALA:N | 1:A:92:ALA:CA | 1:A:92:ALA:C | 19 | 1.51 |
| (1,102) | 1:A:77:LYS:N | 1:A:77:LYS:CA | 1:A:77:LYS:C | 1:A:78:ILE:N | 10 | 1.5 |
| (1,62) | 1:A:57:VAL:N | 1:A:57:VAL:CA | 1:A:57:VAL:C | 1:A:58:ASP:N | 19 | 1.48 |
| (1,57) | 1:A:54:VAL:C | 1:A:55:THR:N | 1:A:55:THR:CA | 1:A:55:THR:C | 15 | 1.48 |
| (1,280) | 1:A:191:LEU:N | 1:A:191:LEU:CA | 1:A:191:LEU:C | 1:A:192:GLY:N | 15 | 1.48 |
| (1,274) | 1:A:188:ILE:N | 1:A:188:ILE:CA | 1:A:188:ILE:C | 1:A:189:GLN:N | 14 | 1.48 |
| (1,204) | 1:A:136:GLN:N | 1:A:136:GLN:CA | 1:A:136:GLN:C | 1:A:137:LEU:N | 11 | 1.48 |
| (1,247) | 1:A:166:LEU:C | 1:A:167:ILE:N | 1:A:167:ILE:CA | 1:A:167:ILE:C | 5 | 1.47 |
| (1,182) | 1:A:124:GLY:N | 1:A:124:GLY:CA | 1:A:124:GLY:C | 1:A:125:GLY:N | 9 | 1.47 |
| (1,164) | 1:A:113:LEU:N | 1:A:113:LEU:CA | 1:A:113:LEU:C | 1:A:114:TYR:N | 9 | 1.47 |
| (1,145) | 1:A:103:CYS:N | 1:A:103:CYS:CA | 1:A:103:CYS:C | 1:A:104:HIS:N | 20 | 1.47 |
| (1,46) | 1:A:49:SER:N | 1:A:49:SER:CA | 1:A:49:SER:C | 1:A:50:LEU:N | 19 | 1.46 |
| (1,186) | 1:A:126:VAL:N | 1:A:126:VAL:CA | 1:A:126:VAL:C | 1:A:127:PHE:N | 2 | 1.46 |
| (1,139) | 1:A:100:SER:N | 1:A:100:SER:CA | 1:A:100:SER:C | 1:A:101:ILE:N | 20 | 1.46 |
| (1,104) | 1:A:78:ILE:N | 1:A:78:ILE:CA | 1:A:78:ILE:C | 1:A:79:THR:N | 3 | 1.46 |
| (1,46) | 1:A:49:SER:N | 1:A:49:SER:CA | 1:A:49:SER:C | 1:A:50:LEU:N | 13 | 1.45 |
| (1,176) | 1:A:120:GLY:C | 1:A:121:LEU:N | 1:A:121:LEU:CA | 1:A:121:LEU:C | 10 | 1.45 |
| (1,154) | 1:A:108:SER:N | 1:A:108:SER:CA | 1:A:108:SER:C | 1:A:109:LEU:N | 16 | 1.45 |
| (1,169) | 1:A:116:LYS:N | 1:A:116:LYS:CA | 1:A:116:LYS:C | 1:A:117:VAL:N | 3 | 1.44 |
| (1,202) | 1:A:135:GLU:N | 1:A:135:GLU:CA | 1:A:135:GLU:C | 1:A:136:GLN:N | 10 | 1.43 |
| (1,38) | 1:A:45:CYS:N | 1:A:45:CYS:CA | 1:A:45:CYS:C | 1:A:46:PHE:N | 13 | 1.42 |
| (1,18) | 1:A:30:GLN:N | 1:A:30:GLN:CA | 1:A:30:GLN:C | 1:A:31:GLY:N | 12 | 1.42 |
| (1,57) | 1:A:54:VAL:C | 1:A:55:THR:N | 1:A:55:THR:CA | 1:A:55:THR:C | 4 | 1.4 |
| (1,274) | 1:A:188:ILE:N | 1:A:188:ILE:CA | 1:A:188:ILE:C | 1:A:189:GLN:N | 20 | 1.4 |
| (1,185) | 1:A:125:GLY:C | 1:A:126:VAL:N | 1:A:126:VAL:CA | 1:A:126:VAL:C | 9 | 1.4 |
| (1,185) | 1:A:125:GLY:C | 1:A:126:VAL:N | 1:A:126:VAL:CA | 1:A:126:VAL:C | 10 | 1.4 |
| (1,175) | 1:A:119:GLN:N | 1:A:119:GLN:CA | 1:A:119:GLN:C | 1:A:120:GLY:N | 18 | 1.4 |
| (1,154) | 1:A:108:SER:N | 1:A:108:SER:CA | 1:A:108:SER:C | 1:A:109:LEU:N | 1 | 1.4 |
| (1,138) | 1:A:99:VAL:C | 1:A:100:SER:N | 1:A:100:SER:CA | 1:A:100:SER:C | 2 | 1.4 |
| (1,23) | 1:A:32:LYS:C | 1:A:33:ILE:N | 1:A:33:ILE:CA | 1:A:33:ILE:C | 19 | 1.39 |
| (1,264) | 1:A:175:LEU:N | 1:A:175:LEU:CA | 1:A:175:LEU:C | 1:A:176:ASP:N | 12 | 1.37 |
| (1,118) | 1:A:85:LEU:N | 1:A:85:LEU:CA | 1:A:85:LEU:C | 1:A:86:ALA:N | 20 | 1.37 |
| (1,281) | 1:A:191:LEU:C | 1:A:192:GLY:N | 1:A:192:GLY:CA | 1:A:192:GLY:C | 6 | 1.36 |
| (1,185) | 1:A:125:GLY:C | 1:A:126:VAL:N | 1:A:126:VAL:CA | 1:A:126:VAL:C | 11 | 1.36 |
| (1,202) | 1:A:135:GLU:N | 1:A:135:GLU:CA | 1:A:135:GLU:C | 1:A:136:GLN:N | 12 | 1.35 |
| (1,264) | 1:A:175:LEU:N | 1:A:175:LEU:CA | 1:A:175:LEU:C | 1:A:176:ASP:N | 3 | 1.34 |
| (1,260) | 1:A:173:ARG:N | 1:A:173:ARG:CA | 1:A:173:ARG:C | 1:A:174:ASN:N | 14 | 1.34 |
| (1,145) | 1:A:103:CYS:N | 1:A:103:CYS:CA | 1:A:103:CYS:C | 1:A:104:HIS:N | 17 | 1.34 |
| (1,182) | 1:A:124:GLY:N | 1:A:124:GLY:CA | 1:A:124:GLY:C | 1:A:125:GLY:N | 11 | 1.33 |
| (1,274) | 1:A:188:ILE:N | 1:A:188:ILE:CA | 1:A:188:ILE:C | 1:A:189:GLN:N | 6 | 1.32 |



| | ed from previous po | • | | | | |
|---------|---------------------|----------------|----------------|---------------|-------|---------------------|
| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model | Violation (\circ) |
| (1,281) | 1:A:191:LEU:C | 1:A:192:GLY:N | 1:A:192:GLY:CA | 1:A:192:GLY:C | 3 | 1.31 |
| (1,18) | 1:A:30:GLN:N | 1:A:30:GLN:CA | 1:A:30:GLN:C | 1:A:31:GLY:N | 18 | 1.31 |
| (1,281) | 1:A:191:LEU:C | 1:A:192:GLY:N | 1:A:192:GLY:CA | 1:A:192:GLY:C | 9 | 1.3 |
| (1,258) | 1:A:172:GLU:N | 1:A:172:GLU:CA | 1:A:172:GLU:C | 1:A:173:ARG:N | 14 | 1.3 |
| (1,247) | 1:A:166:LEU:C | 1:A:167:ILE:N | 1:A:167:ILE:CA | 1:A:167:ILE:C | 15 | 1.3 |
| (1,160) | 1:A:111:GLN:N | 1:A:111:GLN:CA | 1:A:111:GLN:C | 1:A:112:GLN:N | 19 | 1.3 |
| (1,262) | 1:A:174:ASN:N | 1:A:174:ASN:CA | 1:A:174:ASN:C | 1:A:175:LEU:N | 20 | 1.29 |
| (1,239) | 1:A:162:SER:C | 1:A:163:LEU:N | 1:A:163:LEU:CA | 1:A:163:LEU:C | 20 | 1.29 |
| (1,169) | 1:A:116:LYS:N | 1:A:116:LYS:CA | 1:A:116:LYS:C | 1:A:117:VAL:N | 7 | 1.29 |
| (1,284) | 1:A:193:GLN:N | 1:A:193:GLN:CA | 1:A:193:GLN:C | 1:A:194:LYS:N | 9 | 1.28 |
| (1,259) | 1:A:172:GLU:C | 1:A:173:ARG:N | 1:A:173:ARG:CA | 1:A:173:ARG:C | 7 | 1.28 |
| (1,145) | 1:A:103:CYS:N | 1:A:103:CYS:CA | 1:A:103:CYS:C | 1:A:104:HIS:N | 4 | 1.28 |
| (1,237) | 1:A:161:PRO:C | 1:A:162:SER:N | 1:A:162:SER:CA | 1:A:162:SER:C | 3 | 1.27 |
| (1,204) | 1:A:136:GLN:N | 1:A:136:GLN:CA | 1:A:136:GLN:C | 1:A:137:LEU:N | 20 | 1.27 |
| (1,188) | 1:A:127:PHE:N | 1:A:127:PHE:CA | 1:A:127:PHE:C | 1:A:128:ILE:N | 11 | 1.26 |
| (1,247) | 1:A:166:LEU:C | 1:A:167:ILE:N | 1:A:167:ILE:CA | 1:A:167:ILE:C | 10 | 1.25 |
| (1,214) | 1:A:143:GLY:N | 1:A:143:GLY:CA | 1:A:143:GLY:C | 1:A:144:PRO:N | 14 | 1.25 |
| (1,188) | 1:A:127:PHE:N | 1:A:127:PHE:CA | 1:A:127:PHE:C | 1:A:128:ILE:N | 15 | 1.25 |
| (1,69) | 1:A:60:SER:C | 1:A:61:SER:N | 1:A:61:SER:CA | 1:A:61:SER:C | 4 | 1.23 |
| (1,260) | 1:A:173:ARG:N | 1:A:173:ARG:CA | 1:A:173:ARG:C | 1:A:174:ASN:N | 18 | 1.23 |
| (1,211) | 1:A:140:ASN:C | 1:A:141:THR:N | 1:A:141:THR:CA | 1:A:141:THR:C | 5 | 1.23 |
| (1,160) | 1:A:111:GLN:N | 1:A:111:GLN:CA | 1:A:111:GLN:C | 1:A:112:GLN:N | 4 | 1.23 |
| (1,138) | 1:A:99:VAL:C | 1:A:100:SER:N | 1:A:100:SER:CA | 1:A:100:SER:C | 16 | 1.23 |
| (1,138) | 1:A:99:VAL:C | 1:A:100:SER:N | 1:A:100:SER:CA | 1:A:100:SER:C | 14 | 1.22 |
| (1,139) | 1:A:100:SER:N | 1:A:100:SER:CA | 1:A:100:SER:C | 1:A:101:ILE:N | 17 | 1.21 |
| (1,6) | 1:A:23:SER:N | 1:A:23:SER:CA | 1:A:23:SER:C | 1:A:24:VAL:N | 10 | 1.2 |
| (1,201) | 1:A:134:PRO:C | 1:A:135:GLU:N | 1:A:135:GLU:CA | 1:A:135:GLU:C | 12 | 1.2 |
| (1,117) | 1:A:84:ASN:C | 1:A:85:LEU:N | 1:A:85:LEU:CA | 1:A:85:LEU:C | 14 | 1.2 |
| (1,112) | 1:A:82:GLN:N | 1:A:82:GLN:CA | 1:A:82:GLN:C | 1:A:83:SER:N | 8 | 1.2 |
| (1,111) | 1:A:81:VAL:C | 1:A:82:GLN:N | 1:A:82:GLN:CA | 1:A:82:GLN:C | 3 | 1.19 |
| (1,90) | 1:A:71:ALA:N | 1:A:71:ALA:CA | 1:A:71:ALA:C | 1:A:72:GLN:N | 2 | 1.18 |
| (1,127) | 1:A:92:ALA:N | 1:A:92:ALA:CA | 1:A:92:ALA:C | 1:A:93:ASP:N | 8 | 1.18 |
| (1,57) | 1:A:54:VAL:C | 1:A:55:THR:N | 1:A:55:THR:CA | 1:A:55:THR:C | 5 | 1.16 |
| (1,156) | 1:A:109:LEU:N | 1:A:109:LEU:CA | 1:A:109:LEU:C | 1:A:110:ARG:N | 17 | 1.16 |
| (1,6) | 1:A:23:SER:N | 1:A:23:SER:CA | 1:A:23:SER:C | 1:A:24:VAL:N | 2 | 1.15 |
| (1,170) | 1:A:116:LYS:C | 1:A:117:VAL:N | 1:A:117:VAL:CA | 1:A:117:VAL:C | 13 | 1.15 |
| (1,142) | 1:A:101:ILE:C | 1:A:102:PHE:N | 1:A:102:PHE:CA | 1:A:102:PHE:C | 18 | 1.12 |
| (1,272) | 1:A:187:LEU:N | 1:A:187:LEU:CA | 1:A:187:LEU:C | 1:A:188:ILE:N | 6 | 1.11 |
| (1,226) | 1:A:155:THR:N | 1:A:155:THR:CA | 1:A:155:THR:C | 1:A:156:LEU:N | 2 | 1.11 |
| (1,211) | 1:A:140:ASN:C | 1:A:141:THR:N | 1:A:141:THR:CA | 1:A:141:THR:C | 14 | 1.11 |
| (1,58) | 1:A:55:THR:N | 1:A:55:THR:CA | 1:A:55:THR:C | 1:A:56:ALA:N | 12 | 1.1 |
| (1,192) | 1:A:129:LEU:N | 1:A:129:LEU:CA | 1:A:129:LEU:C | 1:A:130:GLU:N | 3 | 1.1 |
| (1,160) | 1:A:111:GLN:N | 1:A:111:GLN:CA | 1:A:111:GLN:C | 1:A:112:GLN:N | 18 | 1.08 |
| (1,118) | 1:A:85:LEU:N | 1:A:85:LEU:CA | 1:A:85:LEU:C | 1:A:86:ALA:N | 5 | 1.08 |
| (1,188) | 1:A:127:PHE:N | 1:A:127:PHE:CA | 1:A:127:PHE:C | 1:A:128:ILE:N | 4 | 1.06 |
| (1,182) | 1:A:124:GLY:N | 1:A:124:GLY:CA | 1:A:124:GLY:C | 1:A:125:GLY:N | 7 | 1.06 |
| (1,18) | 1:A:30:GLN:N | 1:A:30:GLN:CA | 1:A:30:GLN:C | 1:A:31:GLY:N | 19 | 1.06 |
| (1,70) | 1:A:61:SER:N | 1:A:61:SER:CA | 1:A:61:SER:C | 1:A:62:VAL:N | 13 | 1.05 |
| (1,193) | 1:A:129:LEU:C | 1:A:130:GLU:N | 1:A:130:GLU:CA | 1:A:130:GLU:C | 10 | 1.05 |
| (1,237) | 1:A:161:PRO:C | 1:A:162:SER:N | 1:A:162:SER:CA | 1:A:162:SER:C | 9 | 1.04 |
| (1,156) | 1:A:109:LEU:N | 1:A:109:LEU:CA | 1:A:109:LEU:C | 1:A:110:ARG:N | 14 | 1.04 |



| | 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 (o) |
| (1,278) | 1:A:190:LEU:N | 1:A:190:LEU:CA | 1:A:190:LEU:C | 1:A:191:LEU:N | 13 | 1.03 |
| (1,281) | 1:A:191:LEU:C | 1:A:192:GLY:N | 1:A:192:GLY:CA | 1:A:192:GLY:C | 2 | 1.02 |
| (1,154) | 1:A:108:SER:N | 1:A:108:SER:CA | 1:A:108:SER:C | 1:A:109:LEU:N | 2 | 1.02 |
| (1,258) | 1:A:172:GLU:N | 1:A:172:GLU:CA | 1:A:172:GLU:C | 1:A:173:ARG:N | 11 | 1.01 |
| (1,237) | 1:A:161:PRO:C | 1:A:162:SER:N | 1:A:162:SER:CA | 1:A:162:SER:C | 18 | 1.01 |
| (1,188) | 1:A:127:PHE:N | 1:A:127:PHE:CA | 1:A:127:PHE:C | 1:A:128:ILE:N | 12 | 1.01 |
| (1,118) | 1:A:85:LEU:N | 1:A:85:LEU:CA | 1:A:85:LEU:C | 1:A:86:ALA:N | 13 | 1.01 |
| (1,115) | 1:A:83:SER:C | 1:A:84:ASN:N | 1:A:84:ASN:CA | 1:A:84:ASN:C | 19 | 1.01 |
| (1,90) | 1:A:71:ALA:N | 1:A:71:ALA:CA | 1:A:71:ALA:C | 1:A:72:GLN:N | 18 | 1.0 |
| (1,88) | 1:A:70:LEU:N | 1:A:70:LEU:CA | 1:A:70:LEU:C | 1:A:71:ALA:N | 8 | 1.0 |
| (1,172) | 1:A:117:VAL:C | 1:A:118:TYR:N | 1:A:118:TYR:CA | 1:A:118:TYR:C | 2 | 0.98 |
| (1,281) | 1:A:191:LEU:C | 1:A:192:GLY:N | 1:A:192:GLY:CA | 1:A:192:GLY:C | 8 | 0.97 |
| (1,281) | 1:A:191:LEU:C | 1:A:192:GLY:N | 1:A:192:GLY:CA | 1:A:192:GLY:C | 14 | 0.97 |
| (1,23) | 1:A:32:LYS:C | 1:A:33:ILE:N | 1:A:33:ILE:CA | 1:A:33:ILE:C | 3 | 0.97 |
| (1,23) | 1:A:32:LYS:C | 1:A:33:ILE:N | 1:A:33:ILE:CA | 1:A:33:ILE:C | 18 | 0.97 |
| (1,205) | 1:A:136:GLN:C | 1:A:137:LEU:N | 1:A:137:LEU:CA | 1:A:137:LEU:C | 7 | 0.96 |
| (1,185) | 1:A:125:GLY:C | 1:A:126:VAL:N | 1:A:126:VAL:CA | 1:A:126:VAL:C | 13 | 0.96 |
| (1,185) | 1:A:125:GLY:C | 1:A:126:VAL:N | 1:A:126:VAL:CA | 1:A:126:VAL:C | 16 | 0.96 |
| (1,137) | 1:A:99:VAL:N | 1:A:99:VAL:CA | 1:A:99:VAL:C | 1:A:100:SER:N | 12 | 0.96 |
| (1,280) | 1:A:191:LEU:N | 1:A:191:LEU:CA | 1:A:191:LEU:C | 1:A:192:GLY:N | 2 | 0.95 |
| (1,260) | 1:A:173:ARG:N | 1:A:173:ARG:CA | 1:A:173:ARG:C | 1:A:174:ASN:N | 10 | 0.95 |
| (1,145) | 1:A:103:CYS:N | 1:A:103:CYS:CA | 1:A:103:CYS:C | 1:A:104:HIS:N | 1 | 0.95 |
| (1,264) | 1:A:175:LEU:N | 1:A:175:LEU:CA | 1:A:175:LEU:C | 1:A:176:ASP:N | 9 | 0.94 |
| (1,249) | 1:A:167:ILE:C | 1:A:168:ALA:N | 1:A:168:ALA:CA | 1:A:168:ALA:C | 6 | 0.94 |
| (1,118) | 1:A:85:LEU:N | 1:A:85:LEU:CA | 1:A:85:LEU:C | 1:A:86:ALA:N | 8 | 0.94 |
| (1,187) | 1:A:126:VAL:C | 1:A:127:PHE:N | 1:A:127:PHE:CA | 1:A:127:PHE:C | 17 | 0.93 |
| (1,6) | 1:A:23:SER:N | 1:A:23:SER:CA | 1:A:23:SER:C | 1:A:24:VAL:N | 8 | 0.92 |
| (1,3) | 1:A:21:LEU:C | 1:A:22:VAL:N | 1:A:22:VAL:CA | 1:A:22:VAL:C | 14 | 0.92 |
| (1,281) | 1:A:191:LEU:C | 1:A:192:GLY:N | 1:A:192:GLY:CA | 1:A:192:GLY:C | 1 | 0.92 |
| (1,156) | 1:A:109:LEU:N | 1:A:109:LEU:CA | 1:A:109:LEU:C | 1:A:110:ARG:N | 3 | 0.92 |
| (1,46) | 1:A:49:SER:N | 1:A:49:SER:CA | 1:A:49:SER:C | 1:A:50:LEU:N | 7 | 0.91 |
| (1,186) | 1:A:126:VAL:N | 1:A:126:VAL:CA | 1:A:126:VAL:C | 1:A:127:PHE:N | 17 | 0.9 |
| (1,280) | 1:A:191:LEU:N | 1:A:191:LEU:CA | 1:A:191:LEU:C | 1:A:192:GLY:N | 4 | 0.89 |
| (1,224) | 1:A:154:GLU:N | 1:A:154:GLU:CA | 1:A:154:GLU:C | 1:A:155:THR:N | 17 | 0.88 |
| (1,193) | 1:A:129:LEU:C | 1:A:130:GLU:N | 1:A:130:GLU:CA | 1:A:130:GLU:C | 14 | 0.88 |
| (1,90) | 1:A:71:ALA:N | 1:A:71:ALA:CA | 1:A:71:ALA:C | 1:A:72:GLN:N | 4 | 0.87 |
| (1,190) | 1:A:128:ILE:N | 1:A:128:ILE:CA | 1:A:128:ILE:C | 1:A:129:LEU:N | 18 | 0.87 |
| (1,288) | 1:A:195:LEU:N | 1:A:195:LEU:CA | 1:A:195:LEU:C | 1:A:196:GLU:N | 1 | 0.86 |
| (1,280) | 1:A:191:LEU:N | 1:A:191:LEU:CA | 1:A:191:LEU:C | 1:A:192:GLY:N | 10 | 0.86 |
| (1,268) | 1:A:185:ALA:N | 1:A:185:ALA:CA | 1:A:185:ALA:C | 1:A:186:ALA:N | 12 | 0.86 |
| (1,226) | 1:A:155:THR:N | 1:A:155:THR:CA | 1:A:155:THR:C | 1:A:156:LEU:N | 20 | 0.86 |
| (1,194) | 1:A:130:GLU:N | 1:A:130:GLU:CA | 1:A:130:GLU:C | 1:A:131:GLY:N | 16 | 0.86 |
| (1,188) | 1:A:127:PHE:N | 1:A:127:PHE:CA | 1:A:127:PHE:C | 1:A:128:ILE:N | 7 | 0.86 |
| (1,170) | 1:A:116:LYS:C | 1:A:117:VAL:N | 1:A:117:VAL:CA | 1:A:117:VAL:C | 12 | 0.86 |
| (1,70) | 1:A:61:SER:N | 1:A:61:SER:CA | 1:A:61:SER:C | 1:A:62:VAL:N | 15 | 0.85 |
| (1,247) | 1:A:166:LEU:C | 1:A:167:ILE:N | 1:A:167:ILE:CA | 1:A:167:ILE:C | 4 | 0.85 |
| (1,180) | 1:A:123:PRO:N | 1:A:123:PRO:CA | 1:A:123:PRO:C | 1:A:124:GLY:N | 12 | 0.85 |
| (1,150) | 1:A:106:PRO:N | 1:A:106:PRO:CA | 1:A:106:PRO:C | 1:A:107:SER:N | 14 | 0.85 |
| (1,90) | 1:A:71:ALA:N | 1:A:71:ALA:CA | 1:A:71:ALA:C | 1:A:72:GLN:N | 11 | 0.84 |
| (1,156) | 1:A:109:LEU:N | 1:A:109:LEU:CA | 1:A:109:LEU:C | 1:A:110:ARG:N | 1 | 0.84 |
| (1,155) $(1,155)$ | 1:A:108:SER:C | 1:A:109:LEU:N | 1:A:109:LEU:CA | 1:A:109:LEU:C | 3 | 0.84 |
| (1,100) | 1.71.100.0110.0 | 1.71.100.11 | 1.71.100.LEU.OA | 1.71.103.1110.0 | | 0.04 |



| | ed from previous po | | | | | |
|---------|---------------------|----------------|----------------|---------------|-------|-----------------------|
| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model | Violation (\circ) |
| (1,114) | 1:A:83:SER:N | 1:A:83:SER:CA | 1:A:83:SER:C | 1:A:84:ASN:N | 18 | 0.84 |
| (1,62) | 1:A:57:VAL:N | 1:A:57:VAL:CA | 1:A:57:VAL:C | 1:A:58:ASP:N | 4 | 0.83 |
| (1,24) | 1:A:33:ILE:N | 1:A:33:ILE:CA | 1:A:33:ILE:C | 1:A:34:LEU:N | 1 | 0.83 |
| (1,226) | 1:A:155:THR:N | 1:A:155:THR:CA | 1:A:155:THR:C | 1:A:156:LEU:N | 16 | 0.83 |
| (1,186) | 1:A:126:VAL:N | 1:A:126:VAL:CA | 1:A:126:VAL:C | 1:A:127:PHE:N | 11 | 0.83 |
| (1,182) | 1:A:124:GLY:N | 1:A:124:GLY:CA | 1:A:124:GLY:C | 1:A:125:GLY:N | 18 | 0.83 |
| (1,120) | 1:A:86:ALA:N | 1:A:86:ALA:CA | 1:A:86:ALA:C | 1:A:87:ASP:N | 5 | 0.83 |
| (1,247) | 1:A:166:LEU:C | 1:A:167:ILE:N | 1:A:167:ILE:CA | 1:A:167:ILE:C | 8 | 0.82 |
| (1,283) | 1:A:192:GLY:C | 1:A:193:GLN:N | 1:A:193:GLN:CA | 1:A:193:GLN:C | 13 | 0.81 |
| (1,118) | 1:A:85:LEU:N | 1:A:85:LEU:CA | 1:A:85:LEU:C | 1:A:86:ALA:N | 14 | 0.81 |
| (1,211) | 1:A:140:ASN:C | 1:A:141:THR:N | 1:A:141:THR:CA | 1:A:141:THR:C | 1 | 0.79 |
| (1,190) | 1:A:128:ILE:N | 1:A:128:ILE:CA | 1:A:128:ILE:C | 1:A:129:LEU:N | 15 | 0.79 |
| (1,18) | 1:A:30:GLN:N | 1:A:30:GLN:CA | 1:A:30:GLN:C | 1:A:31:GLY:N | 15 | 0.79 |
| (1,138) | 1:A:99:VAL:C | 1:A:100:SER:N | 1:A:100:SER:CA | 1:A:100:SER:C | 5 | 0.79 |
| (1,111) | 1:A:81:VAL:C | 1:A:82:GLN:N | 1:A:82:GLN:CA | 1:A:82:GLN:C | 17 | 0.79 |
| (1,247) | 1:A:166:LEU:C | 1:A:167:ILE:N | 1:A:167:ILE:CA | 1:A:167:ILE:C | 6 | 0.77 |
| (1,195) | 1:A:130:GLU:C | 1:A:131:GLY:N | 1:A:131:GLY:CA | 1:A:131:GLY:C | 7 | 0.77 |
| (1,170) | 1:A:116:LYS:C | 1:A:117:VAL:N | 1:A:117:VAL:CA | 1:A:117:VAL:C | 1 | 0.77 |
| (1,190) | 1:A:128:ILE:N | 1:A:128:ILE:CA | 1:A:128:ILE:C | 1:A:129:LEU:N | 9 | 0.76 |
| (1,188) | 1:A:127:PHE:N | 1:A:127:PHE:CA | 1:A:127:PHE:C | 1:A:128:ILE:N | 1 | 0.76 |
| (1,186) | 1:A:126:VAL:N | 1:A:126:VAL:CA | 1:A:126:VAL:C | 1:A:127:PHE:N | 16 | 0.76 |
| (1,115) | 1:A:83:SER:C | 1:A:84:ASN:N | 1:A:84:ASN:CA | 1:A:84:ASN:C | 4 | 0.75 |
| (1,188) | 1:A:127:PHE:N | 1:A:127:PHE:CA | 1:A:127:PHE:C | 1:A:128:ILE:N | 16 | 0.74 |
| (1,187) | 1:A:126:VAL:C | 1:A:127:PHE:N | 1:A:127:PHE:CA | 1:A:127:PHE:C | 12 | 0.74 |
| (1,156) | 1:A:109:LEU:N | 1:A:109:LEU:CA | 1:A:109:LEU:C | 1:A:110:ARG:N | 20 | 0.74 |
| (1,268) | 1:A:185:ALA:N | 1:A:185:ALA:CA | 1:A:185:ALA:C | 1:A:186:ALA:N | 8 | 0.73 |
| (1,249) | 1:A:167:ILE:C | 1:A:168:ALA:N | 1:A:168:ALA:CA | 1:A:168:ALA:C | 12 | 0.73 |
| (1,188) | 1:A:127:PHE:N | 1:A:127:PHE:CA | 1:A:127:PHE:C | 1:A:128:ILE:N | 18 | 0.73 |
| (1,150) | 1:A:106:PRO:N | 1:A:106:PRO:CA | 1:A:106:PRO:C | 1:A:107:SER:N | 11 | 0.73 |
| (1,170) | 1:A:116:LYS:C | 1:A:117:VAL:N | 1:A:117:VAL:CA | 1:A:117:VAL:C | 16 | 0.72 |
| (1,266) | 1:A:184:LYS:N | 1:A:184:LYS:CA | 1:A:184:LYS:C | 1:A:185:ALA:N | 15 | 0.71 |
| (1,239) | 1:A:162:SER:C | 1:A:163:LEU:N | 1:A:163:LEU:CA | 1:A:163:LEU:C | 19 | 0.7 |
| (1,186) | 1:A:126:VAL:N | 1:A:126:VAL:CA | 1:A:126:VAL:C | 1:A:127:PHE:N | 8 | 0.7 |
| (1,57) | 1:A:54:VAL:C | 1:A:55:THR:N | 1:A:55:THR:CA | 1:A:55:THR:C | 8 | 0.69 |
| (1,187) | 1:A:126:VAL:C | 1:A:127:PHE:N | 1:A:127:PHE:CA | 1:A:127:PHE:C | 15 | 0.69 |
| (1,18) | 1:A:30:GLN:N | 1:A:30:GLN:CA | 1:A:30:GLN:C | 1:A:31:GLY:N | 8 | 0.69 |
| (1,169) | 1:A:116:LYS:N | 1:A:116:LYS:CA | 1:A:116:LYS:C | 1:A:117:VAL:N | 11 | 0.69 |
| (1,163) | 1:A:112:GLN:C | 1:A:113:LEU:N | 1:A:113:LEU:CA | 1:A:113:LEU:C | 15 | 0.69 |
| (1,23) | 1:A:32:LYS:C | 1:A:33:ILE:N | 1:A:33:ILE:CA | 1:A:33:ILE:C | 17 | 0.68 |
| (1,168) | 1:A:115:PRO:C | 1:A:116:LYS:N | 1:A:116:LYS:CA | 1:A:116:LYS:C | 16 | 0.68 |
| (1,127) | 1:A:92:ALA:N | 1:A:92:ALA:CA | 1:A:92:ALA:C | 1:A:93:ASP:N | 12 | 0.68 |
| (1,90) | 1:A:71:ALA:N | 1:A:71:ALA:CA | 1:A:71:ALA:C | 1:A:72:GLN:N | 5 | 0.67 |
| (1,18) | 1:A:30:GLN:N | 1:A:30:GLN:CA | 1:A:30:GLN:C | 1:A:31:GLY:N | 16 | 0.67 |
| (1,57) | 1:A:54:VAL:C | 1:A:55:THR:N | 1:A:55:THR:CA | 1:A:55:THR:C | 14 | 0.66 |
| (1,238) | 1:A:162:SER:N | 1:A:162:SER:CA | 1:A:162:SER:C | 1:A:163:LEU:N | 13 | 0.66 |
| (1,106) | 1:A:79:THR:N | 1:A:79:THR:CA | 1:A:79:THR:C | 1:A:80:THR:N | 13 | 0.66 |
| (1,6) | 1:A:23:SER:N | 1:A:23:SER:CA | 1:A:23:SER:C | 1:A:24:VAL:N | 9 | 0.65 |
| (1,270) | 1:A:186:ALA:N | 1:A:186:ALA:CA | 1:A:186:ALA:C | 1:A:187:LEU:N | 20 | 0.65 |
| (1,247) | 1:A:166:LEU:C | 1:A:167:ILE:N | 1:A:167:ILE:CA | 1:A:167:ILE:C | 18 | 0.65 |
| (1,189) | 1:A:127:PHE:C | 1:A:128:ILE:N | 1:A:128:ILE:CA | 1:A:128:ILE:C | 14 | 0.63 |
| (1,94) | 1:A:73:GLU:N | 1:A:73:GLU:CA | 1:A:73:GLU:C | 1:A:74:LYS:N | 4 | 0.62 |



| | ed from previous po | * | | | | |
|---------|---------------------|----------------|----------------|---------------|-------|-------------------------------------|
| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model | $\textbf{Violation} \ (\ \circ \)$ |
| (1,58) | 1:A:55:THR:N | 1:A:55:THR:CA | 1:A:55:THR:C | 1:A:56:ALA:N | 4 | 0.62 |
| (1,247) | 1:A:166:LEU:C | 1:A:167:ILE:N | 1:A:167:ILE:CA | 1:A:167:ILE:C | 7 | 0.62 |
| (1,192) | 1:A:129:LEU:N | 1:A:129:LEU:CA | 1:A:129:LEU:C | 1:A:130:GLU:N | 5 | 0.62 |
| (1,180) | 1:A:123:PRO:N | 1:A:123:PRO:CA | 1:A:123:PRO:C | 1:A:124:GLY:N | 15 | 0.62 |
| (1,96) | 1:A:74:LYS:N | 1:A:74:LYS:CA | 1:A:74:LYS:C | 1:A:75:GLY:N | 6 | 0.61 |
| (1,57) | 1:A:54:VAL:C | 1:A:55:THR:N | 1:A:55:THR:CA | 1:A:55:THR:C | 9 | 0.61 |
| (1,22) | 1:A:32:LYS:N | 1:A:32:LYS:CA | 1:A:32:LYS:C | 1:A:33:ILE:N | 15 | 0.61 |
| (1,206) | 1:A:137:LEU:N | 1:A:137:LEU:CA | 1:A:137:LEU:C | 1:A:138:GLN:N | 11 | 0.61 |
| (1,115) | 1:A:83:SER:C | 1:A:84:ASN:N | 1:A:84:ASN:CA | 1:A:84:ASN:C | 7 | 0.61 |
| (1,22) | 1:A:32:LYS:N | 1:A:32:LYS:CA | 1:A:32:LYS:C | 1:A:33:ILE:N | 16 | 0.59 |
| (1,145) | 1:A:103:CYS:N | 1:A:103:CYS:CA | 1:A:103:CYS:C | 1:A:104:HIS:N | 5 | 0.59 |
| (1,260) | 1:A:173:ARG:N | 1:A:173:ARG:CA | 1:A:173:ARG:C | 1:A:174:ASN:N | 6 | 0.58 |
| (1,2) | 1:A:21:LEU:N | 1:A:21:LEU:CA | 1:A:21:LEU:C | 1:A:22:VAL:N | 14 | 0.58 |
| (1,54) | 1:A:53:GLU:N | 1:A:53:GLU:CA | 1:A:53:GLU:C | 1:A:54:VAL:N | 4 | 0.56 |
| (1,280) | 1:A:191:LEU:N | 1:A:191:LEU:CA | 1:A:191:LEU:C | 1:A:192:GLY:N | 1 | 0.56 |
| (1,112) | 1:A:82:GLN:N | 1:A:82:GLN:CA | 1:A:82:GLN:C | 1:A:83:SER:N | 10 | 0.56 |
| (1,211) | 1:A:140:ASN:C | 1:A:141:THR:N | 1:A:141:THR:CA | 1:A:141:THR:C | 18 | 0.55 |
| (1,180) | 1:A:123:PRO:N | 1:A:123:PRO:CA | 1:A:123:PRO:C | 1:A:124:GLY:N | 4 | 0.55 |
| (1,169) | 1:A:116:LYS:N | 1:A:116:LYS:CA | 1:A:116:LYS:C | 1:A:117:VAL:N | 6 | 0.55 |
| (1,127) | 1:A:92:ALA:N | 1:A:92:ALA:CA | 1:A:92:ALA:C | 1:A:93:ASP:N | 1 | 0.55 |
| (1,119) | 1:A:85:LEU:C | 1:A:86:ALA:N | 1:A:86:ALA:CA | 1:A:86:ALA:C | 1 | 0.55 |
| (1,6) | 1:A:23:SER:N | 1:A:23:SER:CA | 1:A:23:SER:C | 1:A:24:VAL:N | 5 | 0.54 |
| (1,31) | 1:A:41:GLY:C | 1:A:42:ARG:N | 1:A:42:ARG:CA | 1:A:42:ARG:C | 18 | 0.54 |
| (1,190) | 1:A:128:ILE:N | 1:A:128:ILE:CA | 1:A:128:ILE:C | 1:A:129:LEU:N | 7 | 0.54 |
| (1,175) | 1:A:119:GLN:N | 1:A:119:GLN:CA | 1:A:119:GLN:C | 1:A:120:GLY:N | 7 | 0.53 |
| (1,57) | 1:A:54:VAL:C | 1:A:55:THR:N | 1:A:55:THR:CA | 1:A:55:THR:C | 13 | 0.52 |
| (1,237) | 1:A:161:PRO:C | 1:A:162:SER:N | 1:A:162:SER:CA | 1:A:162:SER:C | 1 | 0.51 |
| (1,18) | 1:A:30:GLN:N | 1:A:30:GLN:CA | 1:A:30:GLN:C | 1:A:31:GLY:N | 20 | 0.51 |
| (1,46) | 1:A:49:SER:N | 1:A:49:SER:CA | 1:A:49:SER:C | 1:A:50:LEU:N | 20 | 0.5 |
| (1,145) | 1:A:103:CYS:N | 1:A:103:CYS:CA | 1:A:103:CYS:C | 1:A:104:HIS:N | 9 | 0.5 |
| (1,54) | 1:A:53:GLU:N | 1:A:53:GLU:CA | 1:A:53:GLU:C | 1:A:54:VAL:N | 20 | 0.49 |
| (1,258) | 1:A:172:GLU:N | 1:A:172:GLU:CA | 1:A:172:GLU:C | 1:A:173:ARG:N | 15 | 0.49 |
| (1,238) | 1:A:162:SER:N | 1:A:162:SER:CA | 1:A:162:SER:C | 1:A:163:LEU:N | 14 | 0.49 |
| (1,139) | 1:A:100:SER:N | 1:A:100:SER:CA | 1:A:100:SER:C | 1:A:101:ILE:N | 10 | 0.49 |
| (1,106) | 1:A:79:THR:N | 1:A:79:THR:CA | 1:A:79:THR:C | 1:A:80:THR:N | 2 | 0.49 |
| (1,262) | 1:A:174:ASN:N | 1:A:174:ASN:CA | 1:A:174:ASN:C | 1:A:175:LEU:N | 7 | 0.48 |
| (1,249) | 1:A:167:ILE:C | 1:A:168:ALA:N | 1:A:168:ALA:CA | 1:A:168:ALA:C | 16 | 0.48 |
| (1,247) | 1:A:166:LEU:C | 1:A:167:ILE:N | 1:A:167:ILE:CA | 1:A:167:ILE:C | 2 | 0.48 |
| (1,115) | 1:A:83:SER:C | 1:A:84:ASN:N | 1:A:84:ASN:CA | 1:A:84:ASN:C | 6 | 0.48 |
| (1,280) | 1:A:191:LEU:N | 1:A:191:LEU:CA | 1:A:191:LEU:C | 1:A:192:GLY:N | 14 | 0.47 |
| (1,206) | 1:A:137:LEU:N | 1:A:137:LEU:CA | 1:A:137:LEU:C | 1:A:138:GLN:N | 6 | 0.47 |
| (1,188) | 1:A:127:PHE:N | 1:A:127:PHE:CA | 1:A:127:PHE:C | 1:A:128:ILE:N | 3 | 0.47 |
| (1,281) | 1:A:191:LEU:C | 1:A:192:GLY:N | 1:A:192:GLY:CA | 1:A:192:GLY:C | 4 | 0.46 |
| (1,104) | 1:A:78:ILE:N | 1:A:78:ILE:CA | 1:A:78:ILE:C | 1:A:79:THR:N | 9 | 0.46 |
| (1,280) | 1:A:191:LEU:N | 1:A:191:LEU:CA | 1:A:191:LEU:C | 1:A:192:GLY:N | 11 | 0.45 |
| (1,194) | 1:A:130:GLU:N | 1:A:130:GLU:CA | 1:A:130:GLU:C | 1:A:131:GLY:N | 20 | 0.45 |
| (1,189) | 1:A:127:PHE:C | 1:A:128:ILE:N | 1:A:128:ILE:CA | 1:A:128:ILE:C | 3 | 0.45 |
| (1,164) | 1:A:113:LEU:N | 1:A:113:LEU:CA | 1:A:113:LEU:C | 1:A:114:TYR:N | 17 | 0.45 |
| (1,107) | 1:A:79:THR:C | 1:A:80:THR:N | 1:A:80:THR:CA | 1:A:80:THR:C | 1 | 0.45 |
| (1,226) | 1:A:155:THR:N | 1:A:155:THR:CA | 1:A:155:THR:C | 1:A:156:LEU:N | 5 | 0.44 |
| (1,115) | 1:A:83:SER:C | 1:A:84:ASN:N | 1:A:84:ASN:CA | 1:A:84:ASN:C | 10 | 0.44 |
| | · · | | | | 01: | ed on nert nage |



| Key | $rac{ed\ from\ previous\ po}{\mathbf{Atom-1}}$ | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model | Violation (o) |
|---------|---|----------------|----------------|---------------|-------|-----------------|
| (1,104) | 1:A:78:ILE:N | 1:A:78:ILE:CA | 1:A:78:ILE:C | 1:A:79:THR:N | 6 | 0.44 |
| (1,280) | 1:A:191:LEU:N | 1:A:191:LEU:CA | 1:A:191:LEU:C | 1:A:192:GLY:N | 6 | 0.43 |
| (1,188) | 1:A:127:PHE:N | 1:A:127:PHE:CA | 1:A:127:PHE:C | 1:A:128:ILE:N | 20 | 0.43 |
| (1,170) | 1:A:116:LYS:C | 1:A:117:VAL:N | 1:A:117:VAL:CA | 1:A:117:VAL:C | 10 | 0.43 |
| (1,130) | 1:A:93:ASP:C | 1:A:94:ALA:N | 1:A:94:ALA:CA | 1:A:94:ALA:C | 19 | 0.43 |
| (1,189) | 1:A:127:PHE:C | 1:A:128:ILE:N | 1:A:128:ILE:CA | 1:A:128:ILE:C | 10 | 0.42 |
| (1,151) | 1:A:106:PRO:C | 1:A:107:SER:N | 1:A:107:SER:CA | 1:A:107:SER:C | 11 | 0.42 |
| (1,226) | 1:A:155:THR:N | 1:A:155:THR:CA | 1:A:155:THR:C | 1:A:156:LEU:N | 15 | 0.41 |
| (1,150) | 1:A:106:PRO:N | 1:A:106:PRO:CA | 1:A:106:PRO:C | 1:A:107:SER:N | 2 | 0.41 |
| (1,54) | 1:A:53:GLU:N | 1:A:53:GLU:CA | 1:A:53:GLU:C | 1:A:54:VAL:N | 14 | 0.4 |
| (1,258) | 1:A:172:GLU:N | 1:A:172:GLU:CA | 1:A:172:GLU:C | 1:A:173:ARG:N | 13 | 0.4 |
| (1,189) | 1:A:127:PHE:C | 1:A:128:ILE:N | 1:A:128:ILE:CA | 1:A:128:ILE:C | 4 | 0.39 |
| (1,73) | 1:A:62:VAL:C | 1:A:63:GLY:N | 1:A:63:GLY:CA | 1:A:63:GLY:C | 2 | 0.38 |
| (1,54) | 1:A:53:GLU:N | 1:A:53:GLU:CA | 1:A:53:GLU:C | 1:A:54:VAL:N | 13 | 0.37 |
| (1,280) | 1:A:191:LEU:N | 1:A:191:LEU:CA | 1:A:191:LEU:C | 1:A:192:GLY:N | 20 | 0.37 |
| (1,190) | 1:A:128:ILE:N | 1:A:128:ILE:CA | 1:A:128:ILE:C | 1:A:129:LEU:N | 12 | 0.37 |
| (1,112) | 1:A:82:GLN:N | 1:A:82:GLN:CA | 1:A:82:GLN:C | 1:A:83:SER:N | 2 | 0.37 |
| (1,212) | 1:A:141:THR:N | 1:A:141:THR:CA | 1:A:141:THR:C | 1:A:142:GLY:N | 18 | 0.36 |
| (1,107) | 1:A:79:THR:C | 1:A:80:THR:N | 1:A:80:THR:CA | 1:A:80:THR:C | 18 | 0.36 |
| (1,156) | 1:A:109:LEU:N | 1:A:109:LEU:CA | 1:A:109:LEU:C | 1:A:110:ARG:N | 9 | 0.35 |
| (1,249) | 1:A:167:ILE:C | 1:A:168:ALA:N | 1:A:168:ALA:CA | 1:A:168:ALA:C | 8 | 0.34 |
| (1,88) | 1:A:70:LEU:N | 1:A:70:LEU:CA | 1:A:70:LEU:C | 1:A:71:ALA:N | 15 | 0.33 |
| (1,281) | 1:A:191:LEU:C | 1:A:192:GLY:N | 1:A:192:GLY:CA | 1:A:192:GLY:C | 15 | 0.33 |
| (1,262) | 1:A:174:ASN:N | 1:A:174:ASN:CA | 1:A:174:ASN:C | 1:A:175:LEU:N | 19 | 0.33 |
| (1,249) | 1:A:167:ILE:C | 1:A:168:ALA:N | 1:A:168:ALA:CA | 1:A:168:ALA:C | 20 | 0.33 |
| (1,6) | 1:A:23:SER:N | 1:A:23:SER:CA | 1:A:23:SER:C | 1:A:24:VAL:N | 14 | 0.32 |
| (1,249) | 1:A:167:ILE:C | 1:A:168:ALA:N | 1:A:168:ALA:CA | 1:A:168:ALA:C | 5 | 0.32 |
| (1,160) | 1:A:111:GLN:N | 1:A:111:GLN:CA | 1:A:111:GLN:C | 1:A:112:GLN:N | 1 | 0.32 |
| (1,143) | 1:A:102:PHE:N | 1:A:102:PHE:CA | 1:A:102:PHE:C | 1:A:103:CYS:N | 1 | 0.32 |
| (1,269) | 1:A:185:ALA:C | 1:A:186:ALA:N | 1:A:186:ALA:CA | 1:A:186:ALA:C | 16 | 0.31 |
| (1,238) | 1:A:162:SER:N | 1:A:162:SER:CA | 1:A:162:SER:C | 1:A:163:LEU:N | 6 | 0.31 |
| (1,187) | 1:A:126:VAL:C | 1:A:127:PHE:N | 1:A:127:PHE:CA | 1:A:127:PHE:C | 1 | 0.3 |
| (1,115) | 1:A:83:SER:C | 1:A:84:ASN:N | 1:A:84:ASN:CA | 1:A:84:ASN:C | 17 | 0.3 |
| (1,285) | 1:A:193:GLN:C | 1:A:194:LYS:N | 1:A:194:LYS:CA | 1:A:194:LYS:C | 7 | 0.29 |
| (1,192) | 1:A:129:LEU:N | 1:A:129:LEU:CA | 1:A:129:LEU:C | 1:A:130:GLU:N | 19 | 0.29 |
| (1,18) | 1:A:30:GLN:N | 1:A:30:GLN:CA | 1:A:30:GLN:C | 1:A:31:GLY:N | 13 | 0.29 |
| (1,274) | 1:A:188:ILE:N | 1:A:188:ILE:CA | 1:A:188:ILE:C | 1:A:189:GLN:N | 3 | 0.28 |
| (1,173) | 1:A:118:TYR:N | 1:A:118:TYR:CA | 1:A:118:TYR:C | 1:A:119:GLN:N | 7 | 0.28 |
| (1,154) | 1:A:108:SER:N | 1:A:108:SER:CA | 1:A:108:SER:C | 1:A:109:LEU:N | 3 | 0.28 |
| (1,127) | 1:A:92:ALA:N | 1:A:92:ALA:CA | 1:A:92:ALA:C | 1:A:93:ASP:N | 3 | 0.27 |
| (1,105) | 1:A:78:ILE:C | 1:A:79:THR:N | 1:A:79:THR:CA | 1:A:79:THR:C | 6 | 0.27 |
| (1,92) | 1:A:72:GLN:N | 1:A:72:GLN:CA | 1:A:72:GLN:C | 1:A:73:GLU:N | 4 | 0.26 |
| (1,280) | 1:A:191:LEU:N | 1:A:191:LEU:CA | 1:A:191:LEU:C | 1:A:192:GLY:N | 17 | 0.25 |
| (1,202) | 1:A:135:GLU:N | 1:A:135:GLU:CA | 1:A:135:GLU:C | 1:A:136:GLN:N | 7 | 0.25 |
| (1,186) | 1:A:126:VAL:N | 1:A:126:VAL:CA | 1:A:126:VAL:C | 1:A:127:PHE:N | 12 | 0.24 |
| (1,182) | 1:A:124:GLY:N | 1:A:124:GLY:CA | 1:A:124:GLY:C | 1:A:125:GLY:N | 13 | 0.24 |
| (1,176) | 1:A:120:GLY:C | 1:A:121:LEU:N | 1:A:121:LEU:CA | 1:A:121:LEU:C | 19 | 0.24 |
| (1,70) | 1:A:61:SER:N | 1:A:61:SER:CA | 1:A:61:SER:C | 1:A:62:VAL:N | 20 | 0.23 |
| (1,213) | 1:A:142:GLY:C | 1:A:143:GLY:N | 1:A:143:GLY:CA | 1:A:143:GLY:C | 13 | 0.23 |
| (1,201) | 1:A:134:PRO:C | 1:A:135:GLU:N | 1:A:135:GLU:CA | 1:A:135:GLU:C | 3 | 0.22 |
| (1,111) | 1:A:81:VAL:C | 1:A:82:GLN:N | 1:A:82:GLN:CA | 1:A:82:GLN:C | 18 | 0.22 |



| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model | Violation (\circ) |
|---------|---------------|----------------|----------------|---------------|-------|---------------------|
| (1,270) | 1:A:186:ALA:N | 1:A:186:ALA:CA | 1:A:186:ALA:C | 1:A:187:LEU:N | 13 | 0.21 |
| (1,20) | 1:A:31:GLY:N | 1:A:31:GLY:CA | 1:A:31:GLY:C | 1:A:32:LYS:N | 16 | 0.21 |
| (1,18) | 1:A:30:GLN:N | 1:A:30:GLN:CA | 1:A:30:GLN:C | 1:A:31:GLY:N | 17 | 0.21 |
| (1,22) | 1:A:32:LYS:N | 1:A:32:LYS:CA | 1:A:32:LYS:C | 1:A:33:ILE:N | 18 | 0.18 |
| (1,206) | 1:A:137:LEU:N | 1:A:137:LEU:CA | 1:A:137:LEU:C | 1:A:138:GLN:N | 10 | 0.18 |
| (1,190) | 1:A:128:ILE:N | 1:A:128:ILE:CA | 1:A:128:ILE:C | 1:A:129:LEU:N | 3 | 0.18 |
| (1,185) | 1:A:125:GLY:C | 1:A:126:VAL:N | 1:A:126:VAL:CA | 1:A:126:VAL:C | 4 | 0.18 |
| (1,114) | 1:A:83:SER:N | 1:A:83:SER:CA | 1:A:83:SER:C | 1:A:84:ASN:N | 17 | 0.18 |
| (1,111) | 1:A:81:VAL:C | 1:A:82:GLN:N | 1:A:82:GLN:CA | 1:A:82:GLN:C | 5 | 0.18 |
| (1,6) | 1:A:23:SER:N | 1:A:23:SER:CA | 1:A:23:SER:C | 1:A:24:VAL:N | 6 | 0.17 |
| (1,284) | 1:A:193:GLN:N | 1:A:193:GLN:CA | 1:A:193:GLN:C | 1:A:194:LYS:N | 5 | 0.16 |
| (1,247) | 1:A:166:LEU:C | 1:A:167:ILE:N | 1:A:167:ILE:CA | 1:A:167:ILE:C | 12 | 0.16 |
| (1,212) | 1:A:141:THR:N | 1:A:141:THR:CA | 1:A:141:THR:C | 1:A:142:GLY:N | 15 | 0.16 |
| (1,129) | 1:A:93:ASP:N | 1:A:93:ASP:CA | 1:A:93:ASP:C | 1:A:94:ALA:N | 19 | 0.16 |
| (1,3) | 1:A:21:LEU:C | 1:A:22:VAL:N | 1:A:22:VAL:CA | 1:A:22:VAL:C | 17 | 0.15 |
| (1,20) | 1:A:31:GLY:N | 1:A:31:GLY:CA | 1:A:31:GLY:C | 1:A:32:LYS:N | 6 | 0.15 |
| (1,54) | 1:A:53:GLU:N | 1:A:53:GLU:CA | 1:A:53:GLU:C | 1:A:54:VAL:N | 16 | 0.14 |
| (1,54) | 1:A:53:GLU:N | 1:A:53:GLU:CA | 1:A:53:GLU:C | 1:A:54:VAL:N | 12 | 0.13 |
| (1,187) | 1:A:126:VAL:C | 1:A:127:PHE:N | 1:A:127:PHE:CA | 1:A:127:PHE:C | 10 | 0.13 |
| (1,90) | 1:A:71:ALA:N | 1:A:71:ALA:CA | 1:A:71:ALA:C | 1:A:72:GLN:N | 7 | 0.12 |
| (1,202) | 1:A:135:GLU:N | 1:A:135:GLU:CA | 1:A:135:GLU:C | 1:A:136:GLN:N | 5 | 0.11 |
| (1,284) | 1:A:193:GLN:N | 1:A:193:GLN:CA | 1:A:193:GLN:C | 1:A:194:LYS:N | 10 | 0.1 |
| (1,247) | 1:A:166:LEU:C | 1:A:167:ILE:N | 1:A:167:ILE:CA | 1:A:167:ILE:C | 17 | 0.1 |
| (1,227) | 1:A:155:THR:C | 1:A:156:LEU:N | 1:A:156:LEU:CA | 1:A:156:LEU:C | 4 | 0.1 |
| (1,142) | 1:A:101:ILE:C | 1:A:102:PHE:N | 1:A:102:PHE:CA | 1:A:102:PHE:C | 3 | 0.09 |
| (1,272) | 1:A:187:LEU:N | 1:A:187:LEU:CA | 1:A:187:LEU:C | 1:A:188:ILE:N | 9 | 0.08 |
| (1,254) | 1:A:170:ASN:N | 1:A:170:ASN:CA | 1:A:170:ASN:C | 1:A:171:LEU:N | 16 | 0.08 |
| (1,28) | 1:A:35:CYS:N | 1:A:35:CYS:CA | 1:A:35:CYS:C | 1:A:36:LEU:N | 3 | 0.07 |
| (1,281) | 1:A:191:LEU:C | 1:A:192:GLY:N | 1:A:192:GLY:CA | 1:A:192:GLY:C | 12 | 0.06 |
| (1,22) | 1:A:32:LYS:N | 1:A:32:LYS:CA | 1:A:32:LYS:C | 1:A:33:ILE:N | 19 | 0.06 |
| (1,285) | 1:A:193:GLN:C | 1:A:194:LYS:N | 1:A:194:LYS:CA | 1:A:194:LYS:C | 9 | 0.04 |
| (1,100) | 1:A:76:VAL:N | 1:A:76:VAL:CA | 1:A:76:VAL:C | 1:A:77:LYS:N | 8 | 0.04 |
| (1,158) | 1:A:110:ARG:N | 1:A:110:ARG:CA | 1:A:110:ARG:C | 1:A:111:GLN:N | 20 | 0.03 |
| (1,58) | 1:A:55:THR:N | 1:A:55:THR:CA | 1:A:55:THR:C | 1:A:56:ALA:N | 17 | 0.02 |
| (1,185) | 1:A:125:GLY:C | 1:A:126:VAL:N | 1:A:126:VAL:CA | 1:A:126:VAL:C | 15 | 0.02 |
| (1,138) | 1:A:99:VAL:C | 1:A:100:SER:N | 1:A:100:SER:CA | 1:A:100:SER:C | 13 | 0.01 |

