

wwPDB NMR Structure Validation Summary Report (i)

Feb 25, 2020 – 04:32 PM CST

PDB ID : 1PQX

Title: Solution NMR Structure of Staphylococcus aureus protein SAV1430. North-

east Strucutral Genomics Consortium Target ZR18.

Authors: Baran, M.C.; Aramini, J.M.; Xiao, R.; Huang, Y.J.; Acton, T.B.; Shih, L.;

Montelione, G.T.; Northeast Structural Genomics Consortium (NESG)

Deposited on : 2003-06-19

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

We welcome your comments at *validation@mail.wwpdb.org*A user guide is available at

https://www.wwpdb.org/validation/2017/NMRValidationReportHelp with specific help available everywhere you see the (i) symbol.

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

Cyrange : Kirchner and Güntert (2011)

NmrClust : Kelley et al. (1996)

MolProbity: 4.02b-467

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

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

PANAV : Wang et al. (2010)

 $ShiftChecker \quad : \quad 2.6.dev1$

BMRB Restraints Analalysis : v1.2

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

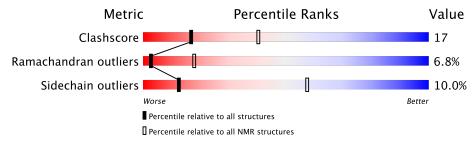
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : 2.6.dev1

1 Overall quality at a glance (i)

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

The overall completeness of chemical shifts assignment is 66%.

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	NMR archive
Metric	$(\# \mathrm{Entries})$	$(\# ext{Entries})$
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	Qualit	y of chain	
1	Λ	01	48%	29%	22%



2 Ensemble composition and analysis (i)

This entry contains 10 models. Model 1 is the overall representative, medoid model (most similar to other models).

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 mode					
1	A:2-A:5, A:13-A:21, A:26-	0.45	1		
	A:83 (71)				

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

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

The models can be grouped into 3 clusters. No single-model clusters were found.

Cluster number	Models
1	1, 2, 4, 10
2	3, 6, 7, 8
3	5, 9



3 Entry composition (i)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 1444 atoms, of which 708 are hydrogens and 0 are deuteriums.

• Molecule 1 is a protein called conserved hypothetical protein.

Mol	Chain	Residues			Aton	ns			Trace
1	Λ	01	Total	С	Н	N	О	S	0
	A	91	1444	462	708	124	146	4	U

There are 8 discrepancies between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	84	LEU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q99U58
A	85	GLU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q99U58
A	86	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q99U58
A	87	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q99U58
A	88	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q99U58
A	89	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q99U58
A	90	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q99U58
A	91	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q99U58

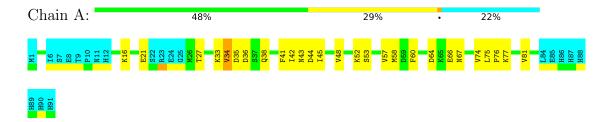


4 Residue-property plots (i)

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.

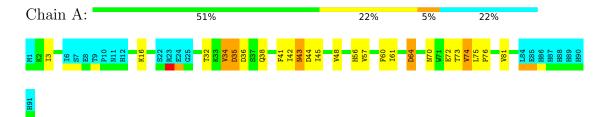
• Molecule 1: conserved hypothetical protein



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

The representative model is number 1. Colouring as in section 4.1 above.

• Molecule 1: conserved hypothetical protein





Refinement protocol and experimental data overview (i) 5



The models were refined using the following method: torsion angle dynamics.

Of the 56 calculated structures, 10 were deposited, based on the following criterion: overall energy.

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

Software name	Classification	Version
X-PLOR	structure solution	
X-PLOR	refinement	

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

Chemical shift file(s)	1pqx_nmr.cif
Number of chemical shift lists	1
Total number of shifts	1077
Number of shifts mapped to atoms	684
Number of unparsed shifts	119
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	274
Assignment completeness (well-defined parts)	66%

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	565	562	562	19±3
All	All	5650	5620	5620	189

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 17.

5 of 94 unique clashes are listed below, sorted by their clash magnitude.

Atom-1 Atom-2		Clash(Å)	$Distance(\mathring{A})$	Models	
Atom-1	\mathbf{m} -1 Atom-2 Clash(A)		Distance(A)	Worst	Total
1:A:42:ILE:HD13	1:A:45:ILE:HD12	0.83	1.50	1	10
1:A:48:VAL:O	1:A:51:VAL:HG22	0.82	1.75	3	1
1:A:51:VAL:O	1:A:53:SER:N	0.76	2.18	3	3
1:A:45:ILE:HD11	1:A:81:VAL:HG21	0.71	1.62	3	6
1:A:51:VAL:O	1:A:64:ASP:O	0.68	2.11	3	3

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	Per	centiles
1	A	71/91 (78%)	53±2 (75±2%)	13±2 (18±3%)	5±2 (7±2%)	3	18
All	All	710/910 (78%)	534 (75%)	128 (18%)	48 (7%)	3	18

5 of 14 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	34	VAL	10
1	A	36	ASP	6
1	A	35	ASP	6
1	A	27	THR	5
1	A	58	MET	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	67/86 (78%)	60±1 (90±2%)	7±1 (10±2%)	12 57
All	All	670/860 (78%)	603 (90%)	67 (10%)	12 57

5 of 31 unique residues with a non-rotameric sidechain are listed below. They are sorted by the frequency of occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	74	VAL	8
1	A	64	ASP	4
1	A	30	THR	4
1	A	77	LYS	3
1	A	75	LEU	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 66% for the well-defined parts and 60% for the entire structure.

7.1 Chemical shift list 1

File name: 1pqx_nmr.cif

Chemical shift list name: nef_chemical_shift_list_1pqx.mr

7.1.1 Bookkeeping (i)

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

Total number of shifts	1077
Number of shifts mapped to atoms	684
Number of unparsed shifts	119
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	274
Number of shift outliers (ShiftChecker)	1

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

• Chemical shift has been reported more than once. First 5 (of 119) occurrences are reported below.

Shift ID	Chain Res		Type	Atom	Shift Data			
	Chain	rtes	Type	Atom	Value	Uncertainty	Ambiguity	
32	A	3	ILE	HG2%	0.595	0.020	1	
33	A	3	ILE	HG2%	0.595	0.020	1	
35	A	3	ILE	HD1%	0.775	0.020	1	
36	A	3	ILE	HD1%	0.775	0.020	1	
50	A	4	ILE	HG2%	0.802	0.020	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 274) occurrences are reported below.

Chain	Pos	Type	Atom		Shift Dat	a
Chain	rtes	Type	Atom	Value	Shift Dat Uncertainty	Ambiguity
A	59	ASP	HBx	2.431	0.02	2
A	53	SER	HBx	3.881	0.02	2



Continued from previous page...

	Chain	Pag	Ттто	Atom		Shift Dat	a
	Chain	rtes	Type	Atom	Value	Shift Dat Uncertainty	Ambiguity
Ī	A	25	GLY	HAx	3.981 0.02		2
Ī	A	7	SER	HBx	3.622	0.02	2
Ī	A	35	ASP	HBx	2.535	0.02	2

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
$^{13}\mathrm{C}_{\alpha}$	87	-0.23 ± 0.27	None needed ($< 0.5 \text{ ppm}$)
$^{13}C_{\beta}$	85	0.19 ± 0.24	None needed ($< 0.5 \text{ ppm}$)
¹³ C′	82	-0.02 ± 0.25	None needed ($< 0.5 \text{ ppm}$)
^{15}N	82	-0.11 ± 0.51	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 66%, i.e. 568 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 862. 11 out of 11 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	$^{1}\mathrm{H}$	$^{13}\mathbf{C}$	$^{15}{ m N}$
Backbone	348/351 (99%)	139/140 (99%)	$140/142 \ (99\%)$	69/69 (100%)
Sidechain	182/448 (41%)	$24/258 \ (9\%)$	153/178 (86%)	5/12 (42%)
Aromatic	38/63 (60%)	19/34 (56%)	18/27 (67%)	1/2 (50%)
Overall	568/862~(66%)	182/432 (42%)	311/347 (90%)	75/83 (90%)

7.1.4 Statistically unusual chemical shifts (i)

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

M	ol Chain	Res	Type	Atom	Shift, ppm	Expected range, ppm	Z-score
1	A	64	ASP	HA	6.21	6.15 - 3.05	5.2

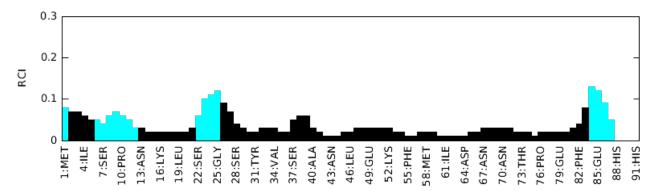
7.1.5 Random Coil Index (RCI) plots (i)

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

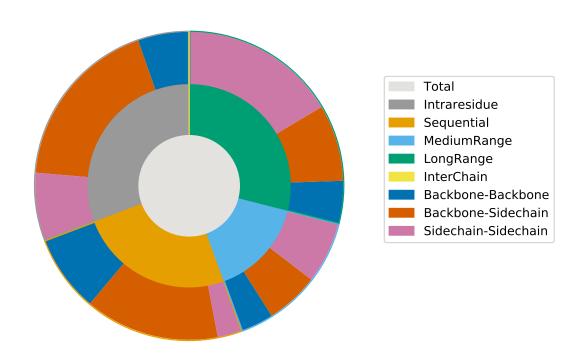
8.1 Distance restraints summary

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

Dogtrointa turo	$B-B^1(H^4)$	$\mathbf{B} ext{-}\mathbf{S}^2(\mathbf{H}^4)$	S-S ³ (H ⁴)	Total		
Restraints type	D-D (I 1)	D-8-(II-)	S-S*(I 1-)	$Total(H^4)$	RR^5	$\%^6$
Intraresidue ($ i-j =0$)	83(0)	282(0)	110(0)	475(0)	5.7	30.8
Sequential (i-j =1)	125(0)	218(0)	40(0)	383(0)	4.6	24.8
Medium range ($ i-j >1$ and $ i-j <5$)	53(22)	86(0)	100(0)	239(22)	2.9	15.5
Long range (i-j ≥5)	69(32)	124(0)	254(0)	447(32)	5.4	29.0
Inter chain	0(0)	0(0)	0(0)	0(0)	0.0	0.0
Total	330(54)	710(0)	504(0)	1544(54)	18.6	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





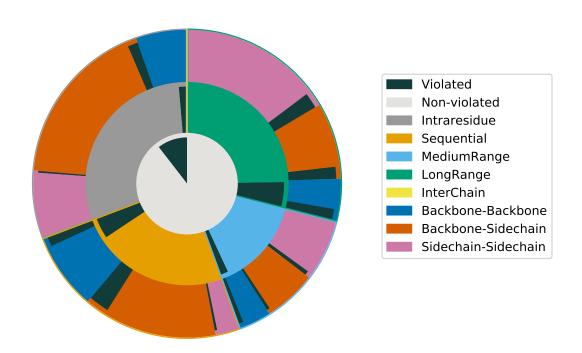
8.2 Distance violations summary

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$)	1(1.2)	17(6.0)	3(2.7)	21(4.4)	0.3	13.0
Sequential (i-j =1)	17(13.6)	34(15.6)	4(10.0)	55(14.4)	0.7	34.0
Medium range ($ i-j >1$ and $ i-j <5$)	9(17.0)	5(5.8)	7(7.0)	21(8.8)	0.3	13.0
Long range (i-j ≥5)	19(27.5)	20(16.1)	26(10.2)	65(14.5)	0.8	40.1
Inter chain	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0.0	0.0
Total	46(13.9)	76(10.7)	40(7.9)	162(10.5)	2.0	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.

8.2.1 Pie-chart: Distance violations summary





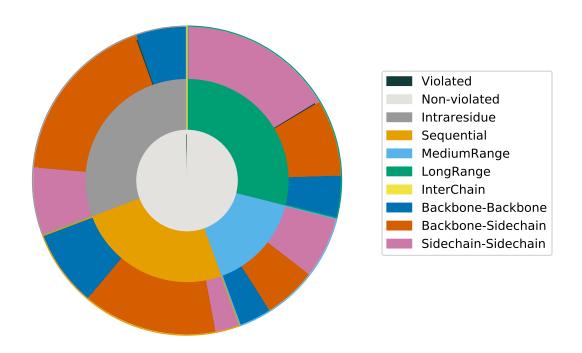
8.3 Consistent distance violations summary

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

Dogtrojeta temo	$B-B^{1}(\%^{4})$	$B-S^2(\%^4)$	$S-S^3(\%^4)$	To	otal	
Restraints type	D-D (%)	D-3 (%)	S-S'(%)	$Total(\%^4)$	RR^5	$\%^6$
Intraresidue ($ i-j =0$)	0(0.0)	2(0.7)	0(0.0)	2(0.4)	0.0	50.0
Sequential (i-j =1)	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0.0	0.0
Medium range ($ i-j >1$ and $ i-j <5$)	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0.0	0.0
Long range (i-j ≥5)	0(0.0)	0(0.0)	2(0.8)	2(0.4)	0.0	50.0
Inter chain	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0.0	0.0
Total	0(0.0)	2(0.3)	2(0.4)	4(0.3)	0.0	100.0

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

8.3.1 Pie-chart: Consistent distance violations





8.4 Residual distance violations

Violation are counted in different bin sizes and listed below

Range (Å)	No. of violated restraints per model	Max violation (Å)
0-0.2	34.2	0.2
0.2-0.5	6.8	0.5
0.5-1.0	3.0	0.89
1.0-2.0	1.4	1.99
2.0-5.0	None	None
5.0<	None	None

8.5 Distance violations in ensemble

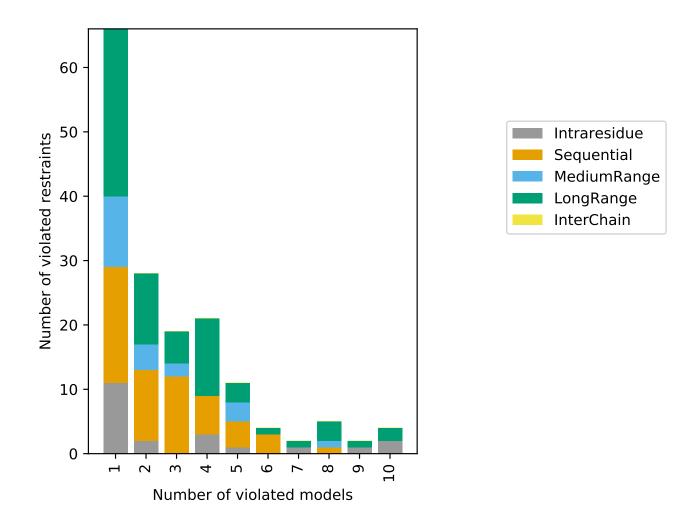
The restraints are grouped based on the number of violated models and listed here.

I	No. of	f violat	ted re	strair	its	No. of violated models
IR^1	SQ^2	$ m MR^3$	LR^4	IC^5	Total	No. of violated models
11	18	11	26	0	66	1
2	11	4	11	0	28	2
0	12	2	5	0	19	3
3	6	0	12	0	21	4
1	4	3	3	0	11	5
0	3	0	1	0	4	6
1	0	0	1	0	2	7
0	1	1	3	0	5	8
1	0	0	1	0	2	9
2	0	0	2	0	4	10

 $^{^1 \}rm intraresidue$ 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



454 intraresidue restraints, 328 sequential restraints, 218 medium range restraints,382 long range restraints and 0 inter chain restraints are not violated. There are totally 1382 restrains not violated in any of the models

8.6 Violations in each model

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

Model ID		N	o. of v	iolati	ons	Mean (Å)	Max (Å)	
Model ID	IR^1	SQ^2	$ m MR^3$	LR^4	IC^5	Total	Mean (A)	Max (A)
1	10	11	3	15	0	39	0.15	1.71
2	6	15	3	17	0	41	0.17	1.71
3	7	12	6	20	0	45	0.19	1.64
4	5	15	6	17	0	43	0.26	1.99
5	7	16	7	20	0	50	0.18	1.64

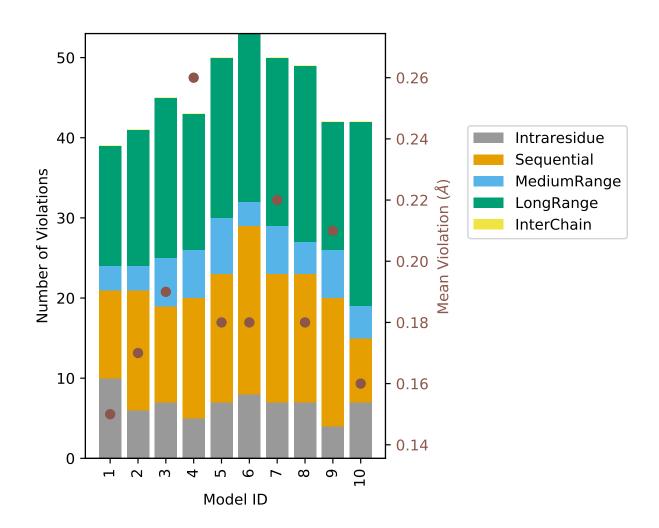


Continued from previous page...

Madal ID		N	o. of v	riolati	ons		Mean (Å)	Max (Å)
Model ID	IR^1	SQ^2	MR^3	LR^4	IC^5	Total	Mean (A)	Max (A)
6	8	21	3	21	0	53	0.18	1.83
7	7	16	6	21	0	50	0.22	1.46
8	7	16	4	22	0	49	0.18	1.56
9	4	16	6	16	0	42	0.21	1.87
10	7	8	4	23	0	42	0.16	1.27

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

8.6.1 Bar graph: Violations in each model

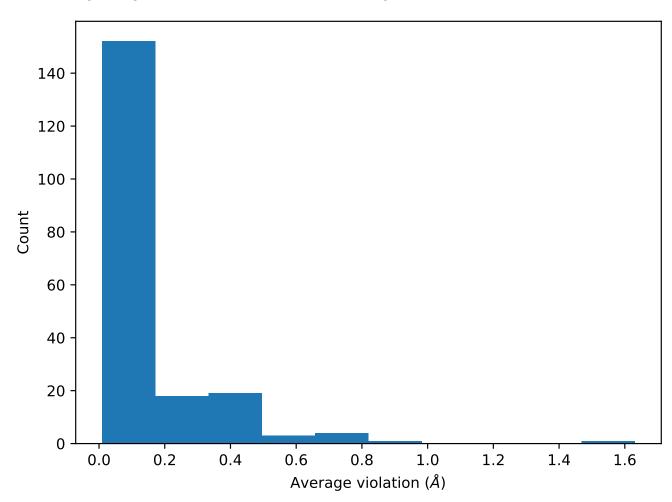




8.7 Most violated distance restraints

8.7.1 Histogram: Distribution of mean distance violation

The following histogram shows the distribution of average violation 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)
(1,794)	1:A:43:ASN:H	1:A:43:ASN:HB3	10	0.09	0.1
(1,555)	1:A:31:TYR:HE1	1:A:42:ILE:HG12	10	1.63	1.98
(1,1495)	1:A:82:PHE:H	1:A:82:PHE:HZ	10	0.05	0.08
(1,1079)	1:A:55:PHE:HE1	1:A:60:PHE:HZ	10	0.89	1.99
(1,48)	1:A:64:ASP:O	1:A:53:SER:H	9	0.1	0.25
(1,422)	1:A:22:SER:H	1:A:22:SER:HA	9	0.02	0.03



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,701)	1:A:39:PRO:HD3	1:A:42:ILE:HG12	8	0.02	0.05
(1,582)	1:A:33:LYS:H	1:A:46:LEU:HB2	8	0.4	0.5
(1,46)	1:A:63:VAL:O	1:A:15:MET:H	8	0.04	0.06
(1,209)	1:A:8:GLU:HB2	1:A:9:THR:H	8	0.07	0.15
(1,103)	1:A:3:ILE:HG12	1:A:82:PHE:H	8	0.48	0.66
(1,589)	1:A:34:VAL:H	1:A:34:VAL:HB	7	0.07	0.13
(1,460)	1:A:26:MET:H	1:A:59:ASP:HB2	7	0.37	0.59
(1,601)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:35:ASP:H	6	0.1	0.14
(1,601)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:35:ASP:H	6	0.1	0.14
(1,601)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:35:ASP:H	6	0.1	0.14
(1,501)	1:A:29:ASP:HB3	1:A:56:HIS:H	6	0.03	0.07
(1,409)	1:A:20:SER:H	1:A:21:GLU:HA	6	0.1	0.13
(1,210)	1:A:8:GLU:HB3	1:A:9:THR:H	6	0.06	0.12
(1,624)	1:A:35:ASP:H	1:A:38:GLN:HB2	5	0.21	0.55
(1,47)	1:A:64:ASP:O	1:A:53:SER:N	5	0.11	0.24
(1,40)	1:A:60:PHE:O	1:A:57:VAL:H	5	0.02	0.05
(1,291)	1:A:15:MET:HG2	1:A:63:VAL:HB	5	0.36	0.61
(1,267)	1:A:14:THR:HB	1:A:64:ASP:HB2	5	0.16	0.23
(1,26)	1:A:48:VAL:O	1:A:51:VAL:H	5	0.05	0.08
(1,208)	1:A:8:GLU:HA	1:A:9:THR:H	5	0.3	0.36
(1,1515)	1:A:83:GLU:HB2	1:A:84:LEU:HB2	5	0.3	0.49
(1,1478)	1:A:81:VAL:H	1:A:81:VAL:HG21	5	0.04	0.07
(1,1478)	1:A:81:VAL:H	1:A:81:VAL:HG22	5	0.04	0.07
(1,1478)	1:A:81:VAL:H	1:A:81:VAL:HG23	5	0.04	0.07
(1,1232)	1:A:65:LYS:HG2	1:A:66:GLU:HA	5	0.35	0.43
(1,1141)	1:A:59:ASP:H	1:A:60:PHE:HE1	5	0.34	0.8
(1,855)	1:A:45:ILE:HG21	1:A:45:ILE:HD11	4	0.02	0.04
(1,855)	1:A:45:ILE:HG21	1:A:45:ILE:HD12	4	0.02	0.04
(1,855)	1:A:45:ILE:HG21	1:A:45:ILE:HD13	4	0.02	0.04
(1,855)	1:A:45:ILE:HG22	1:A:45:ILE:HD11	4	0.02	0.04
(1,855)	1:A:45:ILE:HG22	1:A:45:ILE:HD12	4	0.02	0.04
(1,855)	1:A:45:ILE:HG22	1:A:45:ILE:HD13	4	0.02	0.04
(1,855)	1:A:45:ILE:HG23	1:A:45:ILE:HD11	4	0.02	0.04
(1,855)	1:A:45:ILE:HG23	1:A:45:ILE:HD12	4	0.02	0.04
(1,855)	1:A:45:ILE:HG23	1:A:45:ILE:HD13	4	0.02	0.04
(1,8)	1:A:17:ILE:O	1:A:61:ILE:H	4	0.03	0.05
(1,639)	1:A:37:SER:H	1:A:38:GLN:HB2	4	0.25	0.37
(1,584)	1:A:33:LYS:HA	1:A:34:VAL:H	4	0.15	0.44
(1,562)	1:A:31:TYR:HE1	1:A:61:ILE:HG21	4	0.22	0.35
(1,562)	1:A:31:TYR:HE1	1:A:61:ILE:HG22	4	0.22	0.35
(1,562)	1:A:31:TYR:HE1	1:A:61:ILE:HG23	4	0.22	0.35
(1,540)	1:A:31:TYR:HB3	1:A:54:ILE:H	4	0.04	0.09



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,427)	1:A:22:SER:HB2	1:A:59:ASP:HB3	4	0.13	0.2
(1,349)	1:A:17:ILE:HG12	1:A:61:ILE:HB	4	0.03	0.05
(1,348)	1:A:17:ILE:HG13	1:A:18:THR:H	4	0.03	0.05
(1,338)	1:A:17:ILE:H	1:A:61:ILE:HG12	4	0.26	0.47
(1,28)	1:A:50:GLY:O	1:A:66:GLU:H	4	0.03	0.04
(1,251)	1:A:13:ASN:HB2	1:A:65:LYS:H	4	0.06	0.1
(1,242)	1:A:13:ASN:H	1:A:14:THR:H	4	0.06	0.09
(1,231)	1:A:11:ASN:H	1:A:11:ASN:HB2	4	0.08	0.14
(1,214)	1:A:9:THR:H	1:A:10:PRO:HA	4	0.06	0.16
(1,205)	1:A:8:GLU:H	1:A:8:GLU:HB3	4	0.1	0.18
(1,2)	1:A:5:SER:O	1:A:18:THR:H	4	0.04	0.08
(1,183)	1:A:6:ILE:HG21	1:A:7:SER:H	4	0.14	0.16
(1,183)	1:A:6:ILE:HG22	1:A:7:SER:H	4	0.14	0.16
(1,183)	1:A:6:ILE:HG23	1:A:7:SER:H	4	0.14	0.16
(1,1027)	1:A:53:SER:H	1:A:64:ASP:HB3	4	0.05	0.08
(1,1019)	1:A:52:LYS:HE2	1:A:66:GLU:HB2	4	0.47	0.79
(1,1014)	1:A:52:LYS:HB2	1:A:64:ASP:HB3	4	0.55	0.89
(1,814)	1:A:44:ASP:H	1:A:45:ILE:HG12	3	0.22	0.34
(1,648)	1:A:38:GLN:H	1:A:39:PRO:HD2	3	0.03	0.04
(1,568)	1:A:32:THR:H	1:A:33:LYS:HG2	3	0.1	0.18
(1,50)	1:A:71:TRP:O	1:A:75:LEU:H	3	0.02	0.04
(1,469)	1:A:27:THR:HG21	1:A:28:SER:H	3	0.08	0.11
(1,469)	1:A:27:THR:HG22	1:A:28:SER:H	3	0.08	0.11
(1,469)	1:A:27:THR:HG23	1:A:28:SER:H	3	0.08	0.11
(1,462)	1:A:26:MET:HG2	1:A:59:ASP:HB2	3	0.41	0.67
(1,426)	1:A:22:SER:HB2	1:A:59:ASP:HB2	3	0.05	0.11
(1,290)	1:A:15:MET:HG3	1:A:16:LYS:H	3	0.08	0.09
(1,24)	1:A:45:ILE:O	1:A:48:VAL:H	3	0.03	0.05
(1,238)	1:A:12:HIS:HD2	1:A:71:TRP:HE1	3	0.03	0.06
(1,226)	1:A:10:PRO:HG3	1:A:11:ASN:H	3	0.05	0.11
(1,215)	1:A:9:THR:H	1:A:10:PRO:HD2	3	0.04	0.05
(1,1522)	1:A:84:LEU:H	1:A:85:GLU:H	3	0.04	0.09
(1,1512)	1:A:83:GLU:HA	1:A:84:LEU:H	3	0.03	0.04
(1,1508)	1:A:83:GLU:H	1:A:84:LEU:H	3	0.04	0.07
(1,14)	1:A:31:TYR:O	1:A:54:ILE:H	3	0.04	0.06
(1,1341)	1:A:73:THR:H	1:A:74:VAL:HA	3	0.01	0.02
(1,105)	1:A:3:ILE:HG12	1:A:82:PHE:HB3	3	0.24	0.45
(1,1003)	1:A:52:LYS:H	1:A:53:SER:H	3	0.25	0.27
(1,810)	1:A:43:ASN:HB2	1:A:47:LYS:HD2	2	0.48	0.59
(1,79)	1:A:3:ILE:H	1:A:3:ILE:HB	2	0.07	0.09
(1,71)	1:A:2:LYS:HB2	1:A:3:ILE:H	2	0.04	0.04
(1,669)	1:A:38:GLN:HE21	1:A:42:ILE:HG21	2	0.04	0.05



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,669)	1:A:38:GLN:HE21	1:A:42:ILE:HG22	2	0.04	0.05
(1,669)	1:A:38:GLN:HE21	1:A:42:ILE:HG23	2	0.04	0.05
(1,630)	1:A:35:ASP:HB2	1:A:37:SER:H	2	0.4	0.6
(1,63)	1:A:1:MET:HG2	1:A:20:SER:H	2	0.41	0.41
(1,627)	1:A:35:ASP:H	1:A:43:ASN:HD22	2	0.06	0.07
(1,566)	1:A:32:THR:H	1:A:33:LYS:H	2	0.07	0.12
(1,560)	1:A:31:TYR:HE1	1:A:56:HIS:HB2	2	0.38	0.53
(1,559)	1:A:31:TYR:HE1	1:A:56:HIS:H	2	0.68	0.73
(1,478)	1:A:28:SER:HB3	1:A:55:PHE:HE1	2	0.61	0.82
(1,433)	1:A:23:ARG:H	1:A:23:ARG:HD2	2	0.28	0.52
(1,42)	1:A:61:ILE:O	1:A:17:ILE:H	2	0.04	0.04
(1,30)	1:A:53:SER:O	1:A:64:ASP:H	2	0.06	0.1
(1,256)	1:A:13:ASN:HD22	1:A:67:ASN:HB2	2	0.44	0.53
(1,216)	1:A:9:THR:H	1:A:10:PRO:HD3	2	0.01	0.02
(1,200)	1:A:7:SER:HB2	1:A:16:LYS:HB2	2	0.32	0.47
(1,197)	1:A:7:SER:HA	1:A:8:GLU:H	2	0.06	0.07
(1,165)	1:A:5:SER:H	1:A:18:THR:HA	2	0.02	0.03
(1,163)	1:A:5:SER:H	1:A:17:ILE:HA	2	0.01	0.01
(1,1539)	1:A:85:GLU:HB2	1:A:86:HIS:H	2	0.07	0.09
(1,1539)	1:A:85:GLU:HB3	1:A:86:HIS:H	2	0.07	0.09
(1,1531)	1:A:84:LEU:HB2	1:A:85:GLU:H	2	0.06	0.08
(1,1526)	1:A:84:LEU:HA	1:A:85:GLU:H	2	0.03	0.05
(1,146)	1:A:4:ILE:HG13	1:A:5:SER:H	2	0.04	0.04
(1,1349)	1:A:73:THR:HG21	1:A:74:VAL:H	2	0.02	0.02
(1,1349)	1:A:73:THR:HG22	1:A:74:VAL:H	2	0.02	0.02
(1,1349)	1:A:73:THR:HG23	1:A:74:VAL:H	2	0.02	0.02
(1,1259)	1:A:66:GLU:HA	1:A:67:ASN:HB2	2	0.2	0.21
(1,1133)	1:A:58:MET:HB2	1:A:60:PHE:HE1	2	0.41	0.42
(1,1116)	1:A:57:VAL:HG21	1:A:58:MET:H	2	0.09	0.11
(1,1116)	1:A:57:VAL:HG22	1:A:58:MET:H	2	0.09	0.11
(1,1116)	1:A:57:VAL:HG23	1:A:58:MET:H	2	0.09	0.11
(1,984)	1:A:51:VAL:H	1:A:51:VAL:HG21	1	0.33	0.33
(1,984)	1:A:51:VAL:H	1:A:51:VAL:HG22	1	0.33	0.33
(1,984)	1:A:51:VAL:H	1:A:51:VAL:HG23	1	0.33	0.33
(1,960)	1:A:49:GLU:H	1:A:49:GLU:HG2	1	0.06	0.06
(1,960)	1:A:49:GLU:H	1:A:49:GLU:HG3	1	0.06	0.06
(1,92)	1:A:3:ILE:HA	1:A:4:ILE:HB	1	0.01	0.01
(1,811)	1:A:43:ASN:HB2	1:A:47:LYS:HD3	1	0.05	0.05
(1,76)	1:A:2:LYS:HD2	1:A:83:GLU:HB2	1	0.01	0.01
(1,716)	1:A:40:ALA:HA	1:A:44:ASP:H	1	0.02	0.02
(1,673)	1:A:38:GLN:HE22	1:A:46:LEU:HD11	1	0.1	0.1
(1,673)	1:A:38:GLN:HE22	1:A:46:LEU:HD12	1	0.1	0.1



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,673)	1:A:38:GLN:HE22	1:A:46:LEU:HD13	1	0.1	0.1
(1,67)	1:A:2:LYS:H	1:A:20:SER:H	1	0.01	0.01
(1,668)	1:A:38:GLN:HG2	1:A:43:ASN:HD22	1	0.04	0.04
(1,665)	1:A:38:GLN:HB3	1:A:43:ASN:HD22	1	0.01	0.01
(1,654)	1:A:38:GLN:HB3	1:A:38:GLN:HE22	1	0.01	0.01
(1,652)	1:A:38:GLN:HB2	1:A:38:GLN:HE22	1	0.09	0.09
(1,649)	1:A:38:GLN:H	1:A:39:PRO:HD3	1	0.01	0.01
(1,646)	1:A:38:GLN:H	1:A:38:GLN:HG2	1	0.02	0.02
(1,638)	1:A:37:SER:H	1:A:38:GLN:H	1	0.05	0.05
(1,631)	1:A:35:ASP:HB2	1:A:38:GLN:HE22	1	0.11	0.11
(1,625)	1:A:35:ASP:H	1:A:38:GLN:HE21	1	0.05	0.05
(1,6)	1:A:15:MET:O	1:A:63:VAL:H	1	0.01	0.01
(1,504)	1:A:30:THR:H	1:A:30:THR:HB	1	0.02	0.02
(1,494)	1:A:29:ASP:HA	1:A:56:HIS:H	1	0.02	0.02
(1,490)	1:A:29:ASP:H	1:A:56:HIS:HB3	1	0.04	0.04
(1,461)	1:A:26:MET:HB2	1:A:27:THR:H	1	0.03	0.03
(1,447)	1:A:24:GLU:HA	1:A:25:GLY:H	1	0.05	0.05
(1,44)	1:A:62:SER:O	1:A:55:PHE:H	1	0.02	0.02
(1,438)	1:A:23:ARG:HB2	1:A:24:GLU:H	1	0.05	0.05
(1,424)	1:A:22:SER:HA	1:A:23:ARG:H	1	0.46	0.46
(1,38)	1:A:57:VAL:O	1:A:60:PHE:H	1	0.02	0.02
(1,329)	1:A:16:LYS:HE2	1:A:60:PHE:HE1	1	0.04	0.04
(1,319)	1:A:16:LYS:HG2	1:A:17:ILE:H	1	0.07	0.07
(1,311)	1:A:16:LYS:HA	1:A:62:SER:H	1	0.02	0.02
(1,29)	1:A:53:SER:O	1:A:64:ASP:N	1	0.01	0.01
(1,289)	1:A:15:MET:HG2	1:A:16:LYS:H	1	0.04	0.04
(1,288)	1:A:15:MET:HB2	1:A:71:TRP:HH2	1	0.27	0.27
(1,255)	1:A:13:ASN:HD21	1:A:67:ASN:HB2	1	0.36	0.36
(1,254)	1:A:13:ASN:HD22	1:A:67:ASN:HA	1	0.02	0.02
(1,245)	1:A:13:ASN:HA	1:A:71:TRP:HE1	1	0.04	0.04
(1,235)	1:A:12:HIS:HA	1:A:14:THR:H	1	0.04	0.04
(1,232)	1:A:11:ASN:H	1:A:11:ASN:HB3	1	0.03	0.03
(1,22)	1:A:43:ASN:O	1:A:47:LYS:H	1	0.02	0.02
(1,217)	1:A:9:THR:HB	1:A:11:ASN:H	1	0.07	0.07
(1,206)	1:A:8:GLU:H	1:A:8:GLU:HG2	1	0.03	0.03
(1,206)	1:A:8:GLU:H	1:A:8:GLU:HG3	1	0.03	0.03
(1,204)	1:A:8:GLU:H	1:A:8:GLU:HB2	1	0.08	0.08
(1,201)	1:A:7:SER:HB3	1:A:16:LYS:HB2	1	0.66	0.66
(1,20)	1:A:42:ILE:O	1:A:46:LEU:H	1	0.01	0.01
(1,195)	1:A:7:SER:H	1:A:15:MET:HB2	1	0.35	0.35
(1,181)	1:A:6:ILE:HG12	1:A:15:MET:HB2	1	0.69	0.69
(1,176)	1:A:6:ILE:HA	1:A:7:SER:H	1	0.54	0.54



Continued from previous page...

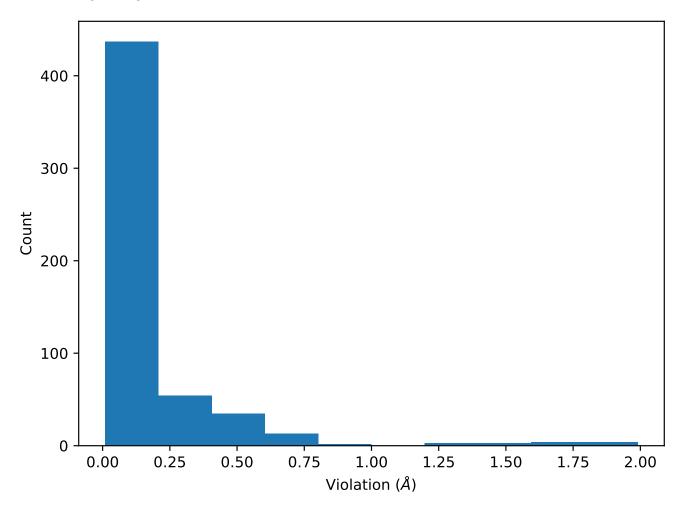
Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,166)	1:A:5:SER:H	1:A:18:THR:HB	1	0.02	0.02
(1,1536)	1:A:85:GLU:H	1:A:85:GLU:HG2	1	0.02	0.02
(1,1536)	1:A:85:GLU:H	1:A:85:GLU:HG3	1	0.02	0.02
(1,150)	1:A:4:ILE:HG13	1:A:20:SER:H	1	0.01	0.01
(1,145)	1:A:4:ILE:HG12	1:A:5:SER:H	1	0.11	0.11
(1,140)	1:A:4:ILE:HB	1:A:5:SER:H	1	0.03	0.03
(1,1339)	1:A:73:THR:H	1:A:73:THR:HG21	1	0.05	0.05
(1,1339)	1:A:73:THR:H	1:A:73:THR:HG22	1	0.05	0.05
(1,1339)	1:A:73:THR:H	1:A:73:THR:HG23	1	0.05	0.05
(1,13)	1:A:31:TYR:O	1:A:54:ILE:N	1	0.02	0.02
(1,1295)	1:A:70:ASN:HB2	1:A:72:GLU:H	1	0.02	0.02
(1,1283)	1:A:69:ALA:HB1	1:A:70:ASN:H	1	0.02	0.02
(1,1283)	1:A:69:ALA:HB2	1:A:70:ASN:H	1	0.02	0.02
(1,1283)	1:A:69:ALA:HB3	1:A:70:ASN:H	1	0.02	0.02
(1,1261)	1:A:66:GLU:HB2	1:A:67:ASN:HB2	1	0.12	0.12
(1,1245)	1:A:65:LYS:HE2	1:A:71:TRP:H	1	0.4	0.4
(1,1243)	1:A:65:LYS:HD2	1:A:71:TRP:H	1	0.04	0.04
(1,1223)	1:A:65:LYS:HB2	1:A:66:GLU:H	1	0.02	0.02
(1,1214)	1:A:65:LYS:H	1:A:71:TRP:HH2	1	0.01	0.01
(1,1135)	1:A:58:MET:HG2	1:A:59:ASP:HB3	1	0.38	0.38
(1,1134)	1:A:58:MET:HG2	1:A:59:ASP:HB2	1	0.79	0.79
(1,1130)	1:A:58:MET:HB2	1:A:59:ASP:H	1	0.01	0.01
(1,1114)	1:A:57:VAL:HB	1:A:60:PHE:HZ	1	0.02	0.02
(1,10)	1:A:18:THR:O	1:A:4:ILE:H	1	0.03	0.03



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)
(1,1079)	1:A:55:PHE:HE1	1:A:60:PHE:HZ	4	1.99
(1,555)	1:A:31:TYR:HE1	1:A:42:ILE:HG12	4	1.98
(1,555)	1:A:31:TYR:HE1	1:A:42:ILE:HG12	9	1.87
(1,555)	1:A:31:TYR:HE1	1:A:42:ILE:HG12	6	1.83
(1,555)	1:A:31:TYR:HE1	1:A:42:ILE:HG12	1	1.71
(1,1079)	1:A:55:PHE:HE1	1:A:60:PHE:HZ	2	1.71
(1,555)	1:A:31:TYR:HE1	1:A:42:ILE:HG12	3	1.64



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,555)	1:A:31:TYR:HE1	1:A:42:ILE:HG12	5	1.64
(1,555)	1:A:31:TYR:HE1	1:A:42:ILE:HG12	8	1.56
(1,1079)	1:A:55:PHE:HE1	1:A:60:PHE:HZ	7	1.46
(1,555)	1:A:31:TYR:HE1	1:A:42:ILE:HG12	7	1.42
(1,555)	1:A:31:TYR:HE1	1:A:42:ILE:HG12	2	1.39
(1,1079)	1:A:55:PHE:HE1	1:A:60:PHE:HZ	3	1.38
(1,555)	1:A:31:TYR:HE1	1:A:42:ILE:HG12	10	1.27
(1,1014)	1:A:52:LYS:HB2	1:A:64:ASP:HB3	8	0.89
(1,478)	1:A:28:SER:HB3	1:A:55:PHE:HE1	4	0.82
(1,1141)	1:A:59:ASP:H	1:A:60:PHE:HE1	9	0.8
(1,1134)	1:A:58:MET:HG2	1:A:59:ASP:HB2	9	0.79
(1,1019)	1:A:52:LYS:HE2	1:A:66:GLU:HB2	4	0.79
(1,1079)	1:A:55:PHE:HE1	1:A:60:PHE:HZ	5	0.76
(1,559)	1:A:31:TYR:HE1	1:A:56:HIS:H	10	0.73
(1,181)	1:A:6:ILE:HG12	1:A:15:MET:HB2	5	0.69
(1,462)	1:A:26:MET:HG2	1:A:59:ASP:HB2	6	0.67
(1,201)	1:A:7:SER:HB3	1:A:16:LYS:HB2	7	0.66
(1,103)	1:A:3:ILE:HG12	1:A:82:PHE:H	3	0.66
(1,1079)	1:A:55:PHE:HE1	1:A:60:PHE:HZ	9	0.63
(1,559)	1:A:31:TYR:HE1	1:A:56:HIS:H	5	0.62
(1,103)	1:A:3:ILE:HG12	1:A:82:PHE:H	7	0.62
(1,291)	1:A:15:MET:HG2	1:A:63:VAL:HB	7	0.61
(1,630)	1:A:35:ASP:HB2	1:A:37:SER:H	4	0.6
(1,810)	1:A:43:ASN:HB2	1:A:47:LYS:HD2	6	0.59
(1,460)	1:A:26:MET:H	1:A:59:ASP:HB2	5	0.59
(1,103)	1:A:3:ILE:HG12	1:A:82:PHE:H	9	0.59
(1,460)	1:A:26:MET:H	1:A:59:ASP:HB2	8	0.58
(1,1019)	1:A:52:LYS:HE2	1:A:66:GLU:HB2	8	0.58
(1,1014)	1:A:52:LYS:HB2	1:A:64:ASP:HB3	10	0.58
(1,624)	1:A:35:ASP:H	1:A:38:GLN:HB2	10	0.55
(1,460)	1:A:26:MET:H	1:A:59:ASP:HB2	7	0.55
(1,176)	1:A:6:ILE:HA	1:A:7:SER:H	10	0.54
(1,103)	1:A:3:ILE:HG12	1:A:82:PHE:H	1	0.54
(1,560)	1:A:31:TYR:HE1	1:A:56:HIS:HB2	10	0.53
(1,256)	1:A:13:ASN:HD22	1:A:67:ASN:HB2	7	0.53
(1,103)	1:A:3:ILE:HG12	1:A:82:PHE:H	8	0.53
(1,433)	1:A:23:ARG:H	1:A:23:ARG:HD2	4	0.52
(1,582)	1:A:33:LYS:H	1:A:46:LEU:HB2	6	0.5
(1,582)	1:A:33:LYS:H	1:A:46:LEU:HB2	1	0.49
(1,1515)	1:A:83:GLU:HB2	1:A:84:LEU:HB2	4	0.49
(1,582)	1:A:33:LYS:H	1:A:46:LEU:HB2	4	0.48
(1,338)	1:A:17:ILE:H	1:A:61:ILE:HG12	6	0.47



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,200)	1:A:7:SER:HB2	1:A:16:LYS:HB2	7	0.47
(1,1515)	1:A:83:GLU:HB2	1:A:84:LEU:HB2	1	0.47
(1,424)	1:A:22:SER:HA	1:A:23:ARG:H	6	0.46
(1,582)	1:A:33:LYS:H	1:A:46:LEU:HB2	10	0.45
(1,105)	1:A:3:ILE:HG12	1:A:82:PHE:HB3	1	0.45
(1,584)	1:A:33:LYS:HA	1:A:34:VAL:H	8	0.44
(1,291)	1:A:15:MET:HG2	1:A:63:VAL:HB	2	0.43
(1,1232)	1:A:65:LYS:HG2	1:A:66:GLU:HA	7	0.43
(1,103)	1:A:3:ILE:HG12	1:A:82:PHE:H	6	0.43
(1,1232)	1:A:65:LYS:HG2	1:A:66:GLU:HA	8	0.42
(1,1133)	1:A:58:MET:HB2	1:A:60:PHE:HE1	9	0.42
(1,63)	1:A:1:MET:HG2	1:A:20:SER:H	2	0.41
(1,63)	1:A:1:MET:HG2	1:A:20:SER:H	8	0.41
(1,462)	1:A:26:MET:HG2	1:A:59:ASP:HB2	4	0.41
(1,1232)	1:A:65:LYS:HG2	1:A:66:GLU:HA	3	0.41
(1,582)	1:A:33:LYS:H	1:A:46:LEU:HB2	5	0.4
(1,478)	1:A:28:SER:HB3	1:A:55:PHE:HE1	2	0.4
(1,1245)	1:A:65:LYS:HE2	1:A:71:TRP:H	8	0.4
(1,1232)	1:A:65:LYS:HG2	1:A:66:GLU:HA	6	0.4
(1,1133)	1:A:58:MET:HB2	1:A:60:PHE:HE1	8	0.4
(1,1014)	1:A:52:LYS:HB2	1:A:64:ASP:HB3	4	0.4
(1,1079)	1:A:55:PHE:HE1	1:A:60:PHE:HZ	6	0.39
(1,338)	1:A:17:ILE:H	1:A:61:ILE:HG12	4	0.38
(1,1135)	1:A:58:MET:HG2	1:A:59:ASP:HB3	9	0.38
(1,103)	1:A:3:ILE:HG12	1:A:82:PHE:H	5	0.38
(1,810)	1:A:43:ASN:HB2	1:A:47:LYS:HD2	9	0.37
(1,639)	1:A:37:SER:H	1:A:38:GLN:HB2	9	0.37
(1,460)	1:A:26:MET:H	1:A:59:ASP:HB2	6	0.37
(1,291)	1:A:15:MET:HG2	1:A:63:VAL:HB	3	0.37
(1,1019)	1:A:52:LYS:HE2	1:A:66:GLU:HB2	6	0.37
(1,255)	1:A:13:ASN:HD21	1:A:67:ASN:HB2	7	0.36
(1,208)	1:A:8:GLU:HA	1:A:9:THR:H	2	0.36
(1,1141)	1:A:59:ASP:H	1:A:60:PHE:HE1	5	0.36
(1,1141)	1:A:59:ASP:H	1:A:60:PHE:HE1	7	0.36
(1,582)	1:A:33:LYS:H	1:A:46:LEU:HB2	9	0.35
(1,562)	1:A:31:TYR:HE1	1:A:61:ILE:HG21	10	0.35
(1,562)	1:A:31:TYR:HE1	1:A:61:ILE:HG22	10	0.35
(1,562)	1:A:31:TYR:HE1	1:A:61:ILE:HG23	10	0.35
(1,256)	1:A:13:ASN:HD22	1:A:67:ASN:HB2	8	0.35
(1,195)	1:A:7:SER:H	1:A:15:MET:HB2	5	0.35
(1,814)	1:A:44:ASP:H	1:A:45:ILE:HG12	2	0.34
			5	1



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,984)	1:A:51:VAL:H	1:A:51:VAL:HG21	3	0.33
(1,984)	1:A:51:VAL:H	1:A:51:VAL:HG22	3	0.33
(1,984)	1:A:51:VAL:H	1:A:51:VAL:HG23	3	0.33
(1,639)	1:A:37:SER:H	1:A:38:GLN:HB2	5	0.33
(1,208)	1:A:8:GLU:HA	1:A:9:THR:H	7	0.33
(1,1515)	1:A:83:GLU:HB2	1:A:84:LEU:HB2	3	0.33
(1,624)	1:A:35:ASP:H	1:A:38:GLN:HB2	7	0.32
(1,562)	1:A:31:TYR:HE1	1:A:61:ILE:HG21	5	0.32
(1,562)	1:A:31:TYR:HE1	1:A:61:ILE:HG22	5	0.32
(1,562)	1:A:31:TYR:HE1	1:A:61:ILE:HG23	5	0.32
(1,460)	1:A:26:MET:H	1:A:59:ASP:HB2	3	0.32
(1,208)	1:A:8:GLU:HA	1:A:9:THR:H	6	0.32
(1,208)	1:A:8:GLU:HA	1:A:9:THR:H	4	0.31
(1,582)	1:A:33:LYS:H	1:A:46:LEU:HB2	3	0.29
(1,291)	1:A:15:MET:HG2	1:A:63:VAL:HB	5	0.28
(1,288)	1:A:15:MET:HB2	1:A:71:TRP:HH2	1	0.27
(1,1003)	1:A:52:LYS:H	1:A:53:SER:H	7	0.27
(1,582)	1:A:33:LYS:H	1:A:46:LEU:HB2	7	0.26
(1,48)	1:A:64:ASP:O	1:A:53:SER:H	3	0.25
(1,47)	1:A:64:ASP:O	1:A:53:SER:N	3	0.24
(1,1003)	1:A:52:LYS:H	1:A:53:SER:H	3	0.24
(1,1003)	1:A:52:LYS:H	1:A:53:SER:H	9	0.24
(1,267)	1:A:14:THR:HB	1:A:64:ASP:HB2	7	0.23
(1,639)	1:A:37:SER:H	1:A:38:GLN:HB2	3	0.22
(1,560)	1:A:31:TYR:HE1	1:A:56:HIS:HB2	5	0.22
(1,630)	1:A:35:ASP:HB2	1:A:37:SER:H	7	0.21
(1,1259)	1:A:66:GLU:HA	1:A:67:ASN:HB2	6	0.21
(1,427)	1:A:22:SER:HB2	1:A:59:ASP:HB3	3	0.2
(1,267)	1:A:14:THR:HB	1:A:64:ASP:HB2	9	0.2
(1,105)	1:A:3:ILE:HG12	1:A:82:PHE:HB3	9	0.2
(1,1079)	1:A:55:PHE:HE1	1:A:60:PHE:HZ	1	0.19
(1,1079)	1:A:55:PHE:HE1	1:A:60:PHE:HZ	8	0.19
(1,568)	1:A:32:THR:H	1:A:33:LYS:HG2	2	0.18
(1,48)	1:A:64:ASP:O	1:A:53:SER:H	9	0.18
(1,460)	1:A:26:MET:H	1:A:59:ASP:HB2	9	0.18
(1,205)	1:A:8:GLU:H	1:A:8:GLU:HB3	5	0.18
(1,200)	1:A:7:SER:HB2	1:A:16:LYS:HB2	2	0.18
(1,1259)	1:A:66:GLU:HA	1:A:67:ASN:HB2	8	0.18
(1,1079)	1:A:55:PHE:HE1	1:A:60:PHE:HZ	10	0.18
(1,48)	1:A:64:ASP:O	1:A:53:SER:H	7	0.17
(1,208)	1:A:8:GLU:HA	1:A:9:THR:H	5	0.17
(1,814)	1:A:44:ASP:H	1:A:45:ILE:HG12	4	0.16



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,562)	1:A:31:TYR:HE1	1:A:61:ILE:HG21	3	0.16
(1,562)	1:A:31:TYR:HE1	1:A:61:ILE:HG22	3	0.16
(1,562)	1:A:31:TYR:HE1	1:A:61:ILE:HG23	3	0.16
(1,427)	1:A:22:SER:HB2	1:A:59:ASP:HB3	2	0.16
(1,427)	1:A:22:SER:HB2	1:A:59:ASP:HB3	6	0.16
(1,214)	1:A:9:THR:H	1:A:10:PRO:HA	7	0.16
(1,183)	1:A:6:ILE:HG21	1:A:7:SER:H	6	0.16
(1,183)	1:A:6:ILE:HG22	1:A:7:SER:H	6	0.16
(1,183)	1:A:6:ILE:HG23	1:A:7:SER:H	6	0.16
(1,183)	1:A:6:ILE:HG21	1:A:7:SER:H	8	0.16
(1,183)	1:A:6:ILE:HG22	1:A:7:SER:H	8	0.16
(1,183)	1:A:6:ILE:HG23	1:A:7:SER:H	8	0.16
(1,814)	1:A:44:ASP:H	1:A:45:ILE:HG12	6	0.15
(1,47)	1:A:64:ASP:O	1:A:53:SER:N	7	0.15
(1,462)	1:A:26:MET:HG2	1:A:59:ASP:HB2	9	0.15
(1,209)	1:A:8:GLU:HB2	1:A:9:THR:H	7	0.15
(1,183)	1:A:6:ILE:HG21	1:A:7:SER:H	2	0.15
(1,183)	1:A:6:ILE:HG22	1:A:7:SER:H	2	0.15
(1,183)	1:A:6:ILE:HG23	1:A:7:SER:H	2	0.15
(1,601)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:35:ASP:H	1	0.14
(1,601)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:35:ASP:H	1	0.14
(1,601)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:35:ASP:H	1	0.14
(1,601)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:35:ASP:H	7	0.14
(1,601)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:35:ASP:H	7	0.14
(1,601)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:35:ASP:H	7	0.14
(1,267)	1:A:14:THR:HB	1:A:64:ASP:HB2	3	0.14
(1,231)	1:A:11:ASN:H	1:A:11:ASN:HB2	6	0.14
(1,589)	1:A:34:VAL:H	1:A:34:VAL:HB	3	0.13
(1,409)	1:A:20:SER:H	1:A:21:GLU:HA	9	0.13
(1,1515)	1:A:83:GLU:HB2	1:A:84:LEU:HB2	7	0.13
(1,1019)	1:A:52:LYS:HE2	1:A:66:GLU:HB2	10	0.13
(1,601)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:35:ASP:H	6	0.12
(1,601)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:35:ASP:H	6	0.12
(1,601)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:35:ASP:H	6	0.12
(1,566)	1:A:32:THR:H	1:A:33:LYS:H	2	0.12
(1,47)	1:A:64:ASP:O	1:A:53:SER:N	9	0.12
(1,409)	1:A:20:SER:H	1:A:21:GLU:HA	1	0.12
(1,409)	1:A:20:SER:H	1:A:21:GLU:HA	5	0.12
(1,267)	1:A:14:THR:HB	1:A:64:ASP:HB2	6	0.12
(1,210)	1:A:8:GLU:HB3	1:A:9:THR:H	6	0.12
(1,1261)	1:A:66:GLU:HB2	1:A:67:ASN:HB2	2	0.12
(1,631)	1:A:35:ASP:HB2	1:A:38:GLN:HE22	4	0.11



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,469)	1:A:27:THR:HG21	1:A:28:SER:H	4	0.11
(1,469)	1:A:27:THR:HG22	1:A:28:SER:H	4	0.11
(1,469)	1:A:27:THR:HG23	1:A:28:SER:H	4	0.11
(1,426)	1:A:22:SER:HB2	1:A:59:ASP:HB2	3	0.11
(1,409)	1:A:20:SER:H	1:A:21:GLU:HA	4	0.11
(1,338)	1:A:17:ILE:H	1:A:61:ILE:HG12	8	0.11
(1,291)	1:A:15:MET:HG2	1:A:63:VAL:HB	8	0.11
(1,226)	1:A:10:PRO:HG3	1:A:11:ASN:H	4	0.11
(1,145)	1:A:4:ILE:HG12	1:A:5:SER:H	4	0.11
(1,1232)	1:A:65:LYS:HG2	1:A:66:GLU:HA	9	0.11
(1,1116)	1:A:57:VAL:HG21	1:A:58:MET:H	10	0.11
(1,1116)	1:A:57:VAL:HG22	1:A:58:MET:H	10	0.11
(1,1116)	1:A:57:VAL:HG23	1:A:58:MET:H	10	0.11
(1,794)	1:A:43:ASN:H	1:A:43:ASN:HB3	7	0.1
(1,673)	1:A:38:GLN:HE22	1:A:46:LEU:HD11	10	0.1
(1,673)	1:A:38:GLN:HE22	1:A:46:LEU:HD12	10	0.1
(1,673)	1:A:38:GLN:HE22	1:A:46:LEU:HD13	10	0.1
(1,568)	1:A:32:THR:H	1:A:33:LYS:HG2	9	0.1
(1,409)	1:A:20:SER:H	1:A:21:GLU:HA	7	0.1
(1,30)	1:A:53:SER:O	1:A:64:ASP:H	5	0.1
(1,267)	1:A:14:THR:HB	1:A:64:ASP:HB2	1	0.1
(1,251)	1:A:13:ASN:HB2	1:A:65:LYS:H	8	0.1
(1,209)	1:A:8:GLU:HB2	1:A:9:THR:H	4	0.1
(1,1515)	1:A:83:GLU:HB2	1:A:84:LEU:HB2	6	0.1
(1,103)	1:A:3:ILE:HG12	1:A:82:PHE:H	10	0.1
(1,794)	1:A:43:ASN:H	1:A:43:ASN:HB3	1	0.09
(1,794)	1:A:43:ASN:H	1:A:43:ASN:HB3	2	0.09
(1,794)	1:A:43:ASN:H	1:A:43:ASN:HB3	3	0.09
(1,794)	1:A:43:ASN:H	1:A:43:ASN:HB3	4	0.09
(1,794)	1:A:43:ASN:H	1:A:43:ASN:HB3	6	0.09
(1,794)	1:A:43:ASN:H	1:A:43:ASN:HB3	8	0.09
(1,794)	1:A:43:ASN:H	1:A:43:ASN:HB3	9	0.09
(1,794)	1:A:43:ASN:H	1:A:43:ASN:HB3	10	0.09
(1,79)	1:A:3:ILE:H	1:A:3:ILE:HB	7	0.09
(1,652)	1:A:38:GLN:HB2	1:A:38:GLN:HE22	2	0.09
(1,601)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:35:ASP:H	9	0.09
(1,601)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:35:ASP:H	9	0.09
(1,601)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:35:ASP:H	9	0.09
(1,540)	1:A:31:TYR:HB3	1:A:54:ILE:H	10	0.09
(1,338)	1:A:17:ILE:H	1:A:61:ILE:HG12	7	0.09
(1,290)	1:A:15:MET:HG3	1:A:16:LYS:H	2	0.09
(1,242)	1:A:13:ASN:H	1:A:14:THR:H	6	0.09



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,209)	1:A:8:GLU:HB2	1:A:9:THR:H	2	0.09
(1,209)	1:A:8:GLU:HB2	1:A:9:THR:H	6	0.09
(1,1539)	1:A:85:GLU:HB2	1:A:86:HIS:H	5	0.09
(1,1539)	1:A:85:GLU:HB3	1:A:86:HIS:H	5	0.09
(1,1522)	1:A:84:LEU:H	1:A:85:GLU:H	4	0.09
(1,1141)	1:A:59:ASP:H	1:A:60:PHE:HE1	6	0.09
(1,794)	1:A:43:ASN:H	1:A:43:ASN:HB3	5	0.08
(1,639)	1:A:37:SER:H	1:A:38:GLN:HB2	8	0.08
(1,624)	1:A:35:ASP:H	1:A:38:GLN:HB2	9	0.08
(1,589)	1:A:34:VAL:H	1:A:34:VAL:HB	1	0.08
(1,589)	1:A:34:VAL:H	1:A:34:VAL:HB	7	0.08
(1,584)	1:A:33:LYS:HA	1:A:34:VAL:H	6	0.08
(1,584)	1:A:33:LYS:HA	1:A:34:VAL:H	7	0.08
(1,48)	1:A:64:ASP:O	1:A:53:SER:H	2	0.08
(1,290)	1:A:15:MET:HG3	1:A:16:LYS:H	3	0.08
(1,26)	1:A:48:VAL:O	1:A:51:VAL:H	7	0.08
(1,205)	1:A:8:GLU:H	1:A:8:GLU:HB3	7	0.08
(1,204)	1:A:8:GLU:H	1:A:8:GLU:HB2	10	0.08
(1,2)	1:A:5:SER:O	1:A:18:THR:H	10	0.08
(1,183)	1:A:6:ILE:HG21	1:A:7:SER:H	1	0.08
(1,183)	1:A:6:ILE:HG22	1:A:7:SER:H	1	0.08
(1,183)	1:A:6:ILE:HG23	1:A:7:SER:H	1	0.08
(1,1531)	1:A:84:LEU:HB2	1:A:85:GLU:H	5	0.08
(1,1495)	1:A:82:PHE:H	1:A:82:PHE:HZ	1	0.08
(1,1027)	1:A:53:SER:H	1:A:64:ASP:HB3	10	0.08
(1,627)	1:A:35:ASP:H	1:A:43:ASN:HD22	4	0.07
(1,624)	1:A:35:ASP:H	1:A:38:GLN:HB2	5	0.07
(1,601)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:35:ASP:H	5	0.07
(1,601)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:35:ASP:H	5	0.07
(1,601)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:35:ASP:H	5	0.07
(1,501)	1:A:29:ASP:HB3	1:A:56:HIS:H	1	0.07
(1,469)	1:A:27:THR:HG21	1:A:28:SER:H	8	0.07
(1,469)	1:A:27:THR:HG22	1:A:28:SER:H	8	0.07
(1,469)	1:A:27:THR:HG23	1:A:28:SER:H	8	0.07
(1,469)	1:A:27:THR:HG21	1:A:28:SER:H	9	0.07
(1,469)	1:A:27:THR:HG22	1:A:28:SER:H	9	0.07
(1,469)	1:A:27:THR:HG23	1:A:28:SER:H	9	0.07
(1,319)	1:A:16:LYS:HG2	1:A:17:ILE:H	6	0.07
(1,26)	1:A:48:VAL:O	1:A:51:VAL:H	3	0.07
(1,251)	1:A:13:ASN:HB2	1:A:65:LYS:H	1	0.07
(1,231)	1:A:11:ASN:H	1:A:11:ASN:HB2	8	0.07
(1,231)	1:A:11:ASN:H	1:A:11:ASN:HB2	10	0.07



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,217)	1:A:9:THR:HB	1:A:11:ASN:H	5	0.07
(1,210)	1:A:8:GLU:HB3	1:A:9:THR:H	5	0.07
(1,205)	1:A:8:GLU:H	1:A:8:GLU:HB3	3	0.07
(1,197)	1:A:7:SER:HA	1:A:8:GLU:H	4	0.07
(1,1508)	1:A:83:GLU:H	1:A:84:LEU:H	5	0.07
(1,1478)	1:A:81:VAL:H	1:A:81:VAL:HG21	1	0.07
(1,1478)	1:A:81:VAL:H	1:A:81:VAL:HG22	1	0.07
(1,1478)	1:A:81:VAL:H	1:A:81:VAL:HG23	1	0.07
(1,1141)	1:A:59:ASP:H	1:A:60:PHE:HE1	1	0.07
(1,1116)	1:A:57:VAL:HG21	1:A:58:MET:H	2	0.07
(1,1116)	1:A:57:VAL:HG22	1:A:58:MET:H	2	0.07
(1,1116)	1:A:57:VAL:HG23	1:A:58:MET:H	2	0.07
(1,960)	1:A:49:GLU:H	1:A:49:GLU:HG2	1	0.06
(1,960)	1:A:49:GLU:H	1:A:49:GLU:HG3	1	0.06
(1,601)	1:A:34:VAL:HG11	1:A:35:ASP:H	3	0.06
(1,601)	1:A:34:VAL:HG12	1:A:35:ASP:H	3	0.06
(1,601)	1:A:34:VAL:HG13	1:A:35:ASP:H	3	0.06
(1,589)	1:A:34:VAL:H	1:A:34:VAL:HB	2	0.06
(1,46)	1:A:63:VAL:O	1:A:15:MET:H	1	0.06
(1,290)	1:A:15:MET:HG3	1:A:16:LYS:H	8	0.06
(1,242)	1:A:13:ASN:H	1:A:14:THR:H	4	0.06
(1,242)	1:A:13:ASN:H	1:A:14:THR:H	8	0.06
(1,238)	1:A:12:HIS:HD2	1:A:71:TRP:HE1	8	0.06
(1,210)	1:A:8:GLU:HB3	1:A:9:THR:H	4	0.06
(1,1495)	1:A:82:PHE:H	1:A:82:PHE:HZ	2	0.06
(1,1495)	1:A:82:PHE:H	1:A:82:PHE:HZ	4	0.06
(1,1495)	1:A:82:PHE:H	1:A:82:PHE:HZ	6	0.06
(1,1495)	1:A:82:PHE:H	1:A:82:PHE:HZ	9	0.06
(1,1495)	1:A:82:PHE:H	1:A:82:PHE:HZ	10	0.06
(1,1478)	1:A:81:VAL:H	1:A:81:VAL:HG21	6	0.06
(1,1478)	1:A:81:VAL:H	1:A:81:VAL:HG22	6	0.06
(1,1478)	1:A:81:VAL:H	1:A:81:VAL:HG23	6	0.06
(1,1478)	1:A:81:VAL:H	1:A:81:VAL:HG21	10	0.06
(1,1478)	1:A:81:VAL:H	1:A:81:VAL:HG22	10	0.06
(1,1478)	1:A:81:VAL:H	1:A:81:VAL:HG23	10	0.06
(1,14)	1:A:31:TYR:O	1:A:54:ILE:H	5	0.06
(1,105)	1:A:3:ILE:HG12	1:A:82:PHE:HB3	3	0.06
(1,1027)	1:A:53:SER:H	1:A:64:ASP:HB3	8	0.06
(1,811)	1:A:43:ASN:HB2	1:A:47:LYS:HD3	1	0.05
(1,8)	1:A:17:ILE:O	1:A:61:ILE:H	1	0.05
(1,79)	1:A:3:ILE:H	1:A:3:ILE:HB	1	0.05
(1,701)	1:A:39:PRO:HD3	1:A:42:ILE:HG12	2	0.05



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,669)	1:A:38:GLN:HE21	1:A:42:ILE:HG21	4	0.05
(1,669)	1:A:38:GLN:HE21	1:A:42:ILE:HG22	4	0.05
(1,669)	1:A:38:GLN:HE21	1:A:42:ILE:HG23	4	0.05
(1,638)	1:A:37:SER:H	1:A:38:GLN:H	7	0.05
(1,625)	1:A:35:ASP:H	1:A:38:GLN:HE21	3	0.05
(1,624)	1:A:35:ASP:H	1:A:38:GLN:HB2	3	0.05
(1,589)	1:A:34:VAL:H	1:A:34:VAL:HB	5	0.05
(1,589)	1:A:34:VAL:H	1:A:34:VAL:HB	9	0.05
(1,48)	1:A:64:ASP:O	1:A:53:SER:H	4	0.05
(1,48)	1:A:64:ASP:O	1:A:53:SER:H	8	0.05
(1,48)	1:A:64:ASP:O	1:A:53:SER:H	10	0.05
(1,46)	1:A:63:VAL:O	1:A:15:MET:H	4	0.05
(1,447)	1:A:24:GLU:HA	1:A:25:GLY:H	4	0.05
(1,438)	1:A:23:ARG:HB2	1:A:24:GLU:H	5	0.05
(1,409)	1:A:20:SER:H	1:A:21:GLU:HA	6	0.05
(1,40)	1:A:60:PHE:O	1:A:57:VAL:H	5	0.05
(1,349)	1:A:17:ILE:HG12	1:A:61:ILE:HB	10	0.05
(1,348)	1:A:17:ILE:HG13	1:A:18:THR:H	5	0.05
(1,348)	1:A:17:ILE:HG13	1:A:18:THR:H	8	0.05
(1,24)	1:A:45:ILE:O	1:A:48:VAL:H	4	0.05
(1,231)	1:A:11:ASN:H	1:A:11:ASN:HB2	5	0.05
(1,215)	1:A:9:THR:H	1:A:10:PRO:HD2	10	0.05
(1,205)	1:A:8:GLU:H	1:A:8:GLU:HB3	1	0.05
(1,2)	1:A:5:SER:O	1:A:18:THR:H	6	0.05
(1,1539)	1:A:85:GLU:HB2	1:A:86:HIS:H	2	0.05
(1,1539)	1:A:85:GLU:HB3	1:A:86:HIS:H	2	0.05
(1,1526)	1:A:84:LEU:HA	1:A:85:GLU:H	3	0.05
(1,1339)	1:A:73:THR:H	1:A:73:THR:HG21	1	0.05
(1,1339)	1:A:73:THR:H	1:A:73:THR:HG22	1	0.05
(1,1339)	1:A:73:THR:H	1:A:73:THR:HG23	1	0.05
(1,855)	1:A:45:ILE:HG21	1:A:45:ILE:HD11	5	0.04
(1,855)	1:A:45:ILE:HG21	1:A:45:ILE:HD12	5	0.04
(1,855)	1:A:45:ILE:HG21	1:A:45:ILE:HD13	5	0.04
(1,855)	1:A:45:ILE:HG22	1:A:45:ILE:HD11	5	0.04
(1,855)	1:A:45:ILE:HG22	1:A:45:ILE:HD12	5	0.04
(1,855)	1:A:45:ILE:HG22	1:A:45:ILE:HD13	5	0.04
(1,855)	1:A:45:ILE:HG23	1:A:45:ILE:HD11	5	0.04
(1,855)	1:A:45:ILE:HG23	1:A:45:ILE:HD12	5	0.04
(1,855)	1:A:45:ILE:HG23	1:A:45:ILE:HD13	5	0.04
(1,8)	1:A:17:ILE:O	1:A:61:ILE:H	6	0.04
(1,71)	1:A:2:LYS:HB2	1:A:3:ILE:H	6	0.04
(1,701)	1:A:39:PRO:HD3	1:A:42:ILE:HG12	8	0.04



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,669)	1:A:38:GLN:HE21	1:A:42:ILE:HG21	3	0.04
(1,669)	1:A:38:GLN:HE21	1:A:42:ILE:HG22	3	0.04
(1,669)	1:A:38:GLN:HE21	1:A:42:ILE:HG23	3	0.04
(1,668)	1:A:38:GLN:HG2	1:A:43:ASN:HD22	7	0.04
(1,648)	1:A:38:GLN:H	1:A:39:PRO:HD2	1	0.04
(1,648)	1:A:38:GLN:H	1:A:39:PRO:HD2	8	0.04
(1,627)	1:A:35:ASP:H	1:A:43:ASN:HD22	2	0.04
(1,562)	1:A:31:TYR:HE1	1:A:61:ILE:HG21	9	0.04
(1,562)	1:A:31:TYR:HE1	1:A:61:ILE:HG22	9	0.04
(1,562)	1:A:31:TYR:HE1	1:A:61:ILE:HG23	9	0.04
(1,501)	1:A:29:ASP:HB3	1:A:56:HIS:H	4	0.04
(1,50)	1:A:71:TRP:O	1:A:75:LEU:H	10	0.04
(1,490)	1:A:29:ASP:H	1:A:56:HIS:HB3	1	0.04
(1,46)	1:A:63:VAL:O	1:A:15:MET:H	3	0.04
(1,46)	1:A:63:VAL:O	1:A:15:MET:H	6	0.04
(1,46)	1:A:63:VAL:O	1:A:15:MET:H	8	0.04
(1,433)	1:A:23:ARG:H	1:A:23:ARG:HD2	6	0.04
(1,42)	1:A:61:ILE:O	1:A:17:ILE:H	6	0.04
(1,42)	1:A:61:ILE:O	1:A:17:ILE:H	10	0.04
(1,329)	1:A:16:LYS:HE2	1:A:60:PHE:HE1	2	0.04
(1,289)	1:A:15:MET:HG2	1:A:16:LYS:H	6	0.04
(1,28)	1:A:50:GLY:O	1:A:66:GLU:H	3	0.04
(1,28)	1:A:50:GLY:O	1:A:66:GLU:H	6	0.04
(1,26)	1:A:48:VAL:O	1:A:51:VAL:H	9	0.04
(1,245)	1:A:13:ASN:HA	1:A:71:TRP:HE1	6	0.04
(1,235)	1:A:12:HIS:HA	1:A:14:THR:H	4	0.04
(1,215)	1:A:9:THR:H	1:A:10:PRO:HD2	5	0.04
(1,215)	1:A:9:THR:H	1:A:10:PRO:HD2	8	0.04
(1,210)	1:A:8:GLU:HB3	1:A:9:THR:H	9	0.04
(1,209)	1:A:8:GLU:HB2	1:A:9:THR:H	3	0.04
(1,197)	1:A:7:SER:HA	1:A:8:GLU:H	5	0.04
(1,1512)	1:A:83:GLU:HA	1:A:84:LEU:H	8	0.04
(1,1512)	1:A:83:GLU:HA	1:A:84:LEU:H	10	0.04
(1,146)	1:A:4:ILE:HG13	1:A:5:SER:H	2	0.04
(1,146)	1:A:4:ILE:HG13	1:A:5:SER:H	7	0.04
(1,14)	1:A:31:TYR:O	1:A:54:ILE:H	2	0.04
(1,1243)	1:A:65:LYS:HD2	1:A:71:TRP:H	8	0.04
(1,855)	1:A:45:ILE:HG21	1:A:45:ILE:HD11	8	0.03
(1,855)	1:A:45:ILE:HG21	1:A:45:ILE:HD12	8	0.03
(1,855)	1:A:45:ILE:HG21	1:A:45:ILE:HD13	8	0.03
(1,855)	1:A:45:ILE:HG22	1:A:45:ILE:HD11	8	0.03
(1,855)	1:A:45:ILE:HG22	1:A:45:ILE:HD12	8	0.03



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,855)	1:A:45:ILE:HG22	1:A:45:ILE:HD13	8	0.03
(1,855)	1:A:45:ILE:HG23	1:A:45:ILE:HD11	8	0.03
(1,855)	1:A:45:ILE:HG23	1:A:45:ILE:HD12	8	0.03
(1,855)	1:A:45:ILE:HG23	1:A:45:ILE:HD13	8	0.03
(1,8)	1:A:17:ILE:O	1:A:61:ILE:H	10	0.03
(1,71)	1:A:2:LYS:HB2	1:A:3:ILE:H	4	0.03
(1,540)	1:A:31:TYR:HB3	1:A:54:ILE:H	8	0.03
(1,501)	1:A:29:ASP:HB3	1:A:56:HIS:H	5	0.03
(1,501)	1:A:29:ASP:HB3	1:A:56:HIS:H	6	0.03
(1,48)	1:A:64:ASP:O	1:A:53:SER:H	1	0.03
(1,461)	1:A:26:MET:HB2	1:A:27:THR:H	9	0.03
(1,46)	1:A:63:VAL:O	1:A:15:MET:H	2	0.03
(1,422)	1:A:22:SER:H	1:A:22:SER:HA	2	0.03
(1,28)	1:A:50:GLY:O	1:A:66:GLU:H	7	0.03
(1,251)	1:A:13:ASN:HB2	1:A:65:LYS:H	9	0.03
(1,251)	1:A:13:ASN:HB2	1:A:65:LYS:H	10	0.03
(1,24)	1:A:45:ILE:O	1:A:48:VAL:H	8	0.03
(1,232)	1:A:11:ASN:H	1:A:11:ASN:HB3	6	0.03
(1,214)	1:A:9:THR:H	1:A:10:PRO:HA	1	0.03
(1,210)	1:A:8:GLU:HB3	1:A:9:THR:H	7	0.03
(1,209)	1:A:8:GLU:HB2	1:A:9:THR:H	9	0.03
(1,209)	1:A:8:GLU:HB2	1:A:9:THR:H	10	0.03
(1,206)	1:A:8:GLU:H	1:A:8:GLU:HG2	8	0.03
(1,206)	1:A:8:GLU:H	1:A:8:GLU:HG3	8	0.03
(1,2)	1:A:5:SER:O	1:A:18:THR:H	2	0.03
(1,165)	1:A:5:SER:H	1:A:18:THR:HA	4	0.03
(1,1531)	1:A:84:LEU:HB2	1:A:85:GLU:H	3	0.03
(1,1508)	1:A:83:GLU:H	1:A:84:LEU:H	7	0.03
(1,1495)	1:A:82:PHE:H	1:A:82:PHE:HZ	3	0.03
(1,1495)	1:A:82:PHE:H	1:A:82:PHE:HZ	7	0.03
(1,140)	1:A:4:ILE:HB	1:A:5:SER:H	10	0.03
(1,1027)	1:A:53:SER:H	1:A:64:ASP:HB3	4	0.03
(1,1027)	1:A:53:SER:H	1:A:64:ASP:HB3	5	0.03
(1,10)	1:A:18:THR:O	1:A:4:ILE:H	10	0.03
(1,716)	1:A:40:ALA:HA	1:A:44:ASP:H	3	0.02
(1,701)	1:A:39:PRO:HD3	1:A:42:ILE:HG12	9	0.02
(1,646)	1:A:38:GLN:H	1:A:38:GLN:HG2	2	0.02
(1,568)	1:A:32:THR:H	1:A:33:LYS:HG2	8	0.02
(1,566)	1:A:32:THR:H	1:A:33:LYS:H	9	0.02
(1,504)	1:A:30:THR:H	1:A:30:THR:HB	8	0.02
(1,501)	1:A:29:ASP:HB3	1:A:56:HIS:H	7	0.02
(1,50)	1:A:71:TRP:O	1:A:75:LEU:H	2	0.02



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

(1,494) (1,48)	1:A:29:ASP:HA			Violation (Å)
(1.48)	1.A.29.ASI .IIA	1:A:56:HIS:H	3	0.02
(1,40)	1:A:64:ASP:O	1:A:53:SER:H	5	0.02
(1,47)	1:A:64:ASP:O	1:A:53:SER:N	2	0.02
(1,46)	1:A:63:VAL:O	1:A:15:MET:H	7	0.02
(1,44)	1:A:62:SER:O	1:A:55:PHE:H	10	0.02
(1,426)	1:A:22:SER:HB2	1:A:59:ASP:HB2	2	0.02
(1,426)	1:A:22:SER:HB2	1:A:59:ASP:HB2	7	0.02
(1,422)	1:A:22:SER:H	1:A:22:SER:HA	1	0.02
(1,422)	1:A:22:SER:H	1:A:22:SER:HA	3	0.02
(1,422)	1:A:22:SER:H	1:A:22:SER:HA	7	0.02
(1,422)	1:A:22:SER:H	1:A:22:SER:HA	8	0.02
(1,422)	1:A:22:SER:H	1:A:22:SER:HA	9	0.02
(1,40)	1:A:60:PHE:O	1:A:57:VAL:H	1	0.02
(1,40)	1:A:60:PHE:O	1:A:57:VAL:H	10	0.02
(1,38)	1:A:57:VAL:O	1:A:60:PHE:H	7	0.02
(1,349)	1:A:17:ILE:HG12	1:A:61:ILE:HB	3	0.02
(1,349)	1:A:17:ILE:HG12	1:A:61:ILE:HB	5	0.02
(1,349)	1:A:17:ILE:HG12	1:A:61:ILE:HB	8	0.02
(1,348)	1:A:17:ILE:HG13	1:A:18:THR:H	10	0.02
(1,311)	1:A:16:LYS:HA	1:A:62:SER:H	7	0.02
(1,28)	1:A:50:GLY:O	1:A:66:GLU:H	9	0.02
(1,26)	1:A:48:VAL:O	1:A:51:VAL:H	5	0.02
(1,26)	1:A:48:VAL:O	1:A:51:VAL:H	8	0.02
(1,254)	1:A:13:ASN:HD22	1:A:67:ASN:HA	9	0.02
(1,242)	1:A:13:ASN:H	1:A:14:THR:H	3	0.02
(1,238)	1:A:12:HIS:HD2	1:A:71:TRP:HE1	9	0.02
(1,226)	1:A:10:PRO:HG3	1:A:11:ASN:H	3	0.02
(1,22)	1:A:43:ASN:O	1:A:47:LYS:H	9	0.02
(1,216)	1:A:9:THR:H	1:A:10:PRO:HD3	5	0.02
(1,214)	1:A:9:THR:H	1:A:10:PRO:HA	9	0.02
(1,209)	1:A:8:GLU:HB2	1:A:9:THR:H	1	0.02
(1,166)	1:A:5:SER:H	1:A:18:THR:HB	10	0.02
(1,1536)	1:A:85:GLU:H	1:A:85:GLU:HG2	3	0.02
(1,1536)	1:A:85:GLU:H	1:A:85:GLU:HG3	3	0.02
(1,1512)	1:A:83:GLU:HA	1:A:84:LEU:H	2	0.02
(1,1508)	1:A:83:GLU:H	1:A:84:LEU:H	2	0.02
(1,1495)	1:A:82:PHE:H	1:A:82:PHE:HZ	5	0.02
(1,1495)	1:A:82:PHE:H	1:A:82:PHE:HZ	8	0.02
(1,1478)	1:A:81:VAL:H	1:A:81:VAL:HG21	4	0.02
(1,1478)	1:A:81:VAL:H	1:A:81:VAL:HG22	4	0.02
(1,1478)	1:A:81:VAL:H	1:A:81:VAL:HG23	4	0.02
(1,14)	1:A:31:TYR:O	1:A:54:ILE:H	7	0.02



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1349)	1:A:73:THR:HG21	1:A:74:VAL:H	4	0.02
(1,1349)	1:A:73:THR:HG22	A:73:THR:HG22 1:A:74:VAL:H		0.02
(1,1349)	1:A:73:THR:HG23	1:A:74:VAL:H	4	0.02
(1,1349)	1:A:73:THR:HG21	1:A:74:VAL:H	5	0.02
(1,1349)	1:A:73:THR:HG22	1:A:74:VAL:H	5	0.02
(1,1349)	1:A:73:THR:HG23	1:A:74:VAL:H	5	0.02
(1,1341)	1:A:73:THR:H	1:A:74:VAL:HA	6	0.02
(1,13)	1:A:31:TYR:O	1:A:54:ILE:N	2	0.02
(1,1295)	1:A:70:ASN:HB2	1:A:72:GLU:H	3	0.02
(1,1283)	1:A:69:ALA:HB1	1:A:70:ASN:H	6	0.02
(1,1283)	1:A:69:ALA:HB2	1:A:70:ASN:H	6	0.02
(1,1283)	1:A:69:ALA:HB3	1:A:70:ASN:H	6	0.02
(1,1223)	1:A:65:LYS:HB2	1:A:66:GLU:H	6	0.02
(1,1114)	1:A:57:VAL:HB	1:A:60:PHE:HZ	6	0.02
(1,92)	1:A:3:ILE:HA	1:A:4:ILE:HB	10	0.01
(1,855)	1:A:45:ILE:HG21	1:A:45:ILE:HD11	1	0.01
(1,855)	1:A:45:ILE:HG21	1:A:45:ILE:HD12	1	0.01
(1,855)	1:A:45:ILE:HG21	1:A:45:ILE:HD13	1	0.01
(1,855)	1:A:45:ILE:HG22	1:A:45:ILE:HD11	1	0.01
(1,855)	1:A:45:ILE:HG22	1:A:45:ILE:HD12	1	0.01
(1,855)	1:A:45:ILE:HG22	1:A:45:ILE:HD13	1	0.01
(1,855)	1:A:45:ILE:HG23	1:A:45:ILE:HD11	1	0.01
(1,855)	1:A:45:ILE:HG23	1:A:45:ILE:HD12	1	0.01
(1,855)	1:A:45:ILE:HG23	1:A:45:ILE:HD13	1	0.01
(1,855)	1:A:45:ILE:HG21	1:A:45:ILE:HD11	10	0.01
(1,855)	1:A:45:ILE:HG21	1:A:45:ILE:HD12	10	0.01
(1,855)	1:A:45:ILE:HG21	1:A:45:ILE:HD13	10	0.01
(1,855)	1:A:45:ILE:HG22	1:A:45:ILE:HD11	10	0.01
(1,855)	1:A:45:ILE:HG22	1:A:45:ILE:HD12	10	0.01
(1,855)	1:A:45:ILE:HG22	1:A:45:ILE:HD13	10	0.01
(1,855)	1:A:45:ILE:HG23	1:A:45:ILE:HD11	10	0.01
(1,855)	1:A:45:ILE:HG23	1:A:45:ILE:HD12	10	0.01
(1,855)	1:A:45:ILE:HG23	1:A:45:ILE:HD13	10	0.01
(1,8)	1:A:17:ILE:O	1:A:61:ILE:H	8	0.01
(1,76)	1:A:2:LYS:HD2	1:A:83:GLU:HB2	1	0.01
(1,701)	1:A:39:PRO:HD3	1:A:42:ILE:HG12	1	0.01
(1,701)	1:A:39:PRO:HD3	1:A:42:ILE:HG12	4	0.01
(1,701)	1:A:39:PRO:HD3	1:A:42:ILE:HG12	5	0.01
(1,701)	1:A:39:PRO:HD3	1:A:42:ILE:HG12	7	0.01
(1,701)	1:A:39:PRO:HD3	1:A:42:ILE:HG12	10	0.01
(1,67)	1:A:2:LYS:H	1:A:20:SER:H	10	0.01
(1,665)	1:A:38:GLN:HB3	1:A:43:ASN:HD22	6	0.01



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

(1,654) 1:A:38:GLN:HB3 1:A:38:GLN:HE22 6 0.01 (1,649) 1:A:38:GLN:H 1:A:39:PRO:HD3 2 0.01 (1,648) 1:A:38:GLN:H 1:A:39:PRO:HD3 2 0.01 (1,648) 1:A:38:GLN:H 1:A:39:PRO:HD2 6 0.01 (1,659) 1:A:35:MET:O 1:A:63:VAL:H 9 0.01 (1,589) 1:A:34:VAL:H 1:A:34:VAL:HB 6 0.01 (1,584) 1:A:33:JYS:HA 1:A:34:VAL:H 3 0.01 (1,540) 1:A:31:TYR:HB3 1:A:54:ILE:H 3 0.01 (1,540) 1:A:31:TYR:HB3 1:A:54:ILE:H 3 0.01 (1,551) 1:A:29:ASP:HB3 1:A:56:ILE:H 6 0.01 (1,501) 1:A:29:ASP:HB3 1:A:56:ILE:H 5 0.01 (1,471) 1:A:64:ASP:O 1:A:75:LEU:H 5 0.01 (1,471) 1:A:64:ASP:O 1:A:75:LEU:H 5 0.01 (1,460) 1:A:26:MET:H 1:A:59:ASP:HB2 2 0.01 (1,461) 1:A:63:VAL:O 1:A:15:MET:H 10 0.01 (1,422) 1:A:22:SER:HB2 1:A:59:ASP:HB3 4 0.01 (1,422) 1:A:22:SER:HB2 1:A:59:ASP:HB3 4 0.01 (1,422) 1:A:22:SER:H 1:A:22:SER:HA 4 0.01 (1,422) 1:A:22:SER:H 1:A:22:SER:HA 5 0.01 (1,400) 1:A:60:PHE:O 1:A:57:VAL:H 6 0.01 (1,401) 1:A:60:PHE:O 1:A:57:VAL:H 7 0.01 (1,304) 1:A:53:SER:O 1:A:64:ASP:H 4 0.01 (1,29) 1:A:53:SER:O 1:A:64:ASP:H 4 0.01 (1,29) 1:A:53:SER:O 1:A:64:ASP:H 4 0.01 (1,201) 1:A:45:ILE:O 1:A:64:ASP:H 4 0.01 (1,202) 1:A:25:SER:H 1:A:17:TRP:HE1 6 0.01 (1,203) 1:A:53:SER:O 1:A:64:ASP:H 4 0.01 (1,204) 1:A:63:SER:O 1:A:64:ASP:H 4 0.01 (1,205) 1:A:10:PRO:HG3 1:A:11:ASN:H 7 0.01 (1,216) 1:A:10:PRO:HG3 1:A:11:ASN:H 7 0.01 (1,216) 1:A:5:SER:H 1:A:17:TRP:HE1 6 0.01 (1,216) 1:A:5:SER:H 1:A:17:TRP:HE1 6 0.01 (1,216) 1:A:5:SER:H 1:A:18:THR:H 1 0.01 (1,216) 1:A:5:SER:H 1:A:19:THR:H 8 0.01 (1,217) 1:A:5:SER:H 1:A:19:THR:H 8 0.01 (1,218) 1:A:5:SER:H 1:A:18:THR:H 1 0.01 (1,219) 1:A:5:SER:H 1:A:18:THR:H 1 0.01 (1,210) 1:A:6:SER:H 1:A:18:THR:H 1 0.01 (1,211) 1:A:6:SER:H 1:A:18:THR:H 1 0.01 (1,2120) 1:A:4:S:SER:H 1:A:18:THR:H 1 0.01 (1,2141) 1:A:6:SER:H 1:A:18:THR:H 1 0.01 (1,2152) 1:A:8:LEU:H 1:A:18:THR:H 1 0.01 (1,1474) 1:A:8:SER:H 1:A:18:THR:H 1 0.01 (1,1474) 1:A:8:THR:H 1:A:10:PRO:HD3 2 0.01 (1,1474) 1:A:8:THR:H 1:A:10:PRO:HD3 2 0.01 (1,1474) 1:A:8:THR:H 1:A:10:PRO:HD3 2 0.01 (1,1474) 1:A:8:THR:H 1:A:18:THR:H 1 0.01 (1,1474) 1:A:8:THR:H 1:A:18:THR:H 1 0.01 (1,1474) 1:A:8:THR:H 1:A:18:THR:H 1 0	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,648) 1:A:38:GLN:H 1:A:39:PRO:HD2 6 0.01 (1,6) 1:A:15:MET:O 1:A:63:VAL:H 9 0.01 (1,589) 1:A:34:VAL:H 1:A:34:VAL:HB 6 0.01 (1,584) 1:A:33:LYS:HA 1:A:34:VAL:H 3 0.01 (1,584) 1:A:33:LYS:HA 1:A:34:VAL:H 3 0.01 (1,540) 1:A:31:TYR:HB3 1:A:54:ILE:H 3 0.01 (1,540) 1:A:31:TYR:HB3 1:A:56:HIS:H 3 0.01 (1,501) 1:A:29:ASP:HB3 1:A:56:HIS:H 3 0.01 (1,501) 1:A:29:ASP:HB3 1:A:56:HIS:H 5 0.01 (1,401) 1:A:64:ASP:O 1:A:75:LEU:H 5 0.01 (1,401) 1:A:64:ASP:O 1:A:53:SER:N 8 0.01 (1,460) 1:A:66:MET:H 1:A:59:ASP:HB2 2 0.01 (1,460) 1:A:63:VAL:O 1:A:15:MET:H 10 0.01 (1,427) 1:A:22:SER:HB2 1:A:59:ASP:HB3 4 0.01 (1,422) 1:A:22:SER:H 1:A:22:SER:HA 4 0.01 (1,422) 1:A:22:SER:H 1:A:22:SER:HA 4 0.01 (1,422) 1:A:22:SER:H 1:A:22:SER:HA 5 0.01 (1,400) 1:A:60:PHE:O 1:A:57:VAL:H 7 0.01 (1,304) 1:A:60:PHE:O 1:A:57:VAL:H 7 0.01 (1,304) 1:A:53:SER:O 1:A:64:ASP:N 5 0.01 (1,29) 1:A:53:SER:O 1:A:64:ASP:N 5 0.01 (1,29) 1:A:53:SER:O 1:A:64:ASP:N 5 0.01 (1,201) 1:A:55:SER:H 1:A:10:PRO:HD3 2 0.01 (1,201) 1:A:55:SER:H 1:A:10:PRO:HD3 2 0.01 (1,201) 1:A:55:SER:H 1:A:11:EHH 8 0.01 (1,201) 1:A:42:ILE:O 1:A:42:ILE:O 1:A:42:ILE:H 5 0.01 (1,201) 1:A:42:ILE:O 1:A:42:I	(1,654)	1:A:38:GLN:HB3	1:A:38:GLN:HE22	6	0.01
(1,6)	(1,649)	1:A:38:GLN:H	1:A:39:PRO:HD3	2	0.01
(1,589) 1:A:34:VAL:H 1:A:34:VAL:H 3 0.01 (1,584) 1:A:33:LYS:HA 1:A:34:VAL:H 3 0.01 (1,540) 1:A:31:TYR:HB3 1:A:54:ILE:H 3 0.01 (1,501) 1:A:29:ASP:HB3 1:A:56:HIS:H 3 0.01 (1,501) 1:A:71:TRP:O 1:A:75:LEU:H 5 0.01 (1,401) 1:A:64:ASP:O 1:A:53:SSR:N 8 0.01 (1,460) 1:A:26:MET:H 1:A:59:ASP:HB2 2 0.01 (1,460) 1:A:26:MET:H 1:A:59:ASP:HB3 4 0.01 (1,460) 1:A:22:SER:HB2 1:A:59:ASP:HB3 4 0.01 (1,427) 1:A:22:SER:HB2 1:A:22:SER:HB3 4 0.01 (1,422) 1:A:22:SER:H 1:A:22:SER:HA4 4 0.01 (1,422) 1:A:22:SER:H 1:A:22:SER:HA 5 0.01 (1,420) 1:A:60:PHE:O 1:A:57:VAL:H 7 0.01 (1,400) 1:A:60:PHE:O 1:A:57:VAL:H 7 0.01	(1,648)	1:A:38:GLN:H	1:A:39:PRO:HD2	6	0.01
(1,584) 1:A:33:LYS:HA 1:A:34:VAL:H 3 0.01 (1,540) 1:A:31:TYR:HB3 1:A:54:ILE:H 6 0.01 (1,501) 1:A:29:ASP:HB3 1:A:56:HIS:H 3 0.01 (1,501) 1:A:29:ASP:HB3 1:A:56:HIS:H 3 0.01 (1,50) 1:A:71:TRP:O 1:A:75:LEU:H 5 0.01 (1,477) 1:A:64:ASP:O 1:A:53:SER:N 8 0.01 (1,460) 1:A:26:MET:H 1:A:59:ASP:HB2 2 0.01 (1,46) 1:A:63:VAL:O 1:A:15:MET:H 10 0.01 (1,427) 1:A:22:SER:HB2 1:A:59:ASP:HB3 4 0.01 (1,422) 1:A:22:SER:H 1:A:22:SER:HA 4 0.01 (1,422) 1:A:22:SER:H 1:A:22:SER:HA 5 0.01 (1,422) 1:A:22:SER:H 1:A:22:SER:HA 5 0.01 (1,400) 1:A:60:PHE:O 1:A:57:VAL:H 6 0.01 (1,40) 1:A:60:PHE:O 1:A:57:VAL:H 7 0.01 (1,301) 1:A:53:SER:O 1:A:64:ASP:H 4 0.01 (1,202) 1:A:22:SER:O 1:A:64:ASP:H 4 0.01 (1,203) 1:A:53:SER:O 1:A:64:ASP:H 4 0.01 (1,204) 1:A:45:ILE:O 1:A:48:VAL:H 2 0.01 (1,205) 1:A:10:PRO:HG3 1:A:11:ASN:H 7 0.01 (1,214) 1:A:45:ILE:O 1:A:48:VAL:H 2 0.01 (1,214) 1:A:45:ILE:O 1:A:48:VAL:H 2 0.01 (1,214) 1:A:53:SER:O 1:A:64:ASP:H 4 0.01 (1,216) 1:A:9:THR:H 1:A:10:PRO:HD3 2 0.01 (1,217) 1:A:9:THR:H 1:A:10:PRO:HD3 2 0.01 (1,210) 1:A:8:GLU:HB3 1:A:11:ASN:H 7 0.01 (1,210) 1:A:8:GLU:HB3 1:A:11:ASN:H 7 0.01 (1,210) 1:A:8:GLU:HB3 1:A:10:PRO:HD3 2 0.01 (1,210) 1:A:42:ILE:O 1:A:46:LEU:H 5 0.01 (1,165) 1:A:5:SER:H 1:A:17:ILE:HA 6 0.01 (1,165) 1:A:5:SER:H 1:A:18:THR:H 1 0.01 (1,165) 1:A:5:SER:H 1:A:18:THR:H 4 0.01 (1,166) 1:A:5:SER:H 1:A:18:THR:H 5 0.01 (1,152) 1:A:84:LEU:H 1:A:85:GLU:H 8 0.01 (1,152) 1:A:84:LEU:H 1:A:85:GLU:H 8 0.01 (1,152) 1:A:84:LEU:H 1:A:85:GLU:H 5 0.01 (1,1478) 1:A:81:VAL:H 1:A:81:VAL:H 27 0.01 (1,1478) 1:A:81:VAL:H 1:A:81:VAL:H 27 0.01 (1,1478) 1:A:81:VAL:H 1:A:81:VAL:H 27 0.01 (1,1478) 1:A:81:VAL:H 1:A:81:VAL:H 27 0.01 (1,1441) 1:A:73:THR:H 1:A:10:PRO:HG3 7 0.01 (1,1478) 1:A:81:VAL:H 1:A:81:VAL:HG22 7 0.01 (1,1478) 1:A:81:VAL:H 1:A:81:VAL:HG23 7 0.01 (1,1474) 1:A:73:THR:H 1:A:10:PRO:HG3 7 0.01	(1,6)	1:A:15:MET:O	1:A:63:VAL:H	9	0.01
(1,540) 1:A:31:TYR:HB3 1:A:54:ILE:H 3 0.01 (1,540) 1:A:31:TYR:HB3 1:A:54:ILE:H 6 0.01 (1,501) 1:A:29:ASP:HB3 1:A:56:HIS:H 3 0.01 (1,501) 1:A:71:TRP:O 1:A:75:LEU:H 5 0.01 (1,47) 1:A:64:ASP:O 1:A:53:SER:N 8 0.01 (1,460) 1:A:64:ASP:O 1:A:59:ASP:HB2 2 0.01 (1,460) 1:A:63:VAL:O 1:A:15:MET:H 10 0.01 (1,460) 1:A:63:VAL:O 1:A:59:ASP:HB3 4 0.01 (1,427) 1:A:22:SER:HB2 1:A:59:ASP:HB3 4 0.01 (1,422) 1:A:22:SER:H 1:A:22:SER:HA 4 0.01 (1,422) 1:A:22:SER:H 1:A:22:SER:HA 5 0.01 (1,420) 1:A:60:PHE:O 1:A:57:VAL:H 6 0.01 (1,400) 1:A:60:PHE:O 1:A:57:VAL:H 7 0.01 (1,348) 1:A:17:ILE:HG13 1:A:18:THR:H 1 0.01 <	(1,589)	1:A:34:VAL:H	1:A:34:VAL:HB	6	0.01
(1,540) 1:A:31:TYR:HB3 1:A:54:ILE:H 6 0.01 (1,501) 1:A:29:ASP:HB3 1:A:56:HIS:H 3 0.01 (1,50) 1:A:71:TRP:O 1:A:75:LEU:H 5 0.01 (1,47) 1:A:64:ASP:O 1:A:53:SER:N 8 0.01 (1,460) 1:A:26:MET:H 1:A:59:ASP:HB2 2 0.01 (1,461) 1:A:63:VAL:O 1:A:15:MET:H 10 0.01 (1,427) 1:A:22:SER:HB2 1:A:59:ASP:HB3 4 0.01 (1,422) 1:A:22:SER:HB 1:A:22:SER:HA 4 0.01 (1,422) 1:A:22:SER:H 1:A:22:SER:HA 5 0.01 (1,422) 1:A:22:SER:H 1:A:22:SER:HA 5 0.01 (1,40) 1:A:60:PHE:O 1:A:57:VAL:H 6 0.01 (1,40) 1:A:60:PHE:O 1:A:57:VAL:H 7 0.01 (1,304) 1:A:53:SER:O 1:A:64:ASP:H 4 0.01 (1,29) 1:A:53:SER:O 1:A:64:ASP:H 4 0.01 (1,29) 1:A:45:ILE:O 1:A:48:VAL:H 2 0.01 (1,216) 1:A:10:PRO:HG3 1:A:11:ASP:HE1 6 0.01 (1,226) 1:A:10:PRO:HG3 1:A:11:ASP:HE1 6 0.01 (1,216) 1:A:9:THR:H 1:A:10:PRO:HD3 2 0.01 (1,216) 1:A:9:THR:H 1:A:10:PRO:HD3 2 0.01 (1,210) 1:A:5:SER:O 1:A:46:LEU:H 5 0.01 (1,20) 1:A:5:SER:O 1:A:18:THR:H 8 0.01 (1,210) 1:A:5:SER:O 1:A:18:THR:H 1 0.01 (1,210) 1:A:5:SER:O 1:A:18:THR:H 1 0.01 (1,210) 1:A:42:ILE:O 1:A:48:VAL:H 8 0.01 (1,210) 1:A:42:ILE:O 1:A:48:VAL:H 9 0.01 (1,165) 1:A:5:SER:H 1:A:17:ILE:HA 4 0.01 (1,165) 1:A:5:SER:H 1:A:18:VAL:H 9 0.01 (1,164) 1:A:8:VAL:H 1:A:18:VAL:H 1 0.01 (1,165) 1:A:4:ILE:HG13 1:A:28:VAL:H 1 0.01 (1,167) 1:A:4:ILE:HG13 1:A:28:VAL:H 1 0.01 (1,168) 1:A:4:ILE:HG13 1:A:28:VAL:H 1 0.01 (1,1478) 1:A:8:VAL:H 1:A:8:VAL:HG22 7 0.01 (1,1478) 1:A:8:VAL:H 1:A:8:VAL:HG23 7 0.01	(1,584)	1:A:33:LYS:HA	1:A:34:VAL:H	3	0.01
(1,501) 1:A:29:ASP:HB3 1:A:56:HIS:H 3 0.01 (1,50) 1:A:71:TRP:O 1:A:75:LEU:H 5 0.01 (1,47) 1:A:64:ASP:O 1:A:53:SER:N 8 0.01 (1,47) 1:A:63:VAL:O 1:A:59:ASP:HB2 2 0.01 (1,460) 1:A:63:VAL:O 1:A:15:MET:H 10 0.01 (1,427) 1:A:63:VAL:O 1:A:59:ASP:HB3 4 0.01 (1,422) 1:A:22:SER:HB2 1:A:59:ASP:HB3 4 0.01 (1,422) 1:A:22:SER:H 1:A:22:SER:HA 4 0.01 (1,422) 1:A:22:SER:H 1:A:22:SER:HA 5 0.01 (1,422) 1:A:22:SER:H 1:A:22:SER:HA 10 0.01 (1,422) 1:A:22:SER:H 1:A:22:SER:HA 5 0.01 (1,422) 1:A:23:SER:H 1:A:22:SER:HA 10 0.01 (1,40) 1:A:60:PHE:O 1:A:57:VAL:H 7 0.01 (1,348) 1:A:17:ILE:HGI3 1:A:18:THR:H 1 0.01 <td>(1,540)</td> <td>1:A:31:TYR:HB3</td> <td>1:A:54:ILE:H</td> <td>3</td> <td>0.01</td>	(1,540)	1:A:31:TYR:HB3	1:A:54:ILE:H	3	0.01
(1,50) 1:A:71:TRP:O 1:A:75:LEU:H 5 0.01 (1,47) 1:A:64:ASP:O 1:A:53:SER:N 8 0.01 (1,460) 1:A:26:MET:H 1:A:59:ASP:HB2 2 0.01 (1,460) 1:A:26:MET:H 1:A:59:ASP:HB2 2 0.01 (1,46) 1:A:63:VAL:O 1:A:15:MET:H 10 0.01 (1,427) 1:A:63:VAL:O 1:A:59:ASP:HB3 4 0.01 (1,427) 1:A:22:SER:HB2 1:A:59:ASP:HB3 4 0.01 (1,422) 1:A:22:SER:H 1:A:22:SER:HA 5 0.01 (1,422) 1:A:22:SER:H 1:A:22:SER:HA 5 0.01 (1,40) 1:A:60:PHE:O 1:A:57:VAL:H 6 0.01 (1,40) 1:A:60:PHE:O 1:A:57:VAL:H 7 0.01 (1,348) 1:A:17:ILE:HG13 1:A:18:THR:H 1 0.01 (1,338) 1:A:17:ILE:HG13 1:A:18:THR:H 1 0.01 (1,29) 1:A:53:SER:O 1:A:64:ASP:N 5 0.01	(1,540)	1:A:31:TYR:HB3	1:A:54:ILE:H	6	0.01
(1,47) 1:A:64:ASP:O 1:A:53:SER:N 8 0.01 (1,460) 1:A:26:MET:H 1:A:59:ASP:HB2 2 0.01 (1,46) 1:A:63:VAL:O 1:A:15:MET:H 10 0.01 (1,427) 1:A:22:SER:HB2 1:A:59:ASP:HB3 4 0.01 (1,427) 1:A:22:SER:HB2 1:A:59:ASP:HB3 4 0.01 (1,427) 1:A:22:SER:HB2 1:A:59:ASP:HB3 4 0.01 (1,422) 1:A:22:SER:H 1:A:22:SER:HA 4 0.01 (1,422) 1:A:22:SER:H 1:A:22:SER:HA 5 0.01 (1,422) 1:A:22:SER:H 1:A:22:SER:HA 10 0.01 (1,422) 1:A:22:SER:H 1:A:22:SER:HA 5 0.01 (1,422) 1:A:42:SER:H 1:A:22:SER:HA 10 0.01 (1,420) 1:A:60:PHE:O 1:A:57:VAL:H 6 0.01 (1,40) 1:A:60:PHE:O 1:A:57:VAL:H 7 0.01 (1,348) 1:A:17:IE:HG13 1:A:64:ASP:H 4 0.01	(1,501)	1:A:29:ASP:HB3	1:A:56:HIS:H	3	0.01
(1,460) 1:A:26:MET:H 1:A:59:ASP:HB2 2 0.01 (1,46) 1:A:63:VAL:O 1:A:15:MET:H 10 0.01 (1,427) 1:A:62:SER:HB2 1:A:59:ASP:HB3 4 0.01 (1,422) 1:A:22:SER:H 1:A:22:SER:HA 4 0.01 (1,422) 1:A:22:SER:H 1:A:22:SER:HA 5 0.01 (1,422) 1:A:22:SER:H 1:A:22:SER:HA 10 0.01 (1,422) 1:A:22:SER:H 1:A:22:SER:HA 10 0.01 (1,422) 1:A:22:SER:H 10 0.01 0.01 (1,40) 1:A:60:PHE:O 1:A:57:VAL:H 6 0.01 (1,40) 1:A:60:PHE:O 1:A:57:VAL:H 7 0.01 (1,40) 1:A:63:SER:O 1:A:64:ASP:H 1 0.01	(1,50)	1:A:71:TRP:O	1:A:75:LEU:H	5	0.01
(1,46) 1:A:63:VAL:O 1:A:15:MET:H 10 0.01 (1,427) 1:A:22:SER:HB2 1:A:59:ASP:HB3 4 0.01 (1,422) 1:A:22:SER:H 1:A:22:SER:HA 4 0.01 (1,422) 1:A:22:SER:H 1:A:22:SER:HA 5 0.01 (1,422) 1:A:22:SER:H 1:A:22:SER:HA 10 0.01 (1,40) 1:A:60:PHE:O 1:A:57:VAL:H 6 0.01 (1,40) 1:A:60:PHE:O 1:A:57:VAL:H 7 0.01 (1,40) 1:A:60:PHE:O 1:A:57:VAL:H 7 0.01 (1,40) 1:A:60:PHE:O 1:A:57:VAL:H 7 0.01 (1,340) 1:A:60:PHE:O 1:A:57:VAL:H 7 0.01 (1,30) 1:A:53:SER:O 1:A:64:ASP:N 5 0.01 (1,29) 1:A:53:SER:O 1:A:64:ASP:N 5 0.01 (1,24) 1:A:45:ILE:O 1:A:48:VAL:H 2 0.01 (1,238) 1:A:10:PRO:HG3 1:A:11:ASN:H 7 0.01	(1,47)	1:A:64:ASP:O	1:A:53:SER:N	8	0.01
(1,427) 1:A:22:SER:HB2 1:A:59:ASP:HB3 4 0.01 (1,422) 1:A:22:SER:H 1:A:22:SER:HA 4 0.01 (1,422) 1:A:22:SER:H 1:A:22:SER:HA 5 0.01 (1,422) 1:A:22:SER:H 1:A:22:SER:HA 10 0.01 (1,40) 1:A:60:PHE:O 1:A:57:VAL:H 6 0.01 (1,40) 1:A:60:PHE:O 1:A:57:VAL:H 7 0.01 (1,348) 1:A:17:ILE:HG13 1:A:18:THR:H 1 0.01 (1,30) 1:A:53:SER:O 1:A:64:ASP:H 4 0.01 (1,30) 1:A:53:SER:O 1:A:46:ASP:N 5 0.01 (1,29) 1:A:45:ILE:O 1:A:48:VAL:H 2 0.01 (1,24) 1:A:19:THR:H 1:A:10:PRO:HB3 2 0.01	(1,460)	1:A:26:MET:H	1:A:59:ASP:HB2	2	0.01
(1,427) 1:A:22:SER:HB2 1:A:59:ASP:HB3 4 0.01 (1,422) 1:A:22:SER:H 1:A:22:SER:HA 4 0.01 (1,422) 1:A:22:SER:H 1:A:22:SER:HA 5 0.01 (1,422) 1:A:22:SER:H 1:A:22:SER:HA 10 0.01 (1,40) 1:A:60:PHE:O 1:A:57:VAL:H 6 0.01 (1,40) 1:A:60:PHE:O 1:A:57:VAL:H 7 0.01 (1,30) 1:A:60:PHE:O 1:A:48:THR:H 1 0.01 (1,30) 1:A:53:SER:O 1:A:64:ASP:H 4 0.01 (1,29) 1:A:53:SER:O 1:A:64:ASP:N 5 0.01 (1,29) 1:A:45:ILE:O 1:A:71:TRP:HEI 6 0.01 (1,24) 1:A:10:PRO:HG3 1:A:11:ASP:GHA 8 0.01	(1,46)	1:A:63:VAL:O	1:A:15:MET:H	10	0.01
(1,422) 1:A:22:SER:H 1:A:22:SER:HA 4 0.01 (1,422) 1:A:22:SER:H 1:A:22:SER:HA 5 0.01 (1,422) 1:A:22:SER:H 1:A:22:SER:HA 10 0.01 (1,40) 1:A:60:PHE:O 1:A:57:VAL:H 6 0.01 (1,40) 1:A:60:PHE:O 1:A:57:VAL:H 7 0.01 (1,340) 1:A:60:PHE:O 1:A:57:VAL:H 7 0.01 (1,348) 1:A:17:ILE:HG13 1:A:18:THR:H 1 0.01 (1,300) 1:A:53:SER:O 1:A:64:ASP:H 4 0.01 (1,29) 1:A:53:SER:O 1:A:64:ASP:N 5 0.01 (1,29) 1:A:53:SER:O 1:A:48:VAL:H 2 0.01 (1,24) 1:A:45:ILE:O 1:A:48:VAL:H 2 0.01 (1,238) 1:A:12:HIS:HD2 1:A:71:TRP:HE1 6 0.01 (1,226) 1:A:19:PRO:HG3 1:A:11:ASN:H 7 0.01 (1,216) 1:A:9:THR:H 1:A:10:PRO:HD3 2 0.01 <	, ,	1:A:22:SER:HB2	1:A:59:ASP:HB3	4	0.01
(1,422) 1:A:22:SER:H 1:A:22:SER:HA 5 0.01 (1,422) 1:A:22:SER:H 1:A:57:VAL:H 6 0.01 (1,40) 1:A:60:PHE:O 1:A:57:VAL:H 7 0.01 (1,34) 1:A:60:PHE:O 1:A:57:VAL:H 7 0.01 (1,348) 1:A:17:ILE:HG13 1:A:18:THR:H 1 0.01 (1,30) 1:A:53:SER:O 1:A:64:ASP:H 4 0.01 (1,29) 1:A:53:SER:O 1:A:64:ASP:N 5 0.01 (1,29) 1:A:53:SER:O 1:A:64:ASP:N 5 0.01 (1,29) 1:A:53:SER:O 1:A:64:ASP:N 5 0.01 (1,29) 1:A:45:ILE:O 1:A:48:VAL:H 2 0.01 (1,24) 1:A:45:INPRO:HG3 1:A:11:ASN:H 7 0.01 (1,26) 1:A:9:THR:H 1:A:10:PRO:HD3 2 0.01 (1,214) 1:A:9:THR:H 1:A:10:PRO:HA 8 0.01 (1,20) 1:A:42:ILE:O 1:A:46:LEU:H 5 0.01	· · /	1:A:22:SER:H	1:A:22:SER:HA	4	0.01
(1,422) 1:A:22:SER:H 1:A:57:VAL:H 6 0.01 (1,40) 1:A:60:PHE:O 1:A:57:VAL:H 6 0.01 (1,40) 1:A:60:PHE:O 1:A:57:VAL:H 7 0.01 (1,348) 1:A:17:ILE:HG13 1:A:18:THR:H 1 0.01 (1,30) 1:A:53:SER:O 1:A:64:ASP:H 4 0.01 (1,29) 1:A:53:SER:O 1:A:64:ASP:N 5 0.01 (1,29) 1:A:53:SER:O 1:A:64:ASP:N 5 0.01 (1,24) 1:A:45:ILE:O 1:A:48:VAL:H 2 0.01 (1,238) 1:A:12:HIS:HD2 1:A:71:TRP:HE1 6 0.01 (1,226) 1:A:10:PRO:HG3 1:A:11:ASN:H 7 0.01 (1,216) 1:A:9:THR:H 1:A:10:PRO:HD3 2 0.01 (1,214) 1:A:9:THR:H 1:A:10:PRO:HD3 2 0.01 (1,210) 1:A:8:GLU:HB3 1:A:9:THR:H 8 0.01 (1,20) 1:A:4:5:SER:O 1:A:46:LEU:H 5 0.01		1:A:22:SER:H	1:A:22:SER:HA	5	0.01
(1,40) 1:A:60:PHE:O 1:A:57:VAL:H 6 0.01 (1,40) 1:A:60:PHE:O 1:A:57:VAL:H 7 0.01 (1,348) 1:A:17:ILE:HG13 1:A:18:THR:H 1 0.01 (1,348) 1:A:53:SER:O 1:A:64:ASP:H 4 0.01 (1,29) 1:A:53:SER:O 1:A:64:ASP:N 5 0.01 (1,29) 1:A:53:SER:O 1:A:48:VAL:H 2 0.01 (1,24) 1:A:45:ILE:O 1:A:48:VAL:H 2 0.01 (1,238) 1:A:10:PRO:HG3 1:A:71:TRP:HE1 6 0.01 (1,226) 1:A:10:PRO:HG3 1:A:11:ASN:H 7 0.01 (1,216) 1:A:9:THR:H 1:A:10:PRO:HD3 2 0.01 (1,216) 1:A:9:THR:H 1:A:10:PRO:HD3 2 0.01 (1,214) 1:A:9:THR:H 1:A:10:PRO:HD3 2 0.01 (1,214) 1:A:42:ILE:O 1:A:46:LEU:H 5 0.01 (1,20) 1:A:42:ILE:O 1:A:18:THR:H 1 0.01	(' /	1:A:22:SER:H	1:A:22:SER:HA	10	0.01
(1,40) 1:A:60:PHE:O 1:A:57:VAL:H 7 0.01 (1,348) 1:A:17:ILE:HG13 1:A:18:THR:H 1 0.01 (1,30) 1:A:53:SER:O 1:A:64:ASP:H 4 0.01 (1,29) 1:A:53:SER:O 1:A:64:ASP:N 5 0.01 (1,24) 1:A:51:ILE:O 1:A:48:VAL:H 2 0.01 (1,24) 1:A:45:ILE:O 1:A:48:VAL:H 2 0.01 (1,24) 1:A:45:ILE:O 1:A:48:VAL:H 2 0.01 (1,238) 1:A:11:ASP:ILE:H 2 0.01 (1,226) 1:A:10:PRO:HG3 1:A:11:ASN:H 7 0.01 (1,226) 1:A:49:THR:H 1:A:10:PRO:HD3 2 0.01 (1,216) 1:A:9:THR:H 1:A:10:PRO:HD3 2 0.01 (1,214) 1:A:9:THR:H 1:A:10:PRO:HD3 2 0.01 (1,210) 1:A:8:GLU:HB3 1:A:9:THR:H 8 0.01 (1,20) 1:A:4:2:ILE:O 1:A:4:1E:THR:H 1 0.01 (1,165)		1:A:60:PHE:O	1:A:57:VAL:H	6	
(1,348) 1:A:17:ILE:HG13 1:A:18:THR:H 1 0.01 (1,30) 1:A:53:SER:O 1:A:64:ASP:H 4 0.01 (1,29) 1:A:53:SER:O 1:A:64:ASP:N 5 0.01 (1,24) 1:A:53:SER:O 1:A:48:VAL:H 2 0.01 (1,238) 1:A:12:HIS:HD2 1:A:71:TRP:HE1 6 0.01 (1,226) 1:A:10:PRO:HG3 1:A:11:ASN:H 7 0.01 (1,216) 1:A:9:THR:H 1:A:10:PRO:HD3 2 0.01 (1,214) 1:A:9:THR:H 1:A:10:PRO:HA 8 0.01 (1,214) 1:A:9:THR:H 1:A:9:THR:H 8 0.01 (1,20) 1:A:8:GLU:HB3 1:A:9:THR:H 8 0.01 (1,20) 1:A:42:ILE:O 1:A:46:LEU:H 5 0.01 (1,2) 1:A:5:SER:O 1:A:18:THR:H 1 0.01 (1,163) 1:A:5:SER:H 1:A:17:ILE:HA 5 0.01 (1,163) 1:A:84:LEU:H 1:A:85:GLU:H 8 0.01	,	1:A:60:PHE:O	1:A:57:VAL:H	7	0.01
(1,30) 1:A:53:SER:O 1:A:64:ASP:H 4 0.01 (1,29) 1:A:53:SER:O 1:A:64:ASP:N 5 0.01 (1,24) 1:A:45:ILE:O 1:A:48:VAL:H 2 0.01 (1,238) 1:A:12:HIS:HD2 1:A:71:TRP:HE1 6 0.01 (1,226) 1:A:10:PRO:HG3 1:A:11:ASN:H 7 0.01 (1,216) 1:A:9:THR:H 1:A:10:PRO:HD3 2 0.01 (1,214) 1:A:9:THR:H 1:A:10:PRO:HD3 2 0.01 (1,214) 1:A:9:THR:H 1:A:10:PRO:HD3 2 0.01 (1,210) 1:A:8:GLU:HB3 1:A:9:THR:H 8 0.01 (1,20) 1:A:42:ILE:O 1:A:46:LEU:H 5 0.01 (1,20) 1:A:42:IE:O 1:A:48:THR:H 1 0.01 (1,165) 1:A:5:SER:O 1:A:18:THR:H 1 0.01 (1,163) 1:A:5:SER:H 1:A:17:ILE:HA 4 0.01 (1,163) 1:A:84:LEU:H 1:A:85:GLU:H 8 0.01	(' /	1:A:17:ILE:HG13	1:A:18:THR:H	1	0.01
(1,29) 1:A:53:SER:O 1:A:64:ASP:N 5 0.01 (1,24) 1:A:45:ILE:O 1:A:48:VAL:H 2 0.01 (1,238) 1:A:12:HIS:HD2 1:A:71:TRP:HE1 6 0.01 (1,226) 1:A:10:PRO:HG3 1:A:11:ASN:H 7 0.01 (1,216) 1:A:9:THR:H 1:A:10:PRO:HD3 2 0.01 (1,214) 1:A:9:THR:H 1:A:10:PRO:HA 8 0.01 (1,210) 1:A:8:GLU:HB3 1:A:9:THR:H 8 0.01 (1,20) 1:A:42:ILE:O 1:A:46:LEU:H 5 0.01 (1,20) 1:A:45:SER:O 1:A:18:THR:H 1 0.01 (1,165) 1:A:5:SER:H 1:A:18:THR:HA 5 0.01 (1,163) 1:A:5:SER:H 1:A:17:ILE:HA 4 0.01 (1,163) 1:A:84:LEU:HA 1:A:85:GLU:H 8 0.01 (1,1526) 1:A:84:LEU:H 1:A:85:GLU:H 1 0.01 (1,1522) 1:A:84:LEU:H 1:A:85:GLU:H 5 0.01	` ′	1:A:53:SER:O	1:A:64:ASP:H	4	0.01
(1,24) 1:A:45:ILE:O 1:A:48:VAL:H 2 0.01 (1,238) 1:A:12:HIS:HD2 1:A:71:TRP:HE1 6 0.01 (1,226) 1:A:10:PRO:HG3 1:A:11:ASN:H 7 0.01 (1,216) 1:A:9:THR:H 1:A:10:PRO:HD3 2 0.01 (1,214) 1:A:9:THR:H 1:A:10:PRO:HA 8 0.01 (1,210) 1:A:8:GLU:HB3 1:A:9:THR:H 8 0.01 (1,20) 1:A:42:ILE:O 1:A:46:LEU:H 5 0.01 (1,20) 1:A:5:SER:O 1:A:18:THR:H 1 0.01 (1,165) 1:A:5:SER:H 1:A:18:THR:HA 5 0.01 (1,163) 1:A:5:SER:H 1:A:17:ILE:HA 4 0.01 (1,163) 1:A:5:SER:H 1:A:17:ILE:HA 6 0.01 (1,1526) 1:A:84:LEU:HA 1:A:85:GLU:H 8 0.01 (1,1522) 1:A:84:LEU:H 1:A:85:GLU:H 5 0.01 (1,150) 1:A:4:ILE:HG13 1:A:20:SER:H 3 0.01 <t< td=""><td>(1,29)</td><td>1:A:53:SER:O</td><td>1:A:64:ASP:N</td><td>5</td><td>0.01</td></t<>	(1,29)	1:A:53:SER:O	1:A:64:ASP:N	5	0.01
(1,226) 1:A:10:PRO:HG3 1:A:11:ASN:H 7 0.01 (1,216) 1:A:9:THR:H 1:A:10:PRO:HD3 2 0.01 (1,214) 1:A:9:THR:H 1:A:10:PRO:HA 8 0.01 (1,210) 1:A:8:GLU:HB3 1:A:9:THR:H 8 0.01 (1,20) 1:A:42:ILE:O 1:A:46:LEU:H 5 0.01 (1,20) 1:A:5:SER:O 1:A:18:THR:H 1 0.01 (1,2) 1:A:5:SER:H 1:A:18:THR:HA 5 0.01 (1,165) 1:A:5:SER:H 1:A:17:ILE:HA 4 0.01 (1,163) 1:A:5:SER:H 1:A:17:ILE:HA 6 0.01 (1,153) 1:A:84:LEU:HA 1:A:85:GLU:H 8 0.01 (1,1526) 1:A:84:LEU:HA 1:A:85:GLU:H 1 0.01 (1,1522) 1:A:84:LEU:H 1:A:85:GLU:H 5 0.01 (1,150) 1:A:4:ILE:HG13 1:A:20:SER:H 3 0.01 (1,1478) 1:A:81:VAL:H 1:A:81:VAL:HG22 7 0.01 <t< td=""><td>· ' /</td><td>1:A:45:ILE:O</td><td>1:A:48:VAL:H</td><td>2</td><td>0.01</td></t<>	· ' /	1:A:45:ILE:O	1:A:48:VAL:H	2	0.01
(1,216) 1:A:9:THR:H 1:A:10:PRO:HD3 2 0.01 (1,214) 1:A:9:THR:H 1:A:10:PRO:HA 8 0.01 (1,210) 1:A:8:GLU:HB3 1:A:9:THR:H 8 0.01 (1,20) 1:A:42:ILE:O 1:A:46:LEU:H 5 0.01 (1,2) 1:A:5:SER:O 1:A:18:THR:H 1 0.01 (1,165) 1:A:5:SER:H 1:A:17:ILE:HA 5 0.01 (1,163) 1:A:5:SER:H 1:A:17:ILE:HA 6 0.01 (1,153) 1:A:84:LEU:HA 1:A:85:GLU:H 8 0.01 (1,1526) 1:A:84:LEU:HA 1:A:85:GLU:H 1 0.01 (1,1522) 1:A:84:LEU:H 1:A:85:GLU:H 5 0.01 (1,150) 1:A:4:ILE:HG13 1:A:20:SER:H 3 0.01 (1,1478) 1:A:81:VAL:H 1:A:81:VAL:HG22 7 0.01 (1,1478) 1:A:81:VAL:H 1:A:81:VAL:HG23 7 0.01 (1,1341) 1:A:73:THR:H 1:A:74:VAL:HA 1 0.01 <	(1,238)	1:A:12:HIS:HD2	1:A:71:TRP:HE1	6	0.01
(1,214) 1:A:9:THR:H 1:A:10:PRO:HA 8 0.01 (1,210) 1:A:8:GLU:HB3 1:A:9:THR:H 8 0.01 (1,20) 1:A:42:ILE:O 1:A:46:LEU:H 5 0.01 (1,2) 1:A:5:SER:O 1:A:18:THR:H 1 0.01 (1,165) 1:A:5:SER:H 1:A:18:THR:HA 5 0.01 (1,163) 1:A:5:SER:H 1:A:17:ILE:HA 4 0.01 (1,163) 1:A:5:SER:H 1:A:17:ILE:HA 6 0.01 (1,1526) 1:A:84:LEU:HA 1:A:85:GLU:H 8 0.01 (1,1522) 1:A:84:LEU:H 1:A:85:GLU:H 5 0.01 (1,1522) 1:A:84:LEU:H 1:A:85:GLU:H 5 0.01 (1,150) 1:A:4:ILE:HG13 1:A:20:SER:H 3 0.01 (1,1478) 1:A:81:VAL:H 1:A:81:VAL:HG21 7 0.01 (1,1478) 1:A:81:VAL:H 1:A:81:VAL:HG23 7 0.01 (1,1341) 1:A:73:THR:H 1:A:74:VAL:HA 1 0.01 </td <td>(1,226)</td> <td>1:A:10:PRO:HG3</td> <td>1:A:11:ASN:H</td> <td>7</td> <td>0.01</td>	(1,226)	1:A:10:PRO:HG3	1:A:11:ASN:H	7	0.01
(1,214) 1:A:9:THR:H 1:A:10:PRO:HA 8 0.01 (1,210) 1:A:8:GLU:HB3 1:A:9:THR:H 8 0.01 (1,20) 1:A:42:ILE:O 1:A:46:LEU:H 5 0.01 (1,2) 1:A:5:SER:O 1:A:18:THR:H 1 0.01 (1,165) 1:A:5:SER:H 1:A:18:THR:HA 5 0.01 (1,163) 1:A:5:SER:H 1:A:17:ILE:HA 4 0.01 (1,163) 1:A:5:SER:H 1:A:17:ILE:HA 6 0.01 (1,1526) 1:A:84:LEU:HA 1:A:85:GLU:H 8 0.01 (1,1522) 1:A:84:LEU:H 1:A:85:GLU:H 1 0.01 (1,1522) 1:A:84:LEU:H 1:A:85:GLU:H 5 0.01 (1,150) 1:A:4:ILE:HG13 1:A:20:SER:H 3 0.01 (1,1478) 1:A:81:VAL:H 1:A:81:VAL:HG21 7 0.01 (1,1478) 1:A:81:VAL:H 1:A:81:VAL:HG23 7 0.01 (1,1341) 1:A:73:THR:H 1:A:74:VAL:HA 1 0.01 </td <td>(1,216)</td> <td>1:A:9:THR:H</td> <td>1:A:10:PRO:HD3</td> <td>2</td> <td>0.01</td>	(1,216)	1:A:9:THR:H	1:A:10:PRO:HD3	2	0.01
(1,20) 1:A:42:ILE:O 1:A:46:LEU:H 5 0.01 (1,2) 1:A:5:SER:O 1:A:18:THR:H 1 0.01 (1,165) 1:A:5:SER:H 1:A:18:THR:HA 5 0.01 (1,163) 1:A:5:SER:H 1:A:17:ILE:HA 4 0.01 (1,163) 1:A:5:SER:H 1:A:17:ILE:HA 6 0.01 (1,1526) 1:A:84:LEU:HA 1:A:85:GLU:H 8 0.01 (1,1522) 1:A:84:LEU:H 1:A:85:GLU:H 1 0.01 (1,1522) 1:A:84:LEU:H 1:A:85:GLU:H 5 0.01 (1,1522) 1:A:84:LEU:H 1:A:85:GLU:H 5 0.01 (1,1529) 1:A:81:VAL:HG13 1:A:20:SER:H 3 0.01 (1,1478) 1:A:81:VAL:H 1:A:81:VAL:HG21 7 0.01 (1,1478) 1:A:81:VAL:H 1:A:81:VAL:HG22 7 0.01 (1,1341) 1:A:73:THR:H 1:A:74:VAL:HA 1 0.01	/	1:A:9:THR:H	1:A:10:PRO:HA	8	0.01
(1,20) 1:A:42:ILE:O 1:A:46:LEU:H 5 0.01 (1,2) 1:A:5:SER:O 1:A:18:THR:H 1 0.01 (1,165) 1:A:5:SER:H 1:A:18:THR:HA 5 0.01 (1,163) 1:A:5:SER:H 1:A:17:ILE:HA 4 0.01 (1,163) 1:A:5:SER:H 1:A:17:ILE:HA 6 0.01 (1,1526) 1:A:84:LEU:HA 1:A:85:GLU:H 8 0.01 (1,1522) 1:A:84:LEU:H 1:A:85:GLU:H 1 0.01 (1,1522) 1:A:84:LEU:H 1:A:85:GLU:H 5 0.01 (1,150) 1:A:4:ILE:HG13 1:A:20:SER:H 3 0.01 (1,1478) 1:A:81:VAL:H 1:A:81:VAL:HG21 7 0.01 (1,1478) 1:A:81:VAL:H 1:A:81:VAL:HG22 7 0.01 (1,1478) 1:A:81:VAL:H 1:A:81:VAL:HG23 7 0.01 (1,1341) 1:A:73:THR:H 1:A:74:VAL:HA 1 0.01	(1,210)	1:A:8:GLU:HB3	1:A:9:THR:H	8	0.01
(1,165) 1:A:5:SER:H 1:A:18:THR:HA 5 0.01 (1,163) 1:A:5:SER:H 1:A:17:ILE:HA 4 0.01 (1,163) 1:A:5:SER:H 1:A:17:ILE:HA 6 0.01 (1,1526) 1:A:84:LEU:HA 1:A:85:GLU:H 8 0.01 (1,1522) 1:A:84:LEU:H 1:A:85:GLU:H 1 0.01 (1,1522) 1:A:84:LEU:H 1:A:85:GLU:H 5 0.01 (1,1522) 1:A:84:LEU:H 1:A:85:GLU:H 5 0.01 (1,150) 1:A:4:ILE:HG13 1:A:20:SER:H 3 0.01 (1,1478) 1:A:81:VAL:H 1:A:81:VAL:HG21 7 0.01 (1,1478) 1:A:81:VAL:H 1:A:81:VAL:HG22 7 0.01 (1,1478) 1:A:81:VAL:H 1:A:81:VAL:HG23 7 0.01 (1,1341) 1:A:73:THR:H 1:A:74:VAL:HA 1 0.01	_ `	1:A:42:ILE:O	1:A:46:LEU:H	5	0.01
(1,163) 1:A:5:SER:H 1:A:17:ILE:HA 4 0.01 (1,163) 1:A:5:SER:H 1:A:17:ILE:HA 6 0.01 (1,1526) 1:A:84:LEU:HA 1:A:85:GLU:H 8 0.01 (1,1522) 1:A:84:LEU:H 1:A:85:GLU:H 1 0.01 (1,1522) 1:A:84:LEU:H 1:A:85:GLU:H 5 0.01 (1,150) 1:A:4:ILE:HG13 1:A:20:SER:H 3 0.01 (1,1478) 1:A:81:VAL:H 1:A:81:VAL:HG21 7 0.01 (1,1478) 1:A:81:VAL:H 1:A:81:VAL:HG22 7 0.01 (1,1478) 1:A:81:VAL:H 1:A:81:VAL:HG23 7 0.01 (1,1341) 1:A:73:THR:H 1:A:74:VAL:HA 1 0.01	(1,2)	1:A:5:SER:O	1:A:18:THR:H	1	0.01
(1,163) 1:A:5:SER:H 1:A:17:ILE:HA 6 0.01 (1,1526) 1:A:84:LEU:HA 1:A:85:GLU:H 8 0.01 (1,1522) 1:A:84:LEU:H 1:A:85:GLU:H 1 0.01 (1,1522) 1:A:84:LEU:H 1:A:85:GLU:H 5 0.01 (1,150) 1:A:4:ILE:HG13 1:A:20:SER:H 3 0.01 (1,1478) 1:A:81:VAL:H 1:A:81:VAL:HG21 7 0.01 (1,1478) 1:A:81:VAL:H 1:A:81:VAL:HG22 7 0.01 (1,1478) 1:A:81:VAL:H 1:A:81:VAL:HG23 7 0.01 (1,1341) 1:A:73:THR:H 1:A:74:VAL:HA 1 0.01	` ,	1:A:5:SER:H	1:A:18:THR:HA	5	0.01
(1,1526) 1:A:84:LEU:HA 1:A:85:GLU:H 8 0.01 (1,1522) 1:A:84:LEU:H 1:A:85:GLU:H 1 0.01 (1,1522) 1:A:84:LEU:H 1:A:85:GLU:H 5 0.01 (1,150) 1:A:4:ILE:HG13 1:A:20:SER:H 3 0.01 (1,1478) 1:A:81:VAL:H 1:A:81:VAL:HG21 7 0.01 (1,1478) 1:A:81:VAL:H 1:A:81:VAL:HG22 7 0.01 (1,1478) 1:A:81:VAL:H 1:A:81:VAL:HG23 7 0.01 (1,1341) 1:A:73:THR:H 1:A:74:VAL:HA 1 0.01	/	1:A:5:SER:H	1:A:17:ILE:HA	4	0.01
(1,1526) 1:A:84:LEU:HA 1:A:85:GLU:H 8 0.01 (1,1522) 1:A:84:LEU:H 1:A:85:GLU:H 1 0.01 (1,1522) 1:A:84:LEU:H 1:A:85:GLU:H 5 0.01 (1,150) 1:A:4:ILE:HG13 1:A:20:SER:H 3 0.01 (1,1478) 1:A:81:VAL:H 1:A:81:VAL:HG21 7 0.01 (1,1478) 1:A:81:VAL:H 1:A:81:VAL:HG22 7 0.01 (1,1478) 1:A:81:VAL:H 1:A:81:VAL:HG23 7 0.01 (1,1341) 1:A:73:THR:H 1:A:74:VAL:HA 1 0.01	· · /	1:A:5:SER:H	1:A:17:ILE:HA	6	0.01
(1,1522) 1:A:84:LEU:H 1:A:85:GLU:H 1 0.01 (1,1522) 1:A:84:LEU:H 1:A:85:GLU:H 5 0.01 (1,150) 1:A:4:ILE:HG13 1:A:20:SER:H 3 0.01 (1,1478) 1:A:81:VAL:H 1:A:81:VAL:HG21 7 0.01 (1,1478) 1:A:81:VAL:H 1:A:81:VAL:HG22 7 0.01 (1,1478) 1:A:81:VAL:H 1:A:81:VAL:HG23 7 0.01 (1,1341) 1:A:73:THR:H 1:A:74:VAL:HA 1 0.01	,	1:A:84:LEU:HA	1:A:85:GLU:H	8	0.01
(1,1522) 1:A:84:LEU:H 1:A:85:GLU:H 5 0.01 (1,150) 1:A:4:ILE:HG13 1:A:20:SER:H 3 0.01 (1,1478) 1:A:81:VAL:H 1:A:81:VAL:HG21 7 0.01 (1,1478) 1:A:81:VAL:H 1:A:81:VAL:HG22 7 0.01 (1,1478) 1:A:81:VAL:H 1:A:81:VAL:HG23 7 0.01 (1,1341) 1:A:73:THR:H 1:A:74:VAL:HA 1 0.01		1:A:84:LEU:H	1:A:85:GLU:H		
(1,150) 1:A:4:ILE:HG13 1:A:20:SER:H 3 0.01 (1,1478) 1:A:81:VAL:H 1:A:81:VAL:HG21 7 0.01 (1,1478) 1:A:81:VAL:H 1:A:81:VAL:HG22 7 0.01 (1,1478) 1:A:81:VAL:H 1:A:81:VAL:HG23 7 0.01 (1,1341) 1:A:73:THR:H 1:A:74:VAL:HA 1 0.01	· · /				
(1,1478) 1:A:81:VAL:H 1:A:81:VAL:HG21 7 0.01 (1,1478) 1:A:81:VAL:H 1:A:81:VAL:HG22 7 0.01 (1,1478) 1:A:81:VAL:H 1:A:81:VAL:HG23 7 0.01 (1,1341) 1:A:73:THR:H 1:A:74:VAL:HA 1 0.01					
(1,1478) 1:A:81:VAL:H 1:A:81:VAL:HG22 7 0.01 (1,1478) 1:A:81:VAL:H 1:A:81:VAL:HG23 7 0.01 (1,1341) 1:A:73:THR:H 1:A:74:VAL:HA 1 0.01	, ,				
(1,1478) 1:A:81:VAL:H 1:A:81:VAL:HG23 7 0.01 (1,1341) 1:A:73:THR:H 1:A:74:VAL:HA 1 0.01	. ,				
(1,1341) 1:A:73:THR:H 1:A:74:VAL:HA 1 0.01				7	
	· · /				
	(1,1341)	1:A:73:THR:H			0.01



Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1214)	1:A:65:LYS:H	1:A:71:TRP:HH2	8	0.01
(1,1130)	1:A:58:MET:HB2	1:A:59:ASP:H	9	0.01



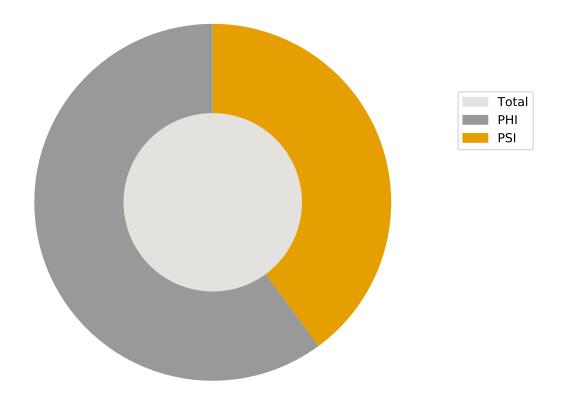
9 Dihedral angle restraints analysis

9.1 Dihedral angle restraints summary

Angle name	Count	%
PHI	107	60.1
PSI	71	39.9
Total	178	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.

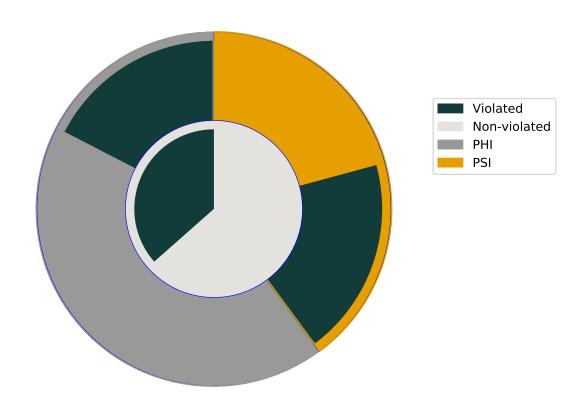
Angle name	Count	$\%^1$	$\%^2$
PHI	31	29.0	47.7
PSI	34	47.9	52.3



Angle name	Count	$\%^1$	$\%^2$
Total	65	36.5	100.0

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

9.2.1 Pie chart : Dihedral angle violations



9.3 Consistent dihedral angle violations

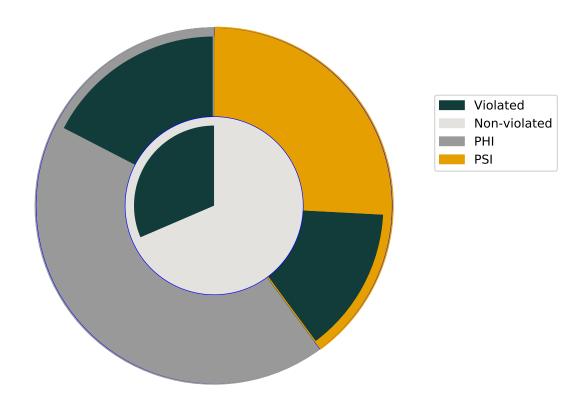
The following table provides the summary of consistently violated restraints. Restraints that are violated all models are counted as violated.

Angle name	Count	$\%^1$	$\%^2$
PHI	31	29.0	55.4
PSI	25	35.2	44.6
Total	56	31.5	100.0

 $^{^{1}}$ percentage of violated restraints in that particular agnle 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)	No. of violated restraints per model	$ \text{Max violation } (\circ) $
0.0-5.0	7.5	4.89
5.0-10.0	2.3	9.84
10.0-20.0	5.5	19.78
20.0-40.0	7.4	39.97
40.0-80.0	22.7	79.42
80.0<	16.3	144.85

9.5 Dihedral angle violations in the ensemble

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

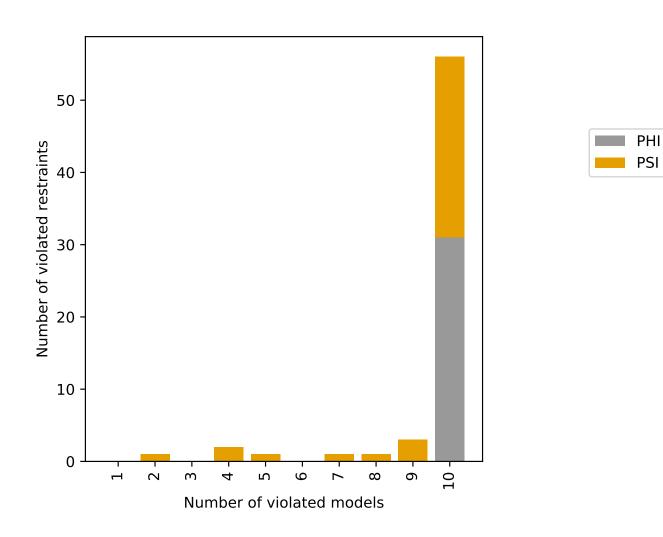
No.	of vio	olated restraints	No. of violated models
РНІ	PHI PSI Total		No. of violated models
0	0	0	1



Continued from previous page...

No.	of vic	olated restraints	No. of violated models		
PHI	PSI	Total	No. of violated models		
0	1	1	2		
0	0	0	3		
0	2	2	4		
0	1	1	5		
0	0	0	6		
0	1	1	7		
0	1	1	8		
0	3	3	9		
31	25	56	10		

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



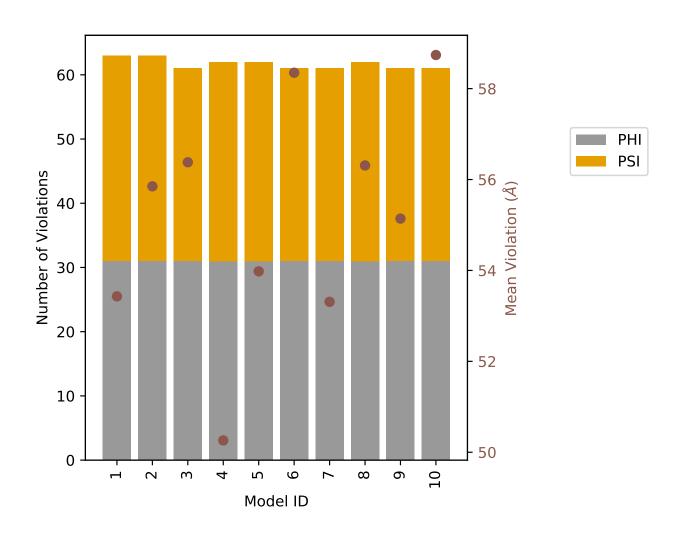


9.6 Violations in each model

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

Model ID	No.	of vic	olations	Mean (Å)	Max (Å)	
Model 1D	PHI	PSI	Total	Mean (A)	Max (A)	
1	31	32	63	53.43	141.04	
2	31	32	63	55.85	122.65	
3	31	30	61	56.38	144.85	
4	31	31	62	50.26	140.68	
5	31	31	62	53.98	133.68	
6	31	30	61	58.35	143.17	
7	31	30	61	53.31	130.2	
8	31	31	62	56.31	144.78	
9	31	30	61	55.14	139.75	
10	31	30	61	58.74	134.0	

9.6.1 Bar graph: Violations in each model

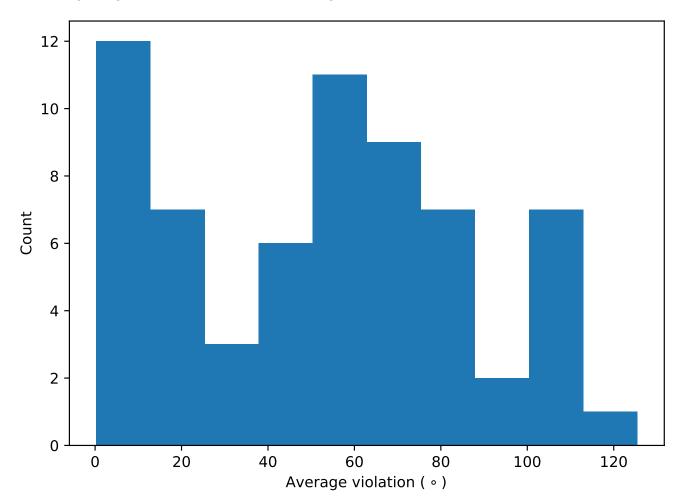




9.7 Most violated dihedral angle restraints

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 (°)
(1,98)	1:A:2:LYS:N	1:A:2:LYS:CA	1:A:2:LYS:C	1:A:3:ILE:N	10	108.41	144.85
(1,119)	1:A:38:GLN:N	1:A:38:GLN:CA	1:A:38:GLN:C	1:A:39:PRO:N	10	125.44	144.78
(1,157)	1:A:70:ASN:N	1:A:70:ASN:CA	1:A:70:ASN:C	1:A:71:TRP:N	10	107.37	138.35
(1,151)	1:A:66:GLU:N	1:A:66:GLU:CA	1:A:66:GLU:C	1:A:67:ASN:N	10	80.19	127.19
(1,114)	1:A:22:SER:N	1:A:22:SER:CA	1:A:22:SER:C	1:A:23:ARG:N	9	78.62	126.2
(1,141)	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	1:A:58:MET:N	10	100.49	117.14
(1,135)	1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CA	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	10	112.49	116.81
(1,178)	1:A:86:HIS:N	1:A:86:HIS:CA	1:A:86:HIS:C	1:A:87:HIS:N	10	82.59	113.81
(1,102)	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	1:A:7:SER:N	10	74.64	105.9
(1,115)	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	10	74.75	94.24



Key	ed from previous p Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models	Mean (o)	Max (∘)
(1,100)	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	10	71.49	91.65
(1,143)	1:A:60:PHE:N	1:A:60:PHE:CA	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	10	74.14	80.51
(1,108)	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	10	46.47	79.42
(1,117)	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	1:A:31:TYR:N	10	58.55	77.5
(1,145)	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	1:A:62:SER:N	10	67.74	77.04
(1,104)	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	10	50.04	75.19
(1,106)	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	10	62.24	75.06
(1,149)	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	1:A:65:LYS:N	10	61.42	74.85
(1,133)	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	1:A:52:LYS:N	7	68.78	74.06
(1,139)	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	10	60.57	68.9
(1,112)	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	1:A:19:LEU:N	10	50.99	66.5
(1,131)	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	1:A:49:GLU:N	10	52.75	61.11
(1,147)	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	10	28.1	34.06
(1,110)	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	10	19.75	28.58
(1,137)	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	10	18.25	24.74
(1,129)	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	1:A:47:LYS:N	8	1.77	4.89
(1,54)	1:A:53:SER:N	1:A:53:SER:CA	1:A:53:SER:C	1:A:54:ILE:N	2	1.79	3.06
(1,161)	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	10	1.48	2.63
(1,163)	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	10	1.16	2.27
(1,159)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	9	1.17	2.15
(1,174)	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	9	1.62	2.07
(1,155)	1:A:68:ASP:N	1:A:68:ASP:CA	1:A:68:ASP:C	1:A:69:ALA:N	5	0.97	1.33
(1,168)	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	1:A:78:VAL:N	4	0.52	1.31
(1,166)	1:A:76:PRO:N	1:A:76:PRO:CA	1:A:76:PRO:C	1:A:77:LYS:N	4	0.31	0.56
(1,35)	1:A:33:LYS:C	1:A:34:VAL:N	1:A:34:VAL:CA	1:A:34:VAL:C	10	110.73	134.85
(1,96)	1:A:84:LEU:C	1:A:85:GLU:N	1:A:85:GLU:CA	1:A:85:GLU:C	10	77.37	109.58
(1,22)	1:A:22:SER:C	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	10	57.3	109.25
(1,25)	1:A:26:MET:C	1:A:27:THR:N	1:A:27:THR:CA	1:A:27:THR:C	10	61.41	106.41
(1,95)	1:A:83:GLU:C	1:A:84:LEU:N	1:A:84:LEU:CA	1:A:84:LEU:C	10	59.99	106.01
(1,3)	1:A:4:ILE:C	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	10	19.88	105.22
(1,49)	1:A:47:LYS:C	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	10	102.5	104.61
(1,19)	1:A:19:LEU:C	1:A:20:SER:N	1:A:20:SER:CA	1:A:20:SER:C	10	17.43	103.35
(1,51)	1:A:50:GLY:C	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	10	100.62	102.34
(1,99)	1:A:4:ILE:C	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	10	88.08	96.86
(1,148)	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	10	89.83	95.55
(1,107)	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	10	82.44	90.95
(1,109)	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	10	81.9	87.26
(1,111)	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	10	83.56	85.51
(1,101)	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	10	72.53	78.41
(1,138)	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	10	72.26	76.36
(1,144)	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	10	68.49	75.16
(1,23)	1:A:23:ARG:C	1:A:24:GLU:N	1:A:24:GLU:CA	1:A:24:GLU:C	10	57.23	72.44
(1,62)	1:A:57:VAL:C	1:A:58:MET:N	1:A:58:MET:CA	1:A:58:MET:C	10	59.41	72.04
(1,142)	1:A:59:ASP:C	1:A:60:PHE:N	1:A:60:PHE:CA	1:A:60:PHE:C	10	40.5	59.53
(1,97)	1:A:1:MET:C	1:A:2:LYS:N	1:A:2:LYS:CA	1:A:2:LYS:C	10	36.82	58.79
(1,136)	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	10	46.92	57.51
(1,140)	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	10	48.11	50.0
(1,146)	1:A:62:SER:C	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	10	41.0	45.69
(1,70)	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	10	31.03	39.1
(1,50)	1:A:48:VAL:C	1:A:49:GLU:N	1:A:49:GLU:CA	1:A:49:GLU:C	10	23.49	28.08
(1,27)	1:A:28:SER:C	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	10	21.07	25.99

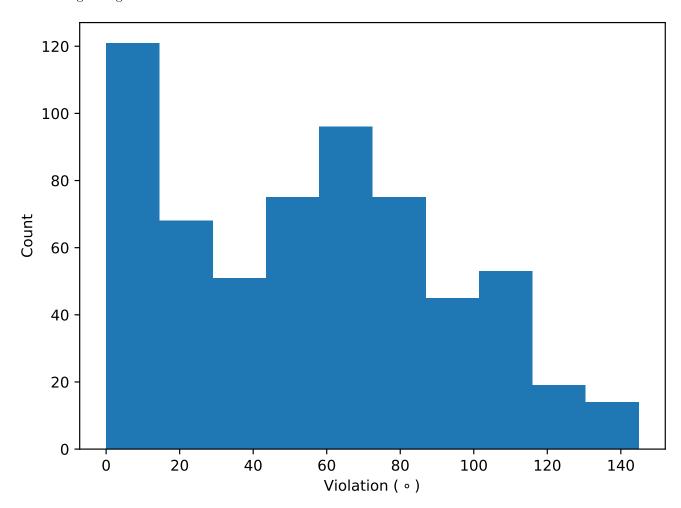


Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models	$\mathbf{Mean} \; (\; \circ \;)$	$\mathbf{Max} \; (\circ)$
(1,92)	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	1:A:81:VAL:CA	1:A:81:VAL:C	10	16.55	21.77
(1,53)	1:A:52:LYS:C	1:A:53:SER:N	1:A:53:SER:CA	1:A:53:SER:C	10	8.01	18.81
(1,38)	1:A:40:ALA:C	1:A:41:PHE:N	1:A:41:PHE:CA	1:A:41:PHE:C	10	10.5	12.31
(1,164)	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	10	1.02	1.95

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	$Violation (\circ)$
(1,98)	1:A:2:LYS:N	1:A:2:LYS:CA	1:A:2:LYS:C	1:A:3:ILE:N	3	144.85
(1,119)	1:A:38:GLN:N	1:A:38:GLN:CA	1:A:38:GLN:C	1:A:39:PRO:N	8	144.78



Key	Violation (\circ) 143.17 141.04 140.68 140.53 139.75 138.35 134.85 134.8 132.68 131.57 131.19 130.2 127.74 127.37 127.19 126.29 126.2 125.48 125.21 122.76 122.65
(1,119) 1:A:38:GLN:N 1:A:38:GLN:CA 1:A:38:GLN:C 1:A:39:PRO:N 1 (1,98) 1:A:2:LYS:N 1:A:2:LYS:CA 1:A:2:LYS:C 1:A:3:ILE:N 4 (1,98) 1:A:2:LYS:N 1:A:2:LYS:CA 1:A:2:LYS:C 1:A:3:ILE:N 6 (1,198) 1:A:2:LYS:N 1:A:2:LYS:CA 1:A:2:LYS:C 1:A:3:ILE:N 9 (1,157) 1:A:70:ASN:N 1:A:70:ASN:CA 1:A:70:ASN:C 1:A:3:ILE:N 9 (1,157) 1:A:33:LYS:C 1:A:34:VAL:N 1:A:34:VAL:CA 1:A:34:VAL:C 6 (1,98) 1:A:2:LYS:N 1:A:2:LYS:CA 1:A:34:VAL:CA 1:A:34:VAL:C 6 (1,98) 1:A:3:IYS:C 1:A:34:VAL:N 1:A:34:VAL:CA 1:A:34:VAL:C 5 (1,35) 1:A:33:LYS:C 1:A:34:VAL:N 1:A:34:VAL:CA 1:A:34:VAL:C 9 (1,35) 1:A:33:LYS:C 1:A:34:VAL:N 1:A:34:VAL:CA 1:A:34:VAL:C 1 (1,157) 1:A:70:ASN:N 1:A:70:ASN:CA 1:A:70:ASN:C 1:A:71:TRP:N 5 (1,157)	141.04 140.68 140.68 140.53 139.75 138.35 134.85 134.0 133.68 132.68 131.57 131.19 130.2 127.74 127.37 127.19 126.29 126.2 125.48 125.21 122.76
(1,98) 1:A:2:LYS:N 1:A:2:LYS:CA 1:A:2:LYS:C 1:A:3:ILE:N 4 (1,98) 1:A:2:LYS:N 1:A:2:LYS:CA 1:A:2:LYS:C 1:A:3:ILE:N 6 (1,98) 1:A:2:LYS:N 1:A:2:LYS:CA 1:A:2:LYS:C 1:A:3:ILE:N 6 (1,98) 1:A:2:LYS:N 1:A:2:LYS:CA 1:A:2:LYS:C 1:A:3:ILE:N 9 (1,157) 1:A:70:ASN:N 1:A:70:ASN:CA 1:A:70:ASN:C 1:A:71:TRP:N 1 (1,35) 1:A:33:LYS:C 1:A:34:VAL:N 1:A:34:VAL:CA 1:A:34:VAL:C 6 (1,98) 1:A:2:LYS:N 1:A:2:LYS:CA 1:A:2:LYS:C 1:A:34:VAL:C 5 (1,35) 1:A:33:LYS:C 1:A:34:VAL:N 1:A:34:VAL:CA 1:A:34:VAL:C 5 (1,35) 1:A:33:LYS:C 1:A:34:VAL:N 1:A:34:VAL:CA 1:A:34:VAL:C 9 (1,35) 1:A:33:LYS:C 1:A:34:VAL:N 1:A:34:VAL:CA 1:A:34:VAL:C 9 (1,35) 1:A:33:LYS:C 1:A:34:VAL:N 1:A:34:VAL:CA 1:A:34:VAL:C 9 (1,35) 1:A:33:LYS:C 1:A:34:VAL:N 1:A:34:VAL:CA 1:A:34:VAL:C 7 (1,157) 1:A:70:ASN:N 1:A:70:ASN:CA 1:A:70:ASN:C 1:A:71:TRP:N 4 (1,157) 1:A:70:ASN:N 1:A:70:ASN:CA 1:A:70:ASN:C 1:A:71:TRP:N 5 (1,157) 1:A:70:ASN:N 1:A:70:ASN:CA 1:A:70:ASN:C 1:A:71:TRP:N 5 (1,157) 1:A:70:ASN:N 1:A:70:ASN:CA 1:A:70:ASN:C 1:A:71:TRP:N 10 (1,151) 1:A:66:GLU:N 1:A:66:GLU:CA 1:A:34:VAL:CA 1:A:34:VAL:C 3 (1,151) 1:A:66:GLU:N 1:A:66:GLU:CA 1:A:34:VAL:CA 1:A:34:VAL:C 3 (1,114) 1:A:22:SER:N 1:A:22:SER:CA 1:A:22:SER:C 1:A:23:ARG:N 7 (1,151) 1:A:66:GLU:N 1:A:66:GLU:CA 1:A:66:GLU:C 1:A:67:ASN:N 8 (1,119) 1:A:38:GLN:N 1:A:38:GLN:CA 1:A:38:GLN:C 1:A:39:PRO:N 3 (1,119) 1:A:38:GLN:N 1:A:38:GLN:CA 1:A:38:GLN:C 1:A:39:PRO:N 3 (1,119) 1:A:38:GLN:N 1:A:38:GLN:CA 1:A:38:GLN:C 1:A:39:PRO:N 2 (1,119) 1:A:38:GLN:N 1:A:38:GLN:CA 1:A:38:GLN:C 1:A:39:PRO:N 10 (1,157) 1:A:70:ASN:N 1:A:38:GLN:CA 1:A:38:GLN:C 1:A:39:PRO:N 10 (1,157) 1:A:38:GLN:N 1:A:38:GLN:CA 1:A:38:GLN:C 1:A:39:PRO:N 10 (1,135) 1:A:38:GLN:N 1:A:38:GLN:CA 1:A:38:GLN:C 1:A:39:PRO:N 10 (1,135) 1:A:38:GLN:N 1:A:38:GLN:CA 1:A:38:GLN:C	140.68 140.53 139.75 138.35 134.85 134.0 133.68 132.68 131.57 131.19 130.2 127.74 127.37 127.19 126.29 126.2 125.48 125.21 122.76
(1,98) 1:A:2:LYS:N 1:A:2:LYS:CA 1:A:2:LYS:C 1:A:3:ILE:N 6 (1,98) 1:A:2:LYS:N 1:A:2:LYS:CA 1:A:2:LYS:C 1:A:3:ILE:N 9 (1,157) 1:A:70:ASN:N 1:A:70:ASN:CA 1:A:70:ASN:C 1:A:3:ILE:N 1 (1,35) 1:A:33:LYS:C 1:A:34:VAL:N 1:A:34:VAL:CA 1:A:34:VAL:C 6 (1,98) 1:A:2:LYS:N 1:A:34:VAL:N 1:A:34:VAL:CA 1:A:34:VAL:C 6 (1,35) 1:A:33:LYS:C 1:A:34:VAL:N 1:A:34:VAL:CA 1:A:34:VAL:C 5 (1,35) 1:A:33:LYS:C 1:A:34:VAL:N 1:A:34:VAL:CA 1:A:34:VAL:C 9 (1,35) 1:A:33:LYS:C 1:A:34:VAL:N 1:A:34:VAL:CA 1:A:34:VAL:C 9 (1,35) 1:A:33:LYS:C 1:A:34:VAL:N 1:A:34:VAL:CA 1:A:34:VAL:C 1 (1,157) 1:A:70:ASN:N 1:A:70:ASN:CA 1:A:70:ASN:C 1:A:71:TRP:N 4 (1,157) 1:A:70:ASN:N 1:A:70:ASN:CA 1:A:70:ASN:C 1:A:71:TRP:N 5 (1,157)	140.53 139.75 138.35 134.85 134.0 133.68 132.68 131.57 131.19 130.2 127.74 127.37 127.19 126.29 126.2 125.48 125.21 122.76
(1,98) 1:A:2:LYS:N 1:A:2:LYS:CA 1:A:2:LYS:C 1:A:3:ILE:N 9 (1,157) 1:A:70:ASN:N 1:A:70:ASN:CA 1:A:70:ASN:C 1:A:71:TRP:N 1 (1,35) 1:A:33:LYS:C 1:A:34:VAL:N 1:A:34:VAL:CA 1:A:34:VAL:C 6 (1,98) 1:A:2:LYS:C 1:A:34:VAL:N 1:A:34:VAL:CA 1:A:34:VAL:C 6 (1,35) 1:A:33:LYS:C 1:A:34:VAL:N 1:A:34:VAL:CA 1:A:34:VAL:C 5 (1,35) 1:A:33:LYS:C 1:A:34:VAL:N 1:A:34:VAL:CA 1:A:34:VAL:C 9 (1,35) 1:A:33:LYS:C 1:A:34:VAL:N 1:A:34:VAL:CA 1:A:34:VAL:C 9 (1,35) 1:A:33:LYS:C 1:A:34:VAL:N 1:A:34:VAL:CA 1:A:71:TRP:N 4 (1,35) 1:A:33:LYS:C 1:A:34:VAL:N 1:A:34:VAL:CA 1:A:71:TRP:N 4 (1,35) 1:A:70:ASN:N 1:A:70:ASN:CA 1:A:70:ASN:C 1:A:71:TRP:N 4 (1,35) 1:A:33:LYS:C 1:A:34:VAL:N 1:A:34:VAL:CA 1:A:71:TRP:N 5 (1,157)	139.75 138.35 134.85 134.0 133.68 132.68 131.57 131.19 130.2 127.74 127.37 127.19 126.29 126.2 125.48 125.21 122.76
(1,157) 1:A:70:ASN:N 1:A:70:ASN:CA 1:A:70:ASN:C 1:A:71:TRP:N 1 (1,35) 1:A:33:LYS:C 1:A:34:VAL:N 1:A:34:VAL:CA 1:A:34:VAL:C 6 (1,98) 1:A:2:LYS:N 1:A:2:LYS:CA 1:A:34:VAL:CA 1:A:3:ILE:N 10 (1,35) 1:A:33:LYS:C 1:A:34:VAL:N 1:A:34:VAL:CA 1:A:34:VAL:C 5 (1,35) 1:A:33:LYS:C 1:A:34:VAL:N 1:A:34:VAL:CA 1:A:34:VAL:C 9 (1,35) 1:A:70:ASN:N 1:A:70:ASN:CA 1:A:70:ASN:C 1:A:70:ASN:CA 1:A:70:ASN:C 1:A:70:ASN:CA 1:A:70:ASN:C 1:A:70:ASN:CA 1:A:70:ASN:C 1:A:70:ASN:CA 1:A:70:ASN:C 1:A:71:TRP:N 4 (1,157) 1:A:70:ASN:N 1:A:70:ASN:CA 1:A:70:ASN:C 1:A:71:TRP:N 5 (1,157) 1:A:70:ASN:N 1:A:70:ASN:CA 1:A:70:ASN:C 1:A:71:TRP:N 5 (1,157) 1:A:70:ASN:N 1:A:34:VAL:N 1:A:34:VAL:CA 1:A:37:TRP:N 10 (1,151) 1:A:66:GLU:N 1:A:66:GLU:CA 1:A:66:GLU:C 1:A:76:ASN:N	138.35 134.85 134.0 133.68 132.68 131.57 131.19 130.2 127.74 127.37 127.19 126.29 126.2 125.48 125.21 122.76
(1,35) 1:A:33:LYS:C 1:A:34:VAL:N 1:A:34:VAL:CA 1:A:34:VAL:C 6 (1,98) 1:A:2:LYS:N 1:A:2:LYS:CA 1:A:2:LYS:C 1:A:3:ILE:N 10 (1,35) 1:A:33:LYS:C 1:A:34:VAL:N 1:A:34:VAL:CA 1:A:34:VAL:C 5 (1,35) 1:A:33:LYS:C 1:A:34:VAL:N 1:A:34:VAL:CA 1:A:34:VAL:C 9 (1,35) 1:A:33:LYS:C 1:A:34:VAL:N 1:A:70:ASN:CA 1:A:71:TRP:N 4 (1,57) 1:A:70:ASN:N 1:A:70:ASN:CA 1:A:70:ASN:C 1:A:71:TRP:N 4 (1,35) 1:A:70:ASN:N 1:A:70:ASN:CA 1:A:70:ASN:C 1:A:71:TRP:N 4 (1,35) 1:A:70:ASN:N 1:A:70:ASN:CA 1:A:70:ASN:C 1:A:71:TRP:N 5 (1,157) 1:A:70:ASN:N 1:A:70:ASN:CA 1:A:70:ASN:C 1:A:71:TRP:N 5 (1,157) 1:A:70:ASN:N 1:A:70:ASN:CA 1:A:70:ASN:C 1:A:71:TRP:N 10 (1,151) 1:A:66:GLU:N 1:A:66:GLU:CA 1:A:66:GLU:C 1:A:67:ASN:N 8 (1,35) <td>134.85 134.0 133.68 132.68 131.57 131.19 130.2 127.74 127.37 127.19 126.29 126.2 125.48 125.21 122.76</td>	134.85 134.0 133.68 132.68 131.57 131.19 130.2 127.74 127.37 127.19 126.29 126.2 125.48 125.21 122.76
(1,98) 1:A:2:LYS:N 1:A:2:LYS:CA 1:A:2:LYS:C 1:A:3:ILE:N 10 (1,35) 1:A:33:LYS:C 1:A:34:VAL:N 1:A:34:VAL:CA 1:A:34:VAL:C 5 (1,35) 1:A:33:LYS:C 1:A:34:VAL:N 1:A:34:VAL:CA 1:A:34:VAL:C 9 (1,35) 1:A:33:LYS:C 1:A:34:VAL:N 1:A:34:VAL:CA 1:A:34:VAL:C 1 (1,157) 1:A:70:ASN:N 1:A:70:ASN:CA 1:A:70:ASN:C 1:A:71:TRP:N 4 (1,35) 1:A:33:LYS:C 1:A:34:VAL:N 1:A:34:VAL:CA 1:A:71:TRP:N 4 (1,35) 1:A:70:ASN:N 1:A:70:ASN:CA 1:A:70:ASN:C 1:A:71:TRP:N 4 (1,35) 1:A:70:ASN:N 1:A:70:ASN:CA 1:A:70:ASN:C 1:A:71:TRP:N 5 (1,157) 1:A:70:ASN:N 1:A:70:ASN:CA 1:A:34:VAL:CA 1:A:34:VAL:C 7 (1,151) 1:A:66:GLU:N 1:A:66:GLU:CA 1:A:34:VAL:CA 1:A:34:VAL:C 3 (1,141) 1:A:22:SER:N 1:A:22:SER:CA 1:A:22:SER:C 1:A:34:VAL:CA 3 (1,151	134.0 133.68 132.68 131.57 131.19 130.2 127.74 127.37 127.19 126.29 126.2 125.48 125.21 122.76
(1,35) 1:A:33:LYS:C 1:A:34:VAL:N 1:A:34:VAL:CA 1:A:34:VAL:C 5 (1,35) 1:A:33:LYS:C 1:A:34:VAL:N 1:A:34:VAL:CA 1:A:34:VAL:C 9 (1,35) 1:A:33:LYS:C 1:A:34:VAL:N 1:A:34:VAL:CA 1:A:34:VAL:C 1 (1,157) 1:A:70:ASN:N 1:A:70:ASN:CA 1:A:70:ASN:C 1:A:71:TRP:N 4 (1,35) 1:A:33:LYS:C 1:A:34:VAL:N 1:A:34:VAL:CA 1:A:71:TRP:N 4 (1,35) 1:A:70:ASN:N 1:A:70:ASN:CA 1:A:70:ASN:C 1:A:71:TRP:N 5 (1,157) 1:A:70:ASN:N 1:A:70:ASN:CA 1:A:70:ASN:C 1:A:71:TRP:N 5 (1,157) 1:A:70:ASN:N 1:A:70:ASN:CA 1:A:70:ASN:C 1:A:71:TRP:N 5 (1,157) 1:A:70:ASN:N 1:A:70:ASN:CA 1:A:70:ASN:C 1:A:71:TRP:N 10 (1,151) 1:A:66:GLU:N 1:A:66:GLU:CA 1:A:66:GLU:C 1:A:34:VAL:C 3 (1,141) 1:A:22:SER:N 1:A:22:SER:CA 1:A:22:SER:C 1:A:33:LE:N 7 (1,1	133.68 132.68 131.57 131.19 130.2 127.74 127.37 127.19 126.29 126.2 125.48 125.21 122.76
(1,35) 1:A:33:LYS:C 1:A:34:VAL:N 1:A:34:VAL:CA 1:A:34:VAL:C 9 (1,35) 1:A:33:LYS:C 1:A:34:VAL:N 1:A:34:VAL:CA 1:A:34:VAL:C 1 (1,157) 1:A:70:ASN:N 1:A:70:ASN:CA 1:A:70:ASN:C 1:A:71:TRP:N 4 (1,35) 1:A:33:LYS:C 1:A:34:VAL:N 1:A:34:VAL:CA 1:A:34:VAL:C 7 (1,157) 1:A:70:ASN:N 1:A:70:ASN:CA 1:A:70:ASN:C 1:A:71:TRP:N 5 (1,157) 1:A:70:ASN:N 1:A:70:ASN:CA 1:A:70:ASN:C 1:A:71:TRP:N 10 (1,157) 1:A:70:ASN:N 1:A:66:GLU:CA 1:A:66:GLU:C 1:A:67:ASN:N 8 (1,35) 1:A:33:LYS:C 1:A:34:VAL:N 1:A:34:VAL:CA 1:A:34:VAL:C 3 (1,35) 1:A:33:LYS:C 1:A:34:VAL:N 1:A:34:VAL:CA 1:A:34:VAL:C 3 (1,35) 1:A:33:LYS:C 1:A:34:VAL:N 1:A:34:VAL:CA 1:A:34:VAL:C 3 (1,141) 1:A:22:SER:N 1:A:32:SER:CA 1:A:33:VAL:CA 1:A:33:ARG:N 7 (1,	132.68 131.57 131.19 130.2 127.74 127.37 127.19 126.29 126.2 125.48 125.21 122.76
(1,35) 1:A:33:LYS:C 1:A:34:VAL:N 1:A:34:VAL:CA 1:A:34:VAL:C 1 (1,157) 1:A:70:ASN:N 1:A:70:ASN:CA 1:A:70:ASN:C 1:A:71:TRP:N 4 (1,35) 1:A:33:LYS:C 1:A:34:VAL:N 1:A:34:VAL:CA 1:A:34:VAL:C 7 (1,157) 1:A:70:ASN:N 1:A:70:ASN:CA 1:A:70:ASN:C 1:A:71:TRP:N 5 (1,157) 1:A:66:GLU:N 1:A:66:GLU:CA 1:A:66:GLU:C 1:A:71:TRP:N 10 (1,151) 1:A:66:GLU:N 1:A:66:GLU:CA 1:A:66:GLU:C 1:A:67:ASN:N 8 (1,35) 1:A:33:LYS:C 1:A:34:VAL:N 1:A:34:VAL:CA 1:A:34:VAL:C 3 (1,114) 1:A:22:SER:N 1:A:22:SER:CA 1:A:22:SER:C 1:A:32:ARG:N 7 (1,151) 1:A:66:GLU:N 1:A:66:GLU:CA 1:A:66:GLU:C 1:A:67:ASN:N 6 (1,98) 1:A:2:LYS:N 1:A:2:LYS:CA 1:A:2:LYS:C 1:A:33:ILE:N 5 (1,119) 1:A:38:GLN:N 1:A:38:GLN:CA 1:A:38:GLN:C 1:A:39:PRO:N 2 (1,11	131.57 131.19 130.2 127.74 127.37 127.19 126.29 126.2 125.48 125.21 122.76
(1,157) 1:A:70:ASN:N 1:A:70:ASN:CA 1:A:70:ASN:C 1:A:71:TRP:N 4 (1,35) 1:A:33:LYS:C 1:A:34:VAL:N 1:A:34:VAL:CA 1:A:34:VAL:C 7 (1,157) 1:A:70:ASN:N 1:A:70:ASN:CA 1:A:70:ASN:C 1:A:71:TRP:N 5 (1,157) 1:A:70:ASN:N 1:A:70:ASN:CA 1:A:70:ASN:C 1:A:71:TRP:N 10 (1,157) 1:A:70:ASN:N 1:A:70:ASN:CA 1:A:70:ASN:C 1:A:71:TRP:N 10 (1,157) 1:A:70:ASN:N 1:A:70:ASN:CA 1:A:70:ASN:C 1:A:71:TRP:N 10 (1,157) 1:A:66:GLU:N 1:A:66:GLU:CA 1:A:66:GLU:C 1:A:67:ASN:N 8 (1,141) 1:A:22:SER:N 1:A:22:SER:CA 1:A:22:SER:C 1:A:33:ILE:N 5 (1,198) 1:A:2:LYS:N 1:A:22:LYS:CA 1:A:38:GLN:C 1:A:39:PRO:N 3 (1,119) 1:A:38:GLN:N 1:A:38:GLN:CA 1:A:38:GLN:C 1:A:39:PRO:N 2 (1,114) 1:A:22:SER:N 1:A:22:SER:CA 1:A:22:SER:C 1:A:39:PRO:N 2 <t< td=""><td>131.19 130.2 127.74 127.37 127.19 126.29 126.2 125.48 125.21 122.76</td></t<>	131.19 130.2 127.74 127.37 127.19 126.29 126.2 125.48 125.21 122.76
(1,35) 1:A:33:LYS:C 1:A:34:VAL:N 1:A:34:VAL:CA 1:A:34:VAL:C 7 (1,157) 1:A:70:ASN:N 1:A:70:ASN:CA 1:A:70:ASN:C 1:A:71:TRP:N 5 (1,157) 1:A:70:ASN:N 1:A:70:ASN:CA 1:A:70:ASN:C 1:A:71:TRP:N 10 (1,151) 1:A:66:GLU:N 1:A:66:GLU:CA 1:A:66:GLU:C 1:A:67:ASN:N 8 (1,35) 1:A:33:LYS:C 1:A:34:VAL:N 1:A:34:VAL:CA 1:A:34:VAL:C 3 (1,14) 1:A:22:SER:N 1:A:22:SER:CA 1:A:22:SER:C 1:A:34:VAL:C 3 (1,141) 1:A:22:SER:N 1:A:22:SER:CA 1:A:22:SER:C 1:A:23:ARG:N 7 (1,151) 1:A:66:GLU:N 1:A:66:GLU:CA 1:A:66:GLU:C 1:A:31:LE:N 5 (1,151) 1:A:66:GLU:N 1:A:66:GLU:CA 1:A:66:GLU:C 1:A:31:LE:N 5 (1,151) 1:A:66:GLU:N 1:A:66:GLU:CA 1:A:66:GLU:C 1:A:31:LE:N 5 (1,19) 1:A:38:GLN:N 1:A:38:GLN:CA 1:A:38:GLN:C 1:A:39:PRO:N 3 (1,11	130.2 127.74 127.37 127.19 126.29 126.2 125.48 125.21 122.76
(1,157) 1:A:70:ASN:N 1:A:70:ASN:CA 1:A:70:ASN:C 1:A:71:TRP:N 5 (1,157) 1:A:70:ASN:N 1:A:70:ASN:CA 1:A:70:ASN:C 1:A:71:TRP:N 10 (1,151) 1:A:66:GLU:N 1:A:66:GLU:CA 1:A:66:GLU:C 1:A:67:ASN:N 8 (1,35) 1:A:33:YS:C 1:A:34:VAL:N 1:A:34:VAL:CA 1:A:34:VAL:C 3 (1,114) 1:A:22:SER:N 1:A:22:SER:CA 1:A:22:SER:C 1:A:23:ARG:N 7 (1,151) 1:A:66:GLU:N 1:A:66:GLU:CA 1:A:66:GLU:C 1:A:67:ASN:N 6 (1,98) 1:A:2:LYS:N 1:A:2:LYS:CA 1:A:2:LYS:C 1:A:31LE:N 5 (1,119) 1:A:38:GLN:N 1:A:38:GLN:CA 1:A:38:GLN:C 1:A:39:PRO:N 3 (1,119) 1:A:38:GLN:N 1:A:422:SER:CA 1:A:22:SER:C 1:A:39:PRO:N 2 (1,114) 1:A:57:VAL:N 1:A:70:ASN:CA 1:A:70:ASN:C 1:A:71:TRP:N 2 (1,119) 1:A:38:GLN:N 1:A:38:GLN:CA 1:A:38:GLN:C 1:A:39:PRO:N 10 (1,1	127.74 127.37 127.19 126.29 126.2 125.48 125.21 122.76
(1,157) 1:A:70:ASN:N 1:A:70:ASN:CA 1:A:70:ASN:C 1:A:71:TRP:N 10 (1,151) 1:A:66:GLU:N 1:A:66:GLU:CA 1:A:66:GLU:C 1:A:67:ASN:N 8 (1,35) 1:A:33:LYS:C 1:A:34:VAL:N 1:A:34:VAL:CA 1:A:34:VAL:C 3 (1,114) 1:A:22:SER:N 1:A:22:SER:CA 1:A:22:SER:C 1:A:23:ARG:N 7 (1,151) 1:A:66:GLU:N 1:A:66:GLU:CA 1:A:66:GLU:C 1:A:67:ASN:N 6 (1,98) 1:A:2:LYS:N 1:A:2:LYS:CA 1:A:2:LYS:C 1:A:3:ILE:N 5 (1,119) 1:A:38:GLN:N 1:A:38:GLN:CA 1:A:38:GLN:C 1:A:39:PRO:N 3 (1,119) 1:A:38:GLN:N 1:A:38:GLN:CA 1:A:38:GLN:C 1:A:39:PRO:N 2 (1,114) 1:A:57:VAL:N 1:A:57:VAL:CA 1:A:57:VAL:C 1:A:58:MET:N 10 (1,157) 1:A:70:ASN:N 1:A:70:ASN:CA 1:A:70:ASN:C 1:A:71:TRP:N 2 (1,119) 1:A:38:GLN:N 1:A:38:GLN:CA 1:A:38:GLN:C 1:A:39:PRO:N 10 (1	127.37 127.19 126.29 126.2 125.48 125.21 122.76
(1,151) 1:A:66:GLU:N 1:A:66:GLU:CA 1:A:66:GLU:C 1:A:67:ASN:N 8 (1,35) 1:A:33:LYS:C 1:A:34:VAL:N 1:A:34:VAL:CA 1:A:34:VAL:C 3 (1,114) 1:A:22:SER:N 1:A:22:SER:CA 1:A:22:SER:C 1:A:23:ARG:N 7 (1,151) 1:A:66:GLU:N 1:A:66:GLU:CA 1:A:66:GLU:C 1:A:67:ASN:N 6 (1,98) 1:A:2:LYS:N 1:A:2:LYS:CA 1:A:2:LYS:C 1:A:3:ILE:N 5 (1,119) 1:A:38:GLN:N 1:A:38:GLN:CA 1:A:38:GLN:C 1:A:39:PRO:N 3 (1,119) 1:A:38:GLN:N 1:A:22:SER:CA 1:A:22:SER:C 1:A:39:PRO:N 2 (1,114) 1:A:57:VAL:N 1:A:57:VAL:CA 1:A:57:VAL:C 1:A:58:MET:N 10 (1,157) 1:A:70:ASN:N 1:A:70:ASN:CA 1:A:70:ASN:C 1:A:71:TRP:N 2 (1,119) 1:A:38:GLN:N 1:A:38:GLN:CA 1:A:38:GLN:C 1:A:39:PRO:N 10 (1,135) 1:A:54:ILE:N 1:A:38:GLN:CA 1:A:38:GLN:C 1:A:39:PRO:N 7 (1,	127.19 126.29 126.2 125.48 125.21 122.76
(1,35) 1:A:33:LYS:C 1:A:34:VAL:N 1:A:34:VAL:CA 1:A:34:VAL:C 3 (1,114) 1:A:22:SER:N 1:A:22:SER:CA 1:A:22:SER:C 1:A:23:ARG:N 7 (1,151) 1:A:66:GLU:N 1:A:66:GLU:CA 1:A:66:GLU:C 1:A:67:ASN:N 6 (1,98) 1:A:2:LYS:N 1:A:2:LYS:CA 1:A:2:LYS:C 1:A:3:ILE:N 5 (1,119) 1:A:38:GLN:N 1:A:38:GLN:CA 1:A:38:GLN:C 1:A:39:PRO:N 3 (1,119) 1:A:38:GLN:N 1:A:38:GLN:CA 1:A:38:GLN:C 1:A:39:PRO:N 2 (1,114) 1:A:57:VAL:N 1:A:57:VAL:CA 1:A:57:VAL:C 1:A:58:MET:N 10 (1,157) 1:A:70:ASN:N 1:A:70:ASN:CA 1:A:70:ASN:C 1:A:71:TRP:N 2 (1,119) 1:A:38:GLN:N 1:A:38:GLN:CA 1:A:38:GLN:C 1:A:39:PRO:N 10 (1,135) 1:A:38:GLN:N 1:A:38:GLN:CA 1:A:38:GLN:C 1:A:39:PRO:N 7 (1,98) 1:A:2:LYS:N 1:A:2:LYS:CA 1:A:38:GLN:C 1:A:39:PRO:N 5 (1,119	126.29 126.2 125.48 125.21 122.76
(1,114) 1:A:22:SER:N 1:A:22:SER:CA 1:A:22:SER:C 1:A:23:ARG:N 7 (1,151) 1:A:66:GLU:N 1:A:66:GLU:CA 1:A:66:GLU:C 1:A:67:ASN:N 6 (1,98) 1:A:2:LYS:N 1:A:2:LYS:CA 1:A:2:LYS:C 1:A:3:ILE:N 5 (1,119) 1:A:38:GLN:N 1:A:38:GLN:CA 1:A:38:GLN:C 1:A:39:PRO:N 3 (1,119) 1:A:38:GLN:N 1:A:38:GLN:CA 1:A:38:GLN:C 1:A:39:PRO:N 2 (1,114) 1:A:57:VAL:N 1:A:57:VAL:CA 1:A:57:VAL:C 1:A:58:MET:N 10 (1,141) 1:A:70:ASN:N 1:A:70:ASN:CA 1:A:70:ASN:C 1:A:71:TRP:N 2 (1,119) 1:A:38:GLN:N 1:A:38:GLN:CA 1:A:38:GLN:C 1:A:39:PRO:N 10 (1,135) 1:A:38:GLN:N 1:A:38:GLN:CA 1:A:38:GLN:C 1:A:39:PRO:N 7 (1,98) 1:A:2:LYS:N 1:A:2:LYS:CA 1:A:38:GLN:C 1:A:39:PRO:N 5 (1,119) 1:A:38:GLN:N 1:A:38:GLN:CA 1:A:38:GLN:C 1:A:39:PRO:N 5	126.2 125.48 125.21 122.76
(1,151) 1:A:66:GLU:N 1:A:66:GLU:CA 1:A:66:GLU:C 1:A:67:ASN:N 6 (1,98) 1:A:2:LYS:N 1:A:2:LYS:CA 1:A:2:LYS:C 1:A:3:ILE:N 5 (1,119) 1:A:38:GLN:N 1:A:38:GLN:CA 1:A:38:GLN:C 1:A:39:PRO:N 3 (1,119) 1:A:38:GLN:N 1:A:38:GLN:CA 1:A:38:GLN:C 1:A:39:PRO:N 2 (1,114) 1:A:22:SER:N 1:A:22:SER:CA 1:A:22:SER:C 1:A:23:ARG:N 8 (1,141) 1:A:57:VAL:N 1:A:57:VAL:CA 1:A:57:VAL:C 1:A:58:MET:N 10 (1,157) 1:A:70:ASN:N 1:A:70:ASN:CA 1:A:70:ASN:C 1:A:71:TRP:N 2 (1,119) 1:A:38:GLN:N 1:A:38:GLN:CA 1:A:38:GLN:C 1:A:39:PRO:N 10 (1,119) 1:A:38:GLN:N 1:A:38:GLN:CA 1:A:38:GLN:C 1:A:39:PRO:N 7 (1,98) 1:A:2:LYS:N 1:A:2:LYS:CA 1:A:38:GLN:C 1:A:39:PRO:N 5 (1,119) 1:A:38:GLN:N 1:A:38:GLN:CA 1:A:38:GLN:C 1:A:39:PRO:N 5	125.48 125.21 122.76
(1,98) 1:A:2:LYS:N 1:A:2:LYS:CA 1:A:2:LYS:C 1:A:3:ILE:N 5 (1,119) 1:A:38:GLN:N 1:A:38:GLN:CA 1:A:38:GLN:C 1:A:39:PRO:N 3 (1,119) 1:A:38:GLN:N 1:A:38:GLN:CA 1:A:38:GLN:C 1:A:39:PRO:N 2 (1,114) 1:A:22:SER:N 1:A:22:SER:CA 1:A:22:SER:C 1:A:23:ARG:N 8 (1,141) 1:A:57:VAL:N 1:A:57:VAL:CA 1:A:57:VAL:C 1:A:58:MET:N 10 (1,157) 1:A:70:ASN:N 1:A:70:ASN:CA 1:A:70:ASN:C 1:A:71:TRP:N 2 (1,119) 1:A:38:GLN:N 1:A:38:GLN:CA 1:A:38:GLN:C 1:A:39:PRO:N 10 (1,119) 1:A:38:GLN:N 1:A:38:GLN:CA 1:A:38:GLN:C 1:A:39:PRO:N 7 (1,98) 1:A:2:LYS:N 1:A:2:LYS:CA 1:A:38:GLN:C 1:A:39:PRO:N 5 (1,119) 1:A:38:GLN:N 1:A:38:GLN:CA 1:A:38:GLN:C 1:A:39:PRO:N 5	125.21 122.76
(1,119) 1:A:38:GLN:N 1:A:38:GLN:CA 1:A:38:GLN:C 1:A:39:PRO:N 3 (1,119) 1:A:38:GLN:N 1:A:38:GLN:CA 1:A:38:GLN:C 1:A:39:PRO:N 2 (1,114) 1:A:22:SER:N 1:A:22:SER:CA 1:A:22:SER:C 1:A:23:ARG:N 8 (1,141) 1:A:57:VAL:N 1:A:57:VAL:CA 1:A:57:VAL:C 1:A:58:MET:N 10 (1,157) 1:A:70:ASN:N 1:A:70:ASN:CA 1:A:70:ASN:C 1:A:71:TRP:N 2 (1,119) 1:A:38:GLN:N 1:A:38:GLN:CA 1:A:38:GLN:C 1:A:39:PRO:N 10 (1,119) 1:A:38:GLN:N 1:A:38:GLN:CA 1:A:38:GLN:C 1:A:39:PRO:N 7 (1,98) 1:A:2:LYS:N 1:A:2:LYS:CA 1:A:38:GLN:C 1:A:39:PRO:N 5 (1,119) 1:A:38:GLN:N 1:A:38:GLN:CA 1:A:38:GLN:C 1:A:39:PRO:N 5	122.76
(1,119) 1:A:38:GLN:N 1:A:38:GLN:CA 1:A:38:GLN:C 1:A:39:PRO:N 2 (1,114) 1:A:22:SER:N 1:A:22:SER:CA 1:A:22:SER:C 1:A:23:ARG:N 8 (1,141) 1:A:57:VAL:N 1:A:57:VAL:CA 1:A:57:VAL:C 1:A:58:MET:N 10 (1,157) 1:A:70:ASN:N 1:A:70:ASN:CA 1:A:70:ASN:C 1:A:71:TRP:N 2 (1,119) 1:A:38:GLN:N 1:A:38:GLN:CA 1:A:38:GLN:C 1:A:39:PRO:N 10 (1,119) 1:A:38:GLN:N 1:A:38:GLN:CA 1:A:38:GLN:C 1:A:39:PRO:N 7 (1,98) 1:A:2:LYS:N 1:A:2:LYS:CA 1:A:38:GLN:C 1:A:39:PRO:N 5 (1,119) 1:A:38:GLN:N 1:A:38:GLN:CA 1:A:38:GLN:C 1:A:39:PRO:N 5	
(1,114) 1:A:22:SER:N 1:A:22:SER:CA 1:A:22:SER:C 1:A:23:ARG:N 8 (1,141) 1:A:57:VAL:N 1:A:57:VAL:CA 1:A:57:VAL:C 1:A:58:MET:N 10 (1,157) 1:A:70:ASN:N 1:A:70:ASN:CA 1:A:70:ASN:C 1:A:71:TRP:N 2 (1,119) 1:A:38:GLN:N 1:A:38:GLN:CA 1:A:38:GLN:C 1:A:39:PRO:N 10 (1,119) 1:A:38:GLN:N 1:A:38:GLN:CA 1:A:38:GLN:C 1:A:39:PRO:N 7 (1,98) 1:A:2:LYS:N 1:A:2:LYS:CA 1:A:2:LYS:C 1:A:31:LE:N 8 (1,119) 1:A:38:GLN:N 1:A:38:GLN:CA 1:A:38:GLN:C 1:A:39:PRO:N 5	122.65
(1,141) 1:A:57:VAL:N 1:A:57:VAL:CA 1:A:57:VAL:C 1:A:58:MET:N 10 (1,157) 1:A:70:ASN:N 1:A:70:ASN:CA 1:A:70:ASN:C 1:A:71:TRP:N 2 (1,119) 1:A:38:GLN:N 1:A:38:GLN:CA 1:A:38:GLN:C 1:A:39:PRO:N 10 (1,135) 1:A:54:ILE:N 1:A:54:ILE:CA 1:A:54:ILE:C 1:A:55:PHE:N 4 (1,119) 1:A:38:GLN:N 1:A:38:GLN:CA 1:A:38:GLN:C 1:A:39:PRO:N 7 (1,98) 1:A:38:GLN:N 1:A:38:GLN:CA 1:A:38:GLN:C 1:A:39:PRO:N 5 (1,119) 1:A:38:GLN:N 1:A:38:GLN:CA 1:A:38:GLN:C 1:A:39:PRO:N 5	
(1,157) 1:A:70:ASN:N 1:A:70:ASN:CA 1:A:70:ASN:C 1:A:71:TRP:N 2 (1,119) 1:A:38:GLN:N 1:A:38:GLN:CA 1:A:38:GLN:C 1:A:39:PRO:N 10 (1,135) 1:A:54:ILE:N 1:A:54:ILE:CA 1:A:54:ILE:C 1:A:55:PHE:N 4 (1,119) 1:A:38:GLN:N 1:A:38:GLN:CA 1:A:38:GLN:C 1:A:39:PRO:N 7 (1,98) 1:A:2:LYS:N 1:A:38:GLN:CA 1:A:38:GLN:C 1:A:39:PRO:N 5 (1,119) 1:A:38:GLN:N 1:A:38:GLN:CA 1:A:38:GLN:C 1:A:39:PRO:N 5	120.49
(1,119) 1:A:38:GLN:N 1:A:38:GLN:CA 1:A:38:GLN:C 1:A:39:PRO:N 10 (1,135) 1:A:54:ILE:N 1:A:54:ILE:CA 1:A:54:ILE:C 1:A:55:PHE:N 4 (1,119) 1:A:38:GLN:N 1:A:38:GLN:CA 1:A:38:GLN:C 1:A:39:PRO:N 7 (1,98) 1:A:2:LYS:N 1:A:2:LYS:CA 1:A:38:GLN:C 1:A:31:ILE:N 8 (1,119) 1:A:38:GLN:N 1:A:38:GLN:CA 1:A:38:GLN:C 1:A:39:PRO:N 5	117.14
(1,135) 1:A:54:ILE:N 1:A:54:ILE:CA 1:A:54:ILE:C 1:A:55:PHE:N 4 (1,119) 1:A:38:GLN:N 1:A:38:GLN:CA 1:A:38:GLN:C 1:A:39:PRO:N 7 (1,98) 1:A:2:LYS:N 1:A:2:LYS:CA 1:A:2:LYS:C 1:A:3:ILE:N 8 (1,119) 1:A:38:GLN:N 1:A:38:GLN:CA 1:A:38:GLN:C 1:A:39:PRO:N 5	116.9
(1,119) 1:A:38:GLN:N 1:A:38:GLN:CA 1:A:38:GLN:C 1:A:39:PRO:N 7 (1,98) 1:A:2:LYS:N 1:A:2:LYS:CA 1:A:2:LYS:C 1:A:3:ILE:N 8 (1,119) 1:A:38:GLN:N 1:A:38:GLN:CA 1:A:38:GLN:C 1:A:39:PRO:N 5	116.85
(1,98) 1:A:2:LYS:N 1:A:2:LYS:CA 1:A:2:LYS:C 1:A:3:ILE:N 8 (1,119) 1:A:38:GLN:N 1:A:38:GLN:CA 1:A:38:GLN:C 1:A:39:PRO:N 5	116.81
(1,119) 1:A:38:GLN:N 1:A:38:GLN:CA 1:A:38:GLN:C 1:A:39:PRO:N 5	116.77
	116.56
(1,119) 1:A:38:GLN:N 1:A:38:GLN:CA 1:A:38:GLN:C 1:A:39:PRO:N 9	116.49
	116.03
(1,135) 1:A:54:ILE:N 1:A:54:ILE:CA 1:A:54:ILE:C 1:A:55:PHE:N 8	115.67
(1,135) 1:A:54:ILE:N 1:A:54:ILE:CA 1:A:54:ILE:C 1:A:55:PHE:N 6	115.33
(1,135) 1:A:54:ILE:N 1:A:54:ILE:CA 1:A:54:ILE:C 1:A:55:PHE:N 10	114.57
(1,135) 1:A:54:ILE:N 1:A:54:ILE:CA 1:A:54:ILE:C 1:A:55:PHE:N 2	114.52
(1,119) 1:A:38:GLN:N 1:A:38:GLN:CA 1:A:38:GLN:C 1:A:39:PRO:N 4	113.87
(1,178) 1:A:86:HIS:N 1:A:86:HIS:CA 1:A:86:HIS:C 1:A:87:HIS:N 8	113.81
(1,135) 1:A:54:ILE:N 1:A:54:ILE:CA 1:A:54:ILE:C 1:A:55:PHE:N 1	113.71
(1,98) 1:A:2:LYS:N 1:A:2:LYS:CA 1:A:2:LYS:C 1:A:3:ILE:N 2	113.31
(1,157) 1:A:70:ASN:N 1:A:70:ASN:CA 1:A:70:ASN:C 1:A:71:TRP:N 9	112.36
(1,135) 1:A:54:ILE:N 1:A:54:ILE:CA 1:A:54:ILE:C 1:A:55:PHE:N 3	111.95
(1,135) 1:A:54:ILE:N 1:A:54:ILE:CA 1:A:54:ILE:C 1:A:55:PHE:N 9	111.67
(1,141) 1:A:57:VAL:N 1:A:57:VAL:CA 1:A:57:VAL:C 1:A:58:MET:N 2	110.93
(1,114) 1:A:22:SER:N 1:A:22:SER:CA 1:A:22:SER:C 1:A:23:ARG:N 9	110.56
(1,35) 1:A:33:LYS:C 1:A:34:VAL:N 1:A:34:VAL:CA 1:A:34:VAL:C 10	109.62
(1,96) 1:A:84:LEU:C 1:A:85:GLU:N 1:A:85:GLU:CA 1:A:85:GLU:C 8	109.58
(1,135) 1:A:54:ILE:N 1:A:54:ILE:CA 1:A:54:ILE:C 1:A:55:PHE:N 7	109.38
(1,22) 1:A:22:SER:C 1:A:23:ARG:N 1:A:23:ARG:CA 1:A:23:ARG:C 2	109.25
(1,96) 1:A:84:LEU:C 1:A:85:GLU:N 1:A:85:GLU:CA 1:A:85:GLU:C 10	100.20
(1,114) 1:A:22:SER:N 1:A:22:SER:CA 1:A:23:ARG:N 10	109.08
(1,96) 1:A:84:LEU:C 1:A:85:GLU:N 1:A:85:GLU:CA 1:A:85:GLU:C 6	



Key	ed from previous p Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,22)	1:A:22:SER:C	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	8	107.08
(1,35)	1:A:33:LYS:C	1:A:34:VAL:N	1:A:34:VAL:CA	1:A:34:VAL:C	4	106.56
(1,151)	1:A:66:GLU:N	1:A:66:GLU:CA	1:A:66:GLU:C	1:A:67:ASN:N	10	106.56
(1,25)	1:A:26:MET:C	1:A:27:THR:N	1:A:27:THR:CA	1:A:27:THR:C	5	106.41
(1,141)	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	1:A:58:MET:N	8	106.32
(1,95)	1:A:83:GLU:C	1:A:84:LEU:N	1:A:84:LEU:CA	1:A:84:LEU:C	3	106.01
(1,102)	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	1:A:7:SER:N	6	105.9
(1,102)	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	1:A:7:SER:N	8	105.64
(1,102)	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	1:A:7:SER:N	2	105.52
(1,3)	1:A:4:ILE:C	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	10	105.22
(1,49)	1:A:47:LYS:C	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	10	104.61
(1,25)	1:A:26:MET:C	1:A:27:THR:N	1:A:27:THR:CA	1:A:27:THR:C	1	104.53
(1,141)	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	1:A:58:MET:N	4	104.33
(1,25)	1:A:26:MET:C	1:A:27:THR:N	1:A:27:THR:CA	1:A:27:THR:C	6	104.09
(1,96)	1:A:84:LEU:C	1:A:85:GLU:N	1:A:85:GLU:CA	1:A:85:GLU:C	3	104.01
(1,49)	1:A:47:LYS:C	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	1	103.7
(1,49)	1:A:47:LYS:C	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	6	103.7
(1,95)	1:A:83:GLU:C	1:A:84:LEU:N	1:A:84:LEU:CA	1:A:84:LEU:C	9	103.57
(1,95)	1:A:83:GLU:C	1:A:84:LEU:N	1:A:84:LEU:CA	1:A:84:LEU:C	7	103.42
(1,19)	1:A:19:LEU:C	1:A:20:SER:N	1:A:20:SER:CA	1:A:20:SER:C	10	103.35
(1,25)	1:A:26:MET:C	1:A:27:THR:N	1:A:27:THR:CA	1:A:27:THR:C	2	103.27
(1,49)	1:A:47:LYS:C	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	2	102.94
(1,49)	1:A:47:LYS:C	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	9	102.87
(1,102)	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	1:A:7:SER:N	1	102.81
(1,49)	1:A:47:LYS:C	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	7	102.71
(1,95)	1:A:83:GLU:C	1:A:84:LEU:N	1:A:84:LEU:CA	1:A:84:LEU:C	6	102.54
(1,151)	1:A:66:GLU:N	1:A:66:GLU:CA	1:A:66:GLU:C	1:A:67:ASN:N	7	102.44
(1,178)	1:A:86:HIS:N	1:A:86:HIS:CA	1:A:86:HIS:C	1:A:87:HIS:N	10	102.37
(1,51)	1:A:50:GLY:C	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	10	102.34
(1,114)	1:A:22:SER:N	1:A:22:SER:CA	1:A:22:SER:C	1:A:23:ARG:N	1	102.15
(1,49)	1:A:47:LYS:C	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	3	102.09
(1,49)	1:A:47:LYS:C	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	8	101.79
(1,51)	1:A:50:GLY:C	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	2	101.71
(1,51)	1:A:50:GLY:C	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	4	101.38
(1,51)	1:A:50:GLY:C	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	6	101.29
(1,135)	1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CA	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	5	101.29
(1,51)	1:A:50:GLY:C	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	3	101.2
(1,178)	1:A:86:HIS:N	1:A:86:HIS:CA	1:A:86:HIS:C	1:A:87:HIS:N	5	100.66
(1,51)	1:A:50:GLY:C	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	1	100.53
(1,49)	1:A:47:LYS:C	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	4	100.48
(1,51)	1:A:50:GLY:C	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	8	100.28
(1,51)	1:A:50:GLY:C	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	5	100.25
(1,102)	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	1:A:7:SER:N	9	100.17
(1,141)	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	1:A:58:MET:N	6	100.16
(1,49)	1:A:47:LYS:C	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	5	100.14
(1,51)	1:A:50:GLY:C	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	7	99.59
(1,141)	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	1:A:58:MET:N	1	98.32
(1,141)	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	1:A:58:MET:N	5	98.0
(1,51)	1:A:50:GLY:C	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	9	97.66
(1,99)	1:A:4:ILE:C	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	8	96.86
(1,35)	1:A:33:LYS:C	1:A:34:VAL:N	1:A:34:VAL:CA	1:A:34:VAL:C	2	95.57



(1,148 1.4.633/Mal.C 1.4.464ASP.N 1.4.64ASP.CA 1.4.654SP.C 1 99.55	Key	ea from previous p Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
1,99		1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	1	95.55
1,99 1:A:4:ILEC	(1,99)	1:A:4:ILE:C	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	2	95.18
(1,191	(1,99)	1:A:4:ILE:C	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	4	94.92
(1,141)	_ ` '	1:A:4:ILE:C	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	7	94.73
(1,148) 1:A:63:VALC	_ ` '	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	1:A:58:MET:N	3	94.69
(1,148) 1:A:63:VALC	· · /	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	2	94.62
(1,148) 1:A:63:VALC	· · /	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	2	94.24
(1,99)	/	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	5	93.65
(1,99)	/	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	10	92.9
(1,99) 1:A4:ILEC	(1,99)	1:A:4:ILE:C	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	5	92.81
(1,100) 1:A:5:SER:N	(1,99)	1:A:4:ILE:C	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	9	91.72
(1,148) 1:A:63:VAL:C	(1,99)	1:A:4:ILE:C	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	3	91.67
(1,107) 1:A:15:MET:C 1:A:16:LYS:N 1:A:16:LYS:CA 1:A:16:LYS:C 8 90.95 (1,99) 1:A:4:ILE:C 1:A:5:SER:N 1:A:5:SER:CA 1:A:5:SER:C 6 90.7 (1,148) 1:A:4:ILE:C 1:A:64:ASP:N 1:A:5:SER:CA 1:A:5:SER:C 9 90.07 (1,148) 1:A:63:VAL:C 1:A:64:ASP:N 1:A:64:ASP:CA 1:A:36:THR:N 1 89.78 (1,141) 1:A:57:VAL:N 1:A:70:ASN:CA 1:A:36:VAL:C 1:A:36:MET:N 7 89.6 (1,157) 1:A:70:ASN:N 1:A:70:ASN:CA 1:A:70:ASN:C 1:A:71:TRP:N 6 89.13 (1,141) 1:A:63:VAL:C 1:A:66:GU:CA 1:A:66:GU:C 1:A:67:ASN:N 3 87.92 (1,148) 1:A:66:GU:N 1:A:64:ASP:N 1:A:66:GU:C 1:A:67:ASN:N 3 87.92 (1,148) 1:A:66:GU:N 1:A:64:ASP:N 1:A:66:GU:C 1:A:67:ASN:N 3 87.92 (1,148) 1:A:66:GU:N 1:A:36:ASP:N 1:A:66:GU:C 1:A:67:ASP:C 4 88.4 </td <td>(1,100)</td> <td>1:A:5:SER:N</td> <td>1:A:5:SER:CA</td> <td>1:A:5:SER:C</td> <td>1:A:6:ILE:N</td> <td>4</td> <td>91.65</td>	(1,100)	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	4	91.65
(1,99)	(1,148)	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	6	91.64
(1,99) 1:A:4:ILE:C 1:A:5:SER:N 1:A:5:SER:CA 1:A:5:SER:C 6 90.7 (1,99) 1:A:4:ILE:C 1:A:5:SER:N 1:A:5:SER:CA 1:A:5:SER:C 1 90.21 (1,148) 1:A:6:3:VAL:C 1:A:6:A:SP:N 1:A:6:A:SP:CA 1:A:3:THR:N 1 80.78 (1,141) 1:A:5:VAL:N 1:A:5:VAL:CA 1:A:6:A:SP:CA 1:A:3:THR:N 1 89.6 (1,157) 1:A:70:ASN:N 1:A:70:ASN:CA 1:A:70:ASN:C 1:A:71:TRP:N 6 89.13 (1,148) 1:A:6:ASN:N 1:A:6:ASP:N 1:A:6:ASP:CA	(1,107)	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	8	90.95
(1,148) 1:A:63:VAL:C 1:A:64:ASP:N 1:A:64:ASP:C 1:A:64:ASP:C 9 90.07 (1,115) 1:A:29:ASP:N 1:A:29:ASP:C 1:A:30:THR:N 1 89.78 (1,141) 1:A:57:VAL:N 1:A:57:VAL:C 1:A:57:VAL:C 1:A:57:VAL:C 1:A:58:MET:N 7 89.6 (1,157) 1:A:70:ASN:N 1:A:70:ASN:C 1:A:70:ASN:C 1:A:70:ASN:C 1:A:71:TRP:N 6 89.13 (1,148) 1:A:63:VAL:C 1:A:64:ASP.N 1:A:64:ASP:C 1:A:64:ASP:C 4 88.4 (1,151) 1:A:66:GLU:N 1:A:66:GLU:C 1:A:67:ASN:N 3 87.92 (1,109) 1:A:16:LYS:C 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:C 4 87.26 (1,148) 1:A:63:VAL:C 1:A:64:ASP:N 1:A:64:ASP:C 1:A:64:ASP:C 3 87.22 (1,100) 1:A:5:SER:N 1:A:5:SER:C 1:A:64:ASP:C 3 87.22 (1,100) 1:A:5:SER:N 1:A:5:SER:C 1:A:6:ILE:N 9 87.15 (1,178) 1:A:86:HIS:N 1:A:86:HIS:C 1:A:17:ILE:N 9 87.15 (1,178) 1:A:86:HIS:N 1:A:86:HIS:C 1:A:17:ILE:C 1 86.46 (1,107) 1:A:16:LYS:C 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:C 1 1:A:16:LYS:C 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:C 1 86.46 (1,107) 1:A:16:LYS:C 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:C 1:A:30:THR:N 8 86.22 (1,109) 1:A:16:LYS:C 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:C 1:A:17:ILE:C 3 86.22 (1,109) 1:A:16:LYS:C 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 8 86.22 (1,109) 1:A:16:LYS:C 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 8 86.22 (1,109) 1:A:16:LYS:C 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:C 1:A:18:THR:C 1 85.49 (1,111) 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:C 1:A:18:THR:C 1 85.49 (1,111) 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1	· · /	1:A:4:ILE:C	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	6	90.7
(1,115) 1:A:29:ASP:N 1:A:29:ASP:CA 1:A:29:ASP:C 1:A:30:THR:N 1 89.78 (1,141) 1:A:57:VAL:N 1:A:57:VAL:CA 1:A:57:VAL:C 1:A:57:VAL:C 1:A:58:MET:N 7 89.6 (1,157) 1:A:70:ASN:N 1:A:70:ASN:CA 1:A:47:ATP:N 6 89.13 (1,148) 1:A:63:VAL:C 1:A:64:ASP:N 1:A:66:GLU:C 1:A:66:GLU:C 4 88.4 (1,151) 1:A:66:GLU:N 1:A:66:GLU:CA 1:A:66:GLU:C 1:A:66:GLU:C 4 87.26 (1,109) 1:A:61:DYS:C 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 4 87.26 (1,109) 1:A:63:VAL:C 1:A:64:ASP:N 1:A:64:ASP:C 3 87.22 (1,109) 1:A:16:LYS:C 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 9 87.15 (1,178) 1:A:86:HIS:N 1:A:86:HIS:CA 1:A:17:ILE:C 9 87.15 (1,109) 1:A:16:LYS:C 1:A:16:LYS:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 1 86.23 (1,115)	(1,99)	1:A:4:ILE:C	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	1	90.21
(1,115) 1:A:29:ASP:N 1:A:29:ASP:CA 1:A:29:ASP:C 1:A:30:THR:N 1 89.78 (1,141) 1:A:57:VAL:N 1:A:57:VAL:CA 1:A:57:VAL:C 1:A:58:MET:N 7 89.6 (1,157) 1:A:70:ASN:N 1:A:70:ASN:CA 1:A:70:ASN:C 1:A:58:MET:N 7 89.6 (1,148) 1:A:63:VAL:C 1:A:64:ASP:N 1:A:66:GLU:C 1:A:66:GLU:C 4 88.4 (1,151) 1:A:66:GLU:N 1:A:66:GLU:CA 1:A:66:GLU:C 1:A:66:ASP:C 4 87.26 (1,109) 1:A:63:VAL:C 1:A:46:ASP:N 1:A:66:ASP:CA 1:A:64:ASP:C 3 87.22 (1,100) 1:A:5:SER:N 1:A:5:SER:N 1:A:5:SER:N 1:A:6:LYS:C 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 9 87.15 (1,179) 1:A:16:LYS:C 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 9 87.15 (1,179) 1:A:16:LYS:C 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 9 86.23 (1,115) 1:A:29:ASP:N 1:A:29:ASP:CA	(' /	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA		9	
(1,141) 1:A:57:VAL:N 1:A:57:VAL:CA 1:A:57:VAL:C 1:A:58:MET:N 7 89.6 (1,157) 1:A:70:ASN:N 1:A:70:ASN:CA 1:A:70:ASN:C 1:A:71:TRP:N 6 89.13 (1,148) 1:A:63:VAL:C 1:A:66:ASP:N 1:A:64:ASP:CA 1:A:64:ASP:C 4 88.4 (1,151) 1:A:66:GU:N 1:A:66:ASP:N 1:A:66:GU:C 1:A:67:ASN:N 3 87.92 (1,109) 1:A:16:LYS:C 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 4 87.26 (1,100) 1:A:5:SER:N 1:A:5:SER:CA 1:A:6:ASP:CA 1:A:6:ASP:CA 9 87.2 (1,100) 1:A:5:SER:N 1:A:5:SER:CA 1:A:5:SER:C 1:A:6:ILE:N 9 87.2 (1,109) 1:A:16:ILYS:C 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:4:7:ILE:C 9 87.15 (1,178) 1:A:3:6:ILYS:C 1:A:16:ILYS:C 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 1 86.6 (1,109) 1:A:16:ILYS:C 1:A:16:ILYS:C 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA	· · /	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C		1	
(1,157) 1:A:70:ASN:N 1:A:70:ASN:CA 1:A:70:ASN:C 1:A:71:TRP:N 6 89.13 (1,148) 1:A:63:VAL:C 1:A:64:ASP:N 1:A:64:ASP:CA 1:A:64:ASP:CA 4 88.4 (1,151) 1:A:66:GLU:N 1:A:66:GLU:CA 1:A:67:ASN:N 3 87.92 (1,109) 1:A:16:LYS:C 1:A:17:ILE:CA 1:A:67:ASN:N 3 87.26 (1,148) 1:A:63:VAL:C 1:A:64:ASP:N 1:A:64:ASP:CA 1:A:64:ASP:C 3 87.22 (1,100) 1:A:5:SER:N 1:A:5:SER:CA 1:A:64:ASP:CA 1:A:64:IEN 9 87.2 (1,109) 1:A:61:LYS:C 1:A:17:ILE:N 1:A:61:IEN 9 87.15 (1,178) 1:A:86:HIS:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 9 87.15 (1,178) 1:A:16:LYS:C 1:A:16:LYS:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 1 86.64 (1,109) 1:A:16:LYS:C 1:A:17:ILE:N 1:A:16:LYS:C 1:A:17:ILE:C 1 86.22 (1,109) 1:A:16:LYS:C 1:A:17:ILE:N	· · /					7	
(1,148) 1:A:63:VAL:C 1:A:64:ASP:N 1:A:64:ASP:CA 1:A:64:ASP:C 4 88.4 (1,151) 1:A:66:GLU:N 1:A:66:GLU:CA 1:A:66:GLU:C 1:A:67:ASN:N 3 87.92 (1,109) 1:A:16:LYS:C 1:A:64:ASP:N 1:A:63:VAL:C 4 87.26 (1,148) 1:A:63:VAL:C 1:A:64:ASP:N 1:A:64:ASP:CA 1:A:64:ASP:C 3 87.22 (1,100) 1:A:5:SER:N 1:A:64:ASP:N 1:A:64:ASP:CA 1:A:64:ASP:C 3 87.22 (1,100) 1:A:16:LYS:C 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 9 87.15 (1,178) 1:A:86:HIS:N 1:A:16:IXS:C 1:A:36:HIS:C 1:A:37:IIE:CA 1:A:37:IIE:CA 1:A:37:IIE:CA 1:A:61:IXS:C 1:A:66:A6 (1,109) 1:A:16:LYS:C 1:A:16:IXS:N 1:A:16:IXS:CA 1:A:36:IXS:CA 1:A:30:THR:N 8 86.22 (1,109) 1:A:16:IXS:C 1:A:17:IIE:N 1:A:17:IIE:CA 1:A:17:IIE:C 3 86.22 (1,109) 1:A:16:IXS:C 1:A:17:IIE:N	(, ,	1:A:70:ASN:N					
(1,151) 1:A:66:GLU:N 1:A:66:GLU:CA 1:A:66:GLU:C 1:A:67:ASN:N 3 87.92 (1,109) 1:A:16:LYS:C 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 4 87.26 (1,148) 1:A:63:VAL:C 1:A:64:ASP:N 1:A:65:SER:CA 1:A:64:ASP:CA 1:A:64:ASP:CA 3 87.22 (1,100) 1:A:5:SER:N 1:A:5:SER:CA 1:A:5:SER:CA 1:A:6:ILE:N 9 87.2 (1,100) 1:A:5:SER:N 1:A:5:SER:CA 1:A:5:SER:CA 1:A:6:ILE:N 9 87.2 (1,109) 1:A:16:LYS:C 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 9 87.15 (1,178) 1:A:86:HIS:N 1:A:86:HIS:CA 1:A:86:HIS:CA 1:A:87:HIS:N 6 86.54 (1,109) 1:A:16:LYS:C 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 1 86.46 (1,107) 1:A:15:MET:C 1:A:16:LYS:N 1:A:16:LYS:CA 1:A:16:LYS:CA 1:A:16:LYS:C 4 86.23 (1,115) 1:A:29:ASP:N 1:A:29:ASP:CA 1:A:29:ASP:CA 1:A:29:ASP:CA 1:A:30:THR:N 8 86.22 (1,109) 1:A:16:LYS:C 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 3 86.22 (1,109) 1:A:16:LYS:C 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 7 85.68 (1,111) 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:18:THR:C 10 85.51 (1,148) 1:A:63:VAL:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:18:THR:C 10 85.51 (1,141) 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:18:THR:C 4 85.43 (1,141) 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:18:THR:C 4 85.43 (1,141) 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:18:THR:C 4 85.43 (1,141) 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:18:THR:C 5 85.06 (1,111) 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:18:THR:C 5 85.06 (1,111) 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:18:THR:C 5 85.06 (1,111) 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:18:THR:C 5 88.44 (1,109) 1:A:16:LYS:C 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:18:THR:C 5 88.44 (1,109) 1:A:16:LYS:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:18:THR:C 2 88.44 (1,109) 1:A:16:LYS:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:18:THR:C 8 83.72 (1,107) 1:A:15:MET:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:18:THR:C 8 83.72 (1,107) 1:A:15:MET:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:18:THR:C 3 83.32 (1,107	· · /						
(1,109) 1:A:16:LYS:C 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 4 87.26 (1,148) 1:A:63:VAL:C 1:A:64:ASP:N 1:A:64:ASP:CA 1:A:64:ASP:C 3 87.22 (1,100) 1:A:55:SER:N 1:A:55:SER:CA 1:A:65:SER:C 1:A:66:ILE:N 9 87.2 (1,109) 1:A:16:LYS:C 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 9 87.15 (1,178) 1:A:66:HIS:N 1:A:86:HIS:CA 1:A:86:HIS:C 1:A:17:ILE:C 9 87.15 (1,109) 1:A:16:LYS:C 1:A:17:ILE:N 1:A:16:LYS:CA 1:A:16:LYS:C 4 86.23 (1,115) 1:A:29:ASP:N 1:A:29:ASP:CA 1:A:16:LYS:C 4 86.23 (1,1109) 1:A:16:LYS:C 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 3 86.22 (1,110) 1:A:16:LYS:C 1:A:17:ILE:CA 1:A:18:THR:N 8 86.22 (1,110) 1:A:16:LYS:C 1:A:17:ILE:CA 1:A:18:THR:CA 1:A:18:THR:C 3 86.22 (1,109) 1:A:16:LYS:C	· · /						
(1,148) 1:A:63:VAL:C 1:A:64:ASP:N 1:A:64:ASP:CA 1:A:64:ASP:C 3 87.22 (1,100) 1:A:5:SER:N 1:A:5:SER:CA 1:A:5:SER:C 1:A:6:ILE:N 9 87.2 (1,109) 1:A:16:LYS:C 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 9 87.15 (1,109) 1:A:16:LYS:C 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 1 86.46 (1,109) 1:A:16:LYS:C 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 1 86.46 (1,107) 1:A:15:MET:C 1:A:16:LYS:N 1:A:16:IVS:CA 1:A:17:ILE:C 4 86.23 (1,115) 1:A:29:ASP:N 1:A:29:ASP:CA 1:A:30:THR:N 8 86.22 (1,109) 1:A:16:LYS:C 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 3 86.22 (1,109) 1:A:16:LYS:C 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 7 85.68 (1,111) 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:18:THR:C 10 85.51	· · /						
(1,100) 1:A:5:SER:N 1:A:5:SER:CA 1:A:5:SER:C 1:A:6:ILE:N 9 87.2 (1,109) 1:A:16:LYS:C 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 9 87.15 (1,178) 1:A:86:HIS:N 1:A:86:HIS:CA 1:A:86:HIS:C 1:A:18:ILE:C 9 87.15 (1,107) 1:A:16:LYS:C 1:A:17:ILE:N 1:A:46:HIS:C 1:A:47:ILE:C 1 86.46 (1,107) 1:A:16:LYS:C 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:16:LYS:C 4 86.23 (1,115) 1:A:29:ASP:N 1:A:29:ASP:CA 1:A:29:ASP:C 1:A:30:THR:N 8 86.22 (1,109) 1:A:16:LYS:C 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 3 86.22 (1,109) 1:A:16:LYS:C 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 7 85.68 (1,111) 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:18:THR:C 10 85.51 (1,144) 1:A:6:1V3:N 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:18:THR:C 4 8	· · /						
(1,109) 1:A:16:LYS:C 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 9 87.15 (1,178) 1:A:86:HIS:N 1:A:86:HIS:CA 1:A:86:HIS:C 1:A:87:HIS:N 6 86.54 (1,109) 1:A:16:LYS:C 1:A:17:ILE:N 1:A:47:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 1 86.46 (1,107) 1:A:16:LYS:C 1:A:16:LYS:C 1:A:16:LYS:C 4 86.23 (1,115) 1:A:29:ASP:N 1:A:29:ASP:CA 1:A:29:ASP:C 1:A:30:THR:N 8 86.22 (1,109) 1:A:16:LYS:C 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 3 86.22 (1,109) 1:A:16:LYS:C 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 7 85.68 (1,111) 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:18:THR:C 10 85.51 (1,148) 1:A:63:VAL:C 1:A:64:ASP:N 1:A:64:ASP:CA 1:A:18:THR:C 4 85.43 (1,111) 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:18:THR:C 4 85.43	· · /						
(1,178) 1:A:86:HIS:N 1:A:86:HIS:CA 1:A:86:HIS:C 1:A:87:HIS:N 6 86.54 (1,109) 1:A:16:LYS:C 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 1 86.46 (1,107) 1:A:15:MET:C 1:A:16:LYS:N 1:A:16:LYS:CA 1:A:16:LYS:C 4 86.23 (1,115) 1:A:29:ASP:N 1:A:29:ASP:CA 1:A:29:ASP:C 1:A:30:THR:N 8 86.22 (1,109) 1:A:16:LYS:C 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 3 86.22 (1,109) 1:A:16:LYS:C 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 7 85.68 (1,111) 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:18:THR:C 10 85.51 (1,148) 1:A:63:VAL:C 1:A:64:ASP:N 1:A:64:ASP:CA 1:A:18:THR:C 4 85.49 (1,111) 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:18:THR:C 4 85.43 (1,111) 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:18:THR:C 5						9	
(1,109) 1:A:16:LYS:C 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 1 86.46 (1,107) 1:A:15:MET:C 1:A:16:LYS:N 1:A:16:LYS:CA 1:A:16:LYS:C 4 86.23 (1,115) 1:A:29:ASP:N 1:A:29:ASP:CA 1:A:29:ASP:C 1:A:30:THR:N 8 86.22 (1,109) 1:A:16:LYS:C 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 7 85.68 (1,111) 1:A:16:LYS:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:17:ILE:C 7 85.68 (1,111) 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:18:THR:C 10 85.51 (1,144) 1:A:63:VAL:C 1:A:64:ASP:N 1:A:64:ASP:CA 1:A:18:THR:C 4 85.49 (1,111) 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:18:THR:C 4 85.43 (1,111) 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:18:THR:C 4 85.43 (1,111) 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:18:THR:C 9						6	
(1,107) 1:A:15:MET:C 1:A:16:LYS:N 1:A:16:LYS:CA 1:A:16:LYS:C 4 86.23 (1,115) 1:A:29:ASP:N 1:A:29:ASP:CA 1:A:29:ASP:C 1:A:30:THR:N 8 86.22 (1,109) 1:A:16:LYS:C 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 3 86.22 (1,109) 1:A:16:LYS:C 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 7 85.68 (1,111) 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:18:THR:C 10 85.51 (1,148) 1:A:63:VAL:C 1:A:64:ASP:N 1:A:64:ASP:CA 1:A:64:ASP:C 8 85.49 (1,111) 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:18:THR:C 4 85.43 (1,141) 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:18:THR:C 4 85.42 (1,111) 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:18:THR:C 5 85.06 (1,111) 1:A:16:LYS:C 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:18:THR:C 9	(' /						
(1,115) 1:A:29:ASP:N 1:A:29:ASP:CA 1:A:29:ASP:C 1:A:30:THR:N 8 86.22 (1,109) 1:A:16:LYS:C 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 3 86.22 (1,109) 1:A:16:LYS:C 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 7 85.68 (1,111) 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:18:THR:C 10 85.51 (1,148) 1:A:63:VAL:C 1:A:64:ASP:N 1:A:64:ASP:CA 1:A:64:ASP:C 8 85.49 (1,111) 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1:A:64:ASP:CA 1:A:18:THR:C 4 85.43 (1,141) 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:18:THR:C 4 85.43 (1,111) 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:18:THR:C 5 85.06 (1,111) 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:18:THR:C 9 84.69 (1,109) 1:A:16:LYS:C 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 84.04	· · /	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	4	86.23
(1,109) 1:A:16:LYS:C 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 3 86.22 (1,109) 1:A:16:LYS:C 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 7 85.68 (1,111) 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:18:THR:C 10 85.51 (1,148) 1:A:63:VAL:C 1:A:64:ASP:N 1:A:64:ASP:CA 1:A:64:ASP:C 8 85.49 (1,111) 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1:A:64:ASP:CA 1:A:64:ASP:C 8 85.49 (1,111) 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:18:THR:C 4 85.43 (1,141) 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:18:THR:C 5 85.06 (1,111) 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:18:THR:C 5 85.06 (1,111) 1:A:16:LYS:C 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:18:THR:C 9 84.69 (1,109) 1:A:16:LYS:C 1:A:16:LYS:N 1:A:16:LYS:CA 1:A:16:LYS:C 9	` ' /	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	8	86.22
(1,109) 1:A:16:LYS:C 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 7 85.68 (1,111) 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:18:THR:C 10 85.51 (1,148) 1:A:63:VAL:C 1:A:64:ASP:N 1:A:64:ASP:CA 1:A:64:ASP:C 8 85.49 (1,111) 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:18:THR:C 4 85.43 (1,111) 1:A:57:VAL:N 1:A:57:VAL:CA 1:A:57:VAL:C 1:A:18:THR:C 4 85.43 (1,111) 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:18:THR:C 5 85.06 (1,111) 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:18:THR:C 9 84.69 (1,109) 1:A:16:LYS:C 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 8 84.4 (1,107) 1:A:16:LYS:C 1:A:16:LYS:N 1:A:16:LYS:CA 1:A:16:LYS:C 9 83.9 (1,111) 1:A:17:ILE:C 1:A:16:LYS:N 1:A:16:LYS:CA 1:A:17:TRP:N 8	(1,109)	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	3	86.22
(1,148) 1:A:63:VAL:C 1:A:64:ASP:N 1:A:64:ASP:CA 1:A:64:ASP:C 8 85.49 (1,111) 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:18:THR:C 4 85.43 (1,141) 1:A:57:VAL:N 1:A:57:VAL:CA 1:A:57:VAL:C 1:A:58:MET:N 9 85.42 (1,111) 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:18:THR:C 5 85.06 (1,111) 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:18:THR:C 9 84.69 (1,109) 1:A:16:LYS:C 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 8 84.4 (1,109) 1:A:16:LYS:C 1:A:17:ILE:N 1:A:16:LYS:CA 1:A:16:LYS:C 9 83.9 (1,107) 1:A:15:MET:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:18:THR:C 8 83.72 (1,157) 1:A:70:ASN:N 1:A:70:ASN:CA 1:A:70:ASN:C 1:A:16:LYS:CA 1:A:16:LYS:C 10 83.57 (1,107) 1:A:15:MET:C 1:A:16:LYS:N 1:A:16:LYS:CA 1:A:16:LYS:C </td <td>(1,109)</td> <td>1:A:16:LYS:C</td> <td>1:A:17:ILE:N</td> <td>1:A:17:ILE:CA</td> <td>1:A:17:ILE:C</td> <td>7</td> <td>85.68</td>	(1,109)	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	7	85.68
(1,111) 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:18:THR:C 4 85.43 (1,141) 1:A:57:VAL:N 1:A:57:VAL:CA 1:A:57:VAL:C 1:A:58:MET:N 9 85.42 (1,111) 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:18:THR:C 5 85.06 (1,111) 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:18:THR:C 9 84.69 (1,109) 1:A:16:LYS:C 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 8 84.4 (1,107) 1:A:16:LYS:C 1:A:16:LYS:N 1:A:16:LYS:CA 1:A:16:LYS:C 9 83.9 (1,111) 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:18:THR:C 8 83.72 (1,157) 1:A:70:ASN:N 1:A:70:ASN:CA 1:A:70:ASN:C 1:A:16:LYS:C 10 83.57 (1,107) 1:A:15:MET:C 1:A:16:LYS:N 1:A:16:LYS:CA 1:A:16:LYS:C 10 83.57 (1,111) 1:A:17:ILE:C 1:A:16:LYS:N 1:A:16:LYS:CA 1:A:16:LYS:C 2	(1,111)	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	10	85.51
(1,111) 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:18:THR:C 4 85.43 (1,141) 1:A:57:VAL:N 1:A:57:VAL:CA 1:A:57:VAL:C 1:A:58:MET:N 9 85.42 (1,111) 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:18:THR:C 5 85.06 (1,111) 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:18:THR:C 9 84.69 (1,109) 1:A:16:LYS:C 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 8 84.4 (1,109) 1:A:16:LYS:C 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 2 84.04 (1,107) 1:A:15:MET:C 1:A:16:LYS:N 1:A:16:LYS:CA 1:A:16:LYS:C 9 83.9 (1,111) 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:18:THR:C 8 83.72 (1,157) 1:A:16:LYS:N 1:A:16:LYS:CA 1:A:16:LYS:C 10 83.57 (1,107) 1:A:15:MET:C 1:A:16:LYS:N 1:A:16:LYS:CA 1:A:16:LYS:C 10 83.32	(1,148)	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	8	85.49
(1,111) 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:18:THR:C 5 85.06 (1,111) 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:18:THR:C 9 84.69 (1,109) 1:A:16:LYS:C 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 8 84.4 (1,109) 1:A:16:LYS:C 1:A:16:LYS:N 1:A:16:LYS:CA 1:A:16:LYS:C 9 83.9 (1,107) 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:18:THR:C 8 83.72 (1,157) 1:A:70:ASN:N 1:A:70:ASN:CA 1:A:70:ASN:C 1:A:16:LYS:C 10 83.57 (1,107) 1:A:15:MET:C 1:A:16:LYS:N 1:A:16:LYS:CA 1:A:16:LYS:C 10 83.57 (1,111) 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1:A:16:LYS:CA 1:A:16:LYS:C 2 82.95 (1,107) 1:A:15:MET:C 1:A:16:LYS:N 1:A:16:LYS:CA 1:A:16:LYS:C 2 82.95 (1,111) 1:A:15:SER:C 1:A:18:THR:C 1:A:18:THR:C 1 82.46 <		1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	4	85.43
(1,111) 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:18:THR:C 9 84.69 (1,109) 1:A:16:LYS:C 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 8 84.4 (1,109) 1:A:16:LYS:C 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 2 84.04 (1,107) 1:A:15:MET:C 1:A:16:LYS:N 1:A:16:LYS:CA 1:A:16:LYS:C 9 83.9 (1,111) 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:18:THR:C 8 83.72 (1,157) 1:A:70:ASN:N 1:A:70:ASN:CA 1:A:70:ASN:C 1:A:71:TRP:N 8 83.64 (1,107) 1:A:15:MET:C 1:A:16:LYS:N 1:A:16:LYS:CA 1:A:16:LYS:C 10 83.57 (1,111) 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:18:THR:C 3 83.32 (1,107) 1:A:15:MET:C 1:A:16:LYS:N 1:A:16:LYS:CA 1:A:16:LYS:C 2 82.95 (1,111) 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:18:THR:C 1	(1,141)	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	1:A:58:MET:N	9	85.42
(1,111) 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:18:THR:C 9 84.69 (1,109) 1:A:16:LYS:C 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 8 84.4 (1,109) 1:A:16:LYS:C 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 2 84.04 (1,107) 1:A:15:MET:C 1:A:16:LYS:N 1:A:16:LYS:CA 1:A:16:LYS:C 9 83.9 (1,111) 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:18:THR:C 8 83.72 (1,157) 1:A:70:ASN:N 1:A:70:ASN:CA 1:A:70:ASN:C 1:A:71:TRP:N 8 83.64 (1,107) 1:A:15:MET:C 1:A:16:LYS:N 1:A:16:LYS:CA 1:A:16:LYS:C 10 83.57 (1,111) 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:18:THR:C 3 83.32 (1,107) 1:A:15:MET:C 1:A:16:LYS:N 1:A:16:LYS:CA 1:A:16:LYS:C 2 82.95 (1,111) 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:18:THR:C 1	· · /	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	5	85.06
(1,109) 1:A:16:LYS:C 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 8 84.4 (1,109) 1:A:16:LYS:C 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 2 84.04 (1,107) 1:A:15:MET:C 1:A:16:LYS:N 1:A:16:LYS:CA 1:A:16:LYS:C 9 83.9 (1,111) 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:18:THR:C 8 83.72 (1,157) 1:A:70:ASN:N 1:A:70:ASN:CA 1:A:70:ASN:C 1:A:71:TRP:N 8 83.64 (1,107) 1:A:15:MET:C 1:A:16:LYS:N 1:A:16:LYS:CA 1:A:16:LYS:C 10 83.57 (1,111) 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:18:THR:C 3 83.32 (1,107) 1:A:15:MET:C 1:A:16:LYS:N 1:A:16:LYS:CA 1:A:16:LYS:C 2 82.95 (1,111) 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:18:THR:C 1 82.46 (1,100) 1:A:5:SER:N 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:6:ILE:N 6 <t< td=""><td></td><td>1:A:17:ILE:C</td><td>1:A:18:THR:N</td><td></td><td></td><td></td><td></td></t<>		1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N				
(1,109) 1:A:16:LYS:C 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 2 84.04 (1,107) 1:A:15:MET:C 1:A:16:LYS:N 1:A:16:LYS:CA 1:A:16:LYS:C 9 83.9 (1,111) 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:18:THR:C 8 83.72 (1,157) 1:A:70:ASN:N 1:A:70:ASN:CA 1:A:70:ASN:C 1:A:71:TRP:N 8 83.64 (1,107) 1:A:15:MET:C 1:A:16:LYS:N 1:A:16:LYS:CA 1:A:16:LYS:C 10 83.57 (1,111) 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:18:THR:C 3 83.32 (1,107) 1:A:15:MET:C 1:A:16:LYS:N 1:A:16:LYS:CA 1:A:16:LYS:C 2 82.95 (1,111) 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:18:THR:C 1 82.46 (1,100) 1:A:5:SER:N 1:A:5:SER:CA 1:A:5:SER:C 1:A:6:ILE:N 6 82.29 (1,111) 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:18:THR:C 7 <td< td=""><td></td><td>1:A:16:LYS:C</td><td>1:A:17:ILE:N</td><td>1:A:17:ILE:CA</td><td>1:A:17:ILE:C</td><td>8</td><td></td></td<>		1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	8	
(1,107) 1:A:15:MET:C 1:A:16:LYS:N 1:A:16:LYS:CA 1:A:16:LYS:C 9 83.9 (1,111) 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:18:THR:C 8 83.72 (1,157) 1:A:70:ASN:N 1:A:70:ASN:CA 1:A:70:ASN:C 1:A:71:TRP:N 8 83.64 (1,107) 1:A:15:MET:C 1:A:16:LYS:N 1:A:16:LYS:CA 1:A:16:LYS:C 10 83.57 (1,111) 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:18:THR:C 3 83.32 (1,107) 1:A:15:MET:C 1:A:16:LYS:N 1:A:16:LYS:CA 1:A:16:LYS:C 2 82.95 (1,111) 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:18:THR:C 1 82.46 (1,100) 1:A:5:SER:N 1:A:5:SER:CA 1:A:5:SER:C 1:A:6:ILE:N 6 82.29 (1,111) 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:18:THR:C 7 82.13		1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	2	84.04
(1,111) 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:18:THR:C 8 83.72 (1,157) 1:A:70:ASN:N 1:A:70:ASN:CA 1:A:70:ASN:C 1:A:71:TRP:N 8 83.64 (1,107) 1:A:15:MET:C 1:A:16:LYS:N 1:A:16:LYS:CA 1:A:16:LYS:C 10 83.57 (1,111) 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:18:THR:C 3 83.32 (1,107) 1:A:15:MET:C 1:A:16:LYS:N 1:A:16:LYS:CA 1:A:16:LYS:C 2 82.95 (1,111) 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:18:THR:C 1 82.46 (1,100) 1:A:5:SER:N 1:A:5:SER:CA 1:A:5:SER:C 1:A:6:ILE:N 6 82.29 (1,111) 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:18:THR:C 7 82.13		1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	9	83.9
(1,157) 1:A:70:ASN:N 1:A:70:ASN:CA 1:A:70:ASN:C 1:A:71:TRP:N 8 83.64 (1,107) 1:A:15:MET:C 1:A:16:LYS:N 1:A:16:LYS:CA 1:A:16:LYS:C 10 83.57 (1,111) 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:18:THR:C 3 83.32 (1,107) 1:A:15:MET:C 1:A:16:LYS:N 1:A:16:LYS:CA 1:A:16:LYS:C 2 82.95 (1,111) 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:18:THR:C 1 82.46 (1,100) 1:A:5:SER:N 1:A:5:SER:CA 1:A:5:SER:C 1:A:6:ILE:N 6 82.29 (1,111) 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:18:THR:C 7 82.13		1:A:17:ILE:C				8	
(1,107) 1:A:15:MET:C 1:A:16:LYS:N 1:A:16:LYS:CA 1:A:16:LYS:C 10 83.57 (1,111) 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:18:THR:C 3 83.32 (1,107) 1:A:15:MET:C 1:A:16:LYS:N 1:A:16:LYS:CA 1:A:16:LYS:C 2 82.95 (1,111) 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:18:THR:C 1 82.46 (1,100) 1:A:5:SER:N 1:A:5:SER:CA 1:A:5:SER:C 1:A:6:ILE:N 6 82.29 (1,111) 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:18:THR:C 7 82.13		1:A:70:ASN:N	1:A:70:ASN:CA	1:A:70:ASN:C	1:A:71:TRP:N	8	83.64
(1,111) 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:18:THR:C 3 83.32 (1,107) 1:A:15:MET:C 1:A:16:LYS:N 1:A:16:LYS:CA 1:A:16:LYS:C 2 82.95 (1,111) 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:18:THR:C 1 82.46 (1,100) 1:A:5:SER:N 1:A:5:SER:CA 1:A:5:SER:C 1:A:6:ILE:N 6 82.29 (1,111) 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:18:THR:C 7 82.13		1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	10	83.57
(1,107) 1:A:15:MET:C 1:A:16:LYS:N 1:A:16:LYS:CA 1:A:16:LYS:C 2 82.95 (1,111) 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:18:THR:C 1 82.46 (1,100) 1:A:5:SER:N 1:A:5:SER:CA 1:A:5:SER:C 1:A:6:ILE:N 6 82.29 (1,111) 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:18:THR:C 7 82.13				1:A:18:THR:CA			
(1,111) 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:18:THR:C 1 82.46 (1,100) 1:A:5:SER:N 1:A:5:SER:CA 1:A:5:SER:C 1:A:6:ILE:N 6 82.29 (1,111) 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:18:THR:C 7 82.13	/						
(1,100) 1:A:5:SER:N 1:A:5:SER:CA 1:A:5:SER:C 1:A:6:ILE:N 6 82.29 (1,111) 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:18:THR:C 7 82.13		1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	1	
(1,111) 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:18:THR:C 7 82.13	, ,	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N		
	` ' /	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	7	
(, ,	(1,178)	1:A:86:HIS:N	1:A:86:HIS:CA	1:A:86:HIS:C	1:A:87:HIS:N	4	81.93



	Key	$egin{array}{c c} ea \ from \ previous \ p \ \hline & \mathbf{Atom-1} \end{array}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,109		1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	6	81.83
	(1,107)	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	3	81.8
	(1,109)	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	5	81.72
(1,100	(1,111)	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	2	81.41
(1,100	(1,102)	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	1:A:7:SER:N	7	81.24
(1,107 1:A-15MET-C	· · /	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	3	81.04
(1,143) 1.A.60.PHEN	· · /	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	7	81.01
(1,178 1-A:86:HIS:N	(1,143)	1:A:60:PHE:N	1:A:60:PHE:CA	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	7	80.51
(1,107 1:A:15:MET:C	(1,108)	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	10	79.42
(1,102 1:A:60; LEN	(1,178)	1:A:86:HIS:N	1:A:86:HIS:CA	1:A:86:HIS:C	1:A:87:HIS:N	3	79.41
(1,102 1:A:6:ILEN	(1,107)	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	1	79.25
(1,143)	/	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	1:A:7:SER:N	3	79.17
(1,178) 1:A:86:HIS:N 1:A:86:HIS:CA 1:A:86:HIS:C 1:A:87:HIS:N 7 78.92 (1,148) 1:A:70:ASN:N 1:A:70:ASN:C 1:A:70:ASN:C 1:A:70:ASN:C 7 78.79 (1,148) 1:A:63:VAL:C 1:A:64:ASP:N 1:A:64:ASP:CA 1:A:64:ASP:C 7 78.79 (1,107) 1:A:15:MET:C 1:A:61:LE:N 1:A:61:LE:CA 1:A:61:LE:C 2 78.47 (1,101) 1:A:5:SER:C 1:A:60:ILE:N 1:A:60:ILE:CA 1:A:61:ILE:N 2 77.97 (1,101) 1:A:36:HIS:N 1:A:60:ILE:CA 1:A:60:ILE:N 1 77.97 (1,101) 1:A:36:HIS:N 1:A:60:ILE:CA 1:A:60:ILE:CA 1:A:61:ILE:C 10 77.93 (1,101) 1:A:30:THR:N 1:A:61:ILE:CA 1:A:61:ILE:CA 1:A:61:ILE:C 10 77.59 (1,143) 1:A:60:HIE:N 1:A:61:ILE:CA 1:A:61:ILE:C 10 77.04 (1,143) 1:A:60:PHE:N 1:A:60:PHE:CA 1:A:60:PHE:CA 1:A:60:PHE:CA 1:A:60:HIE:N 5 76.36	(1,143)	1:A:60:PHE:N	1:A:60:PHE:CA	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	10	79.12
(1,178)	(1,143)	1:A:60:PHE:N	1:A:60:PHE:CA	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	6	79.08
(1,148) 1:A:63:VALC 1:A:64:ASP:N 1:A:64:ASP:CA 1:A:64:ASP:C 7 78.79 (1,107) 1:A:15:METC 1:A:16:IYS:N 1:A:61:IXS:CA 1:A:6:IE:CC 5 78.47 (1,101) 1:A:5:SER:C 1:A:6:IE:N 1:A:6:IE:CA 1:A:6:IE:CC 2 78.41 (1,178) 1:A:86:HIS:N 1:A:6:IE:N 1:A:6:IE:CA 1:A:6:IE:N 2 77.97 (1,143) 1:A:60:PHE:N 1:A:6:IE:CA 1:A:6:ILE:N 1 77.63 (1,101) 1:A:5:SER:C 1:A:6:IE:N 1:A:6:ILE:CA 1:A:6:ILE:CA 1:A:6:ILE:CB 10 77.59 (1,143) 1:A:6:IE:N 1:A:6:IE:N 1:A:6:IE:CA 1:A:6:IE:CA 1:A:6:IE:CB 77.04 (1,101) 1:A:5:SER:C 1:A:6:IIE:N 1:A:6:IIE:N 5 76.5 (1,143) 1:A:6:PHE:N 1:A:6:IIE:N 1:A:6:IIE:N 5 76.5 (1,143) 1:A:6:PHE:N 1:A:6:IHE:N 1:A:6:IHE:N 4 76.39 (1,138) 1:A:6:PHE:N 1:A:6:IHE:N	, ,	1:A:86:HIS:N	1:A:86:HIS:CA	1:A:86:HIS:C	1:A:87:HIS:N	7	78.92
(1,148) 1:A:63:VALC 1:A:64:ASP:N 1:A:64:ASP:CA 1:A:64:ASP:C 7 78.79 (1,107) 1:A:15:METC 1:A:16:LYS:N 1:A:16:LYS:CA 1:A:16:LYS:C 5 78.47 (1,101) 1:A:5:SER:C 1:A:6:ILE:N 1:A:6:ILE:CA 1:A:6:ILE:C 2 78.41 (1,178) 1:A:86:IIIS:N 1:A:6:ILE:CA 1:A:6:ILE:CA 1:A:6:ILE:N 1 77.97 (1,143) 1:A:6:OPHE:N 1:A:6:ILE:N 1:A:6:ILE:CA 1:A:6:ILE:C 10 77.59 (1,101) 1:A:3:0:THR:N 1:A:6:ILE:N 1:A:6:ILE:CA 1:A:6:ILE:C 1:A:6:ILE:C 10 77.59 (1,141) 1:A:6:ILE:N 1:A:6:ILE:N 1:A:6:ILE:CA	\ ' ' /	1:A:70:ASN:N	1:A:70:ASN:CA	1:A:70:ASN:C	1:A:71:TRP:N	7	78.79
(1,107) 1:A:15:MET:C 1:A:16:LYS:N 1:A:16:LYS:CA 1:A:16:LYS:C 5 78.47 (1,101) 1:A:5:SER:C 1:A:6:ILE:N 1:A:6:ILE:CA 1:A:6:ILE:C 2 78.41 (1,178) 1:A:86:HIS:N 1:A:86:HIS:CA 1:A:86:ILE:CA 1:A:86:ILE:C 2 77.97 (1,143) 1:A:60:PHE:N 1:A:60:PHE:CA 1:A:60:PHE:C 1:A:61:ILE:N 1 77.63 (1,101) 1:A:5:SER:C 1:A:6:ILE:CN 1 A:6:ILE:C 10 77.59 (1,117) 1:A:30:THR:N 1:A:6:ILE:CN 1 A:6:ILE:CN 1 A:6:ILE:CN 1 77.59 (1,117) 1:A:30:THR:N 1:A:6:ILE:CN 1:A:6:ILE:CC 10 77.59 (1,145) 1:A:6:ILE:N 1:A:6:ILE:CN 1:A:6:ILE:N 1:A:6:ILE:N	· · /	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	7	78.79
(1,101) 1:A:5:SER:C 1:A:6:ILE:N 1:A:6:ILE:CA 1:A:6:ILE:C 2 78.41 (1,178) 1:A:6:HIS:N 1:A:6:HIS:CA 1:A:6:HIS:N 2 77.97 (1,143) 1:A:6:O:PHE:N 1:A:6:O:PHE:CA 1:A:6:ILE:N 1:A:6:ILE:CA 1:A:6:ILE:C 10 77.53 (1,101) 1:A:5:SER:C 1:A:6:ILE:CA 1:A:6:ILE:CA 1:A:6:ILE:C 10 77.59 (1,117) 1:A:3:THR:N 1:A:6:ILE:CA 1:A:6:ILE:CA 1:A:6:ILE:C 10 77.59 (1,145) 1:A:6:ILE:N 1:A:6:ILE:CA 1:A:6:ILE:CA 1:A:6:ILE:C 9 76.95 (1,1401) 1:A:5:SER:C 1:A:6:ILE:N 1:A:6:ILE:N 5 76.5 (1,143) 1:A:6:O:PHE:N 1:A:6:PHE:CA 1:A:6:PHE:C 1:A:6:ILE:N 4 76.39 (1,143) 1:A:6:O:PHE:N 1:A:6:PHE:CA 1:A:6:PHE:C 1:A:6:ILE:N 4 76.39 (1,143) 1:A:6:D:PHE:N 1:A:6:ILPS:N 1:A:6:ILPS:N 1:A:6:ILPS:N 1:A:6:ILPS:N 1:A:6:ILPS:N 1:A:6	(, ,	1:A:15:MET:C					
(1,178)	· · /	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA			
(1,143) 1:A:60:PHE:N 1:A:60:PHE:CA 1:A:60:PHE:C 1:A:61:ILE:N 1 77.63 (1,101) 1:A:5:SER:C 1:A:61:ILE:N 1:A:61:ILE:CA 1:A:61:ILE:C 10 77.59 (1,117) 1:A:30:THR:N 1:A:30:THR:CA 1:A:30:THR:C 1:A:31:TYR:N 5 77.5 (1,145) 1:A:61:ILE:N 1:A:61:ILE:CA 1:A:61:ILE:	· · /						
(1,101) 1:A:5:SER:C 1:A:6:ILE:N 1:A:6:ILE:CA 1:A:6:ILE:C 10 77.59 (1,117) 1:A:3:0:THR:N 1:A:3:0:THR:CA 1:A:3:0:THR:C 1:A:3:1:TYR:N 5 77.5 (1,145) 1:A:6:ILE:CA 1:A:6:ILE:CA 1:A:6:ILE:CA 1:A:6:ILE:CA 1:A:6:ILE:CB 9 76.95 (1,101) 1:A:5:SER:C 1:A:6:ILE:N 1:A:6:ILE:CA 1:A:6:ILE:CA 1:A:6:ILE:CB 9 76.95 (1,143) 1:A:6:O:PHE:N 1:A:6:O:PHE:CA 1:A:6:ILE:N 4 76.39 (1,143) 1:A:6:O:PHE:N 1:A:6:O:PHE:CA 1:A:6:HIS:N 4 76.39 (1,133) 1:A:5:O:PHE:C 1:A:6:ILE:N 1:A:6:ILE:N 4 76.39 (1,143) 1:A:6:O:PHE:C 1:A:6:ILE:N 1:A:6:ILE:N 4 76.39 (1,143) 1:A:6:O:PHE:C 1:A:6:ILE:N 1:A:6:ILE:N 4 76.39 (1,143) 1:A:6:O:PHE:C 1:A:6:ILE:N 1:A:6:ILE:N 1:A:6:ILE:N 1:A:6:ILE:N 2 75.57 (1,117)	· · /						
(1,117)							
(1,145) 1:A:61:ILE:N 1:A:61:ILE:CA 1:A:61:ILE:C 1:A:62:SER:N 6 77.04 (1,101) 1:A:5:SER:C 1:A:6:ILE:N 1:A:6:ILE:CA 1:A:6:ILE:C 9 76.95 (1,143) 1:A:60:PHE:N 1:A:60:PHE:CA 1:A:60:PHE:C 1:A:60:PHE:C 1:A:60:PHE:CA 1:A:60:PHE:C 1:A:60:PHE:CA 1:A:61:ILE:N 2 76.36 (1,107) 1:A:15:MET:C 1:A:16:LYS:CA 1:A:16:LYS:CA 1:A:61:ILE:N 2 75.57 (1,117) 1:A:3:30:THR:N 1:A:3:30:THR:CA 1:A:16:LYS:CA 1:A:16:LYS:CA 1:A:16:LYS:CA 1:A:16:LYS:CA 1:A:16:LYS:CA 1:A:16:LYS:CA 1:A:6:LYS:CA 1:A:6:							
(1,101) 1:A:5:SER:C 1:A:6:ILE:N 1:A:6:ILE:CA 1:A:6:ILE:C 9 76.95 (1,143) 1:A:60:PHE:N 1:A:60:PHE:CA 1:A:60:PHE:C 1:A:6:ILE:N 5 76.5 (1,143) 1:A:60:PHE:N 1:A:60:PHE:CA 1:A:60:PHE:C 1:A:6:ILE:N 4 76.39 (1,143) 1:A:60:PHE:N 1:A:6:HIS:CA 1:A:6:ILE:N 4 76.39 (1,107) 1:A:5:MET:C 1:A:6:HIS:N 1:A:5:HIS:CA 1:A:6:HIS:C 3 76.36 (1,107) 1:A:5:MET:C 1:A:6:LYS:N 1:A:16:LYS:CA 1:A:6:ILE:N 2 75.57 (1,143) 1:A:6:PHE:N 1:A:6:DYS:CA 1:A:6:ILE:N 2 75.56 (1,117) 1:A:3:0:THR:N 1:A:16:LYS:CA 1:A:16:LYS:C 1:A:17:ILE:N 6 75.27 (1,104) 1:A:14:THR:N 1:A:16:ILE:N 1:A:6:ILE:CA 1:A:6:ILE:CA 75.19 (1,101) 1:A:3:0:THR:N 1:A:6:ILE:CA 1:A:6:ILE:CA 1:A:6:ILE:CA 75.16 (1,117) 1:A:3:0:THR:N 1:A:3:0:THR:C<							
(1,143) 1:A:60:PHE:N 1:A:60:PHE:CA 1:A:60:PHE:C 1:A:61:ILE:N 5 76.5 (1,143) 1:A:60:PHE:N 1:A:60:PHE:CA 1:A:60:PHE:C 1:A:61:ILE:N 4 76.39 (1,143) 1:A:60:PHE:N 1:A:60:PHE:CA 1:A:60:PHE:C 1:A:61:ILE:N 4 76.39 (1,143) 1:A:60:PHE:C 1:A:56:HIS:CA 1:A:56:HIS:C 3 76.36 (1,107) 1:A:15:MET:C 1:A:16:LYS:N 1:A:16:LYS:C 6 76.23 (1,143) 1:A:60:PHE:N 1:A:60:PHE:CA 1:A:60:PHE:C 1:A:61:ILE:N 2 75.57 (1,117) 1:A:30:THR:N 1:A:30:THR:CA 1:A:30:THR:C 1:A:31:TYR:N 6 75.56 (1,108) 1:A:16:LYS:N 1:A:16:LYS:CA 1:A:16:LYS:C 1:A:17:ILE:N 6 75.27 (1,104) 1:A:16:LYS:N 1:A:16:LYS:CA 1:A:16:LYS:C 1:A:17:ILE:N 6 75.19 (1,101) 1:A:5:ER:C 1:A:6:ILE:N 1:A:16:LYS:C 1:A:17:ILE:N 6 75.19 (1,101)							
(1,143) 1:A:60:PHE:N 1:A:60:PHE:CA 1:A:60:PHE:C 1:A:61:ILE:N 4 76.39 (1,138) 1:A:55:PHE:C 1:A:56:HIS:N 1:A:56:HIS:CA 1:A:56:HIS:C 3 76.36 (1,107) 1:A:15:MET:C 1:A:16:LYS:N 1:A:16:LYS:CA 1:A:16:LYS:C 6 76.23 (1,143) 1:A:60:PHE:N 1:A:60:PHE:CA 1:A:60:PHE:C 1:A:61:ILE:N 2 75.57 (1,117) 1:A:30:THR:N 1:A:30:THR:CA 1:A:30:THR:C 1:A:41:ITE:N 6 75.56 (1,108) 1:A:16:LYS:CA 1:A:16:LYS:C 1:A:17:ILE:N 6 75.56 (1,104) 1:A:16:LYS:CA 1:A:16:LYS:C 1:A:16:LYS:C 1:A:17:ILE:N 6 75.27 (1,104) 1:A:16:LYS:N 1:A:16:LYS:CA 1:A:16:LYS:C 1:A:17:ILE:N 6 75.27 (1,101) 1:A:5:SER:C 1:A:6:ILE:N 1:A:6:ILE:CA 1:A:6:ILE:C 8 75.18 (1,144) 1:A:6:PHE:C 1:A:6:ILE:N 1:A:6:ILE:CA 1:A:6:ILE:C 8 75.16							
(1,138) 1:A:55:PHE:C 1:A:56:HIS:N 1:A:56:HIS:CA 1:A:56:HIS:C 3 76.36 (1,107) 1:A:15:MET:C 1:A:16:LYS:N 1:A:16:LYS:CA 1:A:16:LYS:C 6 76.23 (1,143) 1:A:60:PHE:N 1:A:60:PHE:CA 1:A:60:PHE:C 1:A:61:ILE:N 2 75.57 (1,117) 1:A:30:THR:N 1:A:30:THR:CA 1:A:30:THR:C 1:A:31:TYR:N 6 75.56 (1,108) 1:A:16:LYS:N 1:A:16:LYS:CA 1:A:16:LYS:C 1:A:11:IEN 6 75.57 (1,104) 1:A:16:LYS:N 1:A:16:LYS:CA 1:A:16:LYS:C 1:A:15:MET:N 6 75.19 (1,104) 1:A:4:6:LES:R 1:A:16:LE:CA 1:A:6:LE:C 8 75.18 (1,144) 1:A:60:PHE:C 1:A:6:ILE:N 1:A:6:ILE:CA 1:A:6:ILE:C 8 75.18 (1,147) 1:A:30:THR:N 1:A:30:THR:CA 1:A:31:TYR:N 4 75.12 (1,106) 1:A:15:MET:N 1:A:6:HE:CA 1:A:6:LE:CA 1:A:6:LE:CA 1:A:6:LE:CA (1,133) 1:A:6:A:A:A:							
(1,107) 1:A:15:MET:C 1:A:16:LYS:N 1:A:16:LYS:CA 1:A:16:LYS:C 6 76.23 (1,143) 1:A:60:PHE:N 1:A:60:PHE:CA 1:A:60:PHE:C 1:A:61:ILE:N 2 75.57 (1,117) 1:A:30:THR:N 1:A:30:THR:CA 1:A:30:THR:C 1:A:31:TYR:N 6 75.56 (1,108) 1:A:16:LYS:N 1:A:16:LYS:CA 1:A:16:LYS:C 1:A:17:ILE:N 6 75.27 (1,104) 1:A:14:THR:N 1:A:14:THR:CA 1:A:14:THR:C 1:A:15:MET:N 6 75.19 (1,101) 1:A:5:SER:C 1:A:6:ILE:N 1:A:6:ILE:CA 1:A:6:ILE:C 8 75.18 (1,144) 1:A:60:PHE:C 1:A:61:ILE:N 1:A:6:ILE:CA 1:A:6:ILE:C 8 75.16 (1,117) 1:A:30:THR:N 1:A:30:THR:CA 1:A:31:TYR:N 4 75.12 (1,117) 1:A:30:THR:N 1:A:30:THR:CA 1:A:61:ILE:CA 1:A:61:ILE:C 8 75.16 (1,117) 1:A:30:THR:N 1:A:30:THR:CA 1:A:61:ILE:CA 1:A:61:ILE:N 75.16 (1,117	/						
(1,143) 1:A:60:PHE:N 1:A:60:PHE:CA 1:A:60:PHE:C 1:A:61:ILE:N 2 75.57 (1,117) 1:A:30:THR:N 1:A:30:THR:CA 1:A:30:THR:C 1:A:31:TYR:N 6 75.56 (1,108) 1:A:16:LYS:N 1:A:16:LYS:CA 1:A:16:LYS:C 1:A:17:ILE:N 6 75.27 (1,104) 1:A:14:THR:N 1:A:14:THR:CA 1:A:14:THR:C 1:A:6:ILE:C 8 75.19 (1,101) 1:A:5:SER:C 1:A:6:ILE:N 1:A:6:ILE:CA 1:A:6:ILE:C 8 75.18 (1,144) 1:A:6:O:PHE:C 1:A:6:ILE:N 1:A:6:ILE:CA 1:A:6:ILE:C 8 75.16 (1,117) 1:A:30:THR:N 1:A:30:THR:CA 1:A:6:ILE:CA 1:A:6:ILE:C 8 75.16 (1,117) 1:A:30:THR:N 1:A:6:ILE:N 1:A:6:ILE:CA 1:A:6:ILE:C 8 75.16 (1,106) 1:A:15:MET:N 1:A:6:ILE:CA 1:A:6:ILE:CS 75.12 (1,104) 1:A:6:A:SP:N 1:A:6:HS:CC 1:A:6:ILY:N 10 75.06 (1,138) 1:A:5:5:PHE:C	(' /						
(1,117) 1:A:30:THR:N 1:A:30:THR:CA 1:A:30:THR:C 1:A:31:TYR:N 6 75.56 (1,108) 1:A:16:LYS:N 1:A:16:LYS:CA 1:A:16:LYS:C 1:A:17:ILE:N 6 75.27 (1,104) 1:A:14:THR:N 1:A:14:THR:CA 1:A:14:THR:C 1:A:15:MET:N 6 75.19 (1,101) 1:A:5:SER:C 1:A:6:ILE:N 1:A:6:ILE:CA 1:A:6:ILE:C 8 75.18 (1,144) 1:A:60:PHE:C 1:A:6:ILE:N 1:A:6:ILE:CA 1:A:6:ILE:C 8 75.16 (1,117) 1:A:30:THR:N 1:A:30:THR:CA 1:A:61:ILE:CA 1:A:61:ILE:C 8 75.16 (1,117) 1:A:30:THR:N 1:A:30:THR:CA 1:A:61:ILE:CA 1:A:61:ILE:C 8 75.16 (1,117) 1:A:30:THR:N 1:A:61:ILE:N 1:A:61:ILE:CA 1:A:61:ILE:C 8 75.16 (1,117) 1:A:64:ASP:N 1:A:64:ASP:CA 1:A:64:ASP:C 1:A:61:ILE:CA 1:A:61:ILE:C 8 75.16 (1,149) 1:A:64:ASP:N 1:A:64:ASP:CA 1:A:65:HIS:CA 1:A:65:HIS:CA <td>· · /</td> <td>1:A:60:PHE:N</td> <td>1:A:60:PHE:CA</td> <td>1:A:60:PHE:C</td> <td>1:A:61:ILE:N</td> <td>2</td> <td>75.57</td>	· · /	1:A:60:PHE:N	1:A:60:PHE:CA	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	2	75.57
(1,108) 1:A:16:LYS:N 1:A:16:LYS:CA 1:A:16:LYS:C 1:A:17:ILE:N 6 75.27 (1,104) 1:A:14:THR:N 1:A:14:THR:CA 1:A:14:THR:C 1:A:15:MET:N 6 75.19 (1,101) 1:A:5:SER:C 1:A:6:ILE:N 1:A:6:ILE:CA 1:A:6:ILE:C 8 75.18 (1,144) 1:A:60:PHE:C 1:A:61:ILE:N 1:A:61:ILE:CA 1:A:61:ILE:C 8 75.16 (1,117) 1:A:30:THR:N 1:A:30:THR:CA 1:A:30:THR:C 1:A:31:TYR:N 4 75.12 (1,106) 1:A:15:MET:N 1:A:64:ASP:CA 1:A:64:ASP:C 1:A:65:LYS:N 10 75.06 (1,149) 1:A:64:ASP:N 1:A:64:ASP:CA 1:A:64:ASP:C 1:A:65:LYS:N 3 74.85 (1,138) 1:A:55:PHE:C 1:A:66:IIS:N 1:A:66:IIS:CA 1:A:65:HIS:C 6 74.58 (1,131) 1:A:55:PHE:C 1:A:66:ILE:N 1:A:66:ILE:CA 1:A:66:ILE:C 1 74.06 (1,101) 1:A:55:PHE:C 1:A:66:ILE:N 1:A:66:ILE:CA 1:A:6:ILE:C 1 <th< td=""><td>· · /</td><td>1:A:30:THR:N</td><td>1:A:30:THR:CA</td><td>1:A:30:THR:C</td><td>1:A:31:TYR:N</td><td>6</td><td>75.56</td></th<>	· · /	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	1:A:31:TYR:N	6	75.56
(1,101) 1:A:5:SER:C 1:A:6:ILE:N 1:A:6:ILE:CA 1:A:6:ILE:C 8 75.18 (1,144) 1:A:60:PHE:C 1:A:61:ILE:N 1:A:61:ILE:CA 1:A:61:ILE:C 8 75.16 (1,117) 1:A:30:THR:N 1:A:30:THR:CA 1:A:30:THR:C 1:A:41:ITYR:N 4 75.12 (1,106) 1:A:15:MET:N 1:A:15:MET:C 1:A:16:LYS:N 10 75.06 (1,149) 1:A:64:ASP:N 1:A:64:ASP:CA 1:A:64:ASP:C 1:A:65:LYS:N 3 74.85 (1,138) 1:A:64:ASP:N 1:A:64:ASP:CA 1:A:65:HIS:CA 1:A:65:HIS:C 6 74.58 (1,138) 1:A:64:ASP:N 1:A:66:HIS:N 1:A:66:HIS:CA 1:A:85:GLU:C 4 74.39 (1,133) 1:A:55:PHE:C 1:A:66:HIE:N 1:A:6:ILE:CA 1:A:6:ILE:C 1 74.06 (1,101) 1:A:55:PHE:C 1:A:6:HIE:N 1:A:6:ILE:CA 1:A:6:ILE:C 1 73.97 (1,101) 1:A:5:SER:C 1:A:6:ILE:N 1:A:6:ILE:CA 1:A:6:ILE:C 5 73.93	(1,108)	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	6	75.27
(1,144) 1:A:60:PHE:C 1:A:61:ILE:N 1:A:61:ILE:CA 1:A:61:ILE:C 8 75.16 (1,117) 1:A:30:THR:N 1:A:30:THR:CA 1:A:30:THR:C 1:A:31:TYR:N 4 75.12 (1,106) 1:A:15:MET:N 1:A:15:MET:CA 1:A:64:ASP:C 1:A:16:LYS:N 10 75.06 (1,149) 1:A:64:ASP:N 1:A:64:ASP:CA 1:A:64:ASP:C 1:A:65:LYS:N 3 74.85 (1,138) 1:A:55:PHE:C 1:A:56:HIS:N 1:A:56:HIS:CA 1:A:56:HIS:C 6 74.58 (1,96) 1:A:84:LEU:C 1:A:85:GLU:N 1:A:85:GLU:CA 1:A:85:GLU:C 4 74.39 (1,133) 1:A:51:VAL:N 1:A:51:VAL:CA 1:A:51:VAL:C 1:A:52:LYS:N 2 74.06 (1,101) 1:A:5:SER:C 1:A:6:ILE:N 1:A:6:ILE:CA 1:A:6:ILE:C 1 74.05 (1,138) 1:A:5:SER:C 1:A:6:ILE:N 1:A:6:ILE:CA 1:A:6:ILE:C 2 73.97 (1,101) 1:A:5:SER:C 1:A:6:ILE:N 1:A:6:ILE:CA 1:A:6:ILE:C 5 73.93 </td <td>(1,104)</td> <td>1:A:14:THR:N</td> <td>1:A:14:THR:CA</td> <td>1:A:14:THR:C</td> <td>1:A:15:MET:N</td> <td>6</td> <td>75.19</td>	(1,104)	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	6	75.19
(1,117) 1:A:30:THR:N 1:A:30:THR:CA 1:A:30:THR:C 1:A:31:TYR:N 4 75.12 (1,106) 1:A:15:MET:N 1:A:15:MET:CA 1:A:15:MET:C 1:A:16:LYS:N 10 75.06 (1,149) 1:A:64:ASP:N 1:A:64:ASP:CA 1:A:64:ASP:C 1:A:65:LYS:N 3 74.85 (1,138) 1:A:55:PHE:C 1:A:56:HIS:N 1:A:56:HIS:CA 1:A:56:HIS:C 6 74.58 (1,96) 1:A:84:LEU:C 1:A:85:GLU:N 1:A:85:GLU:CA 1:A:85:GLU:C 4 74.39 (1,133) 1:A:51:VAL:N 1:A:6:ILE:N 1:A:6:ILE:CA 1:A:6:ILE:C 1 74.06 (1,101) 1:A:5:SER:C 1:A:6:ILE:N 1:A:6:ILE:CA 1:A:6:ILE:C 1 74.05 (1,138) 1:A:5:SER:C 1:A:6:ILE:N 1:A:6:ILE:CA 1:A:6:ILE:C 1 74.05 (1,138) 1:A:5:SER:C 1:A:6:ILE:N 1:A:6:ILE:CA 1:A:6:ILE:C 2 73.97 (1,101) 1:A:5:SER:C 1:A:6:ILE:N 1:A:6:ILE:CA 1:A:6:ILE:C 5 73.93	(1,101)	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	8	75.18
(1,117) 1:A:30:THR:N 1:A:30:THR:CA 1:A:30:THR:C 1:A:31:TYR:N 4 75.12 (1,106) 1:A:15:MET:N 1:A:15:MET:CA 1:A:15:MET:C 1:A:16:LYS:N 10 75.06 (1,149) 1:A:64:ASP:N 1:A:64:ASP:CA 1:A:64:ASP:C 1:A:65:LYS:N 3 74.85 (1,138) 1:A:55:PHE:C 1:A:56:HIS:N 1:A:56:HIS:CA 1:A:56:HIS:C 6 74.58 (1,96) 1:A:84:LEU:C 1:A:85:GLU:N 1:A:85:GLU:CA 1:A:85:GLU:C 4 74.39 (1,133) 1:A:51:VAL:N 1:A:51:VAL:CA 1:A:51:VAL:C 1:A:52:LYS:N 2 74.06 (1,101) 1:A:5:SER:C 1:A:6:ILE:N 1:A:6:ILE:CA 1:A:6:ILE:C 1 74.05 (1,138) 1:A:5:SER:C 1:A:6:ILE:N 1:A:6:ILE:CA 1:A:6:ILE:C 2 73.97 (1,101) 1:A:5:SER:C 1:A:6:ILE:N 1:A:6:ILE:CA 1:A:6:ILE:C 5 73.93 (1,144) 1:A:60:PHE:C 1:A:6:ILE:N 1:A:6:ILE:CA 1:A:6:ILE:N 1 73.61	(1,144)	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	8	75.16
(1,149) 1:A:64:ASP:N 1:A:64:ASP:CA 1:A:64:ASP:C 1:A:65:LYS:N 3 74.85 (1,138) 1:A:55:PHE:C 1:A:56:HIS:N 1:A:56:HIS:CA 1:A:56:HIS:C 6 74.58 (1,96) 1:A:84:LEU:C 1:A:85:GLU:N 1:A:85:GLU:CA 1:A:85:GLU:C 4 74.39 (1,133) 1:A:51:VAL:N 1:A:51:VAL:CA 1:A:51:VAL:C 1:A:52:LYS:N 2 74.06 (1,101) 1:A:5:SER:C 1:A:6:ILE:N 1:A:6:ILE:CA 1:A:6:ILE:C 1 74.05 (1,138) 1:A:5:SER:C 1:A:6:ILE:N 1:A:6:ILE:CA 1:A:6:ILE:C 1 74.05 (1,138) 1:A:5:SER:C 1:A:6:ILE:N 1:A:6:ILE:CA 1:A:6:ILE:C 2 73.97 (1,101) 1:A:5:SER:C 1:A:6:ILE:N 1:A:6:ILE:CA 1:A:6:ILE:C 5 73.93 (1,144) 1:A:60:PHE:C 1:A:61:ILE:N 1:A:61:ILE:CA 1:A:61:ILE:C 9 73.65 (1,101) 1:A:5:SER:C 1:A:6:ILE:N 1:A:6:ILE:CA 1:A:6:ILE:C 7 73.52 <		1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	1:A:31:TYR:N	4	75.12
(1,138) 1:A:55:PHE:C 1:A:56:HIS:N 1:A:56:HIS:CA 1:A:56:HIS:C 6 74.58 (1,96) 1:A:84:LEU:C 1:A:85:GLU:N 1:A:85:GLU:CA 1:A:85:GLU:C 4 74.39 (1,133) 1:A:51:VAL:N 1:A:51:VAL:CA 1:A:51:VAL:C 1:A:52:LYS:N 2 74.06 (1,101) 1:A:5:SER:C 1:A:6:ILE:N 1:A:6:ILE:CA 1:A:6:ILE:C 1 74.05 (1,138) 1:A:55:PHE:C 1:A:56:HIS:N 1:A:56:HIS:CA 1:A:56:HIS:C 2 73.97 (1,101) 1:A:5:SER:C 1:A:6:ILE:N 1:A:6:ILE:CA 1:A:6:ILE:C 5 73.93 (1,115) 1:A:29:ASP:N 1:A:29:ASP:CA 1:A:30:THR:N 10 73.9 (1,144) 1:A:60:PHE:C 1:A:6:ILE:N 1:A:6:ILE:CA 1:A:6:ILE:N 1 73.61 (1,101) 1:A:5:SER:C 1:A:6:ILE:N 1:A:6:ILE:CA 1:A:6:ILE:C 7 73.52 (1,115) 1:A:29:ASP:N 1:A:6:ILE:N 1:A:6:ILE:CA 1:A:6:ILE:C 7 73.4 (1,	(1,106)	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	10	75.06
(1,138) 1:A:55:PHE:C 1:A:56:HIS:N 1:A:56:HIS:CA 1:A:56:HIS:C 6 74.58 (1,96) 1:A:84:LEU:C 1:A:85:GLU:N 1:A:85:GLU:CA 1:A:85:GLU:C 4 74.39 (1,133) 1:A:51:VAL:N 1:A:51:VAL:CA 1:A:51:VAL:C 1:A:52:LYS:N 2 74.06 (1,101) 1:A:5:SER:C 1:A:6:ILE:N 1:A:6:ILE:CA 1:A:6:ILE:C 1 74.05 (1,138) 1:A:55:PHE:C 1:A:6:ILE:N 1:A:56:HIS:CA 1:A:6:ILE:C 2 73.97 (1,101) 1:A:5:SER:C 1:A:6:ILE:N 1:A:6:ILE:CA 1:A:6:ILE:C 5 73.93 (1,115) 1:A:29:ASP:N 1:A:29:ASP:CA 1:A:30:THR:N 10 73.9 (1,144) 1:A:60:PHE:C 1:A:6:ILE:N 1:A:6:ILE:CA 1:A:6:ILE:N 1 73.61 (1,101) 1:A:29:ASP:N 1:A:6:ILE:N 1:A:6:ILE:CA 1:A:6:ILE:C 7 73.52 (1,115) 1:A:29:ASP:N 1:A:6:ILE:N 1:A:6:ILE:CA 1:A:6:ILE:C 2 73.4 (1,1	(1,149)	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	1:A:65:LYS:N	3	74.85
(1,96) 1:A:84:LEU:C 1:A:85:GLU:N 1:A:85:GLU:CA 1:A:85:GLU:C 4 74.39 (1,133) 1:A:51:VAL:N 1:A:51:VAL:CA 1:A:51:VAL:C 1:A:52:LYS:N 2 74.06 (1,101) 1:A:5:SER:C 1:A:6:ILE:N 1:A:6:ILE:CA 1:A:6:ILE:C 1 74.05 (1,138) 1:A:55:PHE:C 1:A:56:HIS:N 1:A:56:HIS:CA 1:A:56:HIS:C 2 73.97 (1,101) 1:A:5:SER:C 1:A:6:ILE:N 1:A:6:ILE:CA 1:A:6:ILE:C 5 73.93 (1,115) 1:A:29:ASP:N 1:A:29:ASP:CA 1:A:29:ASP:C 1:A:30:THR:N 10 73.9 (1,144) 1:A:5:SER:N 1:A:5:SER:CA 1:A:6:ILE:CA 1:A:6:ILE:N 1 73.61 (1,101) 1:A:5:SER:C 1:A:6:ILE:N 1:A:6:ILE:CA 1:A:6:ILE:C 7 73.52 (1,115) 1:A:29:ASP:N 1:A:29:ASP:CA 1:A:29:ASP:C 1:A:61:ILE:C 2 73.4 (1,144) 1:A:60:PHE:C 1:A:61:ILE:N 1:A:61:ILE:CA 1:A:61:ILE:C 2 73.2		1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C		
(1,133) 1:A:51:VAL:N 1:A:51:VAL:CA 1:A:51:VAL:C 1:A:52:LYS:N 2 74.06 (1,101) 1:A:5:SER:C 1:A:6:ILE:N 1:A:6:ILE:CA 1:A:6:ILE:C 1 74.05 (1,138) 1:A:55:PHE:C 1:A:56:HIS:N 1:A:56:HIS:CA 1:A:56:HIS:C 2 73.97 (1,101) 1:A:5:SER:C 1:A:6:ILE:N 1:A:6:ILE:CA 1:A:6:ILE:C 5 73.93 (1,115) 1:A:29:ASP:N 1:A:29:ASP:CA 1:A:29:ASP:C 1:A:30:THR:N 10 73.9 (1,144) 1:A:60:PHE:C 1:A:61:ILE:N 1:A:61:ILE:CA 1:A:61:ILE:C 9 73.65 (1,101) 1:A:5:SER:N 1:A:6:ILE:N 1:A:6:ILE:C 7 73.52 (1,115) 1:A:29:ASP:N 1:A:29:ASP:CA 1:A:29:ASP:C 1:A:61:ILE:C 7 73.4 (1,144) 1:A:60:PHE:C 1:A:61:ILE:N 1:A:61:ILE:CA 1:A:61:ILE:C 2 73.2		1:A:84:LEU:C	1:A:85:GLU:N	1:A:85:GLU:CA	1:A:85:GLU:C	4	
(1,101) 1:A:5:SER:C 1:A:6:ILE:N 1:A:6:ILE:CA 1:A:6:ILE:C 1 74.05 (1,138) 1:A:55:PHE:C 1:A:56:HIS:N 1:A:56:HIS:CA 1:A:56:HIS:C 2 73.97 (1,101) 1:A:5:SER:C 1:A:6:ILE:N 1:A:6:ILE:CA 1:A:6:ILE:C 5 73.93 (1,115) 1:A:29:ASP:N 1:A:29:ASP:CA 1:A:29:ASP:C 1:A:30:THR:N 10 73.9 (1,144) 1:A:60:PHE:C 1:A:61:ILE:N 1:A:61:ILE:CA 1:A:61:ILE:C 9 73.65 (1,100) 1:A:5:SER:N 1:A:5:SER:CA 1:A:5:SER:C 1:A:6:ILE:N 1 73.61 (1,101) 1:A:29:ASP:N 1:A:6:ILE:N 1:A:6:ILE:CA 1:A:6:ILE:C 7 73.52 (1,115) 1:A:29:ASP:N 1:A:29:ASP:CA 1:A:30:THR:N 7 73.4 (1,144) 1:A:60:PHE:C 1:A:61:ILE:N 1:A:61:ILE:CA 1:A:61:ILE:C 2 73.2		1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	1:A:52:LYS:N	2	74.06
(1,138) 1:A:55:PHE:C 1:A:56:HIS:N 1:A:56:HIS:CA 1:A:56:HIS:C 2 73.97 (1,101) 1:A:5:SER:C 1:A:6:ILE:N 1:A:6:ILE:CA 1:A:6:ILE:C 5 73.93 (1,115) 1:A:29:ASP:N 1:A:29:ASP:CA 1:A:29:ASP:C 1:A:30:THR:N 10 73.9 (1,144) 1:A:60:PHE:C 1:A:61:ILE:N 1:A:61:ILE:CA 1:A:61:ILE:C 9 73.65 (1,100) 1:A:5:SER:N 1:A:5:SER:CA 1:A:5:SER:C 1:A:6:ILE:N 1 73.61 (1,101) 1:A:5:SER:C 1:A:6:ILE:N 1:A:6:ILE:CA 1:A:6:ILE:C 7 73.52 (1,115) 1:A:29:ASP:N 1:A:29:ASP:CA 1:A:29:ASP:C 1:A:30:THR:N 7 73.4 (1,144) 1:A:60:PHE:C 1:A:61:ILE:N 1:A:61:ILE:CA 1:A:61:ILE:C 2 73.2		1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	1	74.05
(1,101) 1:A:5:SER:C 1:A:6:ILE:N 1:A:6:ILE:CA 1:A:6:ILE:C 5 73.93 (1,115) 1:A:29:ASP:N 1:A:29:ASP:CA 1:A:29:ASP:C 1:A:30:THR:N 10 73.9 (1,144) 1:A:60:PHE:C 1:A:61:ILE:N 1:A:61:ILE:CA 1:A:61:ILE:C 9 73.65 (1,100) 1:A:5:SER:N 1:A:5:SER:CA 1:A:5:SER:C 1:A:6:ILE:N 1 73.61 (1,101) 1:A:5:SER:C 1:A:6:ILE:N 1:A:6:ILE:CA 1:A:6:ILE:C 7 73.52 (1,115) 1:A:29:ASP:N 1:A:29:ASP:CA 1:A:29:ASP:C 1:A:30:THR:N 7 73.4 (1,144) 1:A:60:PHE:C 1:A:61:ILE:N 1:A:61:ILE:CA 1:A:61:ILE:C 2 73.2			1:A:56:HIS:N			2	
(1,115) 1:A:29:ASP:N 1:A:29:ASP:CA 1:A:29:ASP:C 1:A:30:THR:N 10 73.9 (1,144) 1:A:60:PHE:C 1:A:61:ILE:N 1:A:61:ILE:CA 1:A:61:ILE:C 9 73.65 (1,100) 1:A:5:SER:N 1:A:5:SER:CA 1:A:5:SER:C 1:A:6:ILE:N 1 73.61 (1,101) 1:A:5:SER:C 1:A:6:ILE:N 1:A:6:ILE:CA 1:A:6:ILE:C 7 73.52 (1,115) 1:A:29:ASP:N 1:A:29:ASP:CA 1:A:29:ASP:C 1:A:30:THR:N 7 73.4 (1,144) 1:A:60:PHE:C 1:A:61:ILE:N 1:A:61:ILE:CA 1:A:61:ILE:C 2 73.2		1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	5	73.93
(1,144) 1:A:60:PHE:C 1:A:61:ILE:N 1:A:61:ILE:CA 1:A:61:ILE:C 9 73.65 (1,100) 1:A:5:SER:N 1:A:5:SER:CA 1:A:5:SER:C 1:A:6:ILE:N 1 73.61 (1,101) 1:A:5:SER:C 1:A:6:ILE:N 1:A:6:ILE:CA 1:A:6:ILE:C 7 73.52 (1,115) 1:A:29:ASP:N 1:A:29:ASP:CA 1:A:29:ASP:C 1:A:30:THR:N 7 73.4 (1,144) 1:A:60:PHE:C 1:A:61:ILE:N 1:A:61:ILE:CA 1:A:61:ILE:C 2 73.2	/	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	10	73.9
(1,100) 1:A:5:SER:N 1:A:5:SER:CA 1:A:5:SER:C 1:A:6:ILE:N 1 73.61 (1,101) 1:A:5:SER:C 1:A:6:ILE:N 1:A:6:ILE:CA 1:A:6:ILE:C 7 73.52 (1,115) 1:A:29:ASP:N 1:A:29:ASP:CA 1:A:29:ASP:C 1:A:30:THR:N 7 73.4 (1,144) 1:A:60:PHE:C 1:A:61:ILE:N 1:A:61:ILE:CA 1:A:61:ILE:C 2 73.2		1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA			
(1,101) 1:A:5:SER:C 1:A:6:ILE:N 1:A:6:ILE:CA 1:A:6:ILE:C 7 73.52 (1,115) 1:A:29:ASP:N 1:A:29:ASP:CA 1:A:29:ASP:C 1:A:30:THR:N 7 73.4 (1,144) 1:A:60:PHE:C 1:A:61:ILE:N 1:A:61:ILE:CA 1:A:61:ILE:C 2 73.2	/						
(1,115) 1:A:29:ASP:N 1:A:29:ASP:CA 1:A:29:ASP:C 1:A:30:THR:N 7 73.4 (1,144) 1:A:60:PHE:C 1:A:61:ILE:N 1:A:61:ILE:CA 1:A:61:ILE:C 2 73.2	· · /						
(1,144) 1:A:60:PHE:C 1:A:61:ILE:N 1:A:61:ILE:CA 1:A:61:ILE:C 2 73.2							
	` ' /						
(1)100 1:11:01: VIIII:II 1:11:01: VIII:OII 1:11:01: VIII:O 1:11:02:IIIO:II 10 (2:01	(1,133)	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	1:A:52:LYS:N	10	72.51



Key	$\frac{\textit{ed from previous p}}{\mathbf{Atom-1}}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,23)	1:A:23:ARG:C	1:A:24:GLU:N	1:A:24:GLU:CA	1:A:24:GLU:C	1	72.44
(1,138)	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	8	72.27
(1,101)	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	6	72.06
(1,62)	1:A:57:VAL:C	1:A:58:MET:N	1:A:58:MET:CA	1:A:58:MET:C	8	72.04
(1,106)	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	9	72.0
(1,22)	1:A:22:SER:C	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	9	71.96
(1,96)	1:A:84:LEU:C	1:A:85:GLU:N	1:A:85:GLU:CA	1:A:85:GLU:C	7	71.8
(1,138)	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	9	71.75
(1,115)	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	6	71.67
(1,138)	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	4	71.64
(1,138)	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	10	71.61
(1,133)	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	1:A:52:LYS:N	5	71.36
(1,109)	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	6	71.2
(1,100)	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	5	71.16
(1,133)	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	1:A:52:LYS:N	4	71.15
(1,143)	1:A:60:PHE:N	1:A:60:PHE:CA	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	3	71.11
(1,23)	1:A:23:ARG:C	1:A:24:GLU:N	1:A:24:GLU:CA	1:A:24:GLU:C	9	70.99
(1,101)	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	3	70.86
(1,138)	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	1	70.73
(1,23)	1:A:23:ARG:C	1:A:24:GLU:N	1:A:24:GLU:CA	1:A:24:GLU:C	8	70.56
(1,145)	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	1:A:62:SER:N	5	70.35
(1,138)	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	7	69.96
(1,138)	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	5	69.69
(1,145)	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	1:A:62:SER:N	9	69.52
(1,114)	1:A:22:SER:N	1:A:22:SER:CA	1:A:22:SER:C	1:A:23:ARG:N	2	68.93
(1,139)	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	8	68.9
(1,145)	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	1:A:62:SER:N	4	68.89
(1,106)	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	6	68.69
(1,23)	1:A:23:ARG:C	1:A:24:GLU:N	1:A:24:GLU:CA	1:A:24:GLU:C	5	68.64
(1,144)	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	3	68.61
(1,22)	1:A:22:SER:C	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	5	68.55
(1,133)	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	1:A:52:LYS:N	1	68.4
(1,157)	1:A:70:ASN:N	1:A:70:ASN:CA	1:A:70:ASN:C	1:A:71:TRP:N	3	68.22
(1,23)	1:A:23:ARG:C	1:A:24:GLU:N	1:A:24:GLU:CA	1:A:24:GLU:C	7	68.16
(1,115)	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	4	68.08
(1,145)	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	1:A:62:SER:N	8	67.98
(1,143)	1:A:60:PHE:N	1:A:60:PHE:CA	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	9	67.71
(1,144)	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	10	67.5
(1,144)	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	6	67.38
(1,149)	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	1:A:65:LYS:N	6	67.37
(1,145)	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	1:A:62:SER:N	10	67.28
(1,149)	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	1:A:65:LYS:N	7	66.98
(1,23)	1:A:23:ARG:C	1:A:24:GLU:N	1:A:24:GLU:CA	1:A:24:GLU:C	10	66.78
(1,145)	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	1:A:62:SER:N	1	66.7
(1,178)	1:A:86:HIS:N	1:A:86:HIS:CA	1:A:86:HIS:C	1:A:87:HIS:N	1	66.65
(1,112)	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	1:A:19:LEU:N	10	66.5
(1,139)	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	9	66.46
(1,145)	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	1:A:62:SER:N	7	66.39
(1,106)	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	3	66.1
(1,23)	1:A:23:ARG:C	1:A:24:GLU:N	1:A:24:GLU:CA	1:A:24:GLU:C	2	66.06
(1,144)	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	5	66.06
	1	<u> </u>				ed on nert nage



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

Key	ea from previous p Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,22)	1:A:22:SER:C	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	3	65.72
(1,115)	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	3	65.6
(1,62)	1:A:57:VAL:C	1:A:58:MET:N	1:A:58:MET:CA	1:A:58:MET:C	10	65.46
(1,115)	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	9	64.93
(1,109)	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	10	64.83
(1,144)	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	7	64.56
(1,144)	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	1	64.45
(1,144)	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	4	64.32
(1,106)	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	7	64.26
(1,149)	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	1:A:65:LYS:N	4	63.98
(1,145)	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	1:A:62:SER:N	3	63.57
(1,22)	1:A:22:SER:C	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	7	63.47
(1,139)	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	2	63.31
(1,96)	1:A:84:LEU:C	1:A:85:GLU:N	1:A:85:GLU:CA	1:A:85:GLU:C	2	62.78
(1,62)	1:A:57:VAL:C	1:A:58:MET:N	1:A:58:MET:CA	1:A:58:MET:C	4	62.71
(1,62)	1:A:57:VAL:C	1:A:58:MET:N	1:A:58:MET:CA	1:A:58:MET:C	9	62.7
(1,149)	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	1:A:65:LYS:N	2	62.56
(1,149)	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	1:A:65:LYS:N	1	62.4
(1,117)	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	1:A:31:TYR:N	1	62.23
(1,106)	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	4	62.18
(1,133)	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	1:A:52:LYS:N	6	62.01
(1,133)	1:A:51:VAL:N	1:A:51:VAL:CA	1:A:51:VAL:C	1:A:52:LYS:N	8	61.96
(1,106)	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	1	61.87
(1,106)	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	8	61.51
(1,25)	1:A:26:MET:C	1:A:27:THR:N	1:A:27:THR:CA	1:A:27:THR:C	3	61.21
(1,131)	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	1:A:49:GLU:N	6	61.11
(1,149)	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	1:A:65:LYS:N	10	61.03
(1,22)	1:A:22:SER:C	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	1	60.9
(1,96)	1:A:84:LEU:C	1:A:85:GLU:N	1:A:85:GLU:CA	1:A:85:GLU:C	5	60.7
(1,100)	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	2	60.42
(1,95)	1:A:83:GLU:C	1:A:84:LEU:N	1:A:84:LEU:CA	1:A:84:LEU:C	2	60.28
(1,131)	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	1:A:49:GLU:N	8	59.87
(1,139)	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	6	59.77
(1,115)	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	1:A:30:THR:N	5	59.66
(1,145)	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	1:A:62:SER:N	2	59.64
(1,139)	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	3	59.62
(1,142)	1:A:59:ASP:C	1:A:60:PHE:N	1:A:60:PHE:CA	1:A:60:PHE:C	3	59.53
(1,149)	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	1:A:65:LYS:N	8	59.37
(1,139)	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	10	59.22
(1,100)	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	8	59.17
(1,62)	1:A:57:VAL:C	1:A:58:MET:N	1:A:58:MET:CA	1:A:58:MET:C	2	58.97
(1,97)	1:A:1:MET:C	1:A:2:LYS:N	1:A:2:LYS:CA	1:A:2:LYS:C	5	58.79
(1,62)	1:A:57:VAL:C	1:A:58:MET:N	1:A:58:MET:CA	1:A:58:MET:C	5	58.73
(1,112)	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	1:A:19:LEU:N	7	58.72
(1,139)	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	1	58.32
(1,139)	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	5	57.92
(1,143)	1:A:60:PHE:N	1:A:60:PHE:CA	1:A:60:PHE:C	1:A:61:ILE:N	8	57.81
(1,136)	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	5	57.51
(1,131)	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	1:A:49:GLU:N	2	57.3
(1,151)	1:A:66:GLU:N	1:A:66:GLU:CA	1:A:66:GLU:C	1:A:67:ASN:N	2	56.94
(1,142)	1:A:59:ASP:C	1:A:60:PHE:N	1:A:60:PHE:CA	1:A:60:PHE:C	10	56.78



1PQX

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

Key	$\frac{\textit{ed from previous } p}{\mathbf{Atom-1}}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,100)	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	10	56.58
(1,139)	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	4	56.07
(1,139)	1:A:56:HIS:N	1:A:56:HIS:CA	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	7	56.07
(1,62)	1:A:57:VAL:C	1:A:58:MET:N	1:A:58:MET:CA	1:A:58:MET:C	1	56.0
(1,117)	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	1:A:31:TYR:N	3	55.92
(1,112)	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	1:A:19:LEU:N	5	55.84
(1,131)	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	1:A:49:GLU:N	7	55.67
(1,131)	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	1:A:49:GLU:N	5	55.61
(1,117)	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	1:A:31:TYR:N	8	55.1
(1,149)	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	1:A:65:LYS:N	5	54.53
(1,62)	1:A:57:VAL:C	1:A:58:MET:N	1:A:58:MET:CA	1:A:58:MET:C	3	53.96
(1,62)	1:A:57:VAL:C	1:A:58:MET:N	1:A:58:MET:CA	1:A:58:MET:C	6	53.78
(1,97)	1:A:1:MET:C	1:A:2:LYS:N	1:A:2:LYS:CA	1:A:2:LYS:C	3	53.73
(1,23)	1:A:23:ARG:C	1:A:24:GLU:N	1:A:24:GLU:CA	1:A:24:GLU:C	3	53.69
(1,104)	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	9	53.52
(1,131)	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	1:A:49:GLU:N	1	53.07
(1,112)	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	1:A:19:LEU:N	9	52.84
(1,101)	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	4	52.8
(1,142)	1:A:59:ASP:C	1:A:60:PHE:N	1:A:60:PHE:CA	1:A:60:PHE:C	5	52.39
(1,100)	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	1:A:6:ILE:N	7	51.82
(1,96)	1:A:84:LEU:C	1:A:85:GLU:N	1:A:85:GLU:CA	1:A:85:GLU:C	9	51.72
(1,131)	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	1:A:49:GLU:N	4	51.26
(1,106)	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	2	51.12
(1,25)	1:A:26:MET:C	1:A:27:THR:N	1:A:27:THR:CA	1:A:27:THR:C	7	51.1
(1,112)	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	1:A:19:LEU:N	3	50.92
(1,151)	1:A:66:GLU:N	1:A:66:GLU:CA	1:A:66:GLU:C	1:A:67:ASN:N	1	50.81
(1,112)	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	1:A:19:LEU:N	1	50.28
(1,140)	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	10	50.0
(1,104)	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	7	49.97
(1,140)	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	8	49.82
(1,62)	1:A:57:VAL:C	1:A:58:MET:N	1:A:58:MET:CA	1:A:58:MET:C	7	49.72
(1,151)	1:A:66:GLU:N	1:A:66:GLU:CA	1:A:66:GLU:C	1:A:67:ASN:N	9	49.43
(1,140)	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	7	49.37
(1,136)	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	7	49.07
(1,97)	1:A:1:MET:C	1:A:2:LYS:N	1:A:2:LYS:CA	1:A:2:LYS:C	8	48.98
(1,140)	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	4	48.96
(1,151)	1:A:66:GLU:N	1:A:66:GLU:CA	1:A:66:GLU:C	1:A:67:ASN:N	4	48.91
(1,117)	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	1:A:31:TYR:N	7	48.55
(1,117)	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	1:A:31:TYR:N	9	48.42
(1,140)	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	5	48.27
(1,140)	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	3	47.92
(1,140)	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	6	47.79
(1,131)	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	1:A:49:GLU:N	10	47.75
(1,114)	1:A:22:SER:N	1:A:22:SER:CA	1:A:22:SER:C	1:A:23:ARG:N	3	47.7
(1,104)	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	1	47.7
(1,108)	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	1	47.44
(1,136)	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	3	47.31
(1,104)	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	3	47.3
(1,112)	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	1:A:19:LEU:N	4	46.85
(1,140)	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	1	46.7
(1,112)	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	1:A:19:LEU:N	2	46.59



Key	Atom-1	<i>Atom-2</i>	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,140)	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	9	46.51
(1,136)	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	10	46.28
(1,104)	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	8	46.24
(1,151)	1:A:66:GLU:N	1:A:66:GLU:CA	1:A:66:GLU:C	1:A:67:ASN:N	5	46.21
(1,104)	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	2	46.07
(1,131)	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	1:A:49:GLU:N	9	46.06
(1,136)	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	1	45.88
(1,136)	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	4	45.81
(1,140)	1:A:56:HIS:C	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	2	45.74
(1,146)	1:A:62:SER:C	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	2	45.69
(1,104)	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	10	45.13
(1,136)	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	2	45.02
(1,136)	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	6	45.01
(1,117)	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	1:A:31:TYR:N	10	44.87
(1,104)	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	4	44.72
(1,104)	1:A:14:THR:N	1:A:14:THR:CA	1:A:14:THR:C	1:A:15:MET:N	5	44.54
(1,108)	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	2	44.49
(1,136)	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	8	44.0
(1,146)	1:A:62:SER:C	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	1	43.41
(1,136)	1:A:54:ILE:C	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	9	43.36
(1,112)	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	1:A:19:LEU:N	8	43.31
(1,95)	1:A:83:GLU:C	1:A:84:LEU:N	1:A:84:LEU:CA	1:A:84:LEU:C	10	42.47
(1,117)	1:A:30:THR:N	1:A:30:THR:CA	1:A:30:THR:C	1:A:31:TYR:N	2	42.19
(1,97)	1:A:1:MET:C	1:A:2:LYS:N	1:A:2:LYS:CA	1:A:2:LYS:C	9	42.18
(1,99)	1:A:4:ILE:C	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	10	41.98
(1,146)	1:A:62:SER:C	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	9	41.75
(1,146)	1:A:62:SER:C	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	4	41.3
(1,149)	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	1:A:65:LYS:N	9	41.11
(1,146)	1:A:62:SER:C	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	3	41.05
(1,108)	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	4	40.95
(1,108)	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	9	40.53
(1,146)	1:A:62:SER:C	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	10	39.97
(1,146)	1:A:62:SER:C	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	7	39.83
(1,131)	1:A:48:VAL:N	1:A:48:VAL:CA	1:A:48:VAL:C	1:A:49:GLU:N	3	39.78
(1,106)	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	1:A:16:LYS:N	5	39.6
(1,146)	1:A:62:SER:C	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	6	39.41
(1,70)	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	10	39.1
(1,146)	1:A:62:SER:C	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	8	39.05
(1,142)	1:A:59:ASP:C	1:A:60:PHE:N	1:A:60:PHE:CA	1:A:60:PHE:C	1	38.75
(1,146)	1:A:62:SER:C	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	5	38.58
(1,102)	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	1:A:7:SER:N	4	38.48
(1,112)	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	1:A:19:LEU:N	6	38.01
(1,178)	1:A:86:HIS:N	1:A:86:HIS:CA	1:A:86:HIS:C	1:A:87:HIS:N	9	37.68
(1,108)	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	3	37.06
(1,70)	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	1	36.19
(1,70)	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	2	35.26
(1,142)	1:A:59:ASP:C	1:A:60:PHE:N	1:A:60:PHE:CA	1:A:60:PHE:C	4	35.13
(1,142)	1:A:59:ASP:C	1:A:60:PHE:N	1:A:60:PHE:CA	1:A:60:PHE:C	2	35.05
(1,108)	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	5	34.48
(1,97)	1:A:1:MET:C	1:A:2:LYS:N	1:A:2:LYS:CA	1:A:2:LYS:C	7	34.33
		1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	5	34.29



(1.147) 1:A-63:VALEN	Key	$rac{\textbf{Atom-1}}{\mathbf{Atom-1}}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1.108) 1:A:16:1YS:N 1:A:16:1XS:CA 1:A:16:1XS:C 1:A:16:1XS:C 1:A:16:1XS:C 1:A:16:1XS:C 1:A:16:1XS:C 1:A:16:1XS:C 1:A:13:1XS:C 1:A:13:1		1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	9	34.06
(1.42)	· · /	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	7	33.53
(1,42)	(1,147)	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	3	33.49
(1,97)	· · /	1:A:59:ASP:C	1:A:60:PHE:N	1:A:60:PHE:CA	1:A:60:PHE:C	7	33.39
(1,142)	(1,97)	1:A:1:MET:C	1:A:2:LYS:N	1:A:2:LYS:CA	1:A:2:LYS:C	2	33.24
(1,42)	/	1:A:1:MET:C	1:A:2:LYS:N	1:A:2:LYS:CA	1:A:2:LYS:C	6	33.2
(1,977	/	1:A:59:ASP:C	1:A:60:PHE:N	1:A:60:PHE:CA	1:A:60:PHE:C	8	33.05
(1,70)	· · /	1:A:1:MET:C	1:A:2:LYS:N	1:A:2:LYS:CA	1:A:2:LYS:C	10	32.33
(1,108) 1:A:16:LYS:N	(1,147)	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	2	32.29
(1,142)	(1,70)	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	6	32.28
(1,147)	(1,108)	1:A:16:LYS:N	1:A:16:LYS:CA	1:A:16:LYS:C	1:A:17:ILE:N	8	31.55
(1,70)	(1,142)	1:A:59:ASP:C	1:A:60:PHE:N	1:A:60:PHE:CA	1:A:60:PHE:C	6	31.26
(1,25) 1:A:26:MET:C	(1,147)	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	1	31.13
(1,95) 1:A:83:GLU:C 1:A:84:LEU:N 1:A:84:LEU:CA 1:A:84:LEU:C 8 29:69 (1,142) 1:A:63:YAL:C 1:A:60:PHE:N 1:A:60:PHE:CA 1:A:60:PHE:C 9 29:68 (1,70) 1:A:63:VAL:C 1:A:64:ASP:N 1:A:64:ASP:CA 1:A:64:ASP:C 4 29:04 (1,110) 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 5 28:58 (1,147) 1:A:63:VAL:N 1:A:63:VAL:CA 1:A:63:VAL:C 1:A:63:VAL:CA 1:A:63:VAL:CA 1:A:63:VAL:CA 1:A:63:VAL:CA 1:A:64:ASP:N 10 28:1 (1,147) 1:A:63:VAL:N 1:A:63:VAL:CA 1:A:6	(1,70)	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	9	30.71
(1,142) 1:A:59:ASP:C 1:A:60:PHE:N 1:A:60:PHE:CA 1:A:60:PHE:C 9 29.68 (1,70) 1:A:63:VAL:C 1:A:64:ASP:N 1:A:64:ASP:CA 1:A:64:ASP:C 4 29.04 (1,110) 1:A:17:ILE:C 1:A:63:VAL:CA 1:A:64:ASP:N 10 28.1 (1,147) 1:A:63:VAL:C 1:A:63:VAL:CA 1:A:63:VAL:C 1:A:64:ASP:N 10 28.1 (1,147) 1:A:63:VAL:C 1:A:64:ASP:N 10 28.1 (1,50) 1:A:64:ASVAL:C 1:A:64:ASP:N 10 128.1 (1,50) 1:A:63:VAL:C 1:A:64:ASP:N 1:A:64:ASP:CA 1:A:64:ASP:C 3 27.86 (1,170) 1:A:63:VAL:C 1:A:64:ASP:N 1:A:64:ASP:CA 1:A:64:ASP:C 3 27.86 (1,147) 1:A:63:VAL:C 1:A:64:ASP:N 1:A:64:ASP:CA 1:A:64:ASP:N 5 26.25 (1,147) 1:A:63:VAL:C 1:A:64:ASP:N 1:A:63:VAL:C 1:A:64:ASP:N 4 26.24 (1,70) 1:A:63:VAL:C 1:A:64:ASP:N 1:A:63:VAL:C 1:A:64:ASP:N 4 26.24 (1,70) 1:A:63:VAL:C 1:A:64:ASP:N 1:A:64:ASP:C 8 26.13 (1,27) 1:A:28:SER:C 1:A:29:ASP:N 1:A:64:ASP:CA 1:A:64:ASP:C 8 26.13 (1,27) 1:A:28:SER:C 1:A:29:ASP:N 1:A:64:ASP:CA 1:A:64:ASP:N 6 25.68 (1,110) 1:A:17:ILE:N 1:A:64:ASP:N 1:A:64:ASP:N 6 25.68 (1,110) 1:A:17:ILE:C 1:A:64:ASP:N 6 25.68 (1,110) 1:A:17:ILE:C 1:A:49:GLU:N 1:A:63:VAL:C 1:A:64:ASP:N 6 25.68 (1,110) 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1 25.52 (1,50) 1:A:48:VAL:C 1:A:49:GLU:N 1:A:49:GLU:C 1:A:18:THR:N 9 24.74 (1,110) 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 9 24.74 (1,110) 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 9 24.29 (1,147) 1:A:63:VAL:N 1:A:63:VAL:C 1:A:63:VAL:C 1:A:18:THR:N 9 24.29 (1,147) 1:A:63:VAL:N 1:A:63:VAL:C 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 9 24.29 (1,147) 1:A:63:VAL:N 1:A:63:VAL:C 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 9 24.29 (1,147) 1:A:63:VAL:N 1:A:63:VAL:C 1:A:49:GLU:N 1:A:49:GLU:C 1:A:49:GLU:C 1:A:18:THR:N 9 24.23 (1,147) 1:A:63:VAL:C 1:A:49:GLU:N 1:A:49:GLU:C 1:A:	(1,25)	1:A:26:MET:C	1:A:27:THR:N	1:A:27:THR:CA	1:A:27:THR:C	8	30.45
(1,142) 1:A:59:ASP:C 1:A:60:PHE:N 1:A:60:PHE:CA 1:A:60:PHE:C 9 29.68 (1,70) 1:A:63:VAL:C 1:A:64:ASP:N 1:A:64:ASP:CA 4 29.04 (1,110) 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 5 28.58 (1,147) 1:A:63:VAL:N 1:A:63:VAL:CA 1:A:63:VAL:CA 1:A:63:VAL:CA 1:A:64:ASP:N 10 28.1 (1,50) 1:A:63:VAL:C 1:A:64:ASP:N 1:A:64:ASP:CA 1:A:64:ASP:CA 3 27.86 (1,147) 1:A:63:VAL:C 1:A:64:ASP:N 1:A:64:ASP:CA 1:A:64:ASP:N 5 26.25 (1,147) 1:A:63:VAL:C 1:A:63:VAL:CA 1:A:64:ASP:CA 1:A:64:ASP:N 4 26.24 (1,70) 1:A:63:VAL:C 1:A:64:ASP:N 1:A:64:ASP:N 4 26.25 (1,147) 1:A:63:VAL:C 1:A:64:ASP:CA 1:A:64:ASP:N 4 26.24 (1,70) 1:A:63:VAL:N 1:A:63:VAL:CA 1:A:63:VAL:CA 1:A:64:ASP:N 4 26.25 (1,147)	· · /	1:A:83:GLU:C	1:A:84:LEU:N	1:A:84:LEU:CA	1:A:84:LEU:C	8	29.69
(1,110) 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 5 28.58 (1,147) 1:A:63:VAL:N 1:A:63:VAL:C 1:A:63:VAL:C 1:A:63:VAL:C 3 28.08 (1,70) 1:A:48:VAL:C 1:A:49:GLU:N 1:A:49:GLU:CA 1:A:49:GLU:CA 3 28.08 (1,70) 1:A:63:VAL:C 1:A:64:ASP:N 1:A:64:ASP:CA 1:A:64:ASP:C 3 27.86 (1,147) 1:A:63:VAL:N 1:A:63:VAL:CA 1:A:63:VAL:C 1:A:64:ASP:N 5 26.25 (1,147) 1:A:63:VAL:N 1:A:63:VAL:CA 1:A:63:VAL:C 1:A:64:ASP:N 5 26.25 (1,147) 1:A:63:VAL:N 1:A:63:VAL:CA 1:A:63:VAL:C 1:A:64:ASP:N 4 26.24 (1,70) 1:A:63:VAL:C 1:A:64:ASP:N 1:A:64:ASP:CA 1:A:64:ASP:C 8 26.13 (1,27) 1:A:28:SER:C 1:A:29:ASP:N 1:A:29:ASP:CA 1:A:29:ASP:C 2 25.99 (1,147) 1:A:63:VAL:N 1:A:63:VAL:CA 1:A:63:VAL:C 1:A:64:ASP:N 6 25.68 (1,110) 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1 25.52 (1,50) 1:A:48:VAL:C 1:A:49:GLU:N 1:A:49:GLU:CA 1:A:49:GLU:C 8 25.04 (1,110) 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1 25.52 (1,110) 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 3 24.59 (1,110) 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 8 24.27 (1,110) 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 8 24.27 (1,110) 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 9 24.23 (1,147) 1:A:63:VAL:N 1:A:63:VAL:CA 1:A:63:VAL:C 1:A:49:GLU:C 1:A:49:GLU:C 4 23.81 (1,27) 1:A:28:SER:C 1:A:29:ASP:N 1:A:29:ASP:CA 1:A:29:ASP:C 5 23.57 (1,50) 1:A:48:VAL:C 1:A:49:GLU:N 1:A:49:GLU:CA 1:A:49:GLU:C 1:A:49	, ,	1:A:59:ASP:C	1:A:60:PHE:N	1:A:60:PHE:CA	1:A:60:PHE:C	9	29.68
(1,110) 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 5 28.58 (1,147) 1:A:63:VAL:N 1:A:63:VAL:CA 1:A:63:VAL:C 1:A:49:GLU:CA 1:A:49:GLU:CA 1:A:49:GLU:CA 28.18 (1,70) 1:A:63:VAL:C 1:A:64:ASP:N 1:A:64:ASP:CA 1:A:63:VAL:CA 1:A:63:VAL:CA 1:A:63:VAL:CA 1:A:63:VAL:C 1:A:63:VAL:CA 1:A:64:ASP:N 4 26:24 (1,70) 1:A:63:VAL:CA 1:A:63:VAL:CA 1:A:63:VAL:CA 1:A:63:VAL:CA 1:A:63:VAL:CA 2:A:63:VAL:CA 1:A:63:VAL:CA 1:A:49:GLU:CA 1:A:49:GLU:CA 1:A:49:GLU:CA 1:A:49:GLU:CA 1:A:49:GLU:CA 1:A:49:GLU:CA 1:A	(' /	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	4	29.04
(1,147) 1:A:63:VAL:N 1:A:63:VAL:CA 1:A:63:VAL:C 1:A:64:ASP:N 10 28.1 (1,50) 1:A:48:VAL:C 1:A:49:GLU:N 1:A:49:GLU:CA 1:A:49:GLU:C 3 28.08 (1,70) 1:A:63:VAL:C 1:A:64:ASP:CA 1:A:64:ASP:CA 1:A:64:ASP:CB 3 27.86 (1,147) 1:A:63:VAL:N 1:A:63:VAL:CA 1:A:63:VAL:C 1:A:64:ASP:N 5 26.25 (1,147) 1:A:63:VAL:N 1:A:63:VAL:CA 1:A:64:ASP:CA 1:A:64:ASP:N 4 26.24 (1,70) 1:A:63:VAL:C 1:A:64:ASP:N 1:A:64:ASP:CA 8 26.13 (1,27) 1:A:63:VAL:C 1:A:64:ASP:N 1:A:29:ASP:CA 2:A:64:ASP:N 6 25.68 (1,147) 1:A:63:VAL:CA 1:A:46:ASP:N 1:A:29:ASP:N 6 25.68 (1,147) 1:A:63:VAL:CA 1:A:49:AL:CA 1:A:49:ASP:CA 1:A:46:ASP:N 6 25.68 (1,147) 1:A:48:VAL:C 1:A:49:GLU:N 1:A:49:GLU:CA 1:A:49:GLU:CA 8 25.04 (1,37)	/	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C		5	
(1,50) 1:A:48:VAL:C 1:A:49:GLU:N 1:A:49:GLU:CA 1:A:49:GLU:C 3 28.08 (1,70) 1:A:63:VAL:C 1:A:64:ASP:N 1:A:64:ASP:CA 1:A:64:ASP:C 3 27.86 (1,147) 1:A:63:VAL:C 1:A:63:VAL:C 1:A:63:VAL:C 1:A:64:ASP:N 5 26.25 (1,147) 1:A:63:VAL:C 1:A:63:VAL:CA 1:A:63:VAL:C 1:A:64:ASP:N 4 26.24 (1,70) 1:A:28:SER:C 1:A:29:ASP:N 1:A:64:ASP:CA 1:A:64:ASP:CA 8 26.13 (1,27) 1:A:28:SER:C 1:A:29:ASP:N 1:A:29:ASP:CA 1:A:29:ASP:C 2 25.99 (1,147) 1:A:63:VAL:N 1:A:63:VAL:CA 1:A:63:VAL:C 1:A:64:ASP:N 6 25.68 (1,110) 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1 25.52 (1,137) 1:A:55:PHE:N 1:A:55:PHE:CA 1:A:49:GLU:CA 1:A:49:GLU:C 8 25.04 (1,137) 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 9 <t< td=""><td>(' /</td><td>1:A:63:VAL:N</td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td></t<>	(' /	1:A:63:VAL:N					
(1,70) 1:A:63:VAL:C 1:A:64:ASP:N 1:A:64:ASP:CA 1:A:64:ASP:C 3 27.86 (1,147) 1:A:63:VAL:N 1:A:63:VAL:CA 1:A:63:VAL:C 1:A:64:ASP:N 5 26.25 (1,147) 1:A:63:VAL:N 1:A:63:VAL:CA 1:A:63:VAL:C 1:A:64:ASP:N 4 26.24 (1,70) 1:A:63:VAL:N 1:A:64:ASP:N 1:A:64:ASP:CA 1:A:64:ASP:CA 8 26.13 (1,27) 1:A:28:SER:C 1:A:29:ASP:N 1:A:29:ASP:CA 1:A:29:ASP:C 2 25.99 (1,147) 1:A:63:VAL:N 1:A:63:VAL:CA 1:A:63:VAL:CA 1:A:63:VAL:CA 1:A:63:VAL:CA 1:A:63:VAL:CA 1:A:63:VAL:CA 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1 25.52 (1,50) 1:A:48:VAL:C 1:A:49:GLU:N 1:A:49:GLU:CA 1:A:49:GLU:C 8 25.04 (1,137) 1:A:45:FPHE:N 1:A:45:FPHE:CA 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 3 24.79 (1,110) 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 3 24.59 </td <td>· · /</td> <td></td> <td></td> <td>1:A:49:GLU:CA</td> <td></td> <td></td> <td></td>	· · /			1:A:49:GLU:CA			
(1,147) 1:A:63:VAL:N 1:A:63:VAL:CA 1:A:63:VAL:C 1:A:64:ASP:N 5 26.25 (1,147) 1:A:63:VAL:N 1:A:63:VAL:CA 1:A:63:VAL:C 1:A:64:ASP:N 4 26.24 (1,70) 1:A:63:VAL:C 1:A:64:ASP:N 1:A:64:ASP:CA 1:A:64:ASP:C 8 26.13 (1,27) 1:A:63:VAL:C 1:A:29:ASP:CA 1:A:64:ASP:N 6 25.68 (1,147) 1:A:63:VAL:N 1:A:63:VAL:CA 1:A:63:VAL:C 1:A:64:ASP:N 6 25.68 (1,147) 1:A:63:VAL:N 1:A:63:VAL:CA 1:A:63:VAL:C 1:A:44:ASP:N 6 25.68 (1,147) 1:A:63:VAL:C 1:A:49:GLU:N 1:A:49:GLU:CA 1:A:49:GLU:C 8 25.04 (1,137) 1:A:55:PHE:N 1:A:55:PHE:CA 1:A:55:PHE:C 1:A:56:HIS:N 9 24.74 (1,110) 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 3 24.29 (1,147) 1:A:63:VAL:N 1:A:26:3VAL:CA 1:A:49:GLU:CA 1:A:49:GLU:CA 1:A:49:GLU:CA	/						
(1,147) 1:A:63:VAL:N 1:A:63:VAL:CA 1:A:63:VAL:C 1:A:64:ASP:N 4 26.24 (1,70) 1:A:63:VAL:C 1:A:64:ASP:N 1:A:64:ASP:CA 1:A:64:ASP:C 8 26.13 (1,27) 1:A:28:SER:C 1:A:29:ASP:N 1:A:29:ASP:CA 1:A:29:ASP:C 2 25.99 (1,147) 1:A:63:VAL:N 1:A:63:VAL:CA 1:A:63:VAL:C 1:A:29:ASP:C 2 25.99 (1,147) 1:A:63:VAL:N 1:A:63:VAL:CA 1:A:63:VAL:C 1:A:49:GLU:CA 1:A:64:ASP:N 6 25.68 (1,110) 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 1:A:49:GLU:CA 1:A:49:GLU:CB 8 25.04 (1,137) 1:A:48:VAL:C 1:A:49:GLU:N 1:A:17:ILE:CB 1:A:17:ILE:CB 1:A:17:ILE:CB 1:A:18:THR:N 9 24.74 (1,110) 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 8 24.27 (1,110) 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 9 24.23 (1,147) 1:A:63:VAL:N	· · /						
(1,70) 1:A:63:VAL:C 1:A:64:ASP:N 1:A:64:ASP:CA 1:A:64:ASP:C 8 26.13 (1,27) 1:A:28:SER:C 1:A:29:ASP:N 1:A:29:ASP:CA 1:A:29:ASP:C 2 25.99 (1,147) 1:A:63:VAL:N 1:A:63:VAL:CA 1:A:63:VAL:C 1:A:64:ASP:N 6 25.68 (1,110) 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 1:A:17:ILE:N 1 25.52 (1,50) 1:A:48:VAL:C 1:A:49:GLU:N 1:A:49:GLU:CA 1:A:49:GLU:C 8 25.04 (1,137) 1:A:55:PHE:N 1:A:55:PHE:CA 1:A:47:ILE:C 1:A:18:THR:N 9 24.74 (1,110) 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 8 24.27 (1,110) 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 9 24.23 (1,147) 1:A:63:VAL:N 1:A:63:VAL:CA 1:A:63:VAL:C 1:A:49:GAU:CA 1:A:29:ASP:N 7 23.93 (1,27) 1:A:28:SER:C 1:A:29:ASP:N 1:A:29:ASP:CA 1:A:29:ASP:CA <td>\ /</td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td>	\ /						
(1,27) 1:A:28:SER:C 1:A:29:ASP:N 1:A:29:ASP:CA 1:A:29:ASP:C 2 25.99 (1,147) 1:A:63:VAL:N 1:A:63:VAL:CA 1:A:63:VAL:C 1:A:64:ASP:N 6 25.68 (1,110) 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 1:A:48:THR:N 1 25.52 (1,50) 1:A:48:VAL:C 1:A:49:GLU:N 1:A:49:GLU:CA 1:A:49:GLU:C 8 25.04 (1,137) 1:A:55:PHE:N 1:A:55:PHE:CA 1:A:55:PHE:C 1:A:56:HIS:N 9 24.74 (1,110) 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 3 24.59 (1,110) 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 8 24.27 (1,110) 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 8 24.27 (1,110) 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 9 24.23 (1,110) 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:CA<	<u> </u>						
(1,147) 1:A:63:VAL:N 1:A:63:VAL:CA 1:A:63:VAL:C 1:A:64:ASP:N 6 25.68 (1,110) 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1 25.52 (1,50) 1:A:48:VAL:C 1:A:49:GLU:N 1:A:49:GLU:CA 1:A:49:GLU:C 8 25.04 (1,137) 1:A:55:PHE:N 1:A:55:PHE:CA 1:A:55:PHE:C 1:A:66:HIS:N 9 24.74 (1,110) 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 3 24.59 (1,110) 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 8 24.27 (1,110) 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 9 24.23 (1,110) 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 8 24.27 (1,110) 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 9 24.23 (1,101) 1:A:21:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 1:A:18:TRIE:N 9	/						
(1,110) 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 1 25.52 (1,50) 1:A:48:VAL:C 1:A:49:GLU:N 1:A:49:GLU:CA 1:A:49:GLU:C 8 25.04 (1,137) 1:A:55:PHE:N 1:A:55:PHE:CA 1:A:55:PHE:C 1:A:66:HIS:N 9 24.74 (1,110) 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 3 24.59 (1,110) 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 8 24.27 (1,110) 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:18:THR:N 9 24.23 (1,110) 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:18:THR:N 8 24.27 (1,110)	/					6	
(1,50) 1:A:48:VAL:C 1:A:49:GLU:N 1:A:49:GLU:CA 1:A:49:GLU:C 8 25.04 (1,137) 1:A:55:PHE:N 1:A:55:PHE:CA 1:A:55:PHE:C 1:A:56:HIS:N 9 24.74 (1,110) 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 3 24.59 (1,110) 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 8 24.27 (1,110) 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 9 24.23 (1,147) 1:A:63:VAL:N 1:A:63:VAL:CA 1:A:63:VAL:C 1:A:64:ASP:N 7 23.93 (1,27) 1:A:28:SER:C 1:A:29:ASP:N 1:A:29:ASP:CA 1:A:29:ASP:C 9 23.91 (1,50) 1:A:48:VAL:C 1:A:49:GLU:N 1:A:49:GLU:CA 1:A:49:GLU:C 4 23.81 (1,27) 1:A:28:SER:C 1:A:29:ASP:N 1:A:29:ASP:CA 1:A:29:ASP:C 5 23.57 (1,50) 1:A:48:VAL:C 1:A:49:GLU:N 1:A:49:GLU:CA 1:A:49:GLU:C 10 <th< td=""><td> /</td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td></th<>	/						
(1,137) 1:A:55:PHE:N 1:A:55:PHE:CA 1:A:55:PHE:C 1:A:56:HIS:N 9 24.74 (1,110) 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 3 24.59 (1,110) 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 8 24.27 (1,110) 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 9 24.23 (1,147) 1:A:63:VAL:N 1:A:63:VAL:CA 1:A:63:VAL:C 1:A:64:ASP:N 7 23.93 (1,27) 1:A:28:SER:C 1:A:29:ASP:N 1:A:29:ASP:CA 1:A:49:GLU:C 6 23.86 (1,50) 1:A:48:VAL:C 1:A:49:GLU:N 1:A:49:GLU:CA 1:A:49:GLU:C 4 23.81 (1,27) 1:A:28:SER:C 1:A:29:ASP:N 1:A:29:ASP:CA 1:A:49:GLU:C 4 23.38 (1,30) 1:A:48:VAL:C 1:A:49:GLU:N 1:A:49:GLU:CA 1:A:49:GLU:C 10 23.38 (1,317) 1:A:48:VAL:C 1:A:49:GLU:N 1:A:49:GLU:CA 1:A:49:GLU:C 10 <	/						
(1,110) 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 3 24.59 (1,110) 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 8 24.27 (1,110) 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 9 24.23 (1,110) 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 9 24.23 (1,110) 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 9 24.23 (1,110) 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 9 24.23 (1,110) 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 9 24.23 (1,147) 1:A:63:VAL:N 1:A:63:VAL:C 1:A:49:GLU:N 1:A:49:GLU:CA 1:A:49:GLU:C 6 23.89 (1,50) 1:A:48:VAL:C 1:A:49:GLU:N 1:A:49:GLU:CA 1:A:49:GLU:C 10 23.38 (1,37) 1:A:48:VAL:C 1:A:49:GLU:N 1:A:49:GLU:CA 1:A:49:GLU:C 1:A:49:GLU:C 1 <t< td=""><td> /</td><td></td><td></td><td></td><td></td><td>9</td><td></td></t<>	/					9	
(1,110) 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 8 24.27 (1,110) 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 9 24.23 (1,147) 1:A:63:VAL:N 1:A:63:VAL:CA 1:A:63:VAL:C 1:A:46:ASP:N 7 23.93 (1,27) 1:A:28:SER:C 1:A:29:ASP:N 1:A:29:ASP:CA 1:A:29:ASP:C 9 23.91 (1,50) 1:A:48:VAL:C 1:A:49:GLU:N 1:A:49:GLU:CA 1:A:49:GLU:C 6 23.86 (1,50) 1:A:48:VAL:C 1:A:49:GLU:N 1:A:49:GLU:CA 1:A:49:GLU:C 4 23.81 (1,27) 1:A:48:VAL:C 1:A:49:GLU:N 1:A:49:GLU:CA 1:A:49:GLU:C 4 23.81 (1,27) 1:A:48:VAL:C 1:A:49:GLU:N 1:A:49:GLU:CA 1:A:49:GLU:C 10 23.38 (1,137) 1:A:48:VAL:C 1:A:49:GLU:N 1:A:49:GLU:CA 1:A:49:GLU:C 10 23.27 (1,50) 1:A:48:VAL:C 1:A:49:GLU:N 1:A:29:ASP:CA 1:A:29:ASP:C 3 <th< td=""><td>\ ' ' /</td><td></td><td></td><td></td><td></td><td>3</td><td></td></th<>	\ ' ' /					3	
(1,110) 1:A:17:ILE:N 1:A:17:ILE:CA 1:A:17:ILE:C 1:A:18:THR:N 9 24.23 (1,147) 1:A:63:VAL:N 1:A:63:VAL:CA 1:A:63:VAL:C 1:A:64:ASP:N 7 23.93 (1,27) 1:A:28:SER:C 1:A:29:ASP:N 1:A:29:ASP:CA 1:A:29:ASP:C 9 23.91 (1,50) 1:A:48:VAL:C 1:A:49:GLU:N 1:A:49:GLU:CA 1:A:49:GLU:C 6 23.86 (1,50) 1:A:48:VAL:C 1:A:29:ASP:N 1:A:29:ASP:CA 1:A:49:GLU:C 4 23.81 (1,27) 1:A:28:SER:C 1:A:29:ASP:N 1:A:29:ASP:CA 1:A:49:GLU:C 10 23.38 (1,50) 1:A:48:VAL:C 1:A:49:GLU:N 1:A:49:GLU:CA 1:A:49:GLU:C 10 23.38 (1,137) 1:A:48:VAL:C 1:A:49:GLU:N 1:A:49:GLU:CA 1:A:49:GLU:C 1 23.27 (1,27) 1:A:28:SER:C 1:A:29:ASP:N 1:A:29:ASP:CA 1:A:29:ASP:C 3 23.23 (1,27) 1:A:28:SER:C 1:A:29:ASP:N 1:A:29:ASP:CA 1:A:29:ASP:C 7			1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	8	24.27
(1,27) 1:A:28:SER:C 1:A:29:ASP:N 1:A:29:ASP:CA 1:A:29:ASP:C 9 23.91 (1,50) 1:A:48:VAL:C 1:A:49:GLU:N 1:A:49:GLU:CA 1:A:49:GLU:C 6 23.86 (1,50) 1:A:48:VAL:C 1:A:49:GLU:N 1:A:49:GLU:CA 1:A:49:GLU:C 4 23.81 (1,27) 1:A:28:SER:C 1:A:29:ASP:N 1:A:29:ASP:CA 1:A:29:ASP:C 5 23.57 (1,50) 1:A:48:VAL:C 1:A:49:GLU:N 1:A:49:GLU:CA 1:A:49:GLU:C 10 23.38 (1,137) 1:A:55:PHE:N 1:A:55:PHE:CA 1:A:55:PHE:C 1:A:56:HIS:N 3 23.31 (1,50) 1:A:48:VAL:C 1:A:49:GLU:N 1:A:49:GLU:CA 1:A:49:GLU:C 1 23.27 (1,27) 1:A:28:SER:C 1:A:29:ASP:N 1:A:29:ASP:CA 1:A:29:ASP:C 3 23.23 (1,27) 1:A:48:VAL:C 1:A:49:GLU:N 1:A:49:GLU:CA 1:A:49:GLU:C 9 22.55 (1,50) 1:A:48:VAL:C 1:A:49:GLU:N 1:A:49:GLU:CA 1:A:49:GLU:C 9 22.		1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	9	24.23
(1,50) 1:A:48:VAL:C 1:A:49:GLU:N 1:A:49:GLU:CA 1:A:49:GLU:C 6 23.86 (1,50) 1:A:48:VAL:C 1:A:49:GLU:N 1:A:49:GLU:CA 1:A:49:GLU:C 4 23.81 (1,27) 1:A:28:SER:C 1:A:29:ASP:N 1:A:29:ASP:CA 1:A:29:ASP:C 5 23.57 (1,50) 1:A:48:VAL:C 1:A:49:GLU:N 1:A:49:GLU:CA 1:A:49:GLU:C 10 23.38 (1,137) 1:A:55:PHE:N 1:A:55:PHE:CA 1:A:55:PHE:C 1:A:56:HIS:N 3 23.31 (1,50) 1:A:48:VAL:C 1:A:49:GLU:N 1:A:49:GLU:CA 1:A:49:GLU:C 1 23.27 (1,27) 1:A:28:SER:C 1:A:29:ASP:N 1:A:29:ASP:CA 1:A:29:ASP:C 3 23.23 (1,27) 1:A:48:VAL:C 1:A:49:GLU:N 1:A:49:GLU:CA 1:A:49:GLU:C 9 22.62 (1,50) 1:A:48:VAL:C 1:A:49:GLU:N 1:A:49:GLU:CA 1:A:49:GLU:C 9 22.55 (1,50) 1:A:48:VAL:C 1:A:49:GLU:N 1:A:49:GLU:CA 1:A:49:GLU:C 5 22.	(1,147)	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	7	23.93
(1,50) 1:A:48:VAL:C 1:A:49:GLU:N 1:A:49:GLU:CA 1:A:49:GLU:C 6 23.86 (1,50) 1:A:48:VAL:C 1:A:49:GLU:N 1:A:49:GLU:CA 1:A:49:GLU:C 4 23.81 (1,27) 1:A:28:SER:C 1:A:29:ASP:N 1:A:29:ASP:CA 1:A:29:ASP:C 5 23.57 (1,50) 1:A:48:VAL:C 1:A:49:GLU:N 1:A:49:GLU:CA 1:A:49:GLU:C 10 23.38 (1,137) 1:A:55:PHE:N 1:A:55:PHE:CA 1:A:55:PHE:C 1:A:56:HIS:N 3 23.31 (1,50) 1:A:48:VAL:C 1:A:49:GLU:N 1:A:49:GLU:CA 1:A:49:GLU:C 1 23.27 (1,27) 1:A:28:SER:C 1:A:29:ASP:N 1:A:29:ASP:CA 1:A:29:ASP:C 3 23.23 (1,27) 1:A:48:VAL:C 1:A:49:GLU:N 1:A:49:GLU:CA 1:A:49:GLU:C 9 22.62 (1,50) 1:A:48:VAL:C 1:A:49:GLU:N 1:A:49:GLU:CA 1:A:49:GLU:C 9 22.55 (1,50) 1:A:48:VAL:C 1:A:49:GLU:N 1:A:49:GLU:CA 1:A:49:GLU:C 5 22.	(1,27)	1:A:28:SER:C	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	9	23.91
(1,50) 1:A:48:VAL:C 1:A:49:GLU:N 1:A:49:GLU:CA 1:A:49:GLU:C 4 23.81 (1,27) 1:A:28:SER:C 1:A:29:ASP:N 1:A:29:ASP:CA 1:A:29:ASP:C 5 23.57 (1,50) 1:A:48:VAL:C 1:A:49:GLU:N 1:A:49:GLU:CA 1:A:49:GLU:C 10 23.38 (1,137) 1:A:55:PHE:N 1:A:55:PHE:CA 1:A:55:PHE:C 1:A:56:HIS:N 3 23.31 (1,50) 1:A:48:VAL:C 1:A:49:GLU:N 1:A:49:GLU:CA 1:A:49:GLU:C 1 23.27 (1,27) 1:A:28:SER:C 1:A:29:ASP:N 1:A:29:ASP:CA 1:A:29:ASP:C 3 23.23 (1,27) 1:A:28:SER:C 1:A:29:ASP:N 1:A:29:ASP:CA 1:A:29:ASP:C 7 22.62 (1,50) 1:A:48:VAL:C 1:A:49:GLU:N 1:A:49:GLU:CA 1:A:49:GLU:C 9 22.55 (1,50) 1:A:48:VAL:C 1:A:49:GLU:N 1:A:49:GLU:CA 1:A:49:GLU:C 5 22.01 (1,50) 1:A:80:ALA:C 1:A:49:GLU:N 1:A:49:GLU:CA 1:A:49:GLU:C 5 22.							
(1,27) 1:A:28:SER:C 1:A:29:ASP:N 1:A:29:ASP:CA 1:A:29:ASP:C 5 23.57 (1,50) 1:A:48:VAL:C 1:A:49:GLU:N 1:A:49:GLU:CA 1:A:49:GLU:C 10 23.38 (1,137) 1:A:55:PHE:N 1:A:55:PHE:CA 1:A:55:PHE:C 1:A:56:HIS:N 3 23.31 (1,50) 1:A:48:VAL:C 1:A:49:GLU:N 1:A:49:GLU:CA 1:A:49:GLU:C 1 23.27 (1,27) 1:A:28:SER:C 1:A:29:ASP:N 1:A:29:ASP:CA 1:A:29:ASP:C 3 23.23 (1,27) 1:A:28:SER:C 1:A:29:ASP:N 1:A:29:ASP:CA 1:A:29:ASP:C 7 22.62 (1,50) 1:A:48:VAL:C 1:A:49:GLU:N 1:A:49:GLU:CA 1:A:49:GLU:C 9 22.55 (1,50) 1:A:48:VAL:C 1:A:49:GLU:N 1:A:49:GLU:CA 1:A:49:GLU:C 5 22.01 (1,92) 1:A:80:ALA:C 1:A:81:VAL:N 1:A:81:VAL:CA 1:A:81:VAL:C 10 21.77	(' /					4	
(1,50) 1:A:48:VAL:C 1:A:49:GLU:N 1:A:49:GLU:CA 1:A:49:GLU:C 10 23.38 (1,137) 1:A:55:PHE:N 1:A:55:PHE:CA 1:A:55:PHE:C 1:A:56:HIS:N 3 23.31 (1,50) 1:A:48:VAL:C 1:A:49:GLU:N 1:A:49:GLU:CA 1:A:49:GLU:C 1 23.27 (1,27) 1:A:28:SER:C 1:A:29:ASP:N 1:A:29:ASP:CA 1:A:29:ASP:C 3 23.23 (1,27) 1:A:28:SER:C 1:A:29:ASP:N 1:A:29:ASP:CA 1:A:29:ASP:C 7 22.62 (1,50) 1:A:48:VAL:C 1:A:49:GLU:N 1:A:49:GLU:CA 1:A:49:GLU:C 9 22.55 (1,50) 1:A:48:VAL:C 1:A:49:GLU:N 1:A:49:GLU:CA 1:A:49:GLU:C 2 22.38 (1,50) 1:A:48:VAL:C 1:A:49:GLU:N 1:A:49:GLU:CA 1:A:49:GLU:C 5 22.01 (1,92) 1:A:80:ALA:C 1:A:81:VAL:N 1:A:81:VAL:CA 1:A:81:VAL:C 10 21.77	/					5	
(1,137) 1:A:55:PHE:N 1:A:55:PHE:CA 1:A:55:PHE:C 1:A:56:HIS:N 3 23.31 (1,50) 1:A:48:VAL:C 1:A:49:GLU:N 1:A:49:GLU:CA 1:A:49:GLU:C 1 23.27 (1,27) 1:A:28:SER:C 1:A:29:ASP:N 1:A:29:ASP:CA 1:A:29:ASP:C 3 23.23 (1,27) 1:A:28:SER:C 1:A:29:ASP:N 1:A:29:ASP:CA 1:A:29:ASP:C 7 22.62 (1,50) 1:A:48:VAL:C 1:A:49:GLU:N 1:A:49:GLU:CA 1:A:49:GLU:C 9 22.55 (1,50) 1:A:48:VAL:C 1:A:49:GLU:N 1:A:49:GLU:CA 1:A:49:GLU:C 2 22.38 (1,50) 1:A:48:VAL:C 1:A:49:GLU:N 1:A:49:GLU:CA 1:A:49:GLU:C 5 22.01 (1,92) 1:A:80:ALA:C 1:A:81:VAL:N 1:A:81:VAL:CA 1:A:81:VAL:C 10 21.77				1:A:49:GLU:CA			
(1,50) 1:A:48:VAL:C 1:A:49:GLU:N 1:A:49:GLU:CA 1:A:49:GLU:C 1 23.27 (1,27) 1:A:28:SER:C 1:A:29:ASP:N 1:A:29:ASP:CA 1:A:29:ASP:C 3 23.23 (1,27) 1:A:28:SER:C 1:A:29:ASP:N 1:A:29:ASP:CA 1:A:29:ASP:C 7 22.62 (1,50) 1:A:48:VAL:C 1:A:49:GLU:N 1:A:49:GLU:CA 1:A:49:GLU:C 9 22.55 (1,50) 1:A:48:VAL:C 1:A:49:GLU:N 1:A:49:GLU:CA 1:A:49:GLU:C 2 22.38 (1,50) 1:A:48:VAL:C 1:A:49:GLU:N 1:A:49:GLU:CA 1:A:49:GLU:C 5 22.01 (1,92) 1:A:80:ALA:C 1:A:81:VAL:N 1:A:81:VAL:CA 1:A:81:VAL:C 10 21.77							
(1,27) 1:A:28:SER:C 1:A:29:ASP:N 1:A:29:ASP:CA 1:A:29:ASP:C 3 23.23 (1,27) 1:A:28:SER:C 1:A:29:ASP:N 1:A:29:ASP:CA 1:A:29:ASP:C 7 22.62 (1,50) 1:A:48:VAL:C 1:A:49:GLU:N 1:A:49:GLU:CA 1:A:49:GLU:C 9 22.55 (1,50) 1:A:48:VAL:C 1:A:49:GLU:N 1:A:49:GLU:CA 1:A:49:GLU:C 2 22.38 (1,50) 1:A:48:VAL:C 1:A:49:GLU:N 1:A:49:GLU:CA 1:A:49:GLU:C 5 22.01 (1,92) 1:A:80:ALA:C 1:A:81:VAL:N 1:A:81:VAL:CA 1:A:81:VAL:C 10 21.77							
(1,27) 1:A:28:SER:C 1:A:29:ASP:N 1:A:29:ASP:CA 1:A:29:ASP:C 7 22.62 (1,50) 1:A:48:VAL:C 1:A:49:GLU:N 1:A:49:GLU:CA 1:A:49:GLU:C 9 22.55 (1,50) 1:A:48:VAL:C 1:A:49:GLU:N 1:A:49:GLU:CA 1:A:49:GLU:C 2 22.38 (1,50) 1:A:48:VAL:C 1:A:49:GLU:N 1:A:49:GLU:CA 1:A:49:GLU:C 5 22.01 (1,92) 1:A:80:ALA:C 1:A:81:VAL:N 1:A:81:VAL:CA 1:A:81:VAL:C 10 21.77							
(1,50) 1:A:48:VAL:C 1:A:49:GLU:N 1:A:49:GLU:CA 1:A:49:GLU:C 9 22.55 (1,50) 1:A:48:VAL:C 1:A:49:GLU:N 1:A:49:GLU:CA 1:A:49:GLU:C 2 22.38 (1,50) 1:A:48:VAL:C 1:A:49:GLU:N 1:A:49:GLU:CA 1:A:49:GLU:C 5 22.01 (1,92) 1:A:80:ALA:C 1:A:81:VAL:N 1:A:81:VAL:CA 1:A:81:VAL:C 10 21.77							
(1,50) 1:A:48:VAL:C 1:A:49:GLU:N 1:A:49:GLU:CA 1:A:49:GLU:C 2 22.38 (1,50) 1:A:48:VAL:C 1:A:49:GLU:N 1:A:49:GLU:CA 1:A:49:GLU:C 5 22.01 (1,92) 1:A:80:ALA:C 1:A:81:VAL:N 1:A:81:VAL:CA 1:A:81:VAL:C 10 21.77							
(1,50) 1:A:48:VAL:C 1:A:49:GLU:N 1:A:49:GLU:CA 1:A:49:GLU:C 5 22.01 (1,92) 1:A:80:ALA:C 1:A:81:VAL:N 1:A:81:VAL:CA 1:A:81:VAL:C 10 21.77	/						
(1,92) 1:A:80:ALA:C 1:A:81:VAL:N 1:A:81:VAL:CA 1:A:81:VAL:C 10 21.77		1:A:48:VAL:C		1:A:49:GLU:CA		I	
	(' /					I	
(2,00) IIII 0 III 0 III 0 0 0 0 0 0 0 0 0	(1,96)	1:A:84:LEU:C	1:A:85:GLU:N	1:A:85:GLU:CA	1:A:85:GLU:C	1	21.68
(1,23) 1:A:23:ARG:C 1:A:24:GLU:N 1:A:24:GLU:CA 1:A:24:GLU:C 6 21.47	/					6	
(1,102) 1:A:6:ILE:N 1:A:6:ILE:CA 1:A:6:ILE:C 1:A:7:SER:N 5 21.38	· · /						
(1,27) 1:A:28:SER:C 1:A:29:ASP:N 1:A:29:ASP:CA 1:A:29:ASP:C 6 21.3		1:A:28:SER:C	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	6	21.3



Key	ea from previous p Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (\circ)
(1,50)	1:A:48:VAL:C	1:A:49:GLU:N	1:A:49:GLU:CA	1:A:49:GLU:C	7	20.51
(1,95)	1:A:83:GLU:C	1:A:84:LEU:N	1:A:84:LEU:CA	1:A:84:LEU:C	5	20.31
(1,137)	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	5	20.27
(1,147)	1:A:63:VAL:N	1:A:63:VAL:CA	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	8	19.78
(1,70)	1:A:63:VAL:C	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	7	19.43
(1,25)	1:A:26:MET:C	1:A:27:THR:N	1:A:27:THR:CA	1:A:27:THR:C	10	19.18
(1,27)	1:A:28:SER:C	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	8	18.86
(1,53)	1:A:52:LYS:C	1:A:53:SER:N	1:A:53:SER:CA	1:A:53:SER:C	6	18.81
(1,92)	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	1:A:81:VAL:CA	1:A:81:VAL:C	1	18.26
(1,137)	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	6	18.06
(1,92)	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	1:A:81:VAL:CA	1:A:81:VAL:C	4	18.05
(1,27)	1:A:28:SER:C	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	4	17.72
(1,110)	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	2	17.64
(1,98)	1:A:2:LYS:N	1:A:2:LYS:CA	1:A:2:LYS:C	1:A:3:ILE:N	1	17.58
(1,137)	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	2	17.19
(1,27)	1:A:28:SER:C	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	1	17.18
(1,97)	1:A:1:MET:C	1:A:2:LYS:N	1:A:2:LYS:CA	1:A:2:LYS:C	1	17.17
(1,92)	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	1:A:81:VAL:CA	1:A:81:VAL:C	6	17.16
(1,25)	1:A:26:MET:C	1:A:27:THR:N	1:A:27:THR:CA	1:A:27:THR:C	4	17.02
(1,25)	1:A:26:MET:C	1:A:27:THR:N	1:A:27:THR:CA	1:A:27:THR:C	9	16.87
(1,137)	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	4	16.62
(1,110)	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	4	16.4
(1,27)	1:A:28:SER:C	1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:CA	1:A:29:ASP:C	10	16.35
(1,110)	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	6	16.24
(1,137)	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	7	16.23
(1,92)	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	1:A:81:VAL:CA	1:A:81:VAL:C	5	16.15
(1,92)	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	1:A:81:VAL:CA	1:A:81:VAL:C	8	16.11
(1,137)	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	10	16.0
(1,114)	1:A:22:SER:N	1:A:22:SER:CA	1:A:22:SER:C	1:A:23:ARG:N	5	15.87
(1,95)	1:A:83:GLU:C	1:A:84:LEU:N	1:A:84:LEU:CA	1:A:84:LEU:C	1	15.83
(1,95)	1:A:83:GLU:C	1:A:84:LEU:N	1:A:84:LEU:CA	1:A:84:LEU:C	4	15.75
(1,92)	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	1:A:81:VAL:CA	1:A:81:VAL:C	7	15.33
(1,137)	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	1	15.07
(1,137)	1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CA	1:A:55:PHE:C	1:A:56:HIS:N	8	15.04
(1,92)	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	1:A:81:VAL:CA	1:A:81:VAL:C	3	14.6
(1,92)	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	1:A:81:VAL:CA	1:A:81:VAL:C	9	14.45
(1,97)	1:A:1:MET:C	1:A:2:LYS:N	1:A:2:LYS:CA	1:A:2:LYS:C	4	14.29
(1,3)	1:A:4:ILE:C	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	8	14.06
(1,92)	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	1:A:81:VAL:CA	1:A:81:VAL:C	2	13.62
(1,53)	1:A:52:LYS:C	1:A:53:SER:N	1:A:53:SER:CA	1:A:53:SER:C	2	13.62
(1,23)	1:A:23:ARG:C	1:A:24:GLU:N	1:A:24:GLU:CA	1:A:24:GLU:C	4	13.53
(1,110)	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	7	12.6
(1,3)	1:A:4:ILE:C	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	2	12.38
(1,38)	1:A:40:ALA:C	1:A:41:PHE:N	1:A:41:PHE:CA	1:A:41:PHE:C	4	12.31
(1,3)	1:A:4:ILE:C	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	4	12.12
(1,3)	1:A:4:ILE:C	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	7	11.93
(1,22)	1:A:22:SER:C	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	4	11.92
(1,98)	1:A:2:LYS:N	1:A:2:LYS:CA	1:A:2:LYS:C	1:A:3:ILE:N	7	11.66
(1,19)	1:A:19:LEU:C	1:A:20:SER:N	1:A:20:SER:CA	1:A:20:SER:C	2	11.65
(1,22)	1:A:22:SER:C	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	10	11.4
(1,38)	1:A:40:ALA:C	1:A:41:PHE:N	1:A:41:PHE:CA	1:A:41:PHE:C	8	11.21
	<u> </u>	I.	<u>I</u> .		Continu	ed on next page



Key	ed from previous p Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,19)	1:A:19:LEU:C	1:A:20:SER:N	1:A:20:SER:CA	1:A:20:SER:C	8	11.09
(1,38)	1:A:40:ALA:C	1:A:41:PHE:N	1:A:41:PHE:CA	1:A:41:PHE:C	7	10.87
(1,38)	1:A:40:ALA:C	1:A:41:PHE:N	1:A:41:PHE:CA	1:A:41:PHE:C	1	10.79
(1,38)	1:A:40:ALA:C	1:A:41:PHE:N	1:A:41:PHE:CA	1:A:41:PHE:C	3	10.72
(1,38)	1:A:40:ALA:C	1:A:41:PHE:N	1:A:41:PHE:CA	1:A:41:PHE:C	6	10.51
(1,53)	1:A:52:LYS:C	1:A:53:SER:N	1:A:53:SER:CA	1:A:53:SER:C	1	10.02
(1,3)	1:A:4:ILE:C	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	5	10.01
(1,38)	1:A:40:ALA:C	1:A:41:PHE:N	1:A:41:PHE:CA	1:A:41:PHE:C	9	9.84
(1,19)	1:A:19:LEU:C	1:A:20:SER:N	1:A:20:SER:CA	1:A:20:SER:C	3	9.82
(1,38)	1:A:40:ALA:C	1:A:41:PHE:N	1:A:41:PHE:CA	1:A:41:PHE:C	2	9.8
(1,38)	1:A:40:ALA:C	1:A:41:PHE:N	1:A:41:PHE:CA	1:A:41:PHE:C	10	9.67
(1,38)	1:A:40:ALA:C	1:A:41:PHE:N	1:A:41:PHE:CA	1:A:41:PHE:C	5	9.25
(1,3)	1:A:4:ILE:C	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	9	8.92
(1,3)	1:A:4:ILE:C	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	3	8.87
(1,3)	1:A:4:ILE:C	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	6	7.9
(1,19)	1:A:19:LEU:C	1:A:20:SER:N	1:A:20:SER:CA	1:A:20:SER:C	7	7.73
(1,114)	1:A:22:SER:N	1:A:22:SER:CA	1:A:22:SER:C	1:A:23:ARG:N	4	7.56
(1,19)	1:A:19:LEU:C	1:A:20:SER:N	1:A:20:SER:CA	1:A:20:SER:C	1	7.5
(1,3)	1:A:4:ILE:C	1:A:5:SER:N	1:A:5:SER:CA	1:A:5:SER:C	1	7.41
(1,110)	1:A:17:ILE:N	1:A:17:ILE:CA	1:A:17:ILE:C	1:A:18:THR:N	10	7.4
(1,53)	1:A:52:LYS:C	1:A:53:SER:N	1:A:53:SER:CA	1:A:53:SER:C	3	7.38
(1,53)	1:A:52:LYS:C	1:A:53:SER:N	1:A:53:SER:CA	1:A:53:SER:C	4	7.04
(1,53)	1:A:52:LYS:C	1:A:53:SER:N	1:A:53:SER:CA	1:A:53:SER:C	9	7.03
(1,19)	1:A:19:LEU:C	1:A:20:SER:N	1:A:20:SER:CA	1:A:20:SER:C	4	6.58
(1,19)	1:A:19:LEU:C	1:A:20:SER:N	1:A:20:SER:CA	1:A:20:SER:C	5	6.36
(1,35)	1:A:33:LYS:C	1:A:34:VAL:N	1:A:34:VAL:CA	1:A:34:VAL:C	8	6.27
(1,102)	1:A:6:ILE:N	1:A:6:ILE:CA	1:A:6:ILE:C	1:A:7:SER:N	10	6.14
(1,53)	1:A:52:LYS:C	1:A:53:SER:N	1:A:53:SER:CA	1:A:53:SER:C	5	5.91
(1,19)	1:A:19:LEU:C	1:A:20:SER:N	1:A:20:SER:CA	1:A:20:SER:C	6	5.4
(1,53)	1:A:52:LYS:C	1:A:53:SER:N	1:A:53:SER:CA	1:A:53:SER:C	7	5.38
(1,129)	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	1:A:47:LYS:N	3	4.89
(1,19)	1:A:19:LEU:C	1:A:20:SER:N	1:A:20:SER:CA	1:A:20:SER:C	9	4.82
(1,53)	1:A:52:LYS:C	1:A:53:SER:N	1:A:53:SER:CA	1:A:53:SER:C	8	3.57
(1,54)	1:A:53:SER:N	1:A:53:SER:CA	1:A:53:SER:C	1:A:54:ILE:N	2	3.06
(1,22)	1:A:22:SER:C	1:A:23:ARG:N	1:A:23:ARG:CA	1:A:23:ARG:C	6	2.71
(1,129)	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	1:A:47:LYS:N	9	2.65
(1,161)	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	1	2.63
(1,161)	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	6	2.3
(1,163)	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	10	2.27
(1,129)	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	1:A:47:LYS:N	7	2.27
(1,161)	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	5	2.15
(1,159)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	9	2.15
(1,174)	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	2	2.07
(1,163)	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	4	1.97
(1,174)	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	9	1.95
(1,164)	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	2	1.95
(1,164)	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	1	1.89
(1,159)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	10	1.88
(1,174)	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	6	1.84
(1,163)	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	5	1.83
(1,174)	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	7	1.8



1PQX

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

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,161)	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	4	1.76
(1,163)	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	1	1.71
(1,174)	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	4	1.7
(1,174)	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	1	1.66
(1,129)	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	1:A:47:LYS:N	10	1.61
(1,159)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	2	1.6
(1,174)	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	8	1.54
(1,161)	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	9	1.53
(1,174)	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	5	1.46
(1,159)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	4	1.4
(1,164)	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	10	1.36
(1,161)	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	7	1.33
(1,159)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	7	1.33
(1,155)	1:A:68:ASP:N	1:A:68:ASP:CA	1:A:68:ASP:C	1:A:69:ALA:N	3	1.33
(1,168)	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	1:A:78:VAL:N	9	1.31
(1,53)	1:A:52:LYS:C	1:A:53:SER:N	1:A:53:SER:CA	1:A:53:SER:C	10	1.29
(1,155)	1:A:68:ASP:N	1:A:68:ASP:CA	1:A:68:ASP:C	1:A:69:ALA:N	2	1.27
(1,164)	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	5	1.12
(1,163)	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	2	1.12
(1,155)	1:A:68:ASP:N	1:A:68:ASP:CA	1:A:68:ASP:C	1:A:69:ALA:N	1	1.07
(1,155)	1:A:68:ASP:N	1:A:68:ASP:CA	1:A:68:ASP:C	1:A:69:ALA:N	8	1.04
(1,164)	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	8	1.0
(1,129)	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	1:A:47:LYS:N	6	0.99
(1,164)	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	4	0.98
(1,161)	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	8	0.98
(1,164)	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	6	0.96
(1,161)	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	10	0.93
(1,129)	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	1:A:47:LYS:N	4	0.91
(1,163)	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	8	0.86
(1,159)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	1	0.78
(1,159)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	6	0.74
(1,163)	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	6	0.73
(1,161)	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	2	0.67
(1,163)	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	9	0.57
(1,161)	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	3	0.57
(1,166)	1:A:76:PRO:N	1:A:76:PRO:CA	1:A:76:PRO:C	1:A:77:LYS:N	8	0.56
(1,174)	1:A:80:ALA:N	1:A:80:ALA:CA	1:A:80:ALA:C	1:A:81:VAL:N	3	0.53
(1,163)	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	7	0.52
(1,54)	1:A:53:SER:N	1:A:53:SER:CA	1:A:53:SER:C	1:A:54:ILE:N	6	0.51
(1,166)	1:A:76:PRO:N	1:A:76:PRO:CA	1:A:76:PRO:C	1:A:77:LYS:N	5	0.49
(1,129)	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	1:A:47:LYS:N	1	0.46
(1,164)	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	9	0.39
(1,129)	1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CA	1:A:46:LEU:C	1:A:47:LYS:N	2	0.37
(1,168)	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	1:A:78:VAL:N	5	0.36
(1,159)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	5	0.36
(1,164)	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	3	0.28
(1,164)	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	7	0.28
(1,168)	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	1:A:78:VAL:N	1	0.25
(1,159)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:THR:N	8	0.25
(1,155)	1:A:68:ASP:N	1:A:68:ASP:CA	1:A:68:ASP:C	1:A:69:ALA:N	10	0.16
(1,168)	1:A:77:LYS:N	1:A:77:LYS:CA	1:A:77:LYS:C	1:A:78:VAL:N	7	0.15



Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	$\textbf{Violation} \ (\ \circ \)$
(1,166)	1:A:76:PRO:N	1:A:76:PRO:CA	1:A:76:PRO:C	1:A:77:LYS:N	4	0.15
(1,166)	1:A:76:PRO:N	1:A:76:PRO:CA	1:A:76:PRO:C	1:A:77:LYS:N	3	0.05
(1,163)	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1:A:75:LEU:N	3	0.05

