

# wwPDB NMR Structure Validation Summary Report (i)

#### Feb 25, 2020 – 04:39 PM CST

PDB ID : 2KZN

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

Bacillus subtilis, Northeast Structural Genomics Consortium Target SR10

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

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

(NESG)

Deposited on : 2010-06-18

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

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

A user guide is available at

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

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

Cyrange : Kirchner and Güntert (2011)

NmrClust : Kelley et al. (1996)

MolProbity: 4.02b-467

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

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

PANAV : Wang et al. (2010)

ShiftChecker : 2.6.dev1

BMRB Restraints Analalysis : v1.2

Ideal geometry (proteins) : Engh & Hul

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

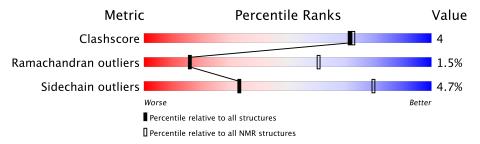
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : 2.6.dev1

# 1 Overall quality at a glance (i)

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

The overall completeness of chemical shifts assignment is 41%.

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



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

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

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



# 2 Ensemble composition and analysis (i)

This entry contains 20 models. Model 8 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 as representative, based on the following criterion: *lowest energy*.

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

Well-defined (core) protein residues						
Well-defined core	Well-defined core Residue range (total) Backbone RMSD (Å) Medoid model					
1 A:6-A:27, A:37-A:142 (128) 0.98 8						

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

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

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

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



# 3 Entry composition (i)

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

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

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

There are 8 discrepancies between the modelled and reference sequences:

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



# 4 Residue-property plots (i)

## 4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

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

• Molecule 1: Peptide methionine sulfoxide reductase msrB



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

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

• Molecule 1: Peptide methionine sulfoxide reductase msrB





tion.

# 5 Refinement protocol and experimental data overview (i)



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

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

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

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

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

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

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



# 6 Model quality (i)

## 6.1 Standard geometry (i)

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

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

Mol	Chain	Chirality	Planarity
1	A	$0.0 \pm 0.0$	$0.1 \pm 0.2$
All	All	0	1

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

All unique planar outliers are listed below.

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

# 6.2 Too-close contacts (i)

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

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

The all-atom clashscore is defined as the number of clashes found per 1000 atoms (including hydrogen atoms). The all-atom clashscore for this structure is 4.

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

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



Continued from previous page...

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

## 6.3 Torsion angles (i)

#### 6.3.1 Protein backbone (i)

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles
1	A	128/151 (85%)	116±3 (90±2%)	10±3 (8±2%)	2±1 (1±1%)	16 61
All	All	2560/3020 (85%)	2315 (90%)	207 (8%)	38 (1%)	16 61

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

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

## 6.3.2 Protein sidechains (i)

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

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

5 of 45 unique residues with a non-rotameric sidechain are listed below. They are sorted by the



frequency of occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	13	ASN	15
1	A	77	GLU	6
1	A	87	ARG	5
1	A	57	LYS	5
1	A	42	TYR	4

#### 6.3.3 RNA (i)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

# 6.5 Carbohydrates (i)

There are no carbohydrates in this entry.

# 6.6 Ligand geometry (i)

There are no ligands in this entry.

# 6.7 Other polymers (i)

There are no such molecules in this entry.

# 6.8 Polymer linkage issues (i)

There are no chain breaks in this entry.



# 7 Chemical shift validation (i)

The completeness of assignment taking into account all chemical shift lists is 41% for the well-defined parts and 39% for the entire structure.

#### 7.1 Chemical shift list 1

File name: 2kzn nmr.cif

Chemical shift list name: nef\_chemical\_shift\_list\_2kzn.mr

#### 7.1.1 Bookkeeping (i)

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

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

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

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

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

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

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

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



Continued from previous page...

	Chain	Dag	Type	Atom		Shift Dat	a
	Chain	nes	Type	Atom	Value	Shift Dat Uncertainty	Ambiguity
	A	121	LEU	HD1%	0.626	0.03	1
	A	129	LEU	HD2%	0.431	0.03	1
ĺ	A	99	LEU	HD1%	0.723	0.03	1

#### 7.1.2 Chemical shift referencing (i)

The following table shows the suggested chemical shift referencing corrections.

Nucleus	# values	Correction $\pm$ precision, $ppm$	Suggested action
$^{13}\mathrm{C}_{\alpha}$	142	$-0.18 \pm 0.18$	None needed ( $< 0.5 \text{ ppm}$ )
$^{13}C_{\beta}$	132	$0.47 \pm 0.23$	None needed ( $< 0.5 \text{ ppm}$ )
<sup>13</sup> C′	141	$-0.49 \pm 0.18$	None needed ( $< 0.5 \text{ ppm}$ )
$^{15}N$	131	$1.13 \pm 0.45$	Should be applied

## 7.1.3 Completeness of resonance assignments (i)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the well-defined regions of the structure. The overall completeness is 41%, i.e. 654 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 1608. 17 out of 17 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

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

# 7.1.4 Statistically unusual chemical shifts (i)

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

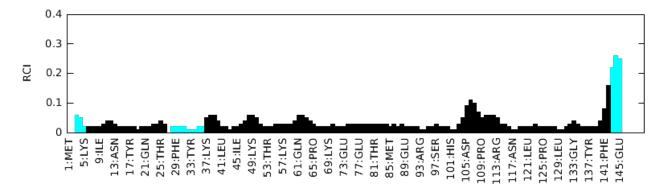
Mol	Chain	Res	Type	Atom	Shift, ppm	Expected range, ppm	Z-score
1	A	118	SER	Н	13.13	11.23 - 5.33	8.2
1	A	38	GLU	Н	5.26	11.34 - 5.34	-5.1



#### 7.1.5 Random Coil Index (RCI) plots (i)

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

Random coil index (RCI) for chain A:





# 8 Distance restraints analysis

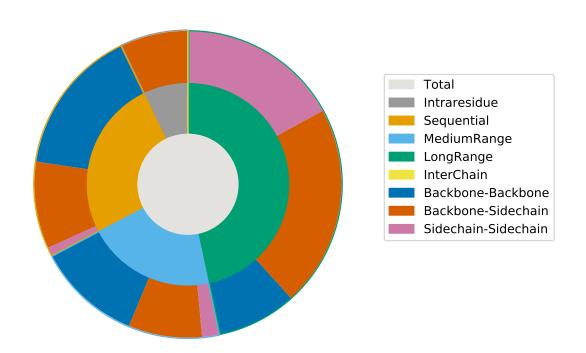
## 8.1 Distance restraints summary

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

Dogtrointa turo	D D1(II4)	$\mathbf{B} ext{-}\mathbf{S}^2(\mathbf{H}^4)$	C C3(TI4)	$\mathbf{T}$	Total		
Restraints type	aints type $\left  \begin{array}{c c} \mathbf{B}\text{-}\mathbf{B}^1(\mathbf{H}^4) \end{array} \right  \left  \begin{array}{c c} \mathbf{B}\text{-}\mathbf{S}^2(\mathbf{H}^4) \end{array} \right  \left  \begin{array}{c c} \mathbf{S}\text{-}\mathbf{S}^3(\mathbf{H}^4) \end{array} \right $		$Total(H^4)$	$RR^5$	$\%^6$		
Intraresidue ( i-j =0)	0(0)	92(0)	0(0)	92(0)	0.6	7.1	
Sequential ( i-j =1)	200(0)	118(0)	12(0)	330(0)	2.3	25.6	
Medium range ( $ i-j >1$ and $ i-j <5$ )	142(0)	100(0)	24(0)	266(0)	1.9	20.6	
Long range ( i-j ≥5)	108(0)	274(0)	220(0)	602(0)	4.2	46.7	
Inter chain	0(0)	0(0)	0(0)	0(0)	0.0	0.0	
Total	450(0)	584(0)	256(0)	1290(0)	9.0	100.0	

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

#### 8.1.1 Pie chart: Distance restraints summary





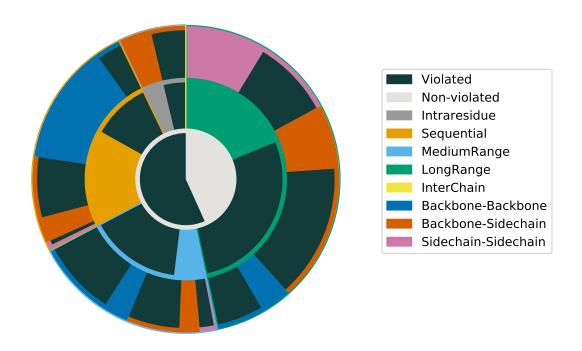
## 8.2 Distance violations summary

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

Doctroints true	$B-B^{1}(\%^{4})$	$B-S^2(\%^4)$	$S-S^3(\%^4)$	T	otal	
Restraints type	<b>D-D</b> (%)	<b>D-3</b> (%)	S-S'(%)	$Total(\%^4)$	$RR^5$	$\%^6$
Intraresidue ( $ i-j =0$ )	0(0.0)	48(52.2)	0(0.0)	48(52.2)	0.3	6.6
Sequential ( i-j =1)	36(18.0)	84(71.2)	6(50.0)	126(38.2)	0.9	17.2
Medium range ( $ i-j >1$ and $ i-j <5$ )	106(74.6)	72(72.0)	20(83.3)	198(74.4)	1.4	27.0
Long range ( i-j ≥5)	66(61.1)	186(67.9)	108(49.1)	360(59.8)	2.5	49.2
Inter chain	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0.0	0.0
Total	208(46.2)	390(66.8)	134(52.3)	732(56.7)	5.1	100.0

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

#### 8.2.1 Pie-chart: Distance violations summary





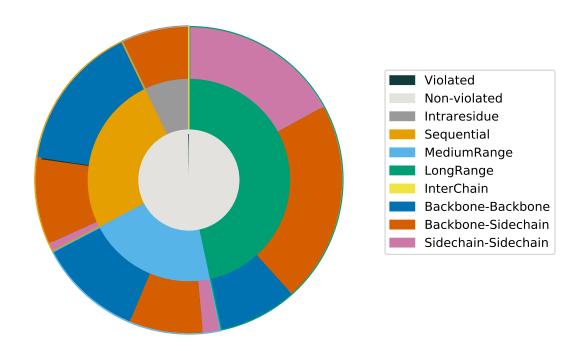
## 8.3 Consistent distance violations summary

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

Dogtrojeta temo	$B-B^{1}(\%^{4})$	$\mathbf{B} ext{-}\mathbf{S}^2(\%^4)$	$S-S^3(\%^4)$	To	otal	
Restraints type	<b>D-D</b> (%)	<b>D-3</b> (%)	S-S'(%)	$Total(\%^4)$	$\mathrm{RR}^5$	$\%^6$
Intraresidue ( i-j =0)	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0.0	0.0
Sequential ( i-j =1)	0(0.0)	2(1.7)	0(0.0)	2(0.6)	0.0	50.0
Medium range ( $ i-j >1$ and $ i-j <5$ )	2(1.4)	0(0.0)	0(0.0)	2(0.8)	0.0	50.0
Long range ( i-j ≥5)	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0.0	0.0
Inter chain	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0.0	0.0
Total	2(0.4)	2(0.3)	0(0.0)	4(0.3)	0.0	100.0

<sup>1</sup>number of backbone to backbone restraints, <sup>2</sup>number of backbone to sidechain restraints, <sup>3</sup>number of sidechain to sidechain restraints, <sup>4</sup>percentage of violations with respect to total restrains in that category, <sup>5</sup>number of restraints per residue, <sup>6</sup>percentage 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	202.0	0.2
0.2-0.5	20.2	0.49
0.5-1.0	1.3	0.99
1.0-2.0	1.6	1.92
2.0-5.0	0.5	3.64
5.0<	None	None

#### 8.5 Distance violations in ensemble

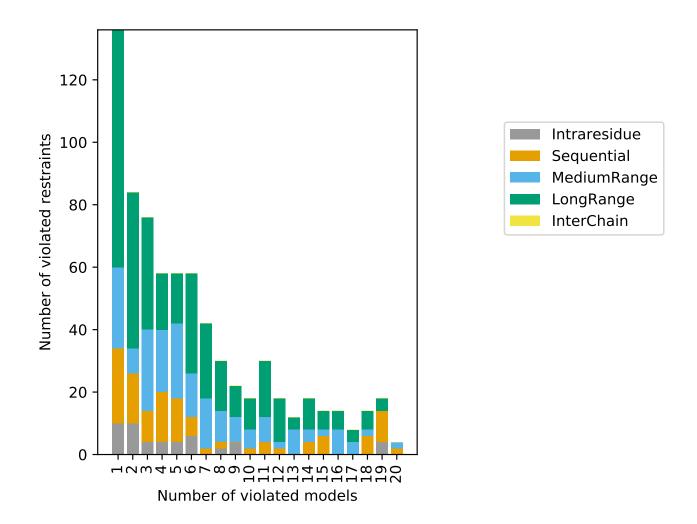
The restraints are grouped based on the number of violated models and listed here.

I	No. of	i violat	ted re	strair	$\operatorname{nts}$	No. of violated models
$IR^1$	$SQ^2$	$ m MR^3$	$LR^4$	$IC^5$	Total	No. of violated models
10	24	26	76	0	136	1
10	16	8	50	0	84	2
4	10	26	36	0	76	3
4	16	20	18	0	58	4
4	14	24	16	0	58	5
6	6	14	32	0	58	6
0	2	16	24	0	42	7
2	2	10	16	0	30	8
4	0	8	10	0	22	9
0	2	6	10	0	18	10
0	4	8	18	0	30	11
0	2	2	14	0	18	12
0	0	8	4	0	12	13
0	4	4	10	0	18	14
0	6	2	6	0	14	15
0	0	8	6	0	14	16
0	0	4	4	0	8	17
0	6	2	6	0	14	18
4	10	0	4	0	18	19
0	2	2	0	0	4	20

 $<sup>^1 \</sup>rm intraresidue$  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



44 intraresidue restraints, 204 sequential restraints, 68 medium range restraints,242 long range restraints and 0 inter chain restraints are not violated. There are totally 558 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	riolati	Mean (Å)	Max (Å)		
Model ID	$IR^1$	$SQ^2$	$ m MR^3$	$LR^4$	$IC^5$	Total	Mean (A)	Max (A)
1	10	52	54	88	0	204	0.14	2.4
2	12	52	60	106	0	230	0.1	0.99
3	6	30	64	104	0	204	0.12	1.58
4	14	42	76	108	0	240	0.12	1.92
5	14	34	68	120	0	236	0.12	2.06



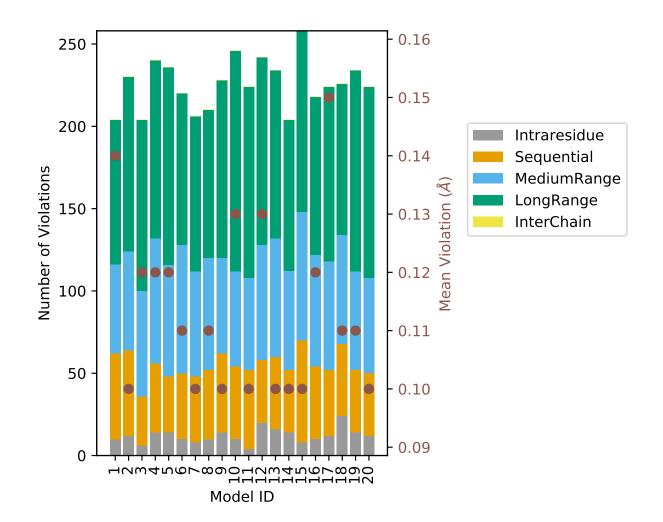
Continued from previous page...

Model ID		N	o. of v	iolati	ons		Mean (Å)	Max (Å)
Wiodei 1D	$IR^1$	$SQ^2$	$MR^3$	$LR^4$	$IC^5$	Total	Mean (A)	Max (A)
6	10	40	78	92	0	220	0.11	2.03
7	8	40	64	94	0	206	0.1	0.42
8	10	42	68	90	0	210	0.11	1.58
9	14	48	58	108	0	228	0.1	0.88
10	10	44	58	134	0	246	0.13	1.82
11	4	48	56	116	0	224	0.1	0.51
12	20	38	70	114	0	242	0.13	3.34
13	16	44	72	102	0	234	0.1	0.95
14	14	38	60	92	0	204	0.1	0.56
15	8	62	78	110	0	258	0.1	1.04
16	10	44	68	96	0	218	0.12	1.75
17	12	40	66	106	0	224	0.15	3.64
18	24	44	66	92	0	226	0.11	1.03
19	14	38	60	122	0	234	0.11	1.2
20	12	38	58	116	0	224	0.1	1.16

 $<sup>^1 \</sup>rm intraresidue$  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

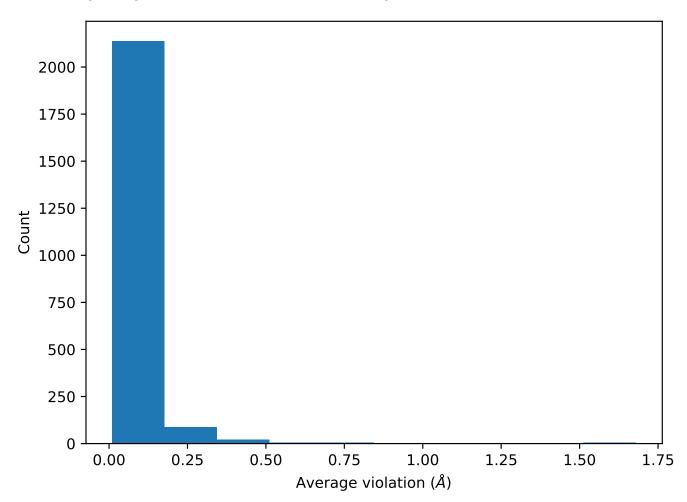




#### 8.7 Most violated distance restraints

#### 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)
(1,911)	1:A:19:VAL:H	1:A:21:GLN:H	20	0.11	0.18
(1,671)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD11	20	0.13	0.23
(1,671)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD12	20	0.13	0.23
(1,671)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD13	20	0.13	0.23
(1,266)	1:A:19:VAL:H	1:A:21:GLN:H	20	0.11	0.18
(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD11	20	0.13	0.23



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD12	20	0.13	0.23
(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD13	20	0.13	0.23
(1,892)	1:A:121:LEU:HD11	1:A:122:ARG:H	19	0.14	0.28
(1,892)	1:A:121:LEU:HD12	1:A:122:ARG:H	19	0.14	0.28
(1,892)	1:A:121:LEU:HD13	1:A:122:ARG:H	19	0.14	0.28
(1,690)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD11	19	0.08	0.18
(1,690)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD12	19	0.08	0.18
(1,690)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD13	19	0.08	0.18
(1,656)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD21	19	0.14	0.24
(1,656)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD22	19	0.14	0.24
(1,656)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD23	19	0.14	0.24
(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG11	19	0.15	0.25
(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG12	19	0.15	0.25
(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG13	19	0.15	0.25
(1,571)	1:A:140:LEU:HD11	1:A:141:PHE:H	19	0.08	0.22
(1,571)	1:A:140:LEU:HD12	1:A:141:PHE:H	19	0.08	0.22
(1,571)	1:A:140:LEU:HD13	1:A:141:PHE:H	19	0.08	0.22
(1,505)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:76:GLU:H	19	0.08	0.21
(1,505)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:76:GLU:H	19	0.08	0.21
(1,505)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:76:GLU:H	19	0.08	0.21
(1,493)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:52:PHE:H	19	0.15	0.32
(1,493)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:52:PHE:H	19	0.15	0.32
(1,493)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:52:PHE:H	19	0.15	0.32
(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD11	19	0.08	0.18
(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD12	19	0.08	0.18
(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD13	19	0.08	0.18
(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD21	19	0.06	0.1
(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD22	19	0.06	0.1
(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD23	19	0.06	0.1
(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD21	19	0.19	0.29
(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD22	19	0.19	0.29
(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD23	19	0.19	0.29
(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD21	19	0.19	0.29
(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD22	19	0.19	0.29
(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD23	19	0.19	0.29
(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD21	19	0.19	0.29
(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD22	19	0.19	0.29
(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD23	19	0.19	0.29
(1,247)	1:A:121:LEU:HD11	1:A:122:ARG:H	19	0.14	0.28
(1,247)	1:A:121:LEU:HD12	1:A:122:ARG:H	19	0.14	0.28
(1,247)	1:A:121:LEU:HD13	1:A:122:ARG:H	19	0.14	0.28
(1,1230)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG11	19	0.15	0.25



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,1230)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG12	19	0.15	0.25
(1,1230)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG13	19	0.15	0.25
(1,1216)	1:A:140:LEU:HD11	1:A:141:PHE:H	19	0.08	0.22
(1,1216)	1:A:140:LEU:HD12	1:A:141:PHE:H	19	0.08	0.22
(1,1216)	1:A:140:LEU:HD13	1:A:141:PHE:H	19	0.08	0.22
(1,1150)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:76:GLU:H	19	0.08	0.21
(1,1150)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:76:GLU:H	19	0.08	0.21
(1,1150)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:76:GLU:H	19	0.08	0.21
(1,1138)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:52:PHE:H	19	0.15	0.32
(1,1138)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:52:PHE:H	19	0.15	0.32
(1,1138)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:52:PHE:H	19	0.15	0.32
(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD21	19	0.14	0.24
(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD22	19	0.14	0.24
(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD23	19	0.14	0.24
(1,1060)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD21	19	0.06	0.1
(1,1060)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD22	19	0.06	0.1
(1,1060)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD23	19	0.06	0.1
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD21	19	0.19	0.29
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD22	19	0.19	0.29
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD23	19	0.19	0.29
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD21	19	0.19	0.29
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD22	19	0.19	0.29
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD23	19	0.19	0.29
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD21	19	0.19	0.29
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD22	19	0.19	0.29
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD23	19	0.19	0.29
(1,904)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD11	18	0.12	0.24
(1,904)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD12	18	0.12	0.24
(1,904)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD13	18	0.12	0.24
(1,904)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD11	18	0.12	0.24
(1,904)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD12	18	0.12	0.24
(1,904)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD13	18	0.12	0.24
(1,904)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD11	18	0.12	0.24
(1,904)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD12	18	0.12	0.24
(1,904)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD13	18	0.12	0.24
(1,893)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD11	18	0.16	0.31
(1,893)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD12	18	0.16	0.31
(1,893)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD13	18	0.16	0.31
(1,837)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:H	18	0.13	0.22
(1,837)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:H	18	0.13	0.22
(1,837)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:H	18	0.13	0.22
(1,776)	1:A:17:TYR:H	1:A:19:VAL:H	18	0.12	0.23



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,619)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:H	18	0.11	0.2
(1,619)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:H	18	0.11	0.2
(1,619)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:H	18	0.11	0.2
(1,458)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:10:LYS:H	18	0.07	0.13
(1,458)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:10:LYS:H	18	0.07	0.13
(1,458)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:10:LYS:H	18	0.07	0.13
(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD21	18	0.18	0.37
(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD22	18	0.18	0.37
(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD23	18	0.18	0.37
(1,259)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD11	18	0.12	0.24
(1,259)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD12	18	0.12	0.24
(1,259)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD13	18	0.12	0.24
(1,259)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD11	18	0.12	0.24
(1,259)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD12	18	0.12	0.24
(1,259)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD13	18	0.12	0.24
(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD11	18	0.12	0.24
(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD12	18	0.12	0.24
(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD13	18	0.12	0.24
(1,248)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD11	18	0.16	0.31
(1,248)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD12	18	0.16	0.31
(1,248)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD13	18	0.16	0.31
(1,192)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:H	18	0.13	0.22
(1,192)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:H	18	0.13	0.22
(1,192)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:H	18	0.13	0.22
(1,131)	1:A:17:TYR:H	1:A:19:VAL:H	18	0.12	0.23
(1,1264)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:H	18	0.11	0.2
(1,1264)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:H	18	0.11	0.2
(1,1264)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:H	18	0.11	0.2
(1,1103)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:10:LYS:H	18	0.07	0.13
(1,1103)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:10:LYS:H	18	0.07	0.13
(1,1103)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:10:LYS:H	18	0.07	0.13
(1,1064)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD21	18	0.18	0.37
(1,1064)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD22	18	0.18	0.37
(1,1064)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD23	18	0.18	0.37
(1,912)	1:A:21:GLN:H	1:A:24:GLY:H	17	0.08	0.16
(1,468)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:23:ASN:H	17	0.12	0.27
(1,468)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:23:ASN:H	17	0.12	0.27
(1,468)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:23:ASN:H	17	0.12	0.27
(1,451)	1:A:75:VAL:HG11	1:A:91:ARG:H	17	0.13	0.37
(1,451)	1:A:75:VAL:HG12	1:A:91:ARG:H	17	0.13	0.37
(1,451)	1:A:75:VAL:HG13	1:A:91:ARG:H	17	0.13	0.37
(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD11	17	0.23	0.58



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD12	17	0.23	0.58
(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD13	17	0.23	0.58
(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD11	17	0.23	0.58
(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD12	17	0.23	0.58
(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD13	17	0.23	0.58
(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD11	17	0.23	0.58
(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD12	17	0.23	0.58
(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD13	17	0.23	0.58
(1,267)	1:A:21:GLN:H	1:A:24:GLY:H	17	0.08	0.16
(1,1113)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:23:ASN:H	17	0.12	0.27
(1,1113)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:23:ASN:H	17	0.12	0.27
(1,1113)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:23:ASN:H	17	0.12	0.27
(1,1096)	1:A:75:VAL:HG11	1:A:91:ARG:H	17	0.13	0.37
(1,1096)	1:A:75:VAL:HG12	1:A:91:ARG:H	17	0.13	0.37
(1,1096)	1:A:75:VAL:HG13	1:A:91:ARG:H	17	0.13	0.37
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD11	17	0.23	0.58
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD12	17	0.23	0.58
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD13	17	0.23	0.58
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD11	17	0.23	0.58
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD12	17	0.23	0.58
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD13	17	0.23	0.58
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD11	17	0.23	0.58
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD12	17	0.23	0.58
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD13	17	0.23	0.58
(1,974)	1:A:79:LEU:H	1:A:89:GLU:H	16	0.12	0.22
(1,944)	1:A:15:MET:H	1:A:18:GLU:H	16	0.09	0.24
(1,943)	1:A:14:ARG:H	1:A:17:TYR:H	16	0.11	0.19
(1,84)	1:A:10:LYS:H	1:A:12:LEU:H	16	0.14	0.25
(1,729)	1:A:10:LYS:H	1:A:12:LEU:H	16	0.14	0.25
(1,630)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD21	16	0.16	0.29
(1,630)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD22	16	0.16	0.29
(1,630)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD23	16	0.16	0.29
(1,630)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD21	16	0.16	0.29
(1,630)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD22	16	0.16	0.29
(1,630)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD23	16	0.16	0.29
(1,630)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD21	16	0.16	0.29
(1,630)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD22	16	0.16	0.29
(1,630)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD23	16	0.16	0.29
(1,453)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG21	16	0.12	0.35
(1,453)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG22	16	0.12	0.35
(1,453)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG23	16	0.12	0.35
(1,445)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:113:ARG:H	16	0.1	0.22



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,445)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:113:ARG:H	16	0.1	0.22
(1,445)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:113:ARG:H	16	0.1	0.22
(1,329)	1:A:79:LEU:H	1:A:89:GLU:H	16	0.12	0.22
(1,299)	1:A:15:MET:H	1:A:18:GLU:H	16	0.09	0.24
(1,298)	1:A:14:ARG:H	1:A:17:TYR:H	16	0.11	0.19
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD21	16	0.16	0.29
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD22	16	0.16	0.29
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD23	16	0.16	0.29
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD21	16	0.16	0.29
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD22	16	0.16	0.29
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD23	16	0.16	0.29
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD21	16	0.16	0.29
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD22	16	0.16	0.29
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD23	16	0.16	0.29
(1,1098)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG21	16	0.12	0.35
(1,1098)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG22	16	0.12	0.35
(1,1098)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG23	16	0.12	0.35
(1,1090)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:113:ARG:H	16	0.1	0.22
(1,1090)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:113:ARG:H	16	0.1	0.22
(1,1090)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:113:ARG:H	16	0.1	0.22
(1,8)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:42:TYR:H	15	0.1	0.28
(1,8)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:42:TYR:H	15	0.1	0.28
(1,8)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:42:TYR:H	15	0.1	0.28
(1,760)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:H	15	0.09	0.22
(1,702)	1:A:112:LEU:HD11	1:A:113:ARG:H	15	0.09	0.16
(1,702)	1:A:112:LEU:HD12	1:A:113:ARG:H	15	0.09	0.16
(1,702)	1:A:112:LEU:HD13	1:A:113:ARG:H	15	0.09	0.16
(1,653)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:42:TYR:H	15	0.1	0.28
(1,653)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:42:TYR:H	15	0.1	0.28
(1,653)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:42:TYR:H	15	0.1	0.28
(1,644)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD11	15	0.13	0.31
(1,644)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD12	15	0.13	0.31
(1,644)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD13	15	0.13	0.31
(1,612)	1:A:102:VAL:H	1:A:88:THR:H	15	0.11	0.28
(1,601)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD11	15	1.68	3.64
(1,601)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD12	15	1.68	3.64
(1,601)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD13	15	1.68	3.64
(1,57)	1:A:112:LEU:HD11	1:A:113:ARG:H	15	0.09	0.16
(1,57)	1:A:112:LEU:HD12	1:A:113:ARG:H	15	0.09	0.16
(1,57)	1:A:112:LEU:HD13	1:A:113:ARG:H	15	0.09	0.16
(1,518)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD11	15	0.05	0.12
(1,518)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD12	15	0.05	0.12



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,518)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD13	15	0.05	0.12
(1,1289)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD11	15	0.13	0.31
(1,1289)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD12	15	0.13	0.31
(1,1289)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD13	15	0.13	0.31
(1,1257)	1:A:102:VAL:H	1:A:88:THR:H	15	0.11	0.28
(1,1246)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD11	15	1.68	3.64
(1,1246)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD12	15	1.68	3.64
(1,1246)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD13	15	1.68	3.64
(1,1163)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD11	15	0.05	0.12
(1,1163)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD12	15	0.05	0.12
(1,1163)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD13	15	0.05	0.12
(1,115)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:H	15	0.09	0.22
(1,816)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG11	14	0.07	0.26
(1,816)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG12	14	0.07	0.26
(1,816)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG13	14	0.07	0.26
(1,669)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:134:TYR:H	14	0.14	0.25
(1,669)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:134:TYR:H	14	0.14	0.25
(1,669)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:134:TYR:H	14	0.14	0.25
(1,664)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:127:HIS:H	14	0.08	0.17
(1,664)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:127:HIS:H	14	0.08	0.17
(1,664)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:127:HIS:H	14	0.08	0.17
(1,649)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:124:VAL:H	14	0.09	0.21
(1,649)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:H	14	0.09	0.21
(1,649)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:H	14	0.09	0.21
(1,613)	1:A:115:CYS:H	1:A:101:HIS:H	14	0.11	0.26
(1,562)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD21	14	0.11	0.29
(1,562)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD22	14	0.11	0.29
(1,562)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD23	14	0.11	0.29
(1,550)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG21	14	0.13	0.36
(1,550)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG22	14	0.13	0.36
(1,550)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG23	14	0.13	0.36
(1,536)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:102:VAL:H	14	0.08	0.19
(1,536)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:102:VAL:H	14	0.08	0.19
(1,536)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:102:VAL:H	14	0.08	0.19
(1,462)	1:A:45:ILE:HD11	1:A:46:VAL:H	14	0.07	0.14
(1,462)	1:A:45:ILE:HD12	1:A:46:VAL:H	14	0.07	0.14
(1,462)	1:A:45:ILE:HD13	1:A:46:VAL:H	14	0.07	0.14
(1,4)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:124:VAL:H	14	0.09	0.21
(1,4)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:H	14	0.09	0.21
(1,4)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:H	14	0.09	0.21
(1,24)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:134:TYR:H	14	0.14	0.25
(1,24)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:134:TYR:H	14	0.14	0.25



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,24)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:134:TYR:H	14	0.14	0.25
(1,19)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:127:HIS:H	14	0.08	0.17
(1,19)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:127:HIS:H	14	0.08	0.17
(1,19)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:127:HIS:H	14	0.08	0.17
(1,171)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG11	14	0.07	0.26
(1,171)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG12	14	0.07	0.26
(1,171)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG13	14	0.07	0.26
(1,1258)	1:A:115:CYS:H	1:A:101:HIS:H	14	0.11	0.26
(1,1207)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD21	14	0.11	0.29
(1,1207)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD22	14	0.11	0.29
(1,1207)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD23	14	0.11	0.29
(1,1195)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG21	14	0.13	0.36
(1,1195)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG22	14	0.13	0.36
(1,1195)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG23	14	0.13	0.36
(1,1181)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:102:VAL:H	14	0.08	0.19
(1,1181)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:102:VAL:H	14	0.08	0.19
(1,1181)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:102:VAL:H	14	0.08	0.19
(1,1107)	1:A:45:ILE:HD11	1:A:46:VAL:H	14	0.07	0.14
(1,1107)	1:A:45:ILE:HD12	1:A:46:VAL:H	14	0.07	0.14
(1,1107)	1:A:45:ILE:HD13	1:A:46:VAL:H	14	0.07	0.14
(1,792)	1:A:130:LYS:H	1:A:134:TYR:H	13	0.15	0.28
(1,708)	1:A:54:SER:HG	1:A:57:LYS:H	13	0.09	0.29
(1,659)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD21	13	0.06	0.14
(1,659)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD22	13	0.06	0.14
(1,659)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD23	13	0.06	0.14
(1,63)	1:A:54:SER:HG	1:A:57:LYS:H	13	0.09	0.29
(1,595)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD11	13	0.72	1.24
(1,595)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD12	13	0.72	1.24
(1,595)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD13	13	0.72	1.24
(1,512)	1:A:79:LEU:HD21	1:A:87:ARG:H	13	0.09	0.17
(1,512)	1:A:79:LEU:HD22	1:A:87:ARG:H	13	0.09	0.17
(1,512)	1:A:79:LEU:HD23	1:A:87:ARG:H	13	0.09	0.17
(1,375)	1:A:131:GLU:H	1:A:133:GLY:H	13	0.09	0.18
(1,147)	1:A:130:LYS:H	1:A:134:TYR:H	13	0.15	0.28
(1,14)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD21	13	0.06	0.14
(1,14)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD22	13	0.06	0.14
(1,14)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD23	13	0.06	0.14
(1,1240)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD11	13	0.72	1.24
(1,1240)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD12	13	0.72	1.24
(1,1240)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD13	13	0.72	1.24
(1,1157)	1:A:79:LEU:HD21	1:A:87:ARG:H	13	0.09	0.17
(1,1157)	1:A:79:LEU:HD22	1:A:87:ARG:H	13	0.09	0.17



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,1157)	1:A:79:LEU:HD23	1:A:87:ARG:H	13	0.09	0.17
(1,1020)	1:A:131:GLU:H	1:A:133:GLY:H	13	0.09	0.18
(1,901)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD11	12	0.15	0.29
(1,901)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD12	12	0.15	0.29
(1,901)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD13	12	0.15	0.29
(1,901)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD11	12	0.15	0.29
(1,901)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD12	12	0.15	0.29
(1,901)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD13	12	0.15	0.29
(1,901)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD11	12	0.15	0.29
(1,901)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD12	12	0.15	0.29
(1,901)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD13	12	0.15	0.29
(1,793)	1:A:44:ASP:H	1:A:122:ARG:H	12	0.07	0.21
(1,692)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:115:CYS:H	12	0.13	0.22
(1,692)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:115:CYS:H	12	0.13	0.22
(1,692)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:115:CYS:H	12	0.13	0.22
(1,488)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:51:LEU:H	12	0.06	0.14
(1,488)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:51:LEU:H	12	0.06	0.14
(1,488)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:51:LEU:H	12	0.06	0.14
(1,473)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD11	12	0.07	0.19
(1,473)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD12	12	0.07	0.19
(1,473)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD13	12	0.07	0.19
(1,47)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:115:CYS:H	12	0.13	0.22
(1,47)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:115:CYS:H	12	0.13	0.22
(1,47)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:115:CYS:H	12	0.13	0.22
(1,465)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG11	12	0.13	0.26
(1,465)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG12	12	0.13	0.26
(1,465)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG13	12	0.13	0.26
(1,431)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:103:PHE:H	12	0.11	0.21
(1,431)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:103:PHE:H	12	0.11	0.21
(1,431)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:103:PHE:H	12	0.11	0.21
(1,387)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:90:VAL:HG21	12	0.06	0.17
(1,387)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:90:VAL:HG22	12	0.06	0.17
(1,387)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:90:VAL:HG23	12	0.06	0.17
(1,387)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:90:VAL:HG21	12	0.06	0.17
(1,387)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:90:VAL:HG22	12	0.06	0.17
(1,387)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:90:VAL:HG23	12	0.06	0.17
(1,387)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG21	12	0.06	0.17
(1,387)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG22	12	0.06	0.17
(1,387)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG23	12	0.06	0.17
(1,374)	1:A:132:GLU:H	1:A:134:TYR:H	12	0.1	0.22
(1,256)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD11	12	0.15	0.29
(1,256)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD12	12	0.15	0.29



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,256)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD13	12	0.15	0.29
(1,256)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD11	12	0.15	0.29
(1,256)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD12	12	0.15	0.29
(1,256)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD13	12	0.15	0.29
(1,256)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD11	12	0.15	0.29
(1,256)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD12	12	0.15	0.29
(1,256)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD13	12	0.15	0.29
(1,148)	1:A:44:ASP:H	1:A:122:ARG:H	12	0.07	0.21
(1,1133)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:51:LEU:H	12	0.06	0.14
(1,1133)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:51:LEU:H	12	0.06	0.14
(1,1133)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:51:LEU:H	12	0.06	0.14
(1,1118)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD11	12	0.07	0.19
(1,1118)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD12	12	0.07	0.19
(1,1118)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD13	12	0.07	0.19
(1,1110)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG11	12	0.13	0.26
(1,1110)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG12	12	0.13	0.26
(1,1110)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG13	12	0.13	0.26
(1,1076)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:103:PHE:H	12	0.11	0.21
(1,1076)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:103:PHE:H	12	0.11	0.21
(1,1076)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:103:PHE:H	12	0.11	0.21
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:90:VAL:HG21	12	0.06	0.17
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:90:VAL:HG22	12	0.06	0.17
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:90:VAL:HG23	12	0.06	0.17
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:90:VAL:HG21	12	0.06	0.17
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:90:VAL:HG22	12	0.06	0.17
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:90:VAL:HG23	12	0.06	0.17
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG21	12	0.06	0.17
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG22	12	0.06	0.17
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG23	12	0.06	0.17
(1,1019)	1:A:132:GLU:H	1:A:134:TYR:H	12	0.1	0.22
(1,948)	1:A:18:GLU:H	1:A:20:THR:H	11	0.08	0.18
(1,864)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:74:GLU:H	11	0.12	0.26
(1,864)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:74:GLU:H	11	0.12	0.26
(1,864)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:74:GLU:H	11	0.12	0.26
(1,817)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:20:THR:H	11	0.04	0.13
(1,817)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:20:THR:H	11	0.04	0.13
(1,817)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:20:THR:H	11	0.04	0.13
(1,698)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD21	11	0.15	0.33
(1,698)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD22	11	0.15	0.33
(1,698)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD23	11	0.15	0.33
(1.662)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD21	11	0.06	0.13
(1,662)	1.A.120.L1 D.11	1.71.120.000.11021	11	0.00	0.10



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,662)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD23	11	0.06	0.13
(1,658)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:131:GLU:H	11	0.11	0.26
(1,658)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:131:GLU:H	11	0.11	0.26
(1,658)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:131:GLU:H	11	0.11	0.26
(1,611)	1:A:100:GLY:H	1:A:90:VAL:H	11	0.09	0.2
(1,565)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:H	11	0.09	0.19
(1,565)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:H	11	0.09	0.19
(1,565)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:H	11	0.09	0.19
(1,564)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:137:TYR:H	11	0.07	0.13
(1,564)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:137:TYR:H	11	0.07	0.13
(1,564)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:137:TYR:H	11	0.07	0.13
(1,542)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD21	11	0.08	0.16
(1,542)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD22	11	0.08	0.16
(1,542)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD23	11	0.08	0.16
(1,53)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD21	11	0.15	0.33
(1,53)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD22	11	0.15	0.33
(1,53)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD23	11	0.15	0.33
(1,472)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:42:TYR:H	11	0.07	0.17
(1,472)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:42:TYR:H	11	0.07	0.17
(1,472)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:42:TYR:H	11	0.07	0.17
(1,469)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:24:GLY:H	11	0.1	0.19
(1,469)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:24:GLY:H	11	0.1	0.19
(1,469)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:24:GLY:H	11	0.1	0.19
(1,452)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG21	11	0.07	0.23
(1,452)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG22	11	0.07	0.23
(1,452)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG23	11	0.07	0.23
(1,440)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:100:GLY:H	11	0.08	0.14
(1,440)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:100:GLY:H	11	0.08	0.14
(1,440)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:100:GLY:H	11	0.08	0.14
(1,438)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:120:ALA:H	11	0.1	0.21
(1,438)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:120:ALA:H	11	0.1	0.21
(1,438)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:120:ALA:H	11	0.1	0.21
(1,303)	1:A:18:GLU:H	1:A:20:THR:H	11	0.08	0.18
(1,219)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:74:GLU:H	11	0.12	0.26
(1,219)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:74:GLU:H	11	0.12	0.26
(1,219)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:74:GLU:H	11	0.12	0.26
(1,172)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:20:THR:H	11	0.04	0.13
(1,172)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:20:THR:H	11	0.04	0.13
(1,172)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:20:THR:H	11	0.04	0.13
(1,17)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD21	11	0.06	0.13
(1,17)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD22	11	0.06	0.13
(1,17)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD23	11	0.06	0.13



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,13)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:131:GLU:H	11	0.11	0.26
(1,13)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:131:GLU:H	11	0.11	0.26
(1,13)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:131:GLU:H	11	0.11	0.26
(1,1256)	1:A:100:GLY:H	1:A:90:VAL:H	11	0.09	0.2
(1,1210)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:H	11	0.09	0.19
(1,1210)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:H	11	0.09	0.19
(1,1210)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:H	11	0.09	0.19
(1,1209)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:137:TYR:H	11	0.07	0.13
(1,1209)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:137:TYR:H	11	0.07	0.13
(1,1209)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:137:TYR:H	11	0.07	0.13
(1,1187)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD21	11	0.08	0.16
(1,1187)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD22	11	0.08	0.16
(1,1187)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD23	11	0.08	0.16
(1,1117)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:42:TYR:H	11	0.07	0.17
(1,1117)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:42:TYR:H	11	0.07	0.17
(1,1117)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:42:TYR:H	11	0.07	0.17
(1,1114)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:24:GLY:H	11	0.1	0.19
(1,1114)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:24:GLY:H	11	0.1	0.19
(1,1114)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:24:GLY:H	11	0.1	0.19
(1,1097)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG21	11	0.07	0.23
(1,1097)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG22	11	0.07	0.23
(1,1097)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG23	11	0.07	0.23
(1,1085)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:100:GLY:H	11	0.08	0.14
(1,1085)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:100:GLY:H	11	0.08	0.14
(1,1085)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:100:GLY:H	11	0.08	0.14
(1,1083)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:120:ALA:H	11	0.1	0.21
(1,1083)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:120:ALA:H	11	0.1	0.21
(1,1083)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:120:ALA:H	11	0.1	0.21
(1,821)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:45:ILE:HD11	10	0.11	0.27
(1,821)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:45:ILE:HD12	10	0.11	0.27
(1,821)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:45:ILE:HD13	10	0.11	0.27
(1,821)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:45:ILE:HD11	10	0.11	0.27
(1,821)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:45:ILE:HD12	10	0.11	0.27
(1,821)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:45:ILE:HD13	10	0.11	0.27
(1,821)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:45:ILE:HD11	10	0.11	0.27
(1,821)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:45:ILE:HD12	10	0.11	0.27
(1,821)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:45:ILE:HD13	10	0.11	0.27
(1,81)	1:A:47:SER:H	1:A:48:GLY:H	10	0.04	0.1
(1,784)	1:A:46:VAL:H	1:A:48:GLY:H	10	0.05	0.17
(1,726)	1:A:47:SER:H	1:A:48:GLY:H	10	0.04	0.1
(1,660)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG11	10	0.07	0.17
(1,660)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG12	10	0.07	0.17



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,660)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG13	10	0.07	0.17
(1,626)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:140:LEU:HD11	10	0.1	0.23
(1,626)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:140:LEU:HD12	10	0.1	0.23
(1,626)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:140:LEU:HD13	10	0.1	0.23
(1,626)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:140:LEU:HD11	10	0.1	0.23
(1,626)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:140:LEU:HD12	10	0.1	0.23
(1,626)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:140:LEU:HD13	10	0.1	0.23
(1,626)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:140:LEU:HD11	10	0.1	0.23
(1,626)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:140:LEU:HD12	10	0.1	0.23
(1,626)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:140:LEU:HD13	10	0.1	0.23
(1,443)	1:A:90:VAL:HG21	1:A:101:HIS:H	10	0.08	0.17
(1,443)	1:A:90:VAL:HG22	1:A:101:HIS:H	10	0.08	0.17
(1,443)	1:A:90:VAL:HG23	1:A:101:HIS:H	10	0.08	0.17
(1,435)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:26:GLU:H	10	0.1	0.2
(1,435)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:26:GLU:H	10	0.1	0.2
(1,435)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:26:GLU:H	10	0.1	0.2
(1,368)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:H	10	0.07	0.23
(1,361)	1:A:45:ILE:H	1:A:122:ARG:H	10	0.08	0.21
(1,176)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:45:ILE:HD11	10	0.11	0.27
(1,176)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:45:ILE:HD12	10	0.11	0.27
(1,176)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:45:ILE:HD13	10	0.11	0.27
(1,176)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:45:ILE:HD11	10	0.11	0.27
(1,176)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:45:ILE:HD12	10	0.11	0.27
(1,176)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:45:ILE:HD13	10	0.11	0.27
(1,176)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:45:ILE:HD11	10	0.11	0.27
(1,176)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:45:ILE:HD12	10	0.11	0.27
(1,176)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:45:ILE:HD13	10	0.11	0.27
(1,15)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG11	10	0.07	0.17
(1,15)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG12	10	0.07	0.17
(1,15)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG13	10	0.07	0.17
(1,139)	1:A:46:VAL:H	1:A:48:GLY:H	10	0.05	0.17
(1,1271)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:140:LEU:HD11	10	0.1	0.23
(1,1271)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:140:LEU:HD12	10	0.1	0.23
(1,1271)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:140:LEU:HD13	10	0.1	0.23
(1,1271)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:140:LEU:HD11	10	0.1	0.23
(1,1271)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:140:LEU:HD12	10	0.1	0.23
(1,1271)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:140:LEU:HD13	10	0.1	0.23
(1,1271)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:140:LEU:HD11	10	0.1	0.23
(1,1271)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:140:LEU:HD12	10	0.1	0.23
(1,1271)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:140:LEU:HD13	10	0.1	0.23
(1,1088)	1:A:90:VAL:HG21	1:A:101:HIS:H	10	0.08	0.17
(1,1088)	1:A:90:VAL:HG22	1:A:101:HIS:H	10	0.08	0.17



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,1088)	1:A:90:VAL:HG23	1:A:101:HIS:H	10	0.08	0.17
(1,1080)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:26:GLU:H	10	0.1	0.2
(1,1080)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:26:GLU:H	10	0.1	0.2
(1,1080)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:26:GLU:H	10	0.1	0.2
(1,1013)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:H	10	0.07	0.23
(1,1006)	1:A:45:ILE:H	1:A:122:ARG:H	10	0.08	0.21
(1,982)	1:A:76:GLU:H	1:A:91:ARG:H	9	0.08	0.21
(1,953)	1:A:30:GLN:H	1:A:34:TRP:HE1	9	0.06	0.15
(1,83)	1:A:9:ILE:H	1:A:12:LEU:H	9	0.08	0.17
(1,829)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:112:LEU:HD11	9	0.04	0.07
(1,829)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:112:LEU:HD12	9	0.04	0.07
(1,829)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:112:LEU:HD13	9	0.04	0.07
(1,829)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:112:LEU:HD11	9	0.04	0.07
(1,829)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:112:LEU:HD12	9	0.04	0.07
(1,829)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:112:LEU:HD13	9	0.04	0.07
(1,829)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:112:LEU:HD11	9	0.04	0.07
(1,829)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:112:LEU:HD12	9	0.04	0.07
(1,829)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:112:LEU:HD13	9	0.04	0.07
(1,806)	1:A:133:GLY:H	1:A:135:GLU:H	9	0.1	0.24
(1,728)	1:A:9:ILE:H	1:A:12:LEU:H	9	0.08	0.17
(1,715)	1:A:16:GLN:HE21	1:A:46:VAL:H	9	0.1	0.19
(1,70)	1:A:16:GLN:HE21	1:A:46:VAL:H	9	0.1	0.19
(1,689)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:48:GLY:H	9	0.06	0.1
(1,689)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:48:GLY:H	9	0.06	0.1
(1,689)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:48:GLY:H	9	0.06	0.1
(1,600)	1:A:142:ASN:H	1:A:142:ASN:HD21	9	0.16	0.41
(1,592)	1:A:22:ASN:H	1:A:22:ASN:HD21	9	0.14	0.28
(1,497)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:H	9	0.12	0.31
(1,497)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:H	9	0.12	0.31
(1,497)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:H	9	0.12	0.31
(1,44)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:48:GLY:H	9	0.06	0.1
(1,44)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:48:GLY:H	9	0.06	0.1
(1,44)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:48:GLY:H	9	0.06	0.1
(1,407)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:46:VAL:HG21	9	0.1	0.21
(1,407)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:46:VAL:HG22	9	0.1	0.21
(1,407)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:46:VAL:HG23	9	0.1	0.21
(1,407)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:46:VAL:HG21	9	0.1	0.21
(1,407)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:46:VAL:HG22	9	0.1	0.21
(1,407)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:46:VAL:HG23	9	0.1	0.21
(1,407)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:46:VAL:HG21	9	0.1	0.21
(1,407)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:46:VAL:HG22	9	0.1	0.21
(1,407)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:46:VAL:HG23	9	0.1	0.21



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,337)	1:A:76:GLU:H	1:A:91:ARG:H	9	0.08	0.21
(1,308)	1:A:30:GLN:H	1:A:34:TRP:HE1	9	0.06	0.15
(1,184)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:112:LEU:HD11	9	0.04	0.07
(1,184)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:112:LEU:HD12	9	0.04	0.07
(1,184)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:112:LEU:HD13	9	0.04	0.07
(1,184)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:112:LEU:HD11	9	0.04	0.07
(1,184)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:112:LEU:HD12	9	0.04	0.07
(1,184)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:112:LEU:HD13	9	0.04	0.07
(1,184)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:112:LEU:HD11	9	0.04	0.07
(1,184)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:112:LEU:HD12	9	0.04	0.07
(1,184)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:112:LEU:HD13	9	0.04	0.07
(1,161)	1:A:133:GLY:H	1:A:135:GLU:H	9	0.1	0.24
(1,1245)	1:A:142:ASN:H	1:A:142:ASN:HD21	9	0.16	0.41
(1,1237)	1:A:22:ASN:H	1:A:22:ASN:HD21	9	0.14	0.28
(1,1142)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:H	9	0.12	0.31
(1,1142)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:H	9	0.12	0.31
(1,1142)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:H	9	0.12	0.31
(1,1052)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:46:VAL:HG21	9	0.1	0.21
(1,1052)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:46:VAL:HG22	9	0.1	0.21
(1,1052)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:46:VAL:HG23	9	0.1	0.21
(1,1052)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:46:VAL:HG21	9	0.1	0.21
(1,1052)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:46:VAL:HG22	9	0.1	0.21
(1,1052)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:46:VAL:HG23	9	0.1	0.21
(1,1052)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:46:VAL:HG21	9	0.1	0.21
(1,1052)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:46:VAL:HG22	9	0.1	0.21
(1,1052)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:46:VAL:HG23	9	0.1	0.21
(1,928)	1:A:131:GLU:H	1:A:134:TYR:H	8	0.13	0.21
(1,924)	1:A:26:GLU:H	1:A:64:TRP:HE1	8	0.08	0.17
(1,870)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:71:ILE:HD11	8	0.08	0.12
(1,870)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:71:ILE:HD12	8	0.08	0.12
(1,870)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:71:ILE:HD13	8	0.08	0.12
(1,870)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:71:ILE:HD11	8	0.08	0.12
(1,870)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:71:ILE:HD12	8	0.08	0.12
(1,870)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:71:ILE:HD13	8	0.08	0.12
(1,870)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:71:ILE:HD11	8	0.08	0.12
(1,870)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:71:ILE:HD12	8	0.08	0.12
(1,870)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:71:ILE:HD13	8	0.08	0.12
(1,807)	1:A:92:SER:H	1:A:96:ASP:H	8	0.28	1.04
(1,772)	1:A:21:GLN:H	1:A:23:ASN:H	8	0.06	0.13
(1,705)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD11	8	0.08	0.14
(1,705)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD12	8	0.08	0.14
(1,705)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD13	8	0.08	0.14



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,686)	1:A:45:ILE:H	1:A:46:VAL:HG21	8	0.06	0.11
(1,686)	1:A:45:ILE:H	1:A:46:VAL:HG22	8	0.06	0.11
(1,686)	1:A:45:ILE:H	1:A:46:VAL:HG23	8	0.06	0.11
(1,685)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:97:SER:H	8	0.19	0.37
(1,685)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:97:SER:H	8	0.19	0.37
(1,685)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:97:SER:H	8	0.19	0.37
(1,677)	1:A:103:PHE:H	1:A:112:LEU:HD21	8	0.05	0.15
(1,677)	1:A:103:PHE:H	1:A:112:LEU:HD22	8	0.05	0.15
(1,677)	1:A:103:PHE:H	1:A:112:LEU:HD23	8	0.05	0.15
(1,661)	1:A:102:VAL:H	1:A:102:VAL:HG11	8	0.04	0.05
(1,661)	1:A:102:VAL:H	1:A:102:VAL:HG12	8	0.04	0.05
(1,661)	1:A:102:VAL:H	1:A:102:VAL:HG13	8	0.04	0.05
(1,625)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:140:LEU:HD11	8	0.15	0.24
(1,625)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:140:LEU:HD12	8	0.15	0.24
(1,625)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:140:LEU:HD13	8	0.15	0.24
(1,625)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:140:LEU:HD11	8	0.15	0.24
(1,625)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:140:LEU:HD12	8	0.15	0.24
(1,625)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:140:LEU:HD13	8	0.15	0.24
(1,625)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:140:LEU:HD11	8	0.15	0.24
(1,625)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:140:LEU:HD12	8	0.15	0.24
(1,625)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:140:LEU:HD13	8	0.15	0.24
(1,60)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD11	8	0.08	0.14
(1,60)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD12	8	0.08	0.14
(1,60)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD13	8	0.08	0.14
(1,572)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:141:PHE:H	8	0.19	0.48
(1,572)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:141:PHE:H	8	0.19	0.48
(1,572)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:141:PHE:H	8	0.19	0.48
(1,549)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD21	8	0.12	0.22
(1,549)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD22	8	0.12	0.22
(1,549)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD23	8	0.12	0.22
(1,513)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:87:ARG:H	8	0.11	0.27
(1,513)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:87:ARG:H	8	0.11	0.27
(1,513)	1:A:79:LEU:HD13	1:A:87:ARG:H	8	0.11	0.27
(1,437)	1:A:46:VAL:HG11	1:A:48:GLY:H	8	0.05	0.13
(1,437)	1:A:46:VAL:HG12	1:A:48:GLY:H	8	0.05	0.13
(1,437)	1:A:46:VAL:HG13	1:A:48:GLY:H	8	0.05	0.13
(1,41)	1:A:45:ILE:H	1:A:46:VAL:HG21	8	0.06	0.11
(1,41)	1:A:45:ILE:H	1:A:46:VAL:HG22	8	0.06	0.11
(1,41)	1:A:45:ILE:H	1:A:46:VAL:HG23	8	0.06	0.11
(1,40)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:97:SER:H	8	0.19	0.37
(1,40)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:97:SER:H	8	0.19	0.37
(1,40)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:97:SER:H	8	0.19	0.37



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,32)	1:A:103:PHE:H	1:A:112:LEU:HD21	8	0.05	0.15
(1,32)	1:A:103:PHE:H	1:A:112:LEU:HD22	8	0.05	0.15
(1,32)	1:A:103:PHE:H	1:A:112:LEU:HD23	8	0.05	0.15
(1,283)	1:A:131:GLU:H	1:A:134:TYR:H	8	0.13	0.21
(1,279)	1:A:26:GLU:H	1:A:64:TRP:HE1	8	0.08	0.17
(1,225)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:71:ILE:HD11	8	0.08	0.12
(1,225)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:71:ILE:HD12	8	0.08	0.12
(1,225)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:71:ILE:HD13	8	0.08	0.12
(1,225)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:71:ILE:HD11	8	0.08	0.12
(1,225)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:71:ILE:HD12	8	0.08	0.12
(1,225)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:71:ILE:HD13	8	0.08	0.12
(1,225)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:71:ILE:HD11	8	0.08	0.12
(1,225)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:71:ILE:HD12	8	0.08	0.12
(1,225)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:71:ILE:HD13	8	0.08	0.12
(1,162)	1:A:92:SER:H	1:A:96:ASP:H	8	0.28	1.04
(1,16)	1:A:102:VAL:H	1:A:102:VAL:HG11	8	0.04	0.05
(1,16)	1:A:102:VAL:H	1:A:102:VAL:HG12	8	0.04	0.05
(1,16)	1:A:102:VAL:H	1:A:102:VAL:HG13	8	0.04	0.05
(1,1270)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:140:LEU:HD11	8	0.15	0.24
(1,1270)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:140:LEU:HD12	8	0.15	0.24
(1,1270)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:140:LEU:HD13	8	0.15	0.24
(1,1270)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:140:LEU:HD11	8	0.15	0.24
(1,1270)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:140:LEU:HD12	8	0.15	0.24
(1,1270)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:140:LEU:HD13	8	0.15	0.24
(1,1270)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:140:LEU:HD11	8	0.15	0.24
(1,1270)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:140:LEU:HD12	8	0.15	0.24
(1,1270)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:140:LEU:HD13	8	0.15	0.24
(1,127)	1:A:21:GLN:H	1:A:23:ASN:H	8	0.06	0.13
(1,1217)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:141:PHE:H	8	0.19	0.48
(1,1217)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:141:PHE:H	8	0.19	0.48
(1,1217)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:141:PHE:H	8	0.19	0.48
(1,1194)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD21	8	0.12	0.22
(1,1194)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD22	8	0.12	0.22
(1,1194)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD23	8	0.12	0.22
(1,1158)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:87:ARG:H	8	0.11	0.27
(1,1158)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:87:ARG:H	8	0.11	0.27
(1,1158)	1:A:79:LEU:HD13	1:A:87:ARG:H	8	0.11	0.27
(1,1082)	1:A:46:VAL:HG11	1:A:48:GLY:H	8	0.05	0.13
(1,1082)	1:A:46:VAL:HG12	1:A:48:GLY:H	8	0.05	0.13
(1,1082)	1:A:46:VAL:HG13	1:A:48:GLY:H	8	0.05	0.13
(1,99)	1:A:20:THR:H	1:A:23:ASN:H	7	0.07	0.11
(1,976)	1:A:80:ASP:H	1:A:88:THR:H	7	0.04	0.07



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,930)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:H	7	0.05	0.12
(1,9)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:138:LEU:H	7	0.12	0.18
(1,9)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:138:LEU:H	7	0.12	0.18
(1,9)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:138:LEU:H	7	0.12	0.18
(1,89)	1:A:55:LYS:H	1:A:57:LYS:H	7	0.07	0.14
(1,808)	1:A:15:MET:H	1:A:17:TYR:H	7	0.05	0.08
(1,791)	1:A:130:LYS:H	1:A:132:GLU:H	7	0.06	0.12
(1,764)	1:A:88:THR:H	1:A:102:VAL:H	7	0.07	0.17
(1,744)	1:A:20:THR:H	1:A:23:ASN:H	7	0.07	0.11
(1,734)	1:A:55:LYS:H	1:A:57:LYS:H	7	0.07	0.14
(1,676)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:49:LYS:H	7	0.06	0.11
(1,676)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:49:LYS:H	7	0.06	0.11
(1,676)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:49:LYS:H	7	0.06	0.11
(1,670)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:123:PHE:H	7	0.11	0.22
(1,670)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:123:PHE:H	7	0.11	0.22
(1,670)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:123:PHE:H	7	0.11	0.22
(1,666)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD11	7	0.04	0.08
(1,666)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD12	7	0.04	0.08
(1,666)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD13	7	0.04	0.08
(1,654)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:138:LEU:H	7	0.12	0.18
(1,654)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:138:LEU:H	7	0.12	0.18
(1,654)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:138:LEU:H	7	0.12	0.18
(1,581)	1:A:102:VAL:HG11	1:A:113:ARG:H	7	0.05	0.11
(1,581)	1:A:102:VAL:HG12	1:A:113:ARG:H	7	0.05	0.11
(1,581)	1:A:102:VAL:HG13	1:A:113:ARG:H	7	0.05	0.11
(1,544)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:120:ALA:H	7	0.1	0.15
(1,544)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:120:ALA:H	7	0.1	0.15
(1,544)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:120:ALA:H	7	0.1	0.15
(1,517)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:HG21	7	0.08	0.11
(1,517)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:HG22	7	0.08	0.11
(1,517)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:HG23	7	0.08	0.11
(1,503)	1:A:76:GLU:H	1:A:99:LEU:HD21	7	0.08	0.23
(1,503)	1:A:76:GLU:H	1:A:99:LEU:HD22	7	0.08	0.23
(1,503)	1:A:76:GLU:H	1:A:99:LEU:HD23	7	0.08	0.23
(1,464)	1:A:16:GLN:H	1:A:46:VAL:HG11	7	0.11	0.22
(1,464)	1:A:16:GLN:H	1:A:46:VAL:HG12	7	0.11	0.22
(1,464)	1:A:16:GLN:H	1:A:46:VAL:HG13	7	0.11	0.22
(1,456)	1:A:9:ILE:H	1:A:12:LEU:HD21	7	0.05	0.15
(1,456)	1:A:9:ILE:H	1:A:12:LEU:HD22	7	0.05	0.15
(1,456)	1:A:9:ILE:H	1:A:12:LEU:HD23	7	0.05	0.15
(1,455)	1:A:8:LYS:H	1:A:9:ILE:HD11	7	0.06	0.13
(1,455)	1:A:8:LYS:H	1:A:9:ILE:HD12	7	0.06	0.13



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,455)	1:A:8:LYS:H	1:A:9:ILE:HD13	7	0.06	0.13
(1,454)	1:A:134:TYR:H	1:A:138:LEU:HD21	7	0.17	0.32
(1,454)	1:A:134:TYR:H	1:A:138:LEU:HD22	7	0.17	0.32
(1,454)	1:A:134:TYR:H	1:A:138:LEU:HD23	7	0.17	0.32
(1,393)	1:A:12:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HG11	7	0.14	0.26
(1,393)	1:A:12:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HG12	7	0.14	0.26
(1,393)	1:A:12:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HG13	7	0.14	0.26
(1,393)	1:A:12:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HG11	7	0.14	0.26
(1,393)	1:A:12:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HG12	7	0.14	0.26
(1,393)	1:A:12:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HG13	7	0.14	0.26
(1,393)	1:A:12:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HG11	7	0.14	0.26
(1,393)	1:A:12:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HG12	7	0.14	0.26
(1,393)	1:A:12:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HG13	7	0.14	0.26
(1,384)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:99:LEU:HD21	7	0.12	0.29
(1,384)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:99:LEU:HD22	7	0.12	0.29
(1,384)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:99:LEU:HD23	7	0.12	0.29
(1,384)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:99:LEU:HD21	7	0.12	0.29
(1,384)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:99:LEU:HD22	7	0.12	0.29
(1,384)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:99:LEU:HD23	7	0.12	0.29
(1,384)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:99:LEU:HD21	7	0.12	0.29
(1,384)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:99:LEU:HD22	7	0.12	0.29
(1,384)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:99:LEU:HD23	7	0.12	0.29
(1,331)	1:A:80:ASP:H	1:A:88:THR:H	7	0.04	0.07
(1,31)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:49:LYS:H	7	0.06	0.11
(1,31)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:49:LYS:H	7	0.06	0.11
(1,31)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:49:LYS:H	7	0.06	0.11
(1,285)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:H	7	0.05	0.12
(1,25)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:123:PHE:H	7	0.11	0.22
(1,25)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:123:PHE:H	7	0.11	0.22
(1,25)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:123:PHE:H	7	0.11	0.22
(1,21)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD11	7	0.04	0.08
(1,21)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD12	7	0.04	0.08
(1,21)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD13	7	0.04	0.08
(1,163)	1:A:15:MET:H	1:A:17:TYR:H	7	0.05	0.08
(1,146)	1:A:130:LYS:H	1:A:132:GLU:H	7	0.06	0.12
(1,1226)	1:A:102:VAL:HG11	1:A:113:ARG:H	7	0.05	0.11
(1,1226)	1:A:102:VAL:HG12	1:A:113:ARG:H	7	0.05	0.11
(1,1226)	1:A:102:VAL:HG13	1:A:113:ARG:H	7	0.05	0.11
(1,119)	1:A:88:THR:H	1:A:102:VAL:H	7	0.07	0.17
(1,1189)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:120:ALA:H	7	0.1	0.15
(1,1189)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:120:ALA:H	7	0.1	0.15
(1,1189)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:120:ALA:H	7	0.1	0.15



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,1162)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:HG21	7	0.08	0.11
(1,1162)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:HG22	7	0.08	0.11
(1,1162)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:HG23	7	0.08	0.11
(1,1148)	1:A:76:GLU:H	1:A:99:LEU:HD21	7	0.08	0.23
(1,1148)	1:A:76:GLU:H	1:A:99:LEU:HD22	7	0.08	0.23
(1,1148)	1:A:76:GLU:H	1:A:99:LEU:HD23	7	0.08	0.23
(1,1109)	1:A:16:GLN:H	1:A:46:VAL:HG11	7	0.11	0.22
(1,1109)	1:A:16:GLN:H	1:A:46:VAL:HG12	7	0.11	0.22
(1,1109)	1:A:16:GLN:H	1:A:46:VAL:HG13	7	0.11	0.22
(1,1101)	1:A:9:ILE:H	1:A:12:LEU:HD21	7	0.05	0.15
(1,1101)	1:A:9:ILE:H	1:A:12:LEU:HD22	7	0.05	0.15
(1,1101)	1:A:9:ILE:H	1:A:12:LEU:HD23	7	0.05	0.15
(1,1100)	1:A:8:LYS:H	1:A:9:ILE:HD11	7	0.06	0.13
(1,1100)	1:A:8:LYS:H	1:A:9:ILE:HD12	7	0.06	0.13
(1,1100)	1:A:8:LYS:H	1:A:9:ILE:HD13	7	0.06	0.13
(1,1099)	1:A:134:TYR:H	1:A:138:LEU:HD21	7	0.17	0.32
(1,1099)	1:A:134:TYR:H	1:A:138:LEU:HD22	7	0.17	0.32
(1,1099)	1:A:134:TYR:H	1:A:138:LEU:HD23	7	0.17	0.32
(1,1038)	1:A:12:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HG11	7	0.14	0.26
(1,1038)	1:A:12:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HG12	7	0.14	0.26
(1,1038)	1:A:12:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HG13	7	0.14	0.26
(1,1038)	1:A:12:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HG11	7	0.14	0.26
(1,1038)	1:A:12:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HG12	7	0.14	0.26
(1,1038)	1:A:12:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HG13	7	0.14	0.26
(1,1038)	1:A:12:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HG11	7	0.14	0.26
(1,1038)	1:A:12:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HG12	7	0.14	0.26
(1,1038)	1:A:12:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HG13	7	0.14	0.26
(1,1029)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:99:LEU:HD21	7	0.12	0.29
(1,1029)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:99:LEU:HD22	7	0.12	0.29
(1,1029)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:99:LEU:HD23	7	0.12	0.29
(1,1029)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:99:LEU:HD21	7	0.12	0.29
(1,1029)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:99:LEU:HD22	7	0.12	0.29
(1,1029)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:99:LEU:HD23	7	0.12	0.29
(1,1029)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:99:LEU:HD21	7	0.12	0.29
(1,1029)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:99:LEU:HD22	7	0.12	0.29
(1,1029)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:99:LEU:HD23	7	0.12	0.29
(1,972)	1:A:78:LYS:H	1:A:89:GLU:H	6	0.06	0.1
(1,957)	1:A:41:LEU:H	1:A:124:VAL:H	6	0.06	0.12
(1,952)	1:A:32:GLU:H	1:A:34:TRP:H	6	0.09	0.24
(1,880)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:13:ASN:HD21	6	0.11	0.36
(1,880)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:13:ASN:HD21	6	0.11	0.36
(1,880)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:13:ASN:HD21	6	0.11	0.36



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,856)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:138:LEU:HD11	6	0.09	0.23
(1,856)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:138:LEU:HD12	6	0.09	0.23
(1,856)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:138:LEU:HD13	6	0.09	0.23
(1,856)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:138:LEU:HD11	6	0.09	0.23
(1,856)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:138:LEU:HD12	6	0.09	0.23
(1,856)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:138:LEU:HD13	6	0.09	0.23
(1,856)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:138:LEU:HD11	6	0.09	0.23
(1,856)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:138:LEU:HD12	6	0.09	0.23
(1,856)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:138:LEU:HD13	6	0.09	0.23
(1,846)	1:A:88:THR:H	1:A:102:VAL:HG11	6	0.08	0.19
(1,846)	1:A:88:THR:H	1:A:102:VAL:HG12	6	0.08	0.19
(1,846)	1:A:88:THR:H	1:A:102:VAL:HG13	6	0.08	0.19
(1,839)	1:A:42:TYR:H	1:A:43:VAL:HG11	6	0.06	0.11
(1,839)	1:A:42:TYR:H	1:A:43:VAL:HG12	6	0.06	0.11
(1,839)	1:A:42:TYR:H	1:A:43:VAL:HG13	6	0.06	0.11
(1,805)	1:A:54:SER:H	1:A:56:ASP:H	6	0.06	0.13
(1,78)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:H	6	0.06	0.13
(1,756)	1:A:92:SER:H	1:A:97:SER:H	6	1.03	1.85
(1,751)	1:A:105:ASP:H	1:A:113:ARG:H	6	0.09	0.2
(1,723)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:H	6	0.06	0.13
(1,713)	1:A:34:TRP:H	1:A:36:HIS:H	6	0.12	0.19
(1,7)	1:A:41:LEU:H	1:A:41:LEU:HD11	6	0.04	0.07
(1,7)	1:A:41:LEU:H	1:A:41:LEU:HD12	6	0.04	0.07
(1,7)	1:A:41:LEU:H	1:A:41:LEU:HD13	6	0.04	0.07
(1,682)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:13:ASN:HD21	6	0.14	0.27
(1,682)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:13:ASN:HD21	6	0.14	0.27
(1,682)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:13:ASN:HD21	6	0.14	0.27
(1,68)	1:A:34:TRP:H	1:A:36:HIS:H	6	0.12	0.19
(1,678)	1:A:92:SER:H	1:A:99:LEU:HD11	6	0.39	1.2
(1,678)	1:A:92:SER:H	1:A:99:LEU:HD12	6	0.39	1.2
(1,678)	1:A:92:SER:H	1:A:99:LEU:HD13	6	0.39	1.2
(1,675)	1:A:106:GLY:H	1:A:112:LEU:HD21	6	0.06	0.11
(1,675)	1:A:106:GLY:H	1:A:112:LEU:HD22	6	0.06	0.11
(1,675)	1:A:106:GLY:H	1:A:112:LEU:HD23	6	0.06	0.11
(1,652)	1:A:41:LEU:H	1:A:41:LEU:HD11	6	0.04	0.07
(1,652)	1:A:41:LEU:H	1:A:41:LEU:HD12	6	0.04	0.07
(1,652)	1:A:41:LEU:H	1:A:41:LEU:HD13	6	0.04	0.07
(1,596)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD21	6	0.42	0.56
(1,596)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD22	6	0.42	0.56
(1,596)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD23	6	0.42	0.56
(1,561)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:134:TYR:H	6	0.08	0.17
(1,561)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:134:TYR:H	6	0.08	0.17



Continued from previous page...

(1,561)       1:A:129:LEU:HD23       1:A:134:TYR:H       6       0.08         (1,558)       1:A:129:LEU:HD21       1:A:132:GLU:H       6       0.1         (1,558)       1:A:129:LEU:HD22       1:A:132:GLU:H       6       0.1         (1,558)       1:A:129:LEU:HD23       1:A:132:GLU:H       6       0.1         (1,556)       1:A:129:LEU:H       1:A:138:LEU:HD11       6       0.06         (1,556)       1:A:129:LEU:H       1:A:138:LEU:HD12       6       0.06         (1,556)       1:A:129:LEU:H       1:A:138:LEU:HD13       6       0.06         (1,551)       1:A:124:VAL:H       1:A:129:LEU:HD11       6       0.08         (1,551)       1:A:124:VAL:H       1:A:129:LEU:HD12       6       0.08         (1,551)       1:A:124:VAL:H       1:A:129:LEU:HD13       6       0.08         (1,548)       1:A:130:LYS:H       1:A:138:LEU:HD11       6       0.12         (1,548)       1:A:130:LYS:H       1:A:138:LEU:HD12       6       0.12         (1,499)       1:A:71:ILE:H       1:A:71:ILE:HD11       6       0.06         (1,499)       1:A:71:ILE:H       1:A:71:ILE:HD12       6       0.06	0.25 0.25 0.25 0.14 0.14 0.14 0.14 0.12 0.12 0.12 0.12 0.12 0.12 0.12 0.12 0.12 0.12 0.12 0.13 0.14
(1,558)         1:A:129:LEU:HD22         1:A:132:GLU:H         6         0.1           (1,558)         1:A:129:LEU:HD23         1:A:132:GLU:H         6         0.1           (1,556)         1:A:129:LEU:H         1:A:138:LEU:HD11         6         0.06           (1,556)         1:A:129:LEU:H         1:A:138:LEU:HD12         6         0.06           (1,556)         1:A:129:LEU:H         1:A:138:LEU:HD13         6         0.06           (1,551)         1:A:124:VAL:H         1:A:129:LEU:HD11         6         0.08           (1,551)         1:A:124:VAL:H         1:A:129:LEU:HD12         6         0.08           (1,551)         1:A:130:LYS:H         1:A:138:LEU:HD13         6         0.08           (1,548)         1:A:130:LYS:H         1:A:138:LEU:HD12         6         0.11           (1,548)         1:A:130:LYS:H         1:A:138:LEU:HD13         6         0.12           (1,548)         1:A:71:ILE:H         1:A:71:ILE:HD11         6         0.06	0.25       0.25       0.14       0.14       0.14       0.12       0.12       0.12       0.12       0.12       0.12       0.12       0.21       0.21       0.09       0.09
(1,558)       1:A:129:LEU:HD23       1:A:132:GLU:H       6       0.1         (1,556)       1:A:129:LEU:H       1:A:138:LEU:HD11       6       0.06         (1,556)       1:A:129:LEU:H       1:A:138:LEU:HD12       6       0.06         (1,556)       1:A:129:LEU:H       1:A:138:LEU:HD13       6       0.06         (1,551)       1:A:124:VAL:H       1:A:129:LEU:HD11       6       0.08         (1,551)       1:A:124:VAL:H       1:A:129:LEU:HD12       6       0.08         (1,551)       1:A:124:VAL:H       1:A:129:LEU:HD13       6       0.08         (1,551)       1:A:130:LYS:H       1:A:138:LEU:HD13       6       0.11         (1,548)       1:A:130:LYS:H       1:A:138:LEU:HD12       6       0.11         (1,548)       1:A:130:LYS:H       1:A:138:LEU:HD13       6       0.11         (1,548)       1:A:130:LYS:H       1:A:138:LEU:HD13       6       0.11         (1,499)       1:A:71:ILE:H       1:A:71:ILE:HD11       6       0.06	0.25       0.14       0.14       0.14       0.12       0.12       0.12       0.12       0.12       0.12       0.12       0.12       0.21       0.21       0.09       0.09
(1,556)       1:A:129:LEU:H       1:A:138:LEU:HD11       6       0.06         (1,556)       1:A:129:LEU:H       1:A:138:LEU:HD12       6       0.06         (1,556)       1:A:129:LEU:H       1:A:138:LEU:HD13       6       0.06         (1,551)       1:A:124:VAL:H       1:A:129:LEU:HD11       6       0.08         (1,551)       1:A:124:VAL:H       1:A:129:LEU:HD12       6       0.08         (1,551)       1:A:124:VAL:H       1:A:129:LEU:HD13       6       0.08         (1,548)       1:A:130:LYS:H       1:A:138:LEU:HD11       6       0.11         (1,548)       1:A:130:LYS:H       1:A:138:LEU:HD12       6       0.11         (1,548)       1:A:130:LYS:H       1:A:138:LEU:HD13       6       0.11         (1,499)       1:A:71:ILE:H       1:A:71:ILE:HD11       6       0.06	6     0.14       6     0.14       6     0.14       8     0.12       8     0.12       1     0.21       1     0.21       1     0.21       6     0.09       6     0.09
(1,556)       1:A:129:LEU:H       1:A:138:LEU:HD12       6       0.06         (1,556)       1:A:129:LEU:H       1:A:138:LEU:HD13       6       0.06         (1,551)       1:A:124:VAL:H       1:A:129:LEU:HD11       6       0.08         (1,551)       1:A:124:VAL:H       1:A:129:LEU:HD12       6       0.08         (1,551)       1:A:124:VAL:H       1:A:129:LEU:HD13       6       0.08         (1,548)       1:A:130:LYS:H       1:A:138:LEU:HD11       6       0.11         (1,548)       1:A:130:LYS:H       1:A:138:LEU:HD12       6       0.11         (1,548)       1:A:130:LYS:H       1:A:138:LEU:HD13       6       0.11         (1,548)       1:A:130:LYS:H       1:A:138:LEU:HD13       6       0.11         (1,499)       1:A:71:ILE:H       1:A:71:ILE:HD11       6       0.06	6     0.14       6     0.14       8     0.12       8     0.12       8     0.12       1     0.21       1     0.21       1     0.21       3     0.09       5     0.09
(1,556)       1:A:129:LEU:H       1:A:138:LEU:HD13       6       0.06         (1,551)       1:A:124:VAL:H       1:A:129:LEU:HD11       6       0.08         (1,551)       1:A:124:VAL:H       1:A:129:LEU:HD12       6       0.08         (1,551)       1:A:124:VAL:H       1:A:129:LEU:HD13       6       0.08         (1,548)       1:A:130:LYS:H       1:A:138:LEU:HD11       6       0.11         (1,548)       1:A:130:LYS:H       1:A:138:LEU:HD12       6       0.11         (1,548)       1:A:130:LYS:H       1:A:138:LEU:HD13       6       0.11         (1,499)       1:A:71:ILE:H       1:A:71:ILE:HD11       6       0.06	6     0.14       8     0.12       8     0.12       8     0.12       1     0.21       1     0.21       1     0.21       5     0.09       6     0.09
(1,551)       1:A:124:VAL:H       1:A:129:LEU:HD11       6       0.08         (1,551)       1:A:124:VAL:H       1:A:129:LEU:HD12       6       0.08         (1,551)       1:A:124:VAL:H       1:A:129:LEU:HD13       6       0.08         (1,548)       1:A:130:LYS:H       1:A:138:LEU:HD11       6       0.11         (1,548)       1:A:130:LYS:H       1:A:138:LEU:HD12       6       0.11         (1,548)       1:A:130:LYS:H       1:A:138:LEU:HD13       6       0.11         (1,499)       1:A:71:ILE:H       1:A:71:ILE:HD11       6       0.06	8 0.12 8 0.12 8 0.12 1 0.21 1 0.21 1 0.21 6 0.09 6 0.09
(1,551)       1:A:124:VAL:H       1:A:129:LEU:HD12       6       0.08         (1,551)       1:A:124:VAL:H       1:A:129:LEU:HD13       6       0.08         (1,548)       1:A:130:LYS:H       1:A:138:LEU:HD11       6       0.11         (1,548)       1:A:130:LYS:H       1:A:138:LEU:HD12       6       0.11         (1,548)       1:A:130:LYS:H       1:A:138:LEU:HD13       6       0.11         (1,499)       1:A:71:ILE:H       1:A:71:ILE:HD11       6       0.06	8 0.12 8 0.12 1 0.21 1 0.21 1 0.21 5 0.09 6 0.09
(1,551)       1:A:124:VAL:H       1:A:129:LEU:HD13       6       0.08         (1,548)       1:A:130:LYS:H       1:A:138:LEU:HD11       6       0.11         (1,548)       1:A:130:LYS:H       1:A:138:LEU:HD12       6       0.11         (1,548)       1:A:130:LYS:H       1:A:138:LEU:HD13       6       0.11         (1,499)       1:A:71:ILE:H       1:A:71:ILE:HD11       6       0.06	8 0.12 1 0.21 1 0.21 1 0.21 6 0.09 6 0.09
(1,548)       1:A:130:LYS:H       1:A:138:LEU:HD11       6       0.11         (1,548)       1:A:130:LYS:H       1:A:138:LEU:HD12       6       0.11         (1,548)       1:A:130:LYS:H       1:A:138:LEU:HD13       6       0.11         (1,499)       1:A:71:ILE:H       1:A:71:ILE:HD11       6       0.06	0.21 0.21 1 0.21 1 0.21 5 0.09 5 0.09
(1,548)       1:A:130:LYS:H       1:A:138:LEU:HD12       6       0.11         (1,548)       1:A:130:LYS:H       1:A:138:LEU:HD13       6       0.11         (1,499)       1:A:71:ILE:H       1:A:71:ILE:HD11       6       0.06	0.21 0.21 0.09 0.09
(1,548) 1:A:130:LYS:H 1:A:138:LEU:HD13 6 0.11 (1,499) 1:A:71:ILE:H 1:A:71:ILE:HD11 6 0.06	0.21 0.09 0.09
(1,499) 1:A:71:ILE:H 1:A:71:ILE:HD11 6 0.06	6 0.09 6 0.09
	0.09
(1,499) 1:A:71:ILE:H 1:A:71:ILE:HD12 6 0.06	
(1,499) 1:A:71:ILE:H 1:A:71:ILE:HD13 6 0.06	6 0.09
(1,491) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:52:PHE:H 6 0.06	6 0.1
(1,491) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:52:PHE:H 6 0.06	6 0.1
(1,491) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:52:PHE:H 6 0.06	6 0.1
(1,483) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:49:LYS:H 6 0.13	3 0.24
(1,483) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:49:LYS:H 6 0.13	3 0.24
(1,483) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:49:LYS:H 6 0.13	3 0.24
(1,430) 1:A:46:VAL:HG11 1:A:47:SER:H 6 0.06	6 0.14
(1,430) 1:A:46:VAL:HG12 1:A:47:SER:H 6 0.06	6 0.14
(1,430) 1:A:46:VAL:HG13 1:A:47:SER:H 6 0.06	6 0.14
(1,416) 1:A:86:ILE:H 1:A:86:ILE:HD11 6 0.12	2 0.19
(1,416) 1:A:86:ILE:H 1:A:86:ILE:HD12 6 0.12	2 0.19
(1,416) 1:A:86:ILE:H 1:A:86:ILE:HD13 6 0.12	2 0.19
(1,37) 1:A:9:ILE:HD11 1:A:13:ASN:HD21 6 0.14	1 0.27
(1,37) 1:A:9:ILE:HD12 1:A:13:ASN:HD21 6 0.14	1 0.27
(1,37) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:13:ASN:HD21 6 0.14	4 0.27
(1,366) 1:A:41:LEU:H 1:A:126:LYS:H 6 0.1	0.14
(1,355) 1:A:67:PHE:H 1:A:114:TYR:H 6 0.07	7 0.16
(1,33) 1:A:92:SER:H 1:A:99:LEU:HD11 6 0.39	9 1.2
(1,33) 1:A:92:SER:H 1:A:99:LEU:HD12 6 0.39	9 1.2
(1,33) 1:A:92:SER:H 1:A:99:LEU:HD13 6 0.39	9 1.2
(1,327) 1:A:78:LYS:H 1:A:89:GLU:H 6 0.06	0.1
(1,312) 1:A:41:LEU:H 1:A:124:VAL:H 6 0.06	0.12
(1,307) 1:A:32:GLU:H 1:A:34:TRP:H 6 0.09	0.24
(1,30) 1:A:106:GLY:H 1:A:112:LEU:HD21 6 0.06	0.11
(1,30) 1:A:106:GLY:H 1:A:112:LEU:HD22 6 0.06	0.11
(1,30) 1:A:106:GLY:H 1:A:112:LEU:HD23 6 0.06	0.11



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,235)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:13:ASN:HD21	6	0.11	0.36
(1,235)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:13:ASN:HD21	6	0.11	0.36
(1,235)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:13:ASN:HD21	6	0.11	0.36
(1,211)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:138:LEU:HD11	6	0.09	0.23
(1,211)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:138:LEU:HD12	6	0.09	0.23
(1,211)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:138:LEU:HD13	6	0.09	0.23
(1,211)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:138:LEU:HD11	6	0.09	0.23
(1,211)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:138:LEU:HD12	6	0.09	0.23
(1,211)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:138:LEU:HD13	6	0.09	0.23
(1,211)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:138:LEU:HD11	6	0.09	0.23
(1,211)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:138:LEU:HD12	6	0.09	0.23
(1,211)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:138:LEU:HD13	6	0.09	0.23
(1,201)	1:A:88:THR:H	1:A:102:VAL:HG11	6	0.08	0.19
(1,201)	1:A:88:THR:H	1:A:102:VAL:HG12	6	0.08	0.19
(1,201)	1:A:88:THR:H	1:A:102:VAL:HG13	6	0.08	0.19
(1,194)	1:A:42:TYR:H	1:A:43:VAL:HG11	6	0.06	0.11
(1,194)	1:A:42:TYR:H	1:A:43:VAL:HG12	6	0.06	0.11
(1,194)	1:A:42:TYR:H	1:A:43:VAL:HG13	6	0.06	0.11
(1,160)	1:A:54:SER:H	1:A:56:ASP:H	6	0.06	0.13
(1,1241)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD21	6	0.42	0.56
(1,1241)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD22	6	0.42	0.56
(1,1241)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD23	6	0.42	0.56
(1,1206)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:134:TYR:H	6	0.08	0.17
(1,1206)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:134:TYR:H	6	0.08	0.17
(1,1206)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:134:TYR:H	6	0.08	0.17
(1,1203)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:132:GLU:H	6	0.1	0.25
(1,1203)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:132:GLU:H	6	0.1	0.25
(1,1203)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:132:GLU:H	6	0.1	0.25
(1,1201)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD11	6	0.06	0.14
(1,1201)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD12	6	0.06	0.14
(1,1201)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD13	6	0.06	0.14
(1,1196)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD11	6	0.08	0.12
(1,1196)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD12	6	0.08	0.12
(1,1196)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD13	6	0.08	0.12
(1,1193)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD11	6	0.11	0.21
(1,1193)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD12	6	0.11	0.21
(1,1193)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD13	6	0.11	0.21
(1,1144)	1:A:71:ILE:H	1:A:71:ILE:HD11	6	0.06	0.09
(1,1144)	1:A:71:ILE:H	1:A:71:ILE:HD12	6	0.06	0.09
(1,1144)	1:A:71:ILE:H	1:A:71:ILE:HD13	6	0.06	0.09
(1,1136)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:52:PHE:H	6	0.06	0.1
(1,1136)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:52:PHE:H	6	0.06	0.1



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,1136)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:52:PHE:H	6	0.06	0.1
(1,1128)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:49:LYS:H	6	0.13	0.24
(1,1128)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:49:LYS:H	6	0.13	0.24
(1,1128)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:49:LYS:H	6	0.13	0.24
(1,111)	1:A:92:SER:H	1:A:97:SER:H	6	1.03	1.85
(1,1075)	1:A:46:VAL:HG11	1:A:47:SER:H	6	0.06	0.14
(1,1075)	1:A:46:VAL:HG12	1:A:47:SER:H	6	0.06	0.14
(1,1075)	1:A:46:VAL:HG13	1:A:47:SER:H	6	0.06	0.14
(1,1061)	1:A:86:ILE:H	1:A:86:ILE:HD11	6	0.12	0.19
(1,1061)	1:A:86:ILE:H	1:A:86:ILE:HD12	6	0.12	0.19
(1,1061)	1:A:86:ILE:H	1:A:86:ILE:HD13	6	0.12	0.19
(1,106)	1:A:105:ASP:H	1:A:113:ARG:H	6	0.09	0.2
(1,1011)	1:A:41:LEU:H	1:A:126:LYS:H	6	0.1	0.14
(1,1000)	1:A:67:PHE:H	1:A:114:TYR:H	6	0.07	0.16
(1,996)	1:A:108:GLY:H	1:A:112:LEU:H	5	0.06	0.07
(1,986)	1:A:99:LEU:H	1:A:100:GLY:H	5	0.03	0.07
(1,984)	1:A:92:SER:H	1:A:98:HIS:H	5	0.15	0.29
(1,98)	1:A:31:ASN:H	1:A:34:TRP:H	5	0.15	0.3
(1,977)	1:A:85:MET:H	1:A:86:ILE:H	5	0.06	0.1
(1,950)	1:A:25:THR:H	1:A:26:GLU:H	5	0.04	0.07
(1,926)	1:A:110:ASN:HD22	1:A:112:LEU:H	5	0.1	0.2
(1,919)	1:A:80:ASP:H	1:A:89:GLU:H	5	0.07	0.09
(1,889)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:130:LYS:H	5	0.03	0.05
(1,889)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:130:LYS:H	5	0.03	0.05
(1,889)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:130:LYS:H	5	0.03	0.05
(1,857)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:129:LEU:HD11	5	0.07	0.1
(1,857)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:129:LEU:HD12	5	0.07	0.1
(1,857)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:129:LEU:HD13	5	0.07	0.1
(1,857)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:129:LEU:HD11	5	0.07	0.1
(1,857)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:129:LEU:HD12	5	0.07	0.1
(1,857)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:129:LEU:HD13	5	0.07	0.1
(1,857)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:129:LEU:HD11	5	0.07	0.1
(1,857)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:129:LEU:HD12	5	0.07	0.1
(1,857)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:129:LEU:HD13	5	0.07	0.1
(1,790)	1:A:128:LYS:H	1:A:130:LYS:H	5	0.06	0.18
(1,777)	1:A:16:GLN:H	1:A:19:VAL:H	5	0.07	0.14
(1,759)	1:A:29:PHE:H	1:A:31:ASN:H	5	0.11	0.28
(1,749)	1:A:73:GLU:H	1:A:75:VAL:H	5	0.02	0.04
(1,743)	1:A:31:ASN:H	1:A:34:TRP:H	5	0.15	0.3
(1,709)	1:A:47:SER:HG	1:A:49:LYS:H	5	0.04	0.07
(1,704)	1:A:132:GLU:H	1:A:138:LEU:HD11	5	0.06	0.11
(1,704)	1:A:132:GLU:H	1:A:138:LEU:HD12	5	0.06	0.11



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,704)	1:A:132:GLU:H	1:A:138:LEU:HD13	5	0.06	0.11
(1,684)	1:A:140:LEU:H	1:A:140:LEU:HD11	5	0.04	0.08
(1,684)	1:A:140:LEU:H	1:A:140:LEU:HD12	5	0.04	0.08
(1,684)	1:A:140:LEU:H	1:A:140:LEU:HD13	5	0.04	0.08
(1,667)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:137:TYR:H	5	0.05	0.11
(1,667)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:137:TYR:H	5	0.05	0.11
(1,667)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:137:TYR:H	5	0.05	0.11
(1,64)	1:A:47:SER:HG	1:A:49:LYS:H	5	0.04	0.07
(1,593)	1:A:22:ASN:HD21	1:A:23:ASN:H	5	0.21	0.35
(1,59)	1:A:132:GLU:H	1:A:138:LEU:HD11	5	0.06	0.11
(1,59)	1:A:132:GLU:H	1:A:138:LEU:HD12	5	0.06	0.11
(1,59)	1:A:132:GLU:H	1:A:138:LEU:HD13	5	0.06	0.11
(1,584)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD11	5	0.08	0.11
(1,584)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD12	5	0.08	0.11
(1,584)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD13	5	0.08	0.11
(1,577)	1:A:111:GLY:H	1:A:112:LEU:HD21	5	0.07	0.12
(1,577)	1:A:111:GLY:H	1:A:112:LEU:HD22	5	0.07	0.12
(1,577)	1:A:111:GLY:H	1:A:112:LEU:HD23	5	0.07	0.12
(1,507)	1:A:75:VAL:HG11	1:A:77:GLU:H	5	0.07	0.18
(1,507)	1:A:75:VAL:HG12	1:A:77:GLU:H	5	0.07	0.18
(1,507)	1:A:75:VAL:HG13	1:A:77:GLU:H	5	0.07	0.18
(1,501)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG21	5	0.05	0.09
(1,501)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG22	5	0.05	0.09
(1,501)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG23	5	0.05	0.09
(1,496)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:54:SER:H	5	0.05	0.08
(1,496)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:54:SER:H	5	0.05	0.08
(1,496)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:54:SER:H	5	0.05	0.08
(1,448)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:89:GLU:H	5	0.05	0.07
(1,448)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:89:GLU:H	5	0.05	0.07
(1,448)	1:A:79:LEU:HD13	1:A:89:GLU:H	5	0.05	0.07
(1,447)	1:A:41:LEU:H	1:A:124:VAL:HG21	5	0.06	0.09
(1,447)	1:A:41:LEU:H	1:A:124:VAL:HG22	5	0.06	0.09
(1,447)	1:A:41:LEU:H	1:A:124:VAL:HG23	5	0.06	0.09
(1,420)	1:A:19:VAL:H	1:A:19:VAL:HG11	5	0.02	0.04
(1,420)	1:A:19:VAL:H	1:A:19:VAL:HG12	5	0.02	0.04
(1,420)	1:A:19:VAL:H	1:A:19:VAL:HG13	5	0.02	0.04
(1,39)	1:A:140:LEU:H	1:A:140:LEU:HD11	5	0.04	0.08
(1,39)	1:A:140:LEU:H	1:A:140:LEU:HD12	5	0.04	0.08
(1,39)	1:A:140:LEU:H	1:A:140:LEU:HD13	5	0.04	0.08
(1,379)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:H	5	0.07	0.17
(1,357)	1:A:119:ALA:H	1:A:121:LEU:H	5	0.03	0.06
(1,351)	1:A:108:GLY:H	1:A:112:LEU:H	5	0.06	0.07



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,341)	1:A:99:LEU:H	1:A:100:GLY:H	5	0.03	0.07
(1,339)	1:A:92:SER:H	1:A:98:HIS:H	5	0.15	0.29
(1,332)	1:A:85:MET:H	1:A:86:ILE:H	5	0.06	0.1
(1,305)	1:A:25:THR:H	1:A:26:GLU:H	5	0.04	0.07
(1,281)	1:A:110:ASN:HD22	1:A:112:LEU:H	5	0.1	0.2
(1,274)	1:A:80:ASP:H	1:A:89:GLU:H	5	0.07	0.09
(1,244)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:130:LYS:H	5	0.03	0.05
(1,244)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:130:LYS:H	5	0.03	0.05
(1,244)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:130:LYS:H	5	0.03	0.05
(1,22)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:137:TYR:H	5	0.05	0.11
(1,22)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:137:TYR:H	5	0.05	0.11
(1,22)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:137:TYR:H	5	0.05	0.11
(1,212)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:129:LEU:HD11	5	0.07	0.1
(1,212)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:129:LEU:HD12	5	0.07	0.1
(1,212)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:129:LEU:HD13	5	0.07	0.1
(1,212)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:129:LEU:HD11	5	0.07	0.1
(1,212)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:129:LEU:HD12	5	0.07	0.1
(1,212)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:129:LEU:HD13	5	0.07	0.1
(1,212)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:129:LEU:HD11	5	0.07	0.1
(1,212)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:129:LEU:HD12	5	0.07	0.1
(1,212)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:129:LEU:HD13	5	0.07	0.1
(1,145)	1:A:128:LYS:H	1:A:130:LYS:H	5	0.06	0.18
(1,132)	1:A:16:GLN:H	1:A:19:VAL:H	5	0.07	0.14
(1,1238)	1:A:22:ASN:HD21	1:A:23:ASN:H	5	0.21	0.35
(1,1229)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD11	5	0.08	0.11
(1,1229)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD12	5	0.08	0.11
(1,1229)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD13	5	0.08	0.11
(1,1222)	1:A:111:GLY:H	1:A:112:LEU:HD21	5	0.07	0.12
(1,1222)	1:A:111:GLY:H	1:A:112:LEU:HD22	5	0.07	0.12
(1,1222)	1:A:111:GLY:H	1:A:112:LEU:HD23	5	0.07	0.12
(1,1152)	1:A:75:VAL:HG11	1:A:77:GLU:H	5	0.07	0.18
(1,1152)	1:A:75:VAL:HG12	1:A:77:GLU:H	5	0.07	0.18
(1,1152)	1:A:75:VAL:HG13	1:A:77:GLU:H	5	0.07	0.18
(1,1146)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG21	5	0.05	0.09
(1,1146)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG22	5	0.05	0.09
(1,1146)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG23	5	0.05	0.09
(1,1141)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:54:SER:H	5	0.05	0.08
(1,1141)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:54:SER:H	5	0.05	0.08
(1,1141)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:54:SER:H	5	0.05	0.08
(1,114)	1:A:29:PHE:H	1:A:31:ASN:H	5	0.11	0.28
(1,1093)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:89:GLU:H	5	0.05	0.07
(1,1093)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:89:GLU:H	5	0.05	0.07



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,1093)	1:A:79:LEU:HD13	1:A:89:GLU:H	5	0.05	0.07
(1,1092)	1:A:41:LEU:H	1:A:124:VAL:HG21	5	0.06	0.09
(1,1092)	1:A:41:LEU:H	1:A:124:VAL:HG22	5	0.06	0.09
(1,1092)	1:A:41:LEU:H	1:A:124:VAL:HG23	5	0.06	0.09
(1,1065)	1:A:19:VAL:H	1:A:19:VAL:HG11	5	0.02	0.04
(1,1065)	1:A:19:VAL:H	1:A:19:VAL:HG12	5	0.02	0.04
(1,1065)	1:A:19:VAL:H	1:A:19:VAL:HG13	5	0.02	0.04
(1,104)	1:A:73:GLU:H	1:A:75:VAL:H	5	0.02	0.04
(1,1024)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:H	5	0.07	0.17
(1,1002)	1:A:119:ALA:H	1:A:121:LEU:H	5	0.03	0.06
(1,998)	1:A:104:ASN:H	1:A:106:GLY:H	4	0.14	0.3
(1,990)	1:A:103:PHE:H	1:A:105:ASP:H	4	0.09	0.13
(1,967)	1:A:54:SER:H	1:A:57:LYS:H	4	0.09	0.15
(1,929)	1:A:6:GLU:H	1:A:8:LYS:H	4	0.1	0.24
(1,914)	1:A:22:ASN:HD22	1:A:24:GLY:H	4	0.04	0.04
(1,87)	1:A:31:ASN:H	1:A:34:TRP:HE1	4	0.06	0.15
(1,852)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:124:VAL:HG11	4	0.03	0.04
(1,852)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:124:VAL:HG12	4	0.03	0.04
(1,852)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:124:VAL:HG13	4	0.03	0.04
(1,852)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:124:VAL:HG11	4	0.03	0.04
(1,852)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:124:VAL:HG12	4	0.03	0.04
(1,852)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:124:VAL:HG13	4	0.03	0.04
(1,852)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:124:VAL:HG11	4	0.03	0.04
(1,852)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:124:VAL:HG12	4	0.03	0.04
(1,852)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:124:VAL:HG13	4	0.03	0.04
(1,825)	1:A:90:VAL:HG21	1:A:91:ARG:H	4	0.03	0.05
(1,825)	1:A:90:VAL:HG22	1:A:91:ARG:H	4	0.03	0.05
(1,825)	1:A:90:VAL:HG23	1:A:91:ARG:H	4	0.03	0.05
(1,803)	1:A:77:GLU:H	1:A:78:LYS:H	4	0.02	0.04
(1,795)	1:A:81:THR:H	1:A:82:SER:H	4	0.03	0.05
(1,747)	1:A:52:PHE:H	1:A:71:ILE:H	4	0.05	0.09
(1,732)	1:A:31:ASN:H	1:A:34:TRP:HE1	4	0.06	0.15
(1,710)	1:A:118:SER:HG	1:A:119:ALA:H	4	0.04	0.09
(1,695)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:64:TRP:HE1	4	0.04	0.08
(1,695)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:64:TRP:HE1	4	0.04	0.08
(1,695)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:64:TRP:HE1	4	0.04	0.08
(1,694)	1:A:78:LYS:H	1:A:90:VAL:HG11	4	0.06	0.11
(1,694)	1:A:78:LYS:H	1:A:90:VAL:HG12	4	0.06	0.11
(1,694)	1:A:78:LYS:H	1:A:90:VAL:HG13	4	0.06	0.11
(1,693)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:88:THR:H	4	0.08	0.17
(1,693)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:88:THR:H	4	0.08	0.17
(1,693)	1:A:79:LEU:HD13	1:A:88:THR:H	4	0.08	0.17



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,663)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:128:LYS:H	4	0.03	0.06
(1,663)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:128:LYS:H	4	0.03	0.06
(1,663)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:128:LYS:H	4	0.03	0.06
(1,65)	1:A:118:SER:HG	1:A:119:ALA:H	4	0.04	0.09
(1,647)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:114:TYR:H	4	0.08	0.12
(1,647)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:114:TYR:H	4	0.08	0.12
(1,647)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:114:TYR:H	4	0.08	0.12
(1,622)	1:A:86:ILE:HD11	1:A:80:ASP:H	4	0.04	0.08
(1,622)	1:A:86:ILE:HD12	1:A:80:ASP:H	4	0.04	0.08
(1,622)	1:A:86:ILE:HD13	1:A:80:ASP:H	4	0.04	0.08
(1,603)	1:A:144:LEU:HD11	1:A:145:GLU:H	4	0.52	0.88
(1,603)	1:A:144:LEU:HD12	1:A:145:GLU:H	4	0.52	0.88
(1,603)	1:A:144:LEU:HD13	1:A:145:GLU:H	4	0.52	0.88
(1,588)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:22:ASN:H	4	0.11	0.19
(1,588)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:22:ASN:H	4	0.11	0.19
(1,588)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:22:ASN:H	4	0.11	0.19
(1,583)	1:A:90:VAL:H	1:A:102:VAL:HG21	4	0.07	0.16
(1,583)	1:A:90:VAL:H	1:A:102:VAL:HG22	4	0.07	0.16
(1,583)	1:A:90:VAL:H	1:A:102:VAL:HG23	4	0.07	0.16
(1,552)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD21	4	0.03	0.07
(1,552)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD22	4	0.03	0.07
(1,552)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD23	4	0.03	0.07
(1,534)	1:A:101:HIS:H	1:A:102:VAL:HG11	4	0.06	0.09
(1,534)	1:A:101:HIS:H	1:A:102:VAL:HG12	4	0.06	0.09
(1,534)	1:A:101:HIS:H	1:A:102:VAL:HG13	4	0.06	0.09
(1,500)	1:A:73:GLU:H	1:A:75:VAL:HG21	4	0.02	0.03
(1,500)	1:A:73:GLU:H	1:A:75:VAL:HG22	4	0.02	0.03
(1,500)	1:A:73:GLU:H	1:A:75:VAL:HG23	4	0.02	0.03
(1,50)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:64:TRP:HE1	4	0.04	0.08
(1,50)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:64:TRP:HE1	4	0.04	0.08
(1,50)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:64:TRP:HE1	4	0.04	0.08
(1,49)	1:A:78:LYS:H	1:A:90:VAL:HG11	4	0.06	0.11
(1,49)	1:A:78:LYS:H	1:A:90:VAL:HG12	4	0.06	0.11
(1,49)	1:A:78:LYS:H	1:A:90:VAL:HG13	4	0.06	0.11
(1,48)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:88:THR:H	4	0.08	0.17
(1,48)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:88:THR:H	4	0.08	0.17
(1,48)	1:A:79:LEU:HD13	1:A:88:THR:H	4	0.08	0.17
(1,442)	1:A:71:ILE:H	1:A:75:VAL:HG11	4	0.06	0.14
(1,442)	1:A:71:ILE:H	1:A:75:VAL:HG12	4	0.06	0.14
(1,442)	1:A:71:ILE:H	1:A:75:VAL:HG13	4	0.06	0.14
(1,421)	1:A:43:VAL:H	1:A:43:VAL:HG11	4	0.03	0.05
(1,421)	1:A:43:VAL:H	1:A:43:VAL:HG12	4	0.03	0.05



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,421)	1:A:43:VAL:H	1:A:43:VAL:HG13	4	0.03	0.05
(1,414)	1:A:12:LEU:H	1:A:12:LEU:HD21	4	0.03	0.06
(1,414)	1:A:12:LEU:H	1:A:12:LEU:HD22	4	0.03	0.06
(1,414)	1:A:12:LEU:H	1:A:12:LEU:HD23	4	0.03	0.06
(1,377)	1:A:134:TYR:H	1:A:135:GLU:H	4	0.14	0.31
(1,365)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:H	4	0.03	0.06
(1,353)	1:A:104:ASN:H	1:A:106:GLY:H	4	0.14	0.3
(1,345)	1:A:103:PHE:H	1:A:105:ASP:H	4	0.09	0.13
(1,322)	1:A:54:SER:H	1:A:57:LYS:H	4	0.09	0.15
(1,284)	1:A:6:GLU:H	1:A:8:LYS:H	4	0.1	0.24
(1,269)	1:A:22:ASN:HD22	1:A:24:GLY:H	4	0.04	0.04
(1,207)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:124:VAL:HG11	4	0.03	0.04
(1,207)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:124:VAL:HG12	4	0.03	0.04
(1,207)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:124:VAL:HG13	4	0.03	0.04
(1,207)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:124:VAL:HG11	4	0.03	0.04
(1,207)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:124:VAL:HG12	4	0.03	0.04
(1,207)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:124:VAL:HG13	4	0.03	0.04
(1,207)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:124:VAL:HG11	4	0.03	0.04
(1,207)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:124:VAL:HG12	4	0.03	0.04
(1,207)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:124:VAL:HG13	4	0.03	0.04
(1,2)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:114:TYR:H	4	0.08	0.12
(1,2)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:114:TYR:H	4	0.08	0.12
(1,2)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:114:TYR:H	4	0.08	0.12
(1,180)	1:A:90:VAL:HG21	1:A:91:ARG:H	4	0.03	0.05
(1,180)	1:A:90:VAL:HG22	1:A:91:ARG:H	4	0.03	0.05
(1,180)	1:A:90:VAL:HG23	1:A:91:ARG:H	4	0.03	0.05
(1,18)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:128:LYS:H	4	0.03	0.06
(1,18)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:128:LYS:H	4	0.03	0.06
(1,18)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:128:LYS:H	4	0.03	0.06
(1,158)	1:A:77:GLU:H	1:A:78:LYS:H	4	0.02	0.04
(1,150)	1:A:81:THR:H	1:A:82:SER:H	4	0.03	0.05
(1,1267)	1:A:86:ILE:HD11	1:A:80:ASP:H	4	0.04	0.08
(1,1267)	1:A:86:ILE:HD12	1:A:80:ASP:H	4	0.04	0.08
(1,1267)	1:A:86:ILE:HD13	1:A:80:ASP:H	4	0.04	0.08
(1,1248)	1:A:144:LEU:HD11	1:A:145:GLU:H	4	0.52	0.88
(1,1248)	1:A:144:LEU:HD12	1:A:145:GLU:H	4	0.52	0.88
(1,1248)	1:A:144:LEU:HD13	1:A:145:GLU:H	4	0.52	0.88
(1,1233)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:22:ASN:H	4	0.11	0.19
(1,1233)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:22:ASN:H	4	0.11	0.19
(1,1233)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:22:ASN:H	4	0.11	0.19
(1,1228)	1:A:90:VAL:H	1:A:102:VAL:HG21	4	0.07	0.16
(1,1228)	1:A:90:VAL:H	1:A:102:VAL:HG22	4	0.07	0.16



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,1228)	1:A:90:VAL:H	1:A:102:VAL:HG23	4	0.07	0.16
(1,1197)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD21	4	0.03	0.07
(1,1197)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD22	4	0.03	0.07
(1,1197)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD23	4	0.03	0.07
(1,1179)	1:A:101:HIS:H	1:A:102:VAL:HG11	4	0.06	0.09
(1,1179)	1:A:101:HIS:H	1:A:102:VAL:HG12	4	0.06	0.09
(1,1179)	1:A:101:HIS:H	1:A:102:VAL:HG13	4	0.06	0.09
(1,1145)	1:A:73:GLU:H	1:A:75:VAL:HG21	4	0.02	0.03
(1,1145)	1:A:73:GLU:H	1:A:75:VAL:HG22	4	0.02	0.03
(1,1145)	1:A:73:GLU:H	1:A:75:VAL:HG23	4	0.02	0.03
(1,1087)	1:A:71:ILE:H	1:A:75:VAL:HG11	4	0.06	0.14
(1,1087)	1:A:71:ILE:H	1:A:75:VAL:HG12	4	0.06	0.14
(1,1087)	1:A:71:ILE:H	1:A:75:VAL:HG13	4	0.06	0.14
(1,1066)	1:A:43:VAL:H	1:A:43:VAL:HG11	4	0.03	0.05
(1,1066)	1:A:43:VAL:H	1:A:43:VAL:HG12	4	0.03	0.05
(1,1066)	1:A:43:VAL:H	1:A:43:VAL:HG13	4	0.03	0.05
(1,1059)	1:A:12:LEU:H	1:A:12:LEU:HD21	4	0.03	0.06
(1,1059)	1:A:12:LEU:H	1:A:12:LEU:HD22	4	0.03	0.06
(1,1059)	1:A:12:LEU:H	1:A:12:LEU:HD23	4	0.03	0.06
(1,1022)	1:A:134:TYR:H	1:A:135:GLU:H	4	0.14	0.31
(1,102)	1:A:52:PHE:H	1:A:71:ILE:H	4	0.05	0.09
(1,1010)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:H	4	0.03	0.06
(1,981)	1:A:90:VAL:H	1:A:101:HIS:H	3	0.09	0.12
(1,979)	1:A:89:GLU:H	1:A:90:VAL:H	3	0.02	0.02
(1,963)	1:A:44:ASP:H	1:A:48:GLY:H	3	0.06	0.08
(1,954)	1:A:33:TYR:H	1:A:36:HIS:H	3	0.17	0.3
(1,93)	1:A:8:LYS:H	1:A:10:LYS:H	3	0.11	0.16
(1,895)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:25:THR:H	3	0.07	0.16
(1,895)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:25:THR:H	3	0.07	0.16
(1,895)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:25:THR:H	3	0.07	0.16
(1,881)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:140:LEU:HD11	3	0.02	0.03
(1,881)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:140:LEU:HD12	3	0.02	0.03
(1,881)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:140:LEU:HD13	3	0.02	0.03
(1,881)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:140:LEU:HD11	3	0.02	0.03
(1,881)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:140:LEU:HD12	3	0.02	0.03
(1,881)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:140:LEU:HD13	3	0.02	0.03
(1,881)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:140:LEU:HD11	3	0.02	0.03
(1,881)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:140:LEU:HD12	3	0.02	0.03
(1,881)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:140:LEU:HD13	3	0.02	0.03
(1,867)	1:A:71:ILE:HD11	1:A:140:LEU:HD21	3	0.17	0.24
(1,867)	1:A:71:ILE:HD11	1:A:140:LEU:HD22	3	0.17	0.24
(1,867)	1:A:71:ILE:HD11	1:A:140:LEU:HD23	3	0.17	0.24



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,867)	1:A:71:ILE:HD12	1:A:140:LEU:HD21	3	0.17	0.24
(1,867)	1:A:71:ILE:HD12	1:A:140:LEU:HD22	3	0.17	0.24
(1,867)	1:A:71:ILE:HD12	1:A:140:LEU:HD23	3	0.17	0.24
(1,867)	1:A:71:ILE:HD13	1:A:140:LEU:HD21	3	0.17	0.24
(1,867)	1:A:71:ILE:HD13	1:A:140:LEU:HD22	3	0.17	0.24
(1,867)	1:A:71:ILE:HD13	1:A:140:LEU:HD23	3	0.17	0.24
(1,866)	1:A:71:ILE:HD11	1:A:140:LEU:HD11	3	0.03	0.04
(1,866)	1:A:71:ILE:HD11	1:A:140:LEU:HD12	3	0.03	0.04
(1,866)	1:A:71:ILE:HD11	1:A:140:LEU:HD13	3	0.03	0.04
(1,866)	1:A:71:ILE:HD12	1:A:140:LEU:HD11	3	0.03	0.04
(1,866)	1:A:71:ILE:HD12	1:A:140:LEU:HD12	3	0.03	0.04
(1,866)	1:A:71:ILE:HD12	1:A:140:LEU:HD13	3	0.03	0.04
(1,866)	1:A:71:ILE:HD13	1:A:140:LEU:HD11	3	0.03	0.04
(1,866)	1:A:71:ILE:HD13	1:A:140:LEU:HD12	3	0.03	0.04
(1,866)	1:A:71:ILE:HD13	1:A:140:LEU:HD13	3	0.03	0.04
(1,858)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:43:VAL:HG11	3	0.02	0.03
(1,858)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:43:VAL:HG12	3	0.02	0.03
(1,858)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:43:VAL:HG13	3	0.02	0.03
(1,858)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:43:VAL:HG11	3	0.02	0.03
(1,858)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:43:VAL:HG12	3	0.02	0.03
(1,858)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:43:VAL:HG13	3	0.02	0.03
(1,858)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:43:VAL:HG11	3	0.02	0.03
(1,858)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:43:VAL:HG12	3	0.02	0.03
(1,858)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:43:VAL:HG13	3	0.02	0.03
(1,834)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:124:VAL:HG21	3	0.07	0.09
(1,834)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:124:VAL:HG22	3	0.07	0.09
(1,834)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:124:VAL:HG23	3	0.07	0.09
(1,834)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:HG21	3	0.07	0.09
(1,834)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:HG22	3	0.07	0.09
(1,834)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:HG23	3	0.07	0.09
(1,834)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:HG21	3	0.07	0.09
(1,834)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:HG22	3	0.07	0.09
(1,834)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:HG23	3	0.07	0.09
(1,809)	1:A:76:GLU:H	1:A:77:GLU:H	3	0.03	0.05
(1,79)	1:A:45:ILE:H	1:A:47:SER:H	3	0.06	0.08
(1,778)	1:A:7:GLU:H	1:A:9:ILE:H	3	0.07	0.1
(1,769)	1:A:5:LYS:H	1:A:7:GLU:H	3	0.07	0.13
(1,738)	1:A:8:LYS:H	1:A:10:LYS:H	3	0.11	0.16
(1,724)	1:A:45:ILE:H	1:A:47:SER:H	3	0.06	0.08
(1,701)	1:A:110:ASN:HD22	1:A:112:LEU:HD11	3	0.36	1.04
(1,701)	1:A:110:ASN:HD22	1:A:112:LEU:HD12	3	0.36	1.04
(1,(01))					



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,687)	1:A:15:MET:H	1:A:19:VAL:HG21	3	0.07	0.11
(1,687)	1:A:15:MET:H	1:A:19:VAL:HG22	3	0.07	0.11
(1,687)	1:A:15:MET:H	1:A:19:VAL:HG23	3	0.07	0.11
(1,683)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:13:ASN:HD22	3	0.05	0.1
(1,683)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:13:ASN:HD22	3	0.05	0.1
(1,683)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:13:ASN:HD22	3	0.05	0.1
(1,674)	1:A:78:LYS:H	1:A:90:VAL:HG21	3	0.03	0.04
(1,674)	1:A:78:LYS:H	1:A:90:VAL:HG22	3	0.03	0.04
(1,674)	1:A:78:LYS:H	1:A:90:VAL:HG23	3	0.03	0.04
(1,634)	1:A:71:ILE:HD11	1:A:140:LEU:HD11	3	0.03	0.04
(1,634)	1:A:71:ILE:HD11	1:A:140:LEU:HD12	3	0.03	0.04
(1,634)	1:A:71:ILE:HD11	1:A:140:LEU:HD13	3	0.03	0.04
(1,634)	1:A:71:ILE:HD12	1:A:140:LEU:HD11	3	0.03	0.04
(1,634)	1:A:71:ILE:HD12	1:A:140:LEU:HD12	3	0.03	0.04
(1,634)	1:A:71:ILE:HD12	1:A:140:LEU:HD13	3	0.03	0.04
(1,634)	1:A:71:ILE:HD13	1:A:140:LEU:HD11	3	0.03	0.04
(1,634)	1:A:71:ILE:HD13	1:A:140:LEU:HD12	3	0.03	0.04
(1,634)	1:A:71:ILE:HD13	1:A:140:LEU:HD13	3	0.03	0.04
(1,623)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:71:ILE:HD11	3	0.06	0.11
(1,623)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:71:ILE:HD12	3	0.06	0.11
(1,623)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:71:ILE:HD13	3	0.06	0.11
(1,623)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:71:ILE:HD11	3	0.06	0.11
(1,623)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:71:ILE:HD12	3	0.06	0.11
(1,623)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:71:ILE:HD13	3	0.06	0.11
(1,623)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:71:ILE:HD11	3	0.06	0.11
(1,623)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:71:ILE:HD12	3	0.06	0.11
(1,623)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:71:ILE:HD13	3	0.06	0.11
(1,621)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:51:LEU:H	3	0.05	0.07
(1,621)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:51:LEU:H	3	0.05	0.07
(1,621)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:51:LEU:H	3	0.05	0.07
(1,580)	1:A:112:LEU:HD21	1:A:113:ARG:H	3	0.11	0.19
(1,580)	1:A:112:LEU:HD22	1:A:113:ARG:H	3	0.11	0.19
(1,580)	1:A:112:LEU:HD23	1:A:113:ARG:H	3	0.11	0.19
(1,570)	1:A:140:LEU:H	1:A:140:LEU:HD21	3	0.04	0.06
(1,570)	1:A:140:LEU:H	1:A:140:LEU:HD22	3	0.04	0.06
(1,570)	1:A:140:LEU:H	1:A:140:LEU:HD23	3	0.04	0.06
(1,56)	1:A:110:ASN:HD22	1:A:112:LEU:HD11	3	0.36	1.04
(1,56)	1:A:110:ASN:HD22	1:A:112:LEU:HD12	3	0.36	1.04
(1,56)	1:A:110:ASN:HD22	1:A:112:LEU:HD13	3	0.36	1.04
(1,559)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:132:GLU:H	3	0.06	0.12
(1,559)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:132:GLU:H	3	0.06	0.12
(1,559)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:132:GLU:H	3	0.06	0.12



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,557)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:131:GLU:H	3	0.07	0.11
(1,557)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:131:GLU:H	3	0.07	0.11
(1,557)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:131:GLU:H	3	0.07	0.11
(1,555)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD11	3	0.1	0.12
(1,555)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD12	3	0.1	0.12
(1,555)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD13	3	0.1	0.12
(1,535)	1:A:101:HIS:H	1:A:116:ILE:HD11	3	0.05	0.07
(1,535)	1:A:101:HIS:H	1:A:116:ILE:HD12	3	0.05	0.07
(1,535)	1:A:101:HIS:H	1:A:116:ILE:HD13	3	0.05	0.07
(1,528)	1:A:105:ASP:H	1:A:112:LEU:HD21	3	0.05	0.07
(1,528)	1:A:105:ASP:H	1:A:112:LEU:HD22	3	0.05	0.07
(1,528)	1:A:105:ASP:H	1:A:112:LEU:HD23	3	0.05	0.07
(1,526)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:98:HIS:H	3	0.11	0.15
(1,526)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:98:HIS:H	3	0.11	0.15
(1,526)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:98:HIS:H	3	0.11	0.15
(1,525)	1:A:98:HIS:H	1:A:99:LEU:HD21	3	0.11	0.17
(1,525)	1:A:98:HIS:H	1:A:99:LEU:HD22	3	0.11	0.17
(1,525)	1:A:98:HIS:H	1:A:99:LEU:HD23	3	0.11	0.17
(1,520)	1:A:90:VAL:H	1:A:90:VAL:HG11	3	0.04	0.07
(1,520)	1:A:90:VAL:H	1:A:90:VAL:HG12	3	0.04	0.07
(1,520)	1:A:90:VAL:H	1:A:90:VAL:HG13	3	0.04	0.07
(1,511)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:122:ARG:H	3	0.03	0.05
(1,511)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:122:ARG:H	3	0.03	0.05
(1,511)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:122:ARG:H	3	0.03	0.05
(1,463)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:16:GLN:H	3	0.04	0.07
(1,463)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:16:GLN:H	3	0.04	0.07
(1,463)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:16:GLN:H	3	0.04	0.07
(1,42)	1:A:15:MET:H	1:A:19:VAL:HG21	3	0.07	0.11
(1,42)	1:A:15:MET:H	1:A:19:VAL:HG22	3	0.07	0.11
(1,42)	1:A:15:MET:H	1:A:19:VAL:HG23	3	0.07	0.11
(1,412)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:138:LEU:HD21	3	0.02	0.02
(1,412)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:138:LEU:HD22	3	0.02	0.02
(1,412)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:138:LEU:HD23	3	0.02	0.02
(1,412)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:138:LEU:HD21	3	0.02	0.02
(1,412)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:138:LEU:HD22	3	0.02	0.02
(1,412)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:138:LEU:HD23	3	0.02	0.02
(1,412)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:138:LEU:HD21	3	0.02	0.02
(1,412)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:138:LEU:HD22	3	0.02	0.02
(1,412)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:138:LEU:HD23	3	0.02	0.02
(1,399)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:129:LEU:HD21	3	0.09	0.13
(1,399)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:129:LEU:HD22	3	0.09	0.13
(1,399)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:129:LEU:HD23	3	0.09	0.13



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,399)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:129:LEU:HD21	3	0.09	0.13
(1,399)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:129:LEU:HD22	3	0.09	0.13
(1,399)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:129:LEU:HD23	3	0.09	0.13
(1,399)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:129:LEU:HD21	3	0.09	0.13
(1,399)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:129:LEU:HD22	3	0.09	0.13
(1,399)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:129:LEU:HD23	3	0.09	0.13
(1,381)	1:A:140:LEU:H	1:A:142:ASN:H	3	0.04	0.08
(1,38)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:13:ASN:HD22	3	0.05	0.1
(1,38)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:13:ASN:HD22	3	0.05	0.1
(1,38)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:13:ASN:HD22	3	0.05	0.1
(1,370)	1:A:129:LEU:H	1:A:130:LYS:H	3	0.04	0.05
(1,336)	1:A:90:VAL:H	1:A:101:HIS:H	3	0.09	0.12
(1,334)	1:A:89:GLU:H	1:A:90:VAL:H	3	0.02	0.02
(1,318)	1:A:44:ASP:H	1:A:48:GLY:H	3	0.06	0.08
(1,309)	1:A:33:TYR:H	1:A:36:HIS:H	3	0.17	0.3
(1,29)	1:A:78:LYS:H	1:A:90:VAL:HG21	3	0.03	0.04
(1,29)	1:A:78:LYS:H	1:A:90:VAL:HG22	3	0.03	0.04
(1,29)	1:A:78:LYS:H	1:A:90:VAL:HG23	3	0.03	0.04
(1,250)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:25:THR:H	3	0.07	0.16
(1,250)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:25:THR:H	3	0.07	0.16
(1,250)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:25:THR:H	3	0.07	0.16
(1,236)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:140:LEU:HD11	3	0.02	0.03
(1,236)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:140:LEU:HD12	3	0.02	0.03
(1,236)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:140:LEU:HD13	3	0.02	0.03
(1,236)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:140:LEU:HD11	3	0.02	0.03
(1,236)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:140:LEU:HD12	3	0.02	0.03
(1,236)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:140:LEU:HD13	3	0.02	0.03
(1,236)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:140:LEU:HD11	3	0.02	0.03
(1,236)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:140:LEU:HD12	3	0.02	0.03
(1,236)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:140:LEU:HD13	3	0.02	0.03
(1,222)	1:A:71:ILE:HD11	1:A:140:LEU:HD21	3	0.17	0.24
(1,222)	1:A:71:ILE:HD11	1:A:140:LEU:HD22	3	0.17	0.24
(1,222)	1:A:71:ILE:HD11	1:A:140:LEU:HD23	3	0.17	0.24
(1,222)	1:A:71:ILE:HD12	1:A:140:LEU:HD21	3	0.17	0.24
(1,222)	1:A:71:ILE:HD12	1:A:140:LEU:HD22	3	0.17	0.24
(1,222)	1:A:71:ILE:HD12	1:A:140:LEU:HD23	3	0.17	0.24
(1,222)	1:A:71:ILE:HD13	1:A:140:LEU:HD21	3	0.17	0.24
(1,222)	1:A:71:ILE:HD13	1:A:140:LEU:HD22	3	0.17	0.24
(1,222)	1:A:71:ILE:HD13	1:A:140:LEU:HD23	3	0.17	0.24
(1,221)	1:A:71:ILE:HD11	1:A:140:LEU:HD11	3	0.03	0.04
(1,221)	1:A:71:ILE:HD11	1:A:140:LEU:HD12	3	0.03	0.04
(1,221)	1:A:71:ILE:HD11	1:A:140:LEU:HD13	3	0.03	0.04



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,221)	1:A:71:ILE:HD12	1:A:140:LEU:HD11	3	0.03	0.04
(1,221)	1:A:71:ILE:HD12	1:A:140:LEU:HD12	3	0.03	0.04
(1,221)	1:A:71:ILE:HD12	1:A:140:LEU:HD13	3	0.03	0.04
(1,221)	1:A:71:ILE:HD13	1:A:140:LEU:HD11	3	0.03	0.04
(1,221)	1:A:71:ILE:HD13	1:A:140:LEU:HD12	3	0.03	0.04
(1,221)	1:A:71:ILE:HD13	1:A:140:LEU:HD13	3	0.03	0.04
(1,213)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:43:VAL:HG11	3	0.02	0.03
(1,213)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:43:VAL:HG12	3	0.02	0.03
(1,213)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:43:VAL:HG13	3	0.02	0.03
(1,213)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:43:VAL:HG11	3	0.02	0.03
(1,213)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:43:VAL:HG12	3	0.02	0.03
(1,213)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:43:VAL:HG13	3	0.02	0.03
(1,213)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:43:VAL:HG11	3	0.02	0.03
(1,213)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:43:VAL:HG12	3	0.02	0.03
(1,213)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:43:VAL:HG13	3	0.02	0.03
(1,189)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:124:VAL:HG21	3	0.07	0.09
(1,189)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:124:VAL:HG22	3	0.07	0.09
(1,189)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:124:VAL:HG23	3	0.07	0.09
(1,189)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:HG21	3	0.07	0.09
(1,189)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:HG22	3	0.07	0.09
(1,189)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:HG23	3	0.07	0.09
(1,189)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:HG21	3	0.07	0.09
(1,189)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:HG22	3	0.07	0.09
(1,189)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:HG23	3	0.07	0.09
(1,164)	1:A:76:GLU:H	1:A:77:GLU:H	3	0.03	0.05
(1,133)	1:A:7:GLU:H	1:A:9:ILE:H	3	0.07	0.1
(1,1279)	1:A:71:ILE:HD11	1:A:140:LEU:HD11	3	0.03	0.04
(1,1279)	1:A:71:ILE:HD11	1:A:140:LEU:HD12	3	0.03	0.04
(1,1279)	1:A:71:ILE:HD11	1:A:140:LEU:HD13	3	0.03	0.04
(1,1279)	1:A:71:ILE:HD12	1:A:140:LEU:HD11	3	0.03	0.04
(1,1279)	1:A:71:ILE:HD12	1:A:140:LEU:HD12	3	0.03	0.04
(1,1279)	1:A:71:ILE:HD12	1:A:140:LEU:HD13	3	0.03	0.04
(1,1279)	1:A:71:ILE:HD13	1:A:140:LEU:HD11	3	0.03	0.04
(1,1279)	1:A:71:ILE:HD13	1:A:140:LEU:HD12	3	0.03	0.04
(1,1279)	1:A:71:ILE:HD13	1:A:140:LEU:HD13	3	0.03	0.04
(1,1268)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:71:ILE:HD11	3	0.06	0.11
(1,1268)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:71:ILE:HD12	3	0.06	0.11
(1,1268)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:71:ILE:HD13	3	0.06	0.11
(1,1268)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:71:ILE:HD11	3	0.06	0.11
(1,1268)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:71:ILE:HD12	3	0.06	0.11
(1,1268)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:71:ILE:HD13	3	0.06	0.11
(1,1268)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:71:ILE:HD11	3	0.06	0.11



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,1268)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:71:ILE:HD12	3	0.06	0.11
(1,1268)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:71:ILE:HD13	3	0.06	0.11
(1,1266)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:51:LEU:H	3	0.05	0.07
(1,1266)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:51:LEU:H	3	0.05	0.07
(1,1266)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:51:LEU:H	3	0.05	0.07
(1,124)	1:A:5:LYS:H	1:A:7:GLU:H	3	0.07	0.13
(1,1225)	1:A:112:LEU:HD21	1:A:113:ARG:H	3	0.11	0.19
(1,1225)	1:A:112:LEU:HD22	1:A:113:ARG:H	3	0.11	0.19
(1,1225)	1:A:112:LEU:HD23	1:A:113:ARG:H	3	0.11	0.19
(1,1215)	1:A:140:LEU:H	1:A:140:LEU:HD21	3	0.04	0.06
(1,1215)	1:A:140:LEU:H	1:A:140:LEU:HD22	3	0.04	0.06
(1,1215)	1:A:140:LEU:H	1:A:140:LEU:HD23	3	0.04	0.06
(1,1204)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:132:GLU:H	3	0.06	0.12
(1,1204)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:132:GLU:H	3	0.06	0.12
(1,1204)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:132:GLU:H	3	0.06	0.12
(1,1202)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:131:GLU:H	3	0.07	0.11
(1,1202)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:131:GLU:H	3	0.07	0.11
(1,1202)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:131:GLU:H	3	0.07	0.11
(1,1200)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD11	3	0.1	0.12
(1,1200)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD12	3	0.1	0.12
(1,1200)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD13	3	0.1	0.12
(1,1180)	1:A:101:HIS:H	1:A:116:ILE:HD11	3	0.05	0.07
(1,1180)	1:A:101:HIS:H	1:A:116:ILE:HD12	3	0.05	0.07
(1,1180)	1:A:101:HIS:H	1:A:116:ILE:HD13	3	0.05	0.07
(1,1173)	1:A:105:ASP:H	1:A:112:LEU:HD21	3	0.05	0.07
(1,1173)	1:A:105:ASP:H	1:A:112:LEU:HD22	3	0.05	0.07
(1,1173)	1:A:105:ASP:H	1:A:112:LEU:HD23	3	0.05	0.07
(1,1171)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:98:HIS:H	3	0.11	0.15
(1,1171)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:98:HIS:H	3	0.11	0.15
(1,1171)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:98:HIS:H	3	0.11	0.15
(1,1170)	1:A:98:HIS:H	1:A:99:LEU:HD21	3	0.11	0.17
(1,1170)	1:A:98:HIS:H	1:A:99:LEU:HD22	3	0.11	0.17
(1,1170)	1:A:98:HIS:H	1:A:99:LEU:HD23	3	0.11	0.17
(1,1165)	1:A:90:VAL:H	1:A:90:VAL:HG11	3	0.04	0.07
(1,1165)	1:A:90:VAL:H	1:A:90:VAL:HG12	3	0.04	0.07
(1,1165)	1:A:90:VAL:H	1:A:90:VAL:HG13	3	0.04	0.07
(1,1156)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:122:ARG:H	3	0.03	0.05
(1,1156)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:122:ARG:H	3	0.03	0.05
(1,1156)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:122:ARG:H	3	0.03	0.05
(1,1108)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:16:GLN:H	3	0.04	0.07
(1,1108)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:16:GLN:H	3	0.04	0.07
(1,1108)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:16:GLN:H	3	Continued on	0.07



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,1057)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:138:LEU:HD21	3	0.02	0.02
(1,1057)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:138:LEU:HD22	3	0.02	0.02
(1,1057)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:138:LEU:HD23	3	0.02	0.02
(1,1057)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:138:LEU:HD21	3	0.02	0.02
(1,1057)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:138:LEU:HD22	3	0.02	0.02
(1,1057)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:138:LEU:HD23	3	0.02	0.02
(1,1057)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:138:LEU:HD21	3	0.02	0.02
(1,1057)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:138:LEU:HD22	3	0.02	0.02
(1,1057)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:138:LEU:HD23	3	0.02	0.02
(1,1044)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:129:LEU:HD21	3	0.09	0.13
(1,1044)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:129:LEU:HD22	3	0.09	0.13
(1,1044)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:129:LEU:HD23	3	0.09	0.13
(1,1044)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:129:LEU:HD21	3	0.09	0.13
(1,1044)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:129:LEU:HD22	3	0.09	0.13
(1,1044)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:129:LEU:HD23	3	0.09	0.13
(1,1044)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:129:LEU:HD21	3	0.09	0.13
(1,1044)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:129:LEU:HD22	3	0.09	0.13
(1,1044)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:129:LEU:HD23	3	0.09	0.13
(1,1026)	1:A:140:LEU:H	1:A:142:ASN:H	3	0.04	0.08
(1,1015)	1:A:129:LEU:H	1:A:130:LYS:H	3	0.04	0.05
(1,973)	1:A:78:LYS:H	1:A:79:LEU:H	2	0.05	0.08
(1,920)	1:A:92:SER:H	1:A:99:LEU:H	2	0.17	0.24
(1,915)	1:A:42:TYR:H	1:A:54:SER:H	2	0.14	0.23
(1,906)	1:A:99:LEU:HD21	1:A:116:ILE:HD11	2	0.04	0.05
(1,906)	1:A:99:LEU:HD21	1:A:116:ILE:HD12	2	0.04	0.05
(1,906)	1:A:99:LEU:HD21	1:A:116:ILE:HD13	2	0.04	0.05
(1,906)	1:A:99:LEU:HD22	1:A:116:ILE:HD11	2	0.04	0.05
(1,906)	1:A:99:LEU:HD22	1:A:116:ILE:HD12	2	0.04	0.05
(1,906)	1:A:99:LEU:HD22	1:A:116:ILE:HD13	2	0.04	0.05
(1,906)	1:A:99:LEU:HD23	1:A:116:ILE:HD11	2	0.04	0.05
(1,906)	1:A:99:LEU:HD23	1:A:116:ILE:HD12	2	0.04	0.05
(1,906)	1:A:99:LEU:HD23	1:A:116:ILE:HD13	2	0.04	0.05
(1,903)	1:A:51:LEU:HD11	1:A:116:ILE:HD11	2	0.03	0.03
(1,903)	1:A:51:LEU:HD11	1:A:116:ILE:HD12	2	0.03	0.03
(1,903)	1:A:51:LEU:HD11	1:A:116:ILE:HD13	2	0.03	0.03
(1,903)	1:A:51:LEU:HD12	1:A:116:ILE:HD11	2	0.03	0.03
(1,903)	1:A:51:LEU:HD12	1:A:116:ILE:HD12	2	0.03	0.03
(1,903)	1:A:51:LEU:HD12	1:A:116:ILE:HD13	2	0.03	0.03
(1,903)	1:A:51:LEU:HD13	1:A:116:ILE:HD11	2	0.03	0.03
(1,903)	1:A:51:LEU:HD13	1:A:116:ILE:HD12	2	0.03	0.03
(1,903)	1:A:51:LEU:HD13	1:A:116:ILE:HD13	2	0.03	0.03
(1,902)	1:A:51:LEU:HD11	1:A:75:VAL:HG21	2	0.05	0.07



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,902)	1:A:51:LEU:HD11	1:A:75:VAL:HG22	2	0.05	0.07
(1,902)	1:A:51:LEU:HD11	1:A:75:VAL:HG23	2	0.05	0.07
(1,902)	1:A:51:LEU:HD12	1:A:75:VAL:HG21	2	0.05	0.07
(1,902)	1:A:51:LEU:HD12	1:A:75:VAL:HG22	2	0.05	0.07
(1,902)	1:A:51:LEU:HD12	1:A:75:VAL:HG23	2	0.05	0.07
(1,902)	1:A:51:LEU:HD13	1:A:75:VAL:HG21	2	0.05	0.07
(1,902)	1:A:51:LEU:HD13	1:A:75:VAL:HG22	2	0.05	0.07
(1,902)	1:A:51:LEU:HD13	1:A:75:VAL:HG23	2	0.05	0.07
(1,897)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:99:LEU:HD11	2	0.05	0.06
(1,897)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:99:LEU:HD12	2	0.05	0.06
(1,897)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:99:LEU:HD13	2	0.05	0.06
(1,897)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:99:LEU:HD11	2	0.05	0.06
(1,897)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:99:LEU:HD12	2	0.05	0.06
(1,897)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:99:LEU:HD13	2	0.05	0.06
(1,897)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:99:LEU:HD11	2	0.05	0.06
(1,897)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:99:LEU:HD12	2	0.05	0.06
(1,897)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:99:LEU:HD13	2	0.05	0.06
(1,885)	1:A:75:VAL:H	1:A:99:LEU:HD11	2	0.11	0.2
(1,885)	1:A:75:VAL:H	1:A:99:LEU:HD12	2	0.11	0.2
(1,885)	1:A:75:VAL:H	1:A:99:LEU:HD13	2	0.11	0.2
(1,882)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:129:LEU:HD11	2	0.14	0.19
(1,882)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:129:LEU:HD12	2	0.14	0.19
(1,882)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:129:LEU:HD13	2	0.14	0.19
(1,882)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:129:LEU:HD11	2	0.14	0.19
(1,882)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:129:LEU:HD12	2	0.14	0.19
(1,882)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:129:LEU:HD13	2	0.14	0.19
(1,882)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:129:LEU:HD11	2	0.14	0.19
(1,882)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:129:LEU:HD12	2	0.14	0.19
(1,882)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:129:LEU:HD13	2	0.14	0.19
(1,875)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:129:LEU:HD21	2	0.01	0.02
(1,875)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:129:LEU:HD22	2	0.01	0.02
(1,875)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:129:LEU:HD23	2	0.01	0.02
(1,875)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:129:LEU:HD21	2	0.01	0.02
(1,875)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:129:LEU:HD22	2	0.01	0.02
(1,875)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:129:LEU:HD23	2	0.01	0.02
(1,875)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:129:LEU:HD21	2	0.01	0.02
(1,875)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:129:LEU:HD22	2	0.01	0.02
(1,875)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:129:LEU:HD23	2	0.01	0.02
(1,871)	1:A:92:SER:H	1:A:99:LEU:HD21	2	0.15	0.27
(1,871)	1:A:92:SER:H	1:A:99:LEU:HD22	2	0.15	0.27
(1,871)	1:A:92:SER:H	1:A:99:LEU:HD23	2	0.15	0.27
(1,865)	1:A:42:TYR:H	1:A:71:ILE:HD11	2	0.03	0.03



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,865)	1:A:42:TYR:H	1:A:71:ILE:HD12	2	0.03	0.03
(1,865)	1:A:42:TYR:H	1:A:71:ILE:HD13	2	0.03	0.03
(1,855)	1:A:41:LEU:H	1:A:41:LEU:HD21	2	0.05	0.09
(1,855)	1:A:41:LEU:H	1:A:41:LEU:HD22	2	0.05	0.09
(1,855)	1:A:41:LEU:H	1:A:41:LEU:HD23	2	0.05	0.09
(1,851)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:124:VAL:HG11	2	0.03	0.04
(1,851)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:124:VAL:HG12	2	0.03	0.04
(1,851)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:124:VAL:HG13	2	0.03	0.04
(1,851)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:HG11	2	0.03	0.04
(1,851)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:HG12	2	0.03	0.04
(1,851)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:HG13	2	0.03	0.04
(1,851)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:HG11	2	0.03	0.04
(1,851)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:HG12	2	0.03	0.04
(1,851)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:HG13	2	0.03	0.04
(1,840)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:124:VAL:HG21	2	0.05	0.06
(1,840)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:124:VAL:HG22	2	0.05	0.06
(1,840)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:124:VAL:HG23	2	0.05	0.06
(1,840)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:124:VAL:HG21	2	0.05	0.06
(1,840)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:124:VAL:HG22	2	0.05	0.06
(1,840)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:124:VAL:HG23	2	0.05	0.06
(1,840)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:124:VAL:HG21	2	0.05	0.06
(1,840)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:124:VAL:HG22	2	0.05	0.06
(1,840)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:124:VAL:HG23	2	0.05	0.06
(1,835)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:26:GLU:H	2	0.06	0.11
(1,835)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:26:GLU:H	2	0.06	0.11
(1,835)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:26:GLU:H	2	0.06	0.11
(1,822)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:43:VAL:HG21	2	0.02	0.03
(1,822)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:43:VAL:HG22	2	0.02	0.03
(1,822)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:43:VAL:HG23	2	0.02	0.03
(1,822)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:43:VAL:HG21	2	0.02	0.03
(1,822)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:43:VAL:HG22	2	0.02	0.03
(1,822)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:43:VAL:HG23	2	0.02	0.03
(1,822)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:43:VAL:HG21	2	0.02	0.03
(1,822)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:43:VAL:HG22	2	0.02	0.03
(1,822)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:43:VAL:HG23	2	0.02	0.03
(1,811)	1:A:40:GLY:H	1:A:54:SER:H	2	0.04	0.05
(1,75)	1:A:29:PHE:H	1:A:30:GLN:H	2	0.08	0.09
(1,74)	1:A:30:GLN:H	1:A:31:ASN:H	2	0.19	0.27
(1,720)	1:A:29:PHE:H	1:A:30:GLN:H	2	0.08	0.09
(1,719)	1:A:30:GLN:H	1:A:31:ASN:H	2	0.19	0.27
(1,712)	1:A:117:ASN:H	1:A:117:ASN:HD22	2	0.08	0.13
(1,700)	1:A:110:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD11	2	0.05	0.07



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,700)	1:A:110:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD12	2	0.05	0.07
(1,700)	1:A:110:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD13	2	0.05	0.07
(1,697)	1:A:16:GLN:HE21	1:A:46:VAL:HG11	2	0.07	0.11
(1,697)	1:A:16:GLN:HE21	1:A:46:VAL:HG12	2	0.07	0.11
(1,697)	1:A:16:GLN:HE21	1:A:46:VAL:HG13	2	0.07	0.11
(1,67)	1:A:117:ASN:H	1:A:117:ASN:HD22	2	0.08	0.13
(1,605)	1:A:54:SER:H	1:A:40:GLY:H	2	0.16	0.18
(1,599)	1:A:117:ASN:H	1:A:117:ASN:HD21	2	0.03	0.05
(1,598)	1:A:110:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD11	2	0.29	0.57
(1,598)	1:A:110:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD12	2	0.29	0.57
(1,598)	1:A:110:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD13	2	0.29	0.57
(1,594)	1:A:22:ASN:HD21	1:A:24:GLY:H	2	0.42	0.44
(1,575)	1:A:144:LEU:HD21	1:A:145:GLU:H	2	0.06	0.06
(1,575)	1:A:144:LEU:HD22	1:A:145:GLU:H	2	0.06	0.06
(1,575)	1:A:144:LEU:HD23	1:A:145:GLU:H	2	0.06	0.06
(1,568)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:140:LEU:H	2	0.31	0.33
(1,568)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:140:LEU:H	2	0.31	0.33
(1,568)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:140:LEU:H	2	0.31	0.33
(1,553)	1:A:124:VAL:H	1:A:124:VAL:HG11	2	0.02	0.02
(1,553)	1:A:124:VAL:H	1:A:124:VAL:HG12	2	0.02	0.02
(1,553)	1:A:124:VAL:H	1:A:124:VAL:HG13	2	0.02	0.02
(1,55)	1:A:110:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD11	2	0.05	0.07
(1,55)	1:A:110:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD12	2	0.05	0.07
(1,55)	1:A:110:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD13	2	0.05	0.07
(1,546)	1:A:121:LEU:H	1:A:121:LEU:HD21	2	0.15	0.19
(1,546)	1:A:121:LEU:H	1:A:121:LEU:HD22	2	0.15	0.19
(1,546)	1:A:121:LEU:H	1:A:121:LEU:HD23	2	0.15	0.19
(1,529)	1:A:99:LEU:H	1:A:116:ILE:HD11	2	0.1	0.13
(1,529)	1:A:99:LEU:H	1:A:116:ILE:HD12	2	0.1	0.13
(1,529)	1:A:99:LEU:H	1:A:116:ILE:HD13	2	0.1	0.13
(1,52)	1:A:16:GLN:HE21	1:A:46:VAL:HG11	2	0.07	0.11
(1,52)	1:A:16:GLN:HE21	1:A:46:VAL:HG12	2	0.07	0.11
(1,52)	1:A:16:GLN:HE21	1:A:46:VAL:HG13	2	0.07	0.11
(1,516)	1:A:89:GLU:H	1:A:90:VAL:HG11	2	0.04	0.06
(1,516)	1:A:89:GLU:H	1:A:90:VAL:HG12	2	0.04	0.06
(1,516)	1:A:89:GLU:H	1:A:90:VAL:HG13	2	0.04	0.06
(1,494)	1:A:52:PHE:H	1:A:71:ILE:HD11	2	0.03	0.04
(1,494)	1:A:52:PHE:H	1:A:71:ILE:HD12	2	0.03	0.04
(1,494)	1:A:52:PHE:H	1:A:71:ILE:HD13	2	0.03	0.04
(1,490)	1:A:51:LEU:HD11	1:A:52:PHE:H	2	0.1	0.11
(1,490)	1:A:51:LEU:HD12	1:A:52:PHE:H	2	0.1	0.11
(1,490)	1:A:51:LEU:HD13	1:A:52:PHE:H	2	0.1	0.11



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,475)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:44:ASP:H	2	0.06	0.08
(1,475)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:44:ASP:H	2	0.06	0.08
(1,475)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:44:ASP:H	2	0.06	0.08
(1,446)	1:A:45:ILE:H	1:A:121:LEU:HD21	2	0.04	0.04
(1,446)	1:A:45:ILE:H	1:A:121:LEU:HD22	2	0.04	0.04
(1,446)	1:A:45:ILE:H	1:A:121:LEU:HD23	2	0.04	0.04
(1,441)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:124:VAL:H	2	0.04	0.06
(1,441)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:124:VAL:H	2	0.04	0.06
(1,441)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:124:VAL:H	2	0.04	0.06
(1,428)	1:A:79:LEU:HD21	1:A:80:ASP:H	2	0.03	0.03
(1,428)	1:A:79:LEU:HD22	1:A:80:ASP:H	2	0.03	0.03
(1,428)	1:A:79:LEU:HD23	1:A:80:ASP:H	2	0.03	0.03
(1,424)	1:A:90:VAL:HG21	1:A:115:CYS:H	2	0.04	0.05
(1,424)	1:A:90:VAL:HG22	1:A:115:CYS:H	2	0.04	0.05
(1,424)	1:A:90:VAL:HG23	1:A:115:CYS:H	2	0.04	0.05
(1,413)	1:A:51:LEU:HD11	1:A:121:LEU:HD11	2	0.03	0.06
(1,413)	1:A:51:LEU:HD11	1:A:121:LEU:HD12	2	0.03	0.06
(1,413)	1:A:51:LEU:HD11	1:A:121:LEU:HD13	2	0.03	0.06
(1,413)	1:A:51:LEU:HD12	1:A:121:LEU:HD11	2	0.03	0.06
(1,413)	1:A:51:LEU:HD12	1:A:121:LEU:HD12	2	0.03	0.06
(1,413)	1:A:51:LEU:HD12	1:A:121:LEU:HD13	2	0.03	0.06
(1,413)	1:A:51:LEU:HD13	1:A:121:LEU:HD11	2	0.03	0.06
(1,413)	1:A:51:LEU:HD13	1:A:121:LEU:HD12	2	0.03	0.06
(1,413)	1:A:51:LEU:HD13	1:A:121:LEU:HD13	2	0.03	0.06
(1,360)	1:A:43:VAL:H	1:A:122:ARG:H	2	0.06	0.08
(1,328)	1:A:78:LYS:H	1:A:79:LEU:H	2	0.05	0.08
(1,275)	1:A:92:SER:H	1:A:99:LEU:H	2	0.17	0.24
(1,270)	1:A:42:TYR:H	1:A:54:SER:H	2	0.14	0.23
(1,261)	1:A:99:LEU:HD21	1:A:116:ILE:HD11	2	0.04	0.05
(1,261)	1:A:99:LEU:HD21	1:A:116:ILE:HD12	2	0.04	0.05
(1,261)	1:A:99:LEU:HD21	1:A:116:ILE:HD13	2	0.04	0.05
(1,261)	1:A:99:LEU:HD22	1:A:116:ILE:HD11	2	0.04	0.05
(1,261)	1:A:99:LEU:HD22	1:A:116:ILE:HD12	2	0.04	0.05
(1,261)	1:A:99:LEU:HD22	1:A:116:ILE:HD13	2	0.04	0.05
(1,261)	1:A:99:LEU:HD23	1:A:116:ILE:HD11	2	0.04	0.05
(1,261)	1:A:99:LEU:HD23	1:A:116:ILE:HD12	2	0.04	0.05
(1,261)	1:A:99:LEU:HD23	1:A:116:ILE:HD13	2	0.04	0.05
(1,258)	1:A:51:LEU:HD11	1:A:116:ILE:HD11	2	0.03	0.03
(1,258)	1:A:51:LEU:HD11	1:A:116:ILE:HD12	2	0.03	0.03
(1,258)	1:A:51:LEU:HD11	1:A:116:ILE:HD13	2	0.03	0.03
(1,258)	1:A:51:LEU:HD12	1:A:116:ILE:HD11	2	0.03	0.03
(1,258)	1:A:51:LEU:HD12	1:A:116:ILE:HD12	2	0.03	0.03



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,258)	1:A:51:LEU:HD12	1:A:116:ILE:HD13	2	0.03	0.03
(1,258)	1:A:51:LEU:HD13	1:A:116:ILE:HD11	2	0.03	0.03
(1,258)	1:A:51:LEU:HD13	1:A:116:ILE:HD12	2	0.03	0.03
(1,258)	1:A:51:LEU:HD13	1:A:116:ILE:HD13	2	0.03	0.03
(1,257)	1:A:51:LEU:HD11	1:A:75:VAL:HG21	2	0.05	0.07
(1,257)	1:A:51:LEU:HD11	1:A:75:VAL:HG22	2	0.05	0.07
(1,257)	1:A:51:LEU:HD11	1:A:75:VAL:HG23	2	0.05	0.07
(1,257)	1:A:51:LEU:HD12	1:A:75:VAL:HG21	2	0.05	0.07
(1,257)	1:A:51:LEU:HD12	1:A:75:VAL:HG22	2	0.05	0.07
(1,257)	1:A:51:LEU:HD12	1:A:75:VAL:HG23	2	0.05	0.07
(1,257)	1:A:51:LEU:HD13	1:A:75:VAL:HG21	2	0.05	0.07
(1,257)	1:A:51:LEU:HD13	1:A:75:VAL:HG22	2	0.05	0.07
(1,257)	1:A:51:LEU:HD13	1:A:75:VAL:HG23	2	0.05	0.07
(1,252)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:99:LEU:HD11	2	0.05	0.06
(1,252)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:99:LEU:HD12	2	0.05	0.06
(1,252)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:99:LEU:HD13	2	0.05	0.06
(1,252)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:99:LEU:HD11	2	0.05	0.06
(1,252)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:99:LEU:HD12	2	0.05	0.06
(1,252)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:99:LEU:HD13	2	0.05	0.06
(1,252)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:99:LEU:HD11	2	0.05	0.06
(1,252)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:99:LEU:HD12	2	0.05	0.06
(1,252)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:99:LEU:HD13	2	0.05	0.06
(1,240)	1:A:75:VAL:H	1:A:99:LEU:HD11	2	0.11	0.2
(1,240)	1:A:75:VAL:H	1:A:99:LEU:HD12	2	0.11	0.2
(1,240)	1:A:75:VAL:H	1:A:99:LEU:HD13	2	0.11	0.2
(1,237)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:129:LEU:HD11	2	0.14	0.19
(1,237)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:129:LEU:HD12	2	0.14	0.19
(1,237)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:129:LEU:HD13	2	0.14	0.19
(1,237)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:129:LEU:HD11	2	0.14	0.19
(1,237)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:129:LEU:HD12	2	0.14	0.19
(1,237)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:129:LEU:HD13	2	0.14	0.19
(1,237)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:129:LEU:HD11	2	0.14	0.19
(1,237)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:129:LEU:HD12	2	0.14	0.19
(1,237)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:129:LEU:HD13	2	0.14	0.19
(1,230)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:129:LEU:HD21	2	0.01	0.02
(1,230)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:129:LEU:HD22	2	0.01	0.02
(1,230)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:129:LEU:HD23	2	0.01	0.02
(1,230)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:129:LEU:HD21	2	0.01	0.02
(1,230)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:129:LEU:HD22	2	0.01	0.02
(1,230)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:129:LEU:HD23	2	0.01	0.02
(1,230)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:129:LEU:HD21	2	0.01	0.02
(1,230)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:129:LEU:HD22	2	0.01	0.02



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,230)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:129:LEU:HD23	2	0.01	0.02
(1,226)	1:A:92:SER:H	1:A:99:LEU:HD21	2	0.15	0.27
(1,226)	1:A:92:SER:H	1:A:99:LEU:HD22	2	0.15	0.27
(1,226)	1:A:92:SER:H	1:A:99:LEU:HD23	2	0.15	0.27
(1,220)	1:A:42:TYR:H	1:A:71:ILE:HD11	2	0.03	0.03
(1,220)	1:A:42:TYR:H	1:A:71:ILE:HD12	2	0.03	0.03
(1,220)	1:A:42:TYR:H	1:A:71:ILE:HD13	2	0.03	0.03
(1,210)	1:A:41:LEU:H	1:A:41:LEU:HD21	2	0.05	0.09
(1,210)	1:A:41:LEU:H	1:A:41:LEU:HD22	2	0.05	0.09
(1,210)	1:A:41:LEU:H	1:A:41:LEU:HD23	2	0.05	0.09
(1,206)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:124:VAL:HG11	2	0.03	0.04
(1,206)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:124:VAL:HG12	2	0.03	0.04
(1,206)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:124:VAL:HG13	2	0.03	0.04
(1,206)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:HG11	2	0.03	0.04
(1,206)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:HG12	2	0.03	0.04
(1,206)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:HG13	2	0.03	0.04
(1,206)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:HG11	2	0.03	0.04
(1,206)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:HG12	2	0.03	0.04
(1,206)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:HG13	2	0.03	0.04
(1,195)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:124:VAL:HG21	2	0.05	0.06
(1,195)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:124:VAL:HG22	2	0.05	0.06
(1,195)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:124:VAL:HG23	2	0.05	0.06
(1,195)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:124:VAL:HG21	2	0.05	0.06
(1,195)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:124:VAL:HG22	2	0.05	0.06
(1,195)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:124:VAL:HG23	2	0.05	0.06
(1,195)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:124:VAL:HG21	2	0.05	0.06
(1,195)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:124:VAL:HG22	2	0.05	0.06
(1,195)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:124:VAL:HG23	2	0.05	0.06
(1,190)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:26:GLU:H	2	0.06	0.11
(1,190)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:26:GLU:H	2	0.06	0.11
(1,190)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:26:GLU:H	2	0.06	0.11
(1,177)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:43:VAL:HG21	2	0.02	0.03
(1,177)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:43:VAL:HG22	2	0.02	0.03
(1,177)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:43:VAL:HG23	2	0.02	0.03
(1,177)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:43:VAL:HG21	2	0.02	0.03
(1,177)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:43:VAL:HG22	2	0.02	0.03
(1,177)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:43:VAL:HG23	2	0.02	0.03
(1,177)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:43:VAL:HG21	2	0.02	0.03
(1,177)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:43:VAL:HG22	2	0.02	0.03
(1,177)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:43:VAL:HG23	2	0.02	0.03
(1,166)	1:A:40:GLY:H	1:A:54:SER:H	2	0.04	0.05
(1,1250)	1:A:54:SER:H	1:A:40:GLY:H	2	0.16	0.18



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,1244)	1:A:117:ASN:H	1:A:117:ASN:HD21	2	0.03	0.05
(1,1243)	1:A:110:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD11	2	0.29	0.57
(1,1243)	1:A:110:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD12	2	0.29	0.57
(1,1243)	1:A:110:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD13	2	0.29	0.57
(1,1239)	1:A:22:ASN:HD21	1:A:24:GLY:H	2	0.42	0.44
(1,1220)	1:A:144:LEU:HD21	1:A:145:GLU:H	2	0.06	0.06
(1,1220)	1:A:144:LEU:HD22	1:A:145:GLU:H	2	0.06	0.06
(1,1220)	1:A:144:LEU:HD23	1:A:145:GLU:H	2	0.06	0.06
(1,1213)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:140:LEU:H	2	0.31	0.33
(1,1213)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:140:LEU:H	2	0.31	0.33
(1,1213)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:140:LEU:H	2	0.31	0.33
(1,1198)	1:A:124:VAL:H	1:A:124:VAL:HG11	2	0.02	0.02
(1,1198)	1:A:124:VAL:H	1:A:124:VAL:HG12	2	0.02	0.02
(1,1198)	1:A:124:VAL:H	1:A:124:VAL:HG13	2	0.02	0.02
(1,1191)	1:A:121:LEU:H	1:A:121:LEU:HD21	2	0.15	0.19
(1,1191)	1:A:121:LEU:H	1:A:121:LEU:HD22	2	0.15	0.19
(1,1191)	1:A:121:LEU:H	1:A:121:LEU:HD23	2	0.15	0.19
(1,1174)	1:A:99:LEU:H	1:A:116:ILE:HD11	2	0.1	0.13
(1,1174)	1:A:99:LEU:H	1:A:116:ILE:HD12	2	0.1	0.13
(1,1174)	1:A:99:LEU:H	1:A:116:ILE:HD13	2	0.1	0.13
(1,1161)	1:A:89:GLU:H	1:A:90:VAL:HG11	2	0.04	0.06
(1,1161)	1:A:89:GLU:H	1:A:90:VAL:HG12	2	0.04	0.06
(1,1161)	1:A:89:GLU:H	1:A:90:VAL:HG13	2	0.04	0.06
(1,1139)	1:A:52:PHE:H	1:A:71:ILE:HD11	2	0.03	0.04
(1,1139)	1:A:52:PHE:H	1:A:71:ILE:HD12	2	0.03	0.04
(1,1139)	1:A:52:PHE:H	1:A:71:ILE:HD13	2	0.03	0.04
(1,1135)	1:A:51:LEU:HD11	1:A:52:PHE:H	2	0.1	0.11
(1,1135)	1:A:51:LEU:HD12	1:A:52:PHE:H	2	0.1	0.11
(1,1135)	1:A:51:LEU:HD13	1:A:52:PHE:H	2	0.1	0.11
(1,1120)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:44:ASP:H	2	0.06	0.08
(1,1120)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:44:ASP:H	2	0.06	0.08
(1,1120)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:44:ASP:H	2	0.06	0.08
(1,1091)	1:A:45:ILE:H	1:A:121:LEU:HD21	2	0.04	0.04
(1,1091)	1:A:45:ILE:H	1:A:121:LEU:HD22	2	0.04	0.04
(1,1091)	1:A:45:ILE:H	1:A:121:LEU:HD23	2	0.04	0.04
(1,1086)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:124:VAL:H	2	0.04	0.06
(1,1086)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:124:VAL:H	2	0.04	0.06
(1,1086)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:124:VAL:H	2	0.04	0.06
(1,1073)	1:A:79:LEU:HD21	1:A:80:ASP:H	2	0.03	0.03
(1,1073)	1:A:79:LEU:HD22	1:A:80:ASP:H	2	0.03	0.03
(1,1073)	1:A:79:LEU:HD23	1:A:80:ASP:H	2	0.03	0.03
(1,1069)	1:A:90:VAL:HG21	1:A:115:CYS:H	2	0.04	0.05



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,1069)	1:A:90:VAL:HG22	1:A:115:CYS:H	2	0.04	0.05
(1,1069)	1:A:90:VAL:HG23	1:A:115:CYS:H	2	0.04	0.05
(1,1058)	1:A:51:LEU:HD11	1:A:121:LEU:HD11	2	0.03	0.06
(1,1058)	1:A:51:LEU:HD11	1:A:121:LEU:HD12	2	0.03	0.06
(1,1058)	1:A:51:LEU:HD11	1:A:121:LEU:HD13	2	0.03	0.06
(1,1058)	1:A:51:LEU:HD12	1:A:121:LEU:HD11	2	0.03	0.06
(1,1058)	1:A:51:LEU:HD12	1:A:121:LEU:HD12	2	0.03	0.06
(1,1058)	1:A:51:LEU:HD12	1:A:121:LEU:HD13	2	0.03	0.06
(1,1058)	1:A:51:LEU:HD13	1:A:121:LEU:HD11	2	0.03	0.06
(1,1058)	1:A:51:LEU:HD13	1:A:121:LEU:HD12	2	0.03	0.06
(1,1058)	1:A:51:LEU:HD13	1:A:121:LEU:HD13	2	0.03	0.06
(1,1005)	1:A:43:VAL:H	1:A:122:ARG:H	2	0.06	0.08
(1,997)	1:A:104:ASN:H	1:A:113:ARG:H	1	0.02	0.02
(1,995)	1:A:108:GLY:H	1:A:111:GLY:H	1	0.09	0.09
(1,994)	1:A:106:GLY:H	1:A:113:ARG:H	1	0.07	0.07
(1,992)	1:A:103:PHE:H	1:A:114:TYR:H	1	0.13	0.13
(1,980)	1:A:90:VAL:H	1:A:100:GLY:H	1	0.01	0.01
(1,975)	1:A:80:ASP:H	1:A:87:ARG:H	1	0.03	0.03
(1,964)	1:A:45:ILE:H	1:A:48:GLY:H	1	0.02	0.02
(1,962)	1:A:46:VAL:H	1:A:49:LYS:H	1	0.06	0.06
(1,951)	1:A:31:ASN:H	1:A:32:GLU:H	1	0.05	0.05
(1,947)	1:A:17:TYR:H	1:A:20:THR:H	1	0.02	0.02
(1,936)	1:A:8:LYS:H	1:A:11:SER:H	1	0.14	0.14
(1,935)	1:A:10:LYS:H	1:A:13:ASN:H	1	0.13	0.13
(1,922)	1:A:103:PHE:H	1:A:106:GLY:H	1	0.21	0.21
(1,918)	1:A:78:LYS:H	1:A:91:ARG:H	1	0.02	0.02
(1,905)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:99:LEU:HD21	1	0.06	0.06
(1,905)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:99:LEU:HD22	1	0.06	0.06
(1,905)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:99:LEU:HD23	1	0.06	0.06
(1,905)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:99:LEU:HD21	1	0.06	0.06
(1,905)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:99:LEU:HD22	1	0.06	0.06
(1,905)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:99:LEU:HD23	1	0.06	0.06
(1,905)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:99:LEU:HD21	1	0.06	0.06
(1,905)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:99:LEU:HD22	1	0.06	0.06
(1,905)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:99:LEU:HD23	1	0.06	0.06
(1,90)	1:A:63:GLY:H	1:A:64:TRP:H	1	0.04	0.04
(1,899)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:46:VAL:HG11	1	0.08	0.08
(1,899)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:46:VAL:HG12	1	0.08	0.08
(1,899)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:46:VAL:HG13	1	0.08	0.08
(1,899)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:46:VAL:HG11	1	0.08	0.08
(1,899)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:46:VAL:HG12	1	0.08	0.08
(1,899)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:46:VAL:HG13	1	0.08	0.08



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

(1,890)	1:A:9:ILE:HD13 1:A:9:ILE:HD13 1:A:9:ILE:HD13	1:A:46:VAL:HG11 1:A:46:VAL:HG12	1	0.08	0.08
(1,899) (1,890) (1,890)	1:A:9:ILE:HD13		-1		
(1,890) (1,890)			1	0.08	0.08
(1,890)	1 A 104 V/AT TIC(11	1:A:46:VAL:HG13	1	0.08	0.08
( ) /	1:A:124:VAL:HG11	1:A:129:LEU:HD11	1	0.02	0.02
(1.000)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:129:LEU:HD12	1	0.02	0.02
(1,890)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:129:LEU:HD13	1	0.02	0.02
(1,890)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:129:LEU:HD11	1	0.02	0.02
(1,890)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:129:LEU:HD12	1	0.02	0.02
(1,890)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:129:LEU:HD13	1	0.02	0.02
(1,890)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:129:LEU:HD11	1	0.02	0.02
(1,890)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:129:LEU:HD12	1	0.02	0.02
(1,890)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:129:LEU:HD13	1	0.02	0.02
(1,884)	1:A:51:LEU:HD11	1:A:99:LEU:HD21	1	0.01	0.01
(1,884)	1:A:51:LEU:HD11	1:A:99:LEU:HD22	1	0.01	0.01
(1,884)	1:A:51:LEU:HD11	1:A:99:LEU:HD23	1	0.01	0.01
(1,884)	1:A:51:LEU:HD12	1:A:99:LEU:HD21	1	0.01	0.01
(1,884)	1:A:51:LEU:HD12	1:A:99:LEU:HD22	1	0.01	0.01
· /	1:A:51:LEU:HD12	1:A:99:LEU:HD23	1	0.01	0.01
(1,884)	1:A:51:LEU:HD13	1:A:99:LEU:HD21	1	0.01	0.01
(1,884)	1:A:51:LEU:HD13	1:A:99:LEU:HD22	1	0.01	0.01
(1,884)	1:A:51:LEU:HD13	1:A:99:LEU:HD23	1	0.01	0.01
· · /	1:A:12:LEU:HD11	1:A:13:ASN:HD22	1	0.17	0.17
(1,877)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:13:ASN:HD22	1	0.17	0.17
(1,877)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:13:ASN:HD22	1	0.17	0.17
(1,860)	1:A:16:GLN:HE21	1:A:45:ILE:HD11	1	0.03	0.03
(1,860)	1:A:16:GLN:HE21	1:A:45:ILE:HD12	1	0.03	0.03
(1,860)	1:A:16:GLN:HE21	1:A:45:ILE:HD13	1	0.03	0.03
(1,859)	1:A:16:GLN:HE22	1:A:45:ILE:HD11	1	0.04	0.04
(1,859)	1:A:16:GLN:HE22	1:A:45:ILE:HD12	1	0.04	0.04
(1,859)	1:A:16:GLN:HE22	1:A:45:ILE:HD13	1	0.04	0.04
(1,845)	1:A:75:VAL:HG11	1:A:102:VAL:HG21	1	0.12	0.12
(1,845)	1:A:75:VAL:HG11	1:A:102:VAL:HG22	1	0.12	0.12
(1,845)	1:A:75:VAL:HG11	1:A:102:VAL:HG23	1	0.12	0.12
(1,845)	1:A:75:VAL:HG12	1:A:102:VAL:HG21	1	0.12	0.12
(1,845)	1:A:75:VAL:HG12	1:A:102:VAL:HG22	1	0.12	0.12
(1,845)	1:A:75:VAL:HG12	1:A:102:VAL:HG23	1	0.12	0.12
(1,845)	1:A:75:VAL:HG13	1:A:102:VAL:HG21	1	0.12	0.12
(1,845)	1:A:75:VAL:HG13	1:A:102:VAL:HG22	1	0.12	0.12
(1,845)	1:A:75:VAL:HG13	1:A:102:VAL:HG23	1	0.12	0.12
(1,842)	1:A:13:ASN:HD21	1:A:46:VAL:HG11	1	0.08	0.08
(1,842)	1:A:13:ASN:HD21	1:A:46:VAL:HG12	1	0.08	0.08
(1,842)	1:A:13:ASN:HD21	1:A:46:VAL:HG13	1	0.08	0.08



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

(1,838)         1:A:19:VAL:HG11         1:A:117:ASN:HD22           (1,838)         1:A:19:VAL:HG12         1:A:117:ASN:HD22           (1,838)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:HD21           (1,836)         1:A:19:VAL:HG11         1:A:117:ASN:HD21           (1,836)         1:A:19:VAL:HG12         1:A:117:ASN:HD21           (1,836)         1:A:49:VAL:HG13         1:A:117:ASN:HD21           (1,832)         1:A:42:TYR:H         1:A:124:VAL:HG21           (1,832)         1:A:42:TYR:H         1:A:124:VAL:HG22           (1,832)         1:A:42:TYR:H         1:A:124:VAL:HG23           (1,831)         1:A:43:VAL:H         1:A:124:VAL:HG23           (1,831)         1:A:43:VAL:H         1:A:124:VAL:HG22           (1,831)         1:A:43:VAL:H         1:A:124:VAL:HG22           (1,831)         1:A:43:VAL:H         1:A:102:VAL:HG23           (1,828)         1:A:90:VAL:HG21         1:A:102:VAL:HG23           (1,828)         1:A:90:VAL:HG21         1:A:102:VAL:HG23           (1,828)         1:A:90:VAL:HG22         1:A:102:VAL:HG23           (1,828)         1:A:90:VAL:HG23         1:A:102:VAL:HG23           (1,828)         1:A:90:VAL:HG23         1:A:102:VAL:HG22	1 1 1 1 1 1 1 1 1	0.05 0.05 0.05 0.17 0.17 0.17 0.04 0.04	0.05 0.05 0.05 0.17 0.17 0.17 0.04 0.04
(1,838)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:HD22           (1,836)         1:A:19:VAL:HG11         1:A:117:ASN:HD21           (1,836)         1:A:19:VAL:HG12         1:A:117:ASN:HD21           (1,836)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:HD21           (1,832)         1:A:42:TYR:H         1:A:124:VAL:HG21           (1,832)         1:A:42:TYR:H         1:A:124:VAL:HG22           (1,832)         1:A:42:TYR:H         1:A:124:VAL:HG23           (1,831)         1:A:43:VAL:H         1:A:124:VAL:HG21           (1,831)         1:A:43:VAL:H         1:A:124:VAL:HG22           (1,831)         1:A:43:VAL:H         1:A:124:VAL:HG22           (1,831)         1:A:43:VAL:H         1:A:124:VAL:HG23           (1,828)         1:A:90:VAL:HG21         1:A:102:VAL:HG23           (1,828)         1:A:90:VAL:HG21         1:A:102:VAL:HG23           (1,828)         1:A:90:VAL:HG22         1:A:102:VAL:HG22           (1,828)         1:A:90:VAL:HG22         1:A:102:VAL:HG23           (1,828)         1:A:90:VAL:HG23         1:A:102:VAL:HG23           (1,828)         1:A:90:VAL:HG23         1:A:102:VAL:HG21	1 1 1 1 1 1 1 1	0.05 0.17 0.17 0.17 0.04 0.04 0.04	0.05 0.17 0.17 0.17 0.04
(1,836)         1:A:19:VAL:HG11         1:A:117:ASN:HD21           (1,836)         1:A:19:VAL:HG12         1:A:117:ASN:HD21           (1,836)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:HD21           (1,832)         1:A:42:TYR:H         1:A:124:VAL:HG21           (1,832)         1:A:42:TYR:H         1:A:124:VAL:HG22           (1,832)         1:A:43:VAL:H         1:A:124:VAL:HG23           (1,831)         1:A:43:VAL:H         1:A:124:VAL:HG21           (1,831)         1:A:43:VAL:H         1:A:124:VAL:HG22           (1,831)         1:A:43:VAL:H         1:A:124:VAL:HG23           (1,828)         1:A:90:VAL:HG21         1:A:102:VAL:HG23           (1,828)         1:A:90:VAL:HG21         1:A:102:VAL:HG23           (1,828)         1:A:90:VAL:HG22         1:A:102:VAL:HG21           (1,828)         1:A:90:VAL:HG22         1:A:102:VAL:HG23           (1,828)         1:A:90:VAL:HG22         1:A:102:VAL:HG23           (1,828)         1:A:90:VAL:HG22         1:A:102:VAL:HG23           (1,828)         1:A:90:VAL:HG23         1:A:102:VAL:HG21	1 1 1 1 1 1 1	0.17 0.17 0.17 0.04 0.04 0.04	0.17 0.17 0.17 0.04
(1,836)         1:A:19:VAL:HG12         1:A:117:ASN:HD21           (1,836)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:HD21           (1,832)         1:A:42:TYR:H         1:A:124:VAL:HG21           (1,832)         1:A:42:TYR:H         1:A:124:VAL:HG22           (1,832)         1:A:42:TYR:H         1:A:124:VAL:HG23           (1,831)         1:A:43:VAL:H         1:A:124:VAL:HG21           (1,831)         1:A:43:VAL:H         1:A:124:VAL:HG22           (1,831)         1:A:43:VAL:H         1:A:124:VAL:HG22           (1,828)         1:A:90:VAL:HG21         1:A:102:VAL:HG23           (1,828)         1:A:90:VAL:HG21         1:A:102:VAL:HG23           (1,828)         1:A:90:VAL:HG22         1:A:102:VAL:HG21           (1,828)         1:A:90:VAL:HG22         1:A:102:VAL:HG22           (1,828)         1:A:90:VAL:HG22         1:A:102:VAL:HG23           (1,828)         1:A:90:VAL:HG22         1:A:102:VAL:HG23           (1,828)         1:A:90:VAL:HG23         1:A:102:VAL:HG21	1 1 1 1 1 1	0.17 0.17 0.04 0.04 0.04	0.17 0.17 0.04
(1,836)       1:A:19:VAL:HG13       1:A:117:ASN:HD21         (1,832)       1:A:42:TYR:H       1:A:124:VAL:HG21         (1,832)       1:A:42:TYR:H       1:A:124:VAL:HG22         (1,832)       1:A:42:TYR:H       1:A:124:VAL:HG23         (1,831)       1:A:43:VAL:H       1:A:124:VAL:HG21         (1,831)       1:A:43:VAL:H       1:A:124:VAL:HG22         (1,831)       1:A:43:VAL:H       1:A:124:VAL:HG23         (1,828)       1:A:90:VAL:HG21       1:A:102:VAL:HG21         (1,828)       1:A:90:VAL:HG21       1:A:102:VAL:HG22         (1,828)       1:A:90:VAL:HG22       1:A:102:VAL:HG21         (1,828)       1:A:90:VAL:HG22       1:A:102:VAL:HG22         (1,828)       1:A:90:VAL:HG22       1:A:102:VAL:HG23         (1,828)       1:A:90:VAL:HG22       1:A:102:VAL:HG23         (1,828)       1:A:90:VAL:HG23       1:A:102:VAL:HG21	1 1 1 1 1	0.17 0.04 0.04 0.04	0.17 0.04
(1,832)       1:A:42:TYR:H       1:A:124:VAL:HG21         (1,832)       1:A:42:TYR:H       1:A:124:VAL:HG22         (1,832)       1:A:42:TYR:H       1:A:124:VAL:HG23         (1,831)       1:A:43:VAL:H       1:A:124:VAL:HG21         (1,831)       1:A:43:VAL:H       1:A:124:VAL:HG22         (1,831)       1:A:43:VAL:H       1:A:124:VAL:HG23         (1,828)       1:A:90:VAL:HG21       1:A:102:VAL:HG21         (1,828)       1:A:90:VAL:HG21       1:A:102:VAL:HG22         (1,828)       1:A:90:VAL:HG22       1:A:102:VAL:HG21         (1,828)       1:A:90:VAL:HG22       1:A:102:VAL:HG22         (1,828)       1:A:90:VAL:HG22       1:A:102:VAL:HG23         (1,828)       1:A:90:VAL:HG23       1:A:102:VAL:HG23         (1,828)       1:A:90:VAL:HG23       1:A:102:VAL:HG23	1 1 1 1	0.04 0.04 0.04	0.04
(1,832)       1:A:42:TYR:H       1:A:124:VAL:HG22         (1,832)       1:A:42:TYR:H       1:A:124:VAL:HG23         (1,831)       1:A:43:VAL:H       1:A:124:VAL:HG21         (1,831)       1:A:43:VAL:H       1:A:124:VAL:HG22         (1,831)       1:A:43:VAL:H       1:A:124:VAL:HG23         (1,828)       1:A:90:VAL:HG21       1:A:102:VAL:HG21         (1,828)       1:A:90:VAL:HG21       1:A:102:VAL:HG22         (1,828)       1:A:90:VAL:HG22       1:A:102:VAL:HG21         (1,828)       1:A:90:VAL:HG22       1:A:102:VAL:HG22         (1,828)       1:A:90:VAL:HG22       1:A:102:VAL:HG23         (1,828)       1:A:90:VAL:HG23       1:A:102:VAL:HG23         (1,828)       1:A:90:VAL:HG23       1:A:102:VAL:HG21	1 1 1	0.04 0.04	
(1,832)       1:A:42:TYR:H       1:A:124:VAL:HG23         (1,831)       1:A:43:VAL:H       1:A:124:VAL:HG21         (1,831)       1:A:43:VAL:H       1:A:124:VAL:HG22         (1,831)       1:A:43:VAL:H       1:A:124:VAL:HG23         (1,828)       1:A:90:VAL:HG21       1:A:102:VAL:HG21         (1,828)       1:A:90:VAL:HG21       1:A:102:VAL:HG22         (1,828)       1:A:90:VAL:HG21       1:A:102:VAL:HG23         (1,828)       1:A:90:VAL:HG22       1:A:102:VAL:HG22         (1,828)       1:A:90:VAL:HG22       1:A:102:VAL:HG23         (1,828)       1:A:90:VAL:HG23       1:A:102:VAL:HG23         (1,828)       1:A:90:VAL:HG23       1:A:102:VAL:HG21	1 1	0.04	0.04
(1,831)       1:A:43:VAL:H       1:A:124:VAL:HG21         (1,831)       1:A:43:VAL:H       1:A:124:VAL:HG22         (1,831)       1:A:43:VAL:H       1:A:124:VAL:HG23         (1,828)       1:A:90:VAL:HG21       1:A:102:VAL:HG21         (1,828)       1:A:90:VAL:HG21       1:A:102:VAL:HG22         (1,828)       1:A:90:VAL:HG21       1:A:102:VAL:HG23         (1,828)       1:A:90:VAL:HG22       1:A:102:VAL:HG21         (1,828)       1:A:90:VAL:HG22       1:A:102:VAL:HG23         (1,828)       1:A:90:VAL:HG23       1:A:102:VAL:HG23         (1,828)       1:A:90:VAL:HG23       1:A:102:VAL:HG21	1		
(1,831)       1:A:43:VAL:H       1:A:124:VAL:HG22         (1,831)       1:A:43:VAL:H       1:A:124:VAL:HG23         (1,828)       1:A:90:VAL:HG21       1:A:102:VAL:HG21         (1,828)       1:A:90:VAL:HG21       1:A:102:VAL:HG22         (1,828)       1:A:90:VAL:HG21       1:A:102:VAL:HG23         (1,828)       1:A:90:VAL:HG22       1:A:102:VAL:HG21         (1,828)       1:A:90:VAL:HG22       1:A:102:VAL:HG23         (1,828)       1:A:90:VAL:HG23       1:A:102:VAL:HG23         (1,828)       1:A:90:VAL:HG23       1:A:102:VAL:HG21		0.64	0.04
(1,831)       1:A:43:VAL:H       1:A:124:VAL:HG23         (1,828)       1:A:90:VAL:HG21       1:A:102:VAL:HG21         (1,828)       1:A:90:VAL:HG21       1:A:102:VAL:HG22         (1,828)       1:A:90:VAL:HG21       1:A:102:VAL:HG23         (1,828)       1:A:90:VAL:HG22       1:A:102:VAL:HG21         (1,828)       1:A:90:VAL:HG22       1:A:102:VAL:HG22         (1,828)       1:A:90:VAL:HG22       1:A:102:VAL:HG23         (1,828)       1:A:90:VAL:HG23       1:A:102:VAL:HG21	1	0.04	0.04
(1,828)       1:A:90:VAL:HG21       1:A:102:VAL:HG21         (1,828)       1:A:90:VAL:HG21       1:A:102:VAL:HG22         (1,828)       1:A:90:VAL:HG21       1:A:102:VAL:HG23         (1,828)       1:A:90:VAL:HG22       1:A:102:VAL:HG21         (1,828)       1:A:90:VAL:HG22       1:A:102:VAL:HG22         (1,828)       1:A:90:VAL:HG22       1:A:102:VAL:HG23         (1,828)       1:A:90:VAL:HG23       1:A:102:VAL:HG21	1	0.04	0.04
(1,828)       1:A:90:VAL:HG21       1:A:102:VAL:HG22         (1,828)       1:A:90:VAL:HG21       1:A:102:VAL:HG23         (1,828)       1:A:90:VAL:HG22       1:A:102:VAL:HG21         (1,828)       1:A:90:VAL:HG22       1:A:102:VAL:HG22         (1,828)       1:A:90:VAL:HG22       1:A:102:VAL:HG23         (1,828)       1:A:90:VAL:HG23       1:A:102:VAL:HG21	1	0.04	0.04
(1,828)       1:A:90:VAL:HG21       1:A:102:VAL:HG23         (1,828)       1:A:90:VAL:HG22       1:A:102:VAL:HG21         (1,828)       1:A:90:VAL:HG22       1:A:102:VAL:HG22         (1,828)       1:A:90:VAL:HG22       1:A:102:VAL:HG23         (1,828)       1:A:90:VAL:HG23       1:A:102:VAL:HG21	1	0.06	0.06
(1,828)       1:A:90:VAL:HG22       1:A:102:VAL:HG21         (1,828)       1:A:90:VAL:HG22       1:A:102:VAL:HG22         (1,828)       1:A:90:VAL:HG22       1:A:102:VAL:HG23         (1,828)       1:A:90:VAL:HG23       1:A:102:VAL:HG21	1	0.06	0.06
(1,828)       1:A:90:VAL:HG22       1:A:102:VAL:HG22         (1,828)       1:A:90:VAL:HG22       1:A:102:VAL:HG23         (1,828)       1:A:90:VAL:HG23       1:A:102:VAL:HG21	1	0.06	0.06
(1,828)       1:A:90:VAL:HG22       1:A:102:VAL:HG22         (1,828)       1:A:90:VAL:HG22       1:A:102:VAL:HG23         (1,828)       1:A:90:VAL:HG23       1:A:102:VAL:HG21	1	0.06	0.06
(1,828) 1:A:90:VAL:HG23 1:A:102:VAL:HG21	1	0.06	0.06
(1,828) 1:A:90:VAL:HG23 1:A:102:VAL:HG21	1	0.06	0.06
	1	0.06	0.06
(1,020)   1.11.00. VIII.IIQ20   1.11.102. VIII.IIQ22	1	0.06	0.06
(1,828) 1:A:90:VAL:HG23 1:A:102:VAL:HG23	1	0.06	0.06
(1,827) 1:A:90:VAL:HG21 1:A:99:LEU:H	1	0.18	0.18
(1,827) 1:A:90:VAL:HG22 1:A:99:LEU:H	1	0.18	0.18
(1,827) 1:A:90:VAL:HG23 1:A:99:LEU:H	1	0.18	0.18
(1,82) 1:A:13:ASN:H 1:A:13:ASN:HD21	1	0.01	0.01
(1,812) 1:A:101:HIS:H 1:A:115:CYS:H	1	0.02	0.02
(1,789) 1:A:130:LYS:H 1:A:133:GLY:H	1	0.03	0.03
(1,755) 1:A:95:ALA:H 1:A:96:ASP:H	1	0.04	0.04
(1,735) 1:A:63:GLY:H 1:A:64:TRP:H	1	0.04	0.04
(1,727) 1:A:13:ASN:H 1:A:13:ASN:HD21	1	0.01	0.01
(1,72) 1:A:22:ASN:H 1:A:23:ASN:H	1	0.06	0.06
(1,717) 1:A:22:ASN:H 1:A:23:ASN:H	1	0.06	0.06
(1,707) 1:A:54:SER:HG 1:A:56:ASP:H	1	0.02	0.02
(1,706) 1:A:54:SER:HG 1:A:55:LYS:H	1	0.16	0.16
(1,681) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:47:SER:H	1	0.07	0.07
(1,681) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:47:SER:H	1	0.07	0.07
(1,681) 1:A:12:LEU:HD23 1:A:47:SER:H	1	0.07	0.07
(1,679) 1:A:104:ASN:HD22 1:A:112:LEU:HD21	1	0.15	0.15
(1,679) 1:A:104:ASN:HD22 1:A:112:LEU:HD22	1	0.15	0.15
(1,679) 1:A:104:ASN:HD22 1:A:112:LEU:HD23	1	0.15	0.15
(1,643) 1:A:13:ASN:HD22 1:A:12:LEU:HD11	1	0.03	0.03
(1,643) 1:A:13:ASN:HD22 1:A:12:LEU:HD12		0.00	0.00



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,643)	1:A:13:ASN:HD22	1:A:12:LEU:HD13	1	0.03	0.03
(1,640)	1:A:34:TRP:HE1	1:A:31:ASN:H	1	0.01	0.01
(1,637)	1:A:116:ILE:HD11	1:A:99:LEU:HD11	1	0.03	0.03
(1,637)	1:A:116:ILE:HD11	1:A:99:LEU:HD12	1	0.03	0.03
(1,637)	1:A:116:ILE:HD11	1:A:99:LEU:HD13	1	0.03	0.03
(1,637)	1:A:116:ILE:HD12	1:A:99:LEU:HD11	1	0.03	0.03
(1,637)	1:A:116:ILE:HD12	1:A:99:LEU:HD12	1	0.03	0.03
(1,637)	1:A:116:ILE:HD12	1:A:99:LEU:HD13	1	0.03	0.03
(1,637)	1:A:116:ILE:HD13	1:A:99:LEU:HD11	1	0.03	0.03
(1,637)	1:A:116:ILE:HD13	1:A:99:LEU:HD12	1	0.03	0.03
(1,637)	1:A:116:ILE:HD13	1:A:99:LEU:HD13	1	0.03	0.03
(1,62)	1:A:54:SER:HG	1:A:56:ASP:H	1	0.02	0.02
(1,61)	1:A:54:SER:HG	1:A:55:LYS:H	1	0.16	0.16
(1,590)	1:A:16:GLN:HE21	1:A:45:ILE:HD11	1	0.08	0.08
(1,590)	1:A:16:GLN:HE21	1:A:45:ILE:HD12	1	0.08	0.08
(1,590)	1:A:16:GLN:HE21	1:A:45:ILE:HD13	1	0.08	0.08
(1,590)	1:A:16:GLN:HE22	1:A:45:ILE:HD11	1	0.08	0.08
(1,590)	1:A:16:GLN:HE22	1:A:45:ILE:HD12	1	0.08	0.08
(1,590)	1:A:16:GLN:HE22	1:A:45:ILE:HD13	1	0.08	0.08
(1,578)	1:A:112:LEU:H	1:A:112:LEU:HD11	1	0.01	0.01
(1,578)	1:A:112:LEU:H	1:A:112:LEU:HD12	1	0.01	0.01
(1,578)	1:A:112:LEU:H	1:A:112:LEU:HD13	1	0.01	0.01
(1,574)	1:A:144:LEU:HD11	1:A:145:GLU:H	1	0.14	0.14
(1,574)	1:A:144:LEU:HD12	1:A:145:GLU:H	1	0.14	0.14
(1,574)	1:A:144:LEU:HD13	1:A:145:GLU:H	1	0.14	0.14
(1,567)	1:A:138:LEU:H	1:A:138:LEU:HD21	1	0.02	0.02
(1,567)	1:A:138:LEU:H	1:A:138:LEU:HD22	1	0.02	0.02
(1,567)	1:A:138:LEU:H	1:A:138:LEU:HD23	1	0.02	0.02
(1,563)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:137:TYR:H	1	0.08	0.08
(1,563)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:137:TYR:H	1	0.08	0.08
(1,563)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:137:TYR:H	1	0.08	0.08
(1,560)	1:A:134:TYR:H	1:A:138:LEU:HD11	1	0.13	0.13
(1,560)	1:A:134:TYR:H	1:A:138:LEU:HD12	1	0.13	0.13
(1,560)	1:A:134:TYR:H	1:A:138:LEU:HD13	1	0.13	0.13
(1,547)	1:A:45:ILE:HD11	1:A:121:LEU:H	1	0.03	0.03
(1,547)	1:A:45:ILE:HD12	1:A:121:LEU:H	1	0.03	0.03
(1,547)	1:A:45:ILE:HD13	1:A:121:LEU:H	1	0.03	0.03
(1,545)	1:A:121:LEU:H	1:A:121:LEU:HD11	1	0.02	0.02
(1,545)	1:A:121:LEU:H	1:A:121:LEU:HD12	1	0.02	0.02
(1,545)	1:A:121:LEU:H	1:A:121:LEU:HD13	1	0.02	0.02
(1,531)	1:A:99:LEU:HD21	1:A:100:GLY:H	1	0.02	0.02
(1,531)	1:A:99:LEU:HD22	1:A:100:GLY:H	1	0.02	0.02



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,531)	1:A:99:LEU:HD23	1:A:100:GLY:H	1	0.02	0.02
(1,524)	1:A:91:ARG:H	1:A:99:LEU:HD11	1	0.25	0.25
(1,524)	1:A:91:ARG:H	1:A:99:LEU:HD12	1	0.25	0.25
(1,524)	1:A:91:ARG:H	1:A:99:LEU:HD13	1	0.25	0.25
(1,514)	1:A:86:ILE:HD11	1:A:87:ARG:H	1	0.17	0.17
(1,514)	1:A:86:ILE:HD12	1:A:87:ARG:H	1	0.17	0.17
(1,514)	1:A:86:ILE:HD13	1:A:87:ARG:H	1	0.17	0.17
(1,508)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG21	1	0.03	0.03
(1,508)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG22	1	0.03	0.03
(1,508)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG23	1	0.03	0.03
(1,498)	1:A:71:ILE:H	1:A:75:VAL:HG21	1	0.02	0.02
(1,498)	1:A:71:ILE:H	1:A:75:VAL:HG22	1	0.02	0.02
(1,498)	1:A:71:ILE:H	1:A:75:VAL:HG23	1	0.02	0.02
(1,489)	1:A:51:LEU:H	1:A:71:ILE:HD11	1	0.03	0.03
(1,489)	1:A:51:LEU:H	1:A:71:ILE:HD12	1	0.03	0.03
(1,489)	1:A:51:LEU:H	1:A:71:ILE:HD13	1	0.03	0.03
(1,480)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:48:GLY:H	1	0.02	0.02
(1,480)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:48:GLY:H	1	0.02	0.02
(1,480)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:48:GLY:H	1	0.02	0.02
(1,476)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:44:ASP:H	1	0.04	0.04
(1,476)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:44:ASP:H	1	0.04	0.04
(1,476)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:44:ASP:H	1	0.04	0.04
(1,471)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:25:THR:H	1	0.04	0.04
(1,471)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:25:THR:H	1	0.04	0.04
(1,471)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:25:THR:H	1	0.04	0.04
(1,470)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:24:GLY:H	1	0.09	0.09
(1,470)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:24:GLY:H	1	0.09	0.09
(1,470)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:24:GLY:H	1	0.09	0.09
(1,459)	1:A:12:LEU:H	1:A:12:LEU:HD11	1	0.01	0.01
(1,459)	1:A:12:LEU:H	1:A:12:LEU:HD12	1	0.01	0.01
(1,459)	1:A:12:LEU:H	1:A:12:LEU:HD13	1	0.01	0.01
(1,436)	1:A:13:ASN:HD22	1:A:46:VAL:HG11	1	0.05	0.05
(1,436)	1:A:13:ASN:HD22	1:A:46:VAL:HG12	1	0.05	0.05
(1,436)	1:A:13:ASN:HD22	1:A:46:VAL:HG13	1	0.05	0.05
(1,426)	1:A:12:LEU:HD21	1:A:13:ASN:H	1	0.04	0.04
(1,426)	1:A:12:LEU:HD22	1:A:13:ASN:H	1	0.04	0.04
(1,426)	1:A:12:LEU:HD23	1:A:13:ASN:H	1	0.04	0.04
(1,425)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:119:ALA:H	1	0.15	0.15
(1,425)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:119:ALA:H	1	0.15	0.15
(1,425)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:119:ALA:H	1	0.15	0.15
(1,404)	1:A:102:VAL:HG11	1:A:112:LEU:HD21	1	0.11	0.11
(1,404)	1:A:102:VAL:HG11	1:A:112:LEU:HD22	1	0.11	0.11



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,404)	1:A:102:VAL:HG11	1:A:112:LEU:HD23	1	0.11	0.11
(1,404)	1:A:102:VAL:HG12	1:A:112:LEU:HD21	1	0.11	0.11
(1,404)	1:A:102:VAL:HG12	1:A:112:LEU:HD22	1	0.11	0.11
(1,404)	1:A:102:VAL:HG12	1:A:112:LEU:HD23	1	0.11	0.11
(1,404)	1:A:102:VAL:HG13	1:A:112:LEU:HD21	1	0.11	0.11
(1,404)	1:A:102:VAL:HG13	1:A:112:LEU:HD22	1	0.11	0.11
(1,404)	1:A:102:VAL:HG13	1:A:112:LEU:HD23	1	0.11	0.11
(1,398)	1:A:12:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HG21	1	0.01	0.01
(1,398)	1:A:12:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HG22	1	0.01	0.01
(1,398)	1:A:12:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HG23	1	0.01	0.01
(1,398)	1:A:12:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HG21	1	0.01	0.01
(1,398)	1:A:12:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HG22	1	0.01	0.01
(1,398)	1:A:12:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HG23	1	0.01	0.01
(1,398)	1:A:12:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HG21	1	0.01	0.01
(1,398)	1:A:12:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HG22	1	0.01	0.01
(1,398)	1:A:12:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HG23	1	0.01	0.01
(1,397)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:12:LEU:HD21	1	0.04	0.04
(1,397)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:12:LEU:HD22	1	0.04	0.04
(1,397)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:12:LEU:HD23	1	0.04	0.04
(1,397)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:12:LEU:HD21	1	0.04	0.04
(1,397)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:12:LEU:HD22	1	0.04	0.04
(1,397)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:12:LEU:HD23	1	0.04	0.04
(1,397)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:12:LEU:HD21	1	0.04	0.04
(1,397)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:12:LEU:HD22	1	0.04	0.04
(1,397)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:12:LEU:HD23	1	0.04	0.04
(1,364)	1:A:43:VAL:H	1:A:124:VAL:H	1	0.09	0.09
(1,36)	1:A:12:LEU:HD21	1:A:47:SER:H	1	0.07	0.07
(1,36)	1:A:12:LEU:HD22	1:A:47:SER:H	1	0.07	0.07
(1,36)	1:A:12:LEU:HD23	1:A:47:SER:H	1	0.07	0.07
(1,352)	1:A:104:ASN:H	1:A:113:ARG:H	1	0.02	0.02
(1,350)	1:A:108:GLY:H	1:A:111:GLY:H	1	0.09	0.09
(1,349)	1:A:106:GLY:H	1:A:113:ARG:H	1	0.07	0.07
(1,347)	1:A:103:PHE:H	1:A:114:TYR:H	1	0.13	0.13
(1,34)	1:A:104:ASN:HD22	1:A:112:LEU:HD21	1	0.15	0.15
(1,34)	1:A:104:ASN:HD22	1:A:112:LEU:HD22	1	0.15	0.15
(1,34)	1:A:104:ASN:HD22	1:A:112:LEU:HD23	1	0.15	0.15
(1,335)	1:A:90:VAL:H	1:A:100:GLY:H	1	0.01	0.01
(1,330)	1:A:80:ASP:H	1:A:87:ARG:H	1	0.03	0.03
(1,319)	1:A:45:ILE:H	1:A:48:GLY:H	1	0.02	0.02
(1,317)	1:A:46:VAL:H	1:A:49:LYS:H	1	0.06	0.06
(1,306)	1:A:31:ASN:H	1:A:32:GLU:H	1	0.05	0.05
(1,302)	1:A:17:TYR:H	1:A:20:THR:H	1	0.02	0.02



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,291)	1:A:8:LYS:H	1:A:11:SER:H	1	0.14	0.14
(1,290)	1:A:10:LYS:H	1:A:13:ASN:H	1	0.13	0.13
(1,277)	1:A:103:PHE:H	1:A:106:GLY:H	1	0.21	0.21
(1,273)	1:A:78:LYS:H	1:A:91:ARG:H	1	0.02	0.02
(1,260)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:99:LEU:HD21	1	0.06	0.06
(1,260)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:99:LEU:HD22	1	0.06	0.06
(1,260)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:99:LEU:HD23	1	0.06	0.06
(1,260)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:99:LEU:HD21	1	0.06	0.06
(1,260)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:99:LEU:HD22	1	0.06	0.06
(1,260)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:99:LEU:HD23	1	0.06	0.06
(1,260)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:99:LEU:HD21	1	0.06	0.06
(1,260)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:99:LEU:HD22	1	0.06	0.06
(1,260)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:99:LEU:HD23	1	0.06	0.06
(1,254)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:46:VAL:HG11	1	0.08	0.08
(1,254)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:46:VAL:HG12	1	0.08	0.08
(1,254)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:46:VAL:HG13	1	0.08	0.08
(1,254)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:46:VAL:HG11	1	0.08	0.08
(1,254)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:46:VAL:HG12	1	0.08	0.08
(1,254)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:46:VAL:HG13	1	0.08	0.08
(1,254)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:46:VAL:HG11	1	0.08	0.08
(1,254)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:46:VAL:HG12	1	0.08	0.08
(1,254)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:46:VAL:HG13	1	0.08	0.08
(1,245)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:129:LEU:HD11	1	0.02	0.02
(1,245)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:129:LEU:HD12	1	0.02	0.02
(1,245)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:129:LEU:HD13	1	0.02	0.02
(1,245)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:129:LEU:HD11	1	0.02	0.02
(1,245)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:129:LEU:HD12	1	0.02	0.02
(1,245)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:129:LEU:HD13	1	0.02	0.02
(1,245)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:129:LEU:HD11	1	0.02	0.02
(1,245)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:129:LEU:HD12	1	0.02	0.02
(1,245)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:129:LEU:HD13	1	0.02	0.02
(1,239)	1:A:51:LEU:HD11	1:A:99:LEU:HD21	1	0.01	0.01
(1,239)	1:A:51:LEU:HD11	1:A:99:LEU:HD22	1	0.01	0.01
(1,239)	1:A:51:LEU:HD11	1:A:99:LEU:HD23	1	0.01	0.01
(1,239)	1:A:51:LEU:HD12	1:A:99:LEU:HD21	1	0.01	0.01
(1,239)	1:A:51:LEU:HD12	1:A:99:LEU:HD22	1	0.01	0.01
(1,239)	1:A:51:LEU:HD12	1:A:99:LEU:HD23	1	0.01	0.01
(1,239)	1:A:51:LEU:HD13	1:A:99:LEU:HD21	1	0.01	0.01
(1,239)	1:A:51:LEU:HD13	1:A:99:LEU:HD22	1	0.01	0.01
(1,239)	1:A:51:LEU:HD13	1:A:99:LEU:HD23	1	0.01	0.01
(1,232)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:13:ASN:HD22	1	0.17	0.17
(1,232)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:13:ASN:HD22	1	0.17	0.17



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,232)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:13:ASN:HD22	1	0.17	0.17
(1,215)	1:A:16:GLN:HE21	1:A:45:ILE:HD11	1	0.03	0.03
(1,215)	1:A:16:GLN:HE21	1:A:45:ILE:HD12	1	0.03	0.03
(1,215)	1:A:16:GLN:HE21	1:A:45:ILE:HD13	1	0.03	0.03
(1,214)	1:A:16:GLN:HE22	1:A:45:ILE:HD11	1	0.04	0.04
(1,214)	1:A:16:GLN:HE22	1:A:45:ILE:HD12	1	0.04	0.04
(1,214)	1:A:16:GLN:HE22	1:A:45:ILE:HD13	1	0.04	0.04
(1,200)	1:A:75:VAL:HG11	1:A:102:VAL:HG21	1	0.12	0.12
(1,200)	1:A:75:VAL:HG11	1:A:102:VAL:HG22	1	0.12	0.12
(1,200)	1:A:75:VAL:HG11	1:A:102:VAL:HG23	1	0.12	0.12
(1,200)	1:A:75:VAL:HG12	1:A:102:VAL:HG21	1	0.12	0.12
(1,200)	1:A:75:VAL:HG12	1:A:102:VAL:HG22	1	0.12	0.12
(1,200)	1:A:75:VAL:HG12	1:A:102:VAL:HG23	1	0.12	0.12
(1,200)	1:A:75:VAL:HG13	1:A:102:VAL:HG21	1	0.12	0.12
(1,200)	1:A:75:VAL:HG13	1:A:102:VAL:HG22	1	0.12	0.12
(1,200)	1:A:75:VAL:HG13	1:A:102:VAL:HG23	1	0.12	0.12
(1,197)	1:A:13:ASN:HD21	1:A:46:VAL:HG11	1	0.08	0.08
(1,197)	1:A:13:ASN:HD21	1:A:46:VAL:HG12	1	0.08	0.08
(1,197)	1:A:13:ASN:HD21	1:A:46:VAL:HG13	1	0.08	0.08
(1,193)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:HD22	1	0.05	0.05
(1,193)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:HD22	1	0.05	0.05
(1,193)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:HD22	1	0.05	0.05
(1,191)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:HD21	1	0.17	0.17
(1,191)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:HD21	1	0.17	0.17
(1,191)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:HD21	1	0.17	0.17
(1,187)	1:A:42:TYR:H	1:A:124:VAL:HG21	1	0.04	0.04
(1,187)	1:A:42:TYR:H	1:A:124:VAL:HG22	1	0.04	0.04
(1,187)	1:A:42:TYR:H	1:A:124:VAL:HG23	1	0.04	0.04
(1,186)	1:A:43:VAL:H	1:A:124:VAL:HG21	1	0.04	0.04
(1,186)	1:A:43:VAL:H	1:A:124:VAL:HG22	1	0.04	0.04
(1,186)	1:A:43:VAL:H	1:A:124:VAL:HG23	1	0.04	0.04
(1,183)	1:A:90:VAL:HG21	1:A:102:VAL:HG21	1	0.06	0.06
(1,183)	1:A:90:VAL:HG21	1:A:102:VAL:HG22	1	0.06	0.06
(1,183)	1:A:90:VAL:HG21	1:A:102:VAL:HG23	1	0.06	0.06
(1,183)	1:A:90:VAL:HG22	1:A:102:VAL:HG21	1	0.06	0.06
(1,183)	1:A:90:VAL:HG22	1:A:102:VAL:HG22	1	0.06	0.06
(1,183)	1:A:90:VAL:HG22	1:A:102:VAL:HG23	1	0.06	0.06
(1,183)	1:A:90:VAL:HG23	1:A:102:VAL:HG21	1	0.06	0.06
(1,183)	1:A:90:VAL:HG23	1:A:102:VAL:HG22	1	0.06	0.06
(1,183)	1:A:90:VAL:HG23	1:A:102:VAL:HG23	1	0.06	0.06
(1,182)	1:A:90:VAL:HG21	1:A:99:LEU:H	1	0.18	0.18
(1,182)	1:A:90:VAL:HG22	1:A:99:LEU:H	1	0.18	0.18



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,182)	1:A:90:VAL:HG23	1:A:99:LEU:H	1	0.18	0.18
(1,167)	1:A:101:HIS:H	1:A:115:CYS:H	1	0.02	0.02
(1,144)	1:A:130:LYS:H	1:A:133:GLY:H	1	0.03	0.03
(1,1288)	1:A:13:ASN:HD22	1:A:12:LEU:HD11	1	0.03	0.03
(1,1288)	1:A:13:ASN:HD22	1:A:12:LEU:HD12	1	0.03	0.03
(1,1288)	1:A:13:ASN:HD22	1:A:12:LEU:HD13	1	0.03	0.03
(1,1285)	1:A:34:TRP:HE1	1:A:31:ASN:H	1	0.01	0.01
(1,1282)	1:A:116:ILE:HD11	1:A:99:LEU:HD11	1	0.03	0.03
(1,1282)	1:A:116:ILE:HD11	1:A:99:LEU:HD12	1	0.03	0.03
(1,1282)	1:A:116:ILE:HD11	1:A:99:LEU:HD13	1	0.03	0.03
(1,1282)	1:A:116:ILE:HD12	1:A:99:LEU:HD11	1	0.03	0.03
(1,1282)	1:A:116:ILE:HD12	1:A:99:LEU:HD12	1	0.03	0.03
(1,1282)	1:A:116:ILE:HD12	1:A:99:LEU:HD13	1	0.03	0.03
(1,1282)	1:A:116:ILE:HD13	1:A:99:LEU:HD11	1	0.03	0.03
(1,1282)	1:A:116:ILE:HD13	1:A:99:LEU:HD12	1	0.03	0.03
(1,1282)	1:A:116:ILE:HD13	1:A:99:LEU:HD13	1	0.03	0.03
(1,1235)	1:A:16:GLN:HE21	1:A:45:ILE:HD11	1	0.08	0.08
(1,1235)	1:A:16:GLN:HE21	1:A:45:ILE:HD12	1	0.08	0.08
(1,1235)	1:A:16:GLN:HE21	1:A:45:ILE:HD13	1	0.08	0.08
(1,1235)	1:A:16:GLN:HE22	1:A:45:ILE:HD11	1	0.08	0.08
(1,1235)	1:A:16:GLN:HE22	1:A:45:ILE:HD12	1	0.08	0.08
(1,1235)	1:A:16:GLN:HE22	1:A:45:ILE:HD13	1	0.08	0.08
(1,1223)	1:A:112:LEU:H	1:A:112:LEU:HD11	1	0.01	0.01
(1,1223)	1:A:112:LEU:H	1:A:112:LEU:HD12	1	0.01	0.01
(1,1223)	1:A:112:LEU:H	1:A:112:LEU:HD13	1	0.01	0.01
(1,1219)	1:A:144:LEU:HD11	1:A:145:GLU:H	1	0.14	0.14
(1,1219)	1:A:144:LEU:HD12	1:A:145:GLU:H	1	0.14	0.14
(1,1219)	1:A:144:LEU:HD13	1:A:145:GLU:H	1	0.14	0.14
(1,1212)	1:A:138:LEU:H	1:A:138:LEU:HD21	1	0.02	0.02
(1,1212)	1:A:138:LEU:H	1:A:138:LEU:HD22	1	0.02	0.02
(1,1212)	1:A:138:LEU:H	1:A:138:LEU:HD23	1	0.02	0.02
(1,1208)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:137:TYR:H	1	0.08	0.08
(1,1208)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:137:TYR:H	1	0.08	0.08
(1,1208)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:137:TYR:H	1	0.08	0.08
(1,1205)	1:A:134:TYR:H	1:A:138:LEU:HD11	1	0.13	0.13
(1,1205)	1:A:134:TYR:H	1:A:138:LEU:HD12	1	0.13	0.13
(1,1205)	1:A:134:TYR:H	1:A:138:LEU:HD13	1	0.13	0.13
(1,1192)	1:A:45:ILE:HD11	1:A:121:LEU:H	1	0.03	0.03
(1,1192)	1:A:45:ILE:HD12	1:A:121:LEU:H	1	0.03	0.03
(1,1192)	1:A:45:ILE:HD13	1:A:121:LEU:H	1	0.03	0.03
(1,1190)	1:A:121:LEU:H	1:A:121:LEU:HD11	1	0.02	0.02
(1,1190)	1:A:121:LEU:H	1:A:121:LEU:HD12	1	0.02	0.02



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,1190)	1:A:121:LEU:H	1:A:121:LEU:HD13	1	0.02	0.02
(1,1176)	1:A:99:LEU:HD21	1:A:100:GLY:H	1	0.02	0.02
(1,1176)	1:A:99:LEU:HD22	1:A:100:GLY:H	1	0.02	0.02
(1,1176)	1:A:99:LEU:HD23	1:A:100:GLY:H	1	0.02	0.02
(1,1169)	1:A:91:ARG:H	1:A:99:LEU:HD11	1	0.25	0.25
(1,1169)	1:A:91:ARG:H	1:A:99:LEU:HD12	1	0.25	0.25
(1,1169)	1:A:91:ARG:H	1:A:99:LEU:HD13	1	0.25	0.25
(1,1159)	1:A:86:ILE:HD11	1:A:87:ARG:H	1	0.17	0.17
(1,1159)	1:A:86:ILE:HD12	1:A:87:ARG:H	1	0.17	0.17
(1,1159)	1:A:86:ILE:HD13	1:A:87:ARG:H	1	0.17	0.17
(1,1153)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG21	1	0.03	0.03
(1,1153)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG22	1	0.03	0.03
(1,1153)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG23	1	0.03	0.03
(1,1143)	1:A:71:ILE:H	1:A:75:VAL:HG21	1	0.02	0.02
(1,1143)	1:A:71:ILE:H	1:A:75:VAL:HG22	1	0.02	0.02
(1,1143)	1:A:71:ILE:H	1:A:75:VAL:HG23	1	0.02	0.02
(1,1134)	1:A:51:LEU:H	1:A:71:ILE:HD11	1	0.03	0.03
(1,1134)	1:A:51:LEU:H	1:A:71:ILE:HD12	1	0.03	0.03
(1,1134)	1:A:51:LEU:H	1:A:71:ILE:HD13	1	0.03	0.03
(1,1125)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:48:GLY:H	1	0.02	0.02
(1,1125)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:48:GLY:H	1	0.02	0.02
(1,1125)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:48:GLY:H	1	0.02	0.02
(1,1121)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:44:ASP:H	1	0.04	0.04
(1,1121)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:44:ASP:H	1	0.04	0.04
(1,1121)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:44:ASP:H	1	0.04	0.04
(1,1116)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:25:THR:H	1	0.04	0.04
(1,1116)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:25:THR:H	1	0.04	0.04
(1,1116)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:25:THR:H	1	0.04	0.04
(1,1115)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:24:GLY:H	1	0.09	0.09
(1,1115)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:24:GLY:H	1	0.09	0.09
(1,1115)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:24:GLY:H	1	0.09	0.09
(1,1104)	1:A:12:LEU:H	1:A:12:LEU:HD11	1	0.01	0.01
(1,1104)	1:A:12:LEU:H	1:A:12:LEU:HD12	1	0.01	0.01
(1,1104)	1:A:12:LEU:H	1:A:12:LEU:HD13	1	0.01	0.01
(1,110)	1:A:95:ALA:H	1:A:96:ASP:H	1	0.04	0.04
(1,1081)	1:A:13:ASN:HD22	1:A:46:VAL:HG11	1	0.05	0.05
(1,1081)	1:A:13:ASN:HD22	1:A:46:VAL:HG12	1	0.05	0.05
(1,1081)	1:A:13:ASN:HD22	1:A:46:VAL:HG13	1	0.05	0.05
(1,1071)	1:A:12:LEU:HD21	1:A:13:ASN:H	1	0.04	0.04
(1,1071)	1:A:12:LEU:HD22	1:A:13:ASN:H	1	0.04	0.04
(1,1071)	1:A:12:LEU:HD23	1:A:13:ASN:H	1	0.04	0.04
(1,1070)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:119:ALA:H	1	0.15	0.15



Continued from previous page...

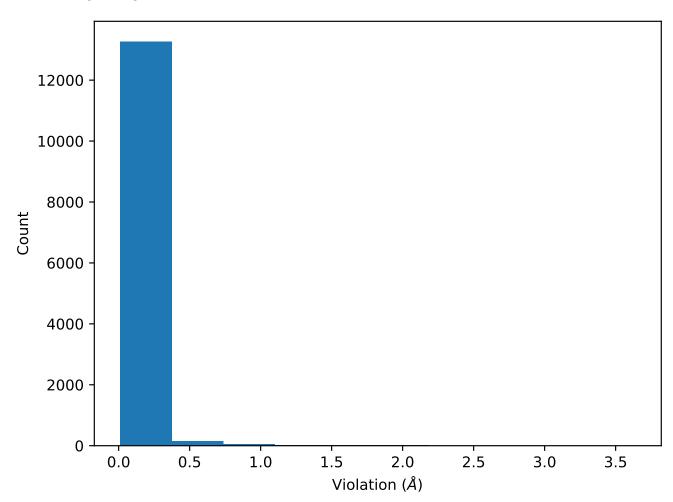
Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,1070)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:119:ALA:H	1	0.15	0.15
(1,1070)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:119:ALA:H	1	0.15	0.15
(1,1049)	1:A:102:VAL:HG11	1:A:112:LEU:HD21	1	0.11	0.11
(1,1049)	1:A:102:VAL:HG11	1:A:112:LEU:HD22	1	0.11	0.11
(1,1049)	1:A:102:VAL:HG11	1:A:112:LEU:HD23	1	0.11	0.11
(1,1049)	1:A:102:VAL:HG12	1:A:112:LEU:HD21	1	0.11	0.11
(1,1049)	1:A:102:VAL:HG12	1:A:112:LEU:HD22	1	0.11	0.11
(1,1049)	1:A:102:VAL:HG12	1:A:112:LEU:HD23	1	0.11	0.11
(1,1049)	1:A:102:VAL:HG13	1:A:112:LEU:HD21	1	0.11	0.11
(1,1049)	1:A:102:VAL:HG13	1:A:112:LEU:HD22	1	0.11	0.11
(1,1049)	1:A:102:VAL:HG13	1:A:112:LEU:HD23	1	0.11	0.11
(1,1043)	1:A:12:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HG21	1	0.01	0.01
(1,1043)	1:A:12:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HG22	1	0.01	0.01
(1,1043)	1:A:12:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HG23	1	0.01	0.01
(1,1043)	1:A:12:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HG21	1	0.01	0.01
(1,1043)	1:A:12:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HG22	1	0.01	0.01
(1,1043)	1:A:12:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HG23	1	0.01	0.01
(1,1043)	1:A:12:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HG21	1	0.01	0.01
(1,1043)	1:A:12:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HG22	1	0.01	0.01
(1,1043)	1:A:12:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HG23	1	0.01	0.01
(1,1042)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:12:LEU:HD21	1	0.04	0.04
(1,1042)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:12:LEU:HD22	1	0.04	0.04
(1,1042)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:12:LEU:HD23	1	0.04	0.04
(1,1042)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:12:LEU:HD21	1	0.04	0.04
(1,1042)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:12:LEU:HD22	1	0.04	0.04
(1,1042)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:12:LEU:HD23	1	0.04	0.04
(1,1042)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:12:LEU:HD21	1	0.04	0.04
(1,1042)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:12:LEU:HD22	1	0.04	0.04
(1,1042)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:12:LEU:HD23	1	0.04	0.04
(1,1009)	1:A:43:VAL:H	1:A:124:VAL:H	1	0.09	0.09



## 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)
(1,601)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD11	17	3.64
(1,601)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD12	17	3.64
(1,601)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD13	17	3.64
(1,1246)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD11	17	3.64
(1,1246)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD12	17	3.64
(1,1246)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD13	17	3.64
(1,601)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD11	12	3.34



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,601)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD12	12	3.34
(1,601)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD13	12	3.34
(1,1246)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD11	12	3.34
(1,1246)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD12	12	3.34
(1,1246)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD13	12	3.34
(1,601)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD11	1	2.4
(1,601)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD12	1	2.4
(1,601)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD13	1	2.4
(1,1246)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD11	1	2.4
(1,1246)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD12	1	2.4
(1,1246)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD13	1	2.4
(1,601)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD11	5	2.06
(1,601)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD12	5	2.06
(1,601)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD13	5	2.06
(1,1246)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD11	5	2.06
(1,1246)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD12	5	2.06
(1,1246)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD13	5	2.06
(1,601)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD11	6	2.03
(1,601)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD12	6	2.03
(1,601)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD13	6	2.03
(1,1246)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD11	6	2.03
(1,1246)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD12	6	2.03
(1,1246)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD13	6	2.03
(1,601)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD11	4	1.92
(1,601)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD12	4	1.92
(1,601)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD13	4	1.92
(1,1246)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD11	4	1.92
(1,1246)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD12	4	1.92
(1,1246)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD13	4	1.92
(1,756)	1:A:92:SER:H	1:A:97:SER:H	17	1.85
(1,111)	1:A:92:SER:H	1:A:97:SER:H	17	1.85
(1,756)	1:A:92:SER:H	1:A:97:SER:H	10	1.82
(1,111)	1:A:92:SER:H	1:A:97:SER:H	10	1.82
(1,601)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD11	16	1.75
(1,601)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD12	16	1.75
(1,601)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD13	16	1.75
(1,1246)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD11	16	1.75
(1,1246)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD12	16	1.75
(1,1246)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD13	16	1.75
(1,601)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD11	3	1.58
(1,601)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD12	3	1.58
(1,601)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD13	3	1.58



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,601)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD11	8	1.58
(1,601)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD12	8	1.58
(1,601)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD13	8	1.58
(1,1246)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD11	3	1.58
(1,1246)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD12	3	1.58
(1,1246)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD13	3	1.58
(1,1246)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD11	8	1.58
(1,1246)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD12	8	1.58
(1,1246)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD13	8	1.58
(1,601)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD11	10	1.54
(1,601)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD12	10	1.54
(1,601)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD13	10	1.54
(1,1246)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD11	10	1.54
(1,1246)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD12	10	1.54
(1,1246)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD13	10	1.54
(1,756)	1:A:92:SER:H	1:A:97:SER:H	3	1.39
(1,111)	1:A:92:SER:H	1:A:97:SER:H	3	1.39
(1,595)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD11	12	1.24
(1,595)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD12	12	1.24
(1,595)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD13	12	1.24
(1,1240)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD11	12	1.24
(1,1240)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD12	12	1.24
(1,1240)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD13	12	1.24
(1,678)	1:A:92:SER:H	1:A:99:LEU:HD11	19	1.2
(1,678)	1:A:92:SER:H	1:A:99:LEU:HD12	19	1.2
(1,678)	1:A:92:SER:H	1:A:99:LEU:HD13	19	1.2
(1,33)	1:A:92:SER:H	1:A:99:LEU:HD11	19	1.2
(1,33)	1:A:92:SER:H	1:A:99:LEU:HD12	19	1.2
(1,33)	1:A:92:SER:H	1:A:99:LEU:HD13	19	1.2
(1,601)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD11	20	1.16
(1,601)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD12	20	1.16
(1,601)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD13	20	1.16
(1,1246)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD11	20	1.16
(1,1246)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD12	20	1.16
(1,1246)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD13	20	1.16
(1,595)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD11	4	1.13
(1,595)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD12	4	1.13
(1,595)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD13	4	1.13
(1,1240)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD11	4	1.13
(1,1240)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD12	4	1.13
(1,1240)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD13	4	1.13
(1,807)	1:A:92:SER:H	1:A:96:ASP:H	10	1.04



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

(1,701)         1:A:110:ASN:HD22         1:A:112:LEU:HD11         15         1.04           (1,701)         1:A:110:ASN:HD22         1:A:112:LEU:HD12         15         1.04           (1,701)         1:A:110:ASN:HD22         1:A:112:LEU:HD13         15         1.04           (1,56)         1:A:110:ASN:HD22         1:A:112:LEU:HD11         15         1.04           (1,56)         1:A:110:ASN:HD22         1:A:112:LEU:HD13         15         1.04           (1,566)         1:A:110:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         18         1.03           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         18         1.03           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         18         1.03           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         19         1.03           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         19         1.03           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         19         1.03           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         18         1.03           (1,240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         18         1.03           (1,1240)         <	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,701) 1:A:110:ASN:HD22 1:A:112:LEU:HD13 15 1.04 (1,56) 1:A:110:ASN:HD22 1:A:112:LEU:HD11 15 1.04 (1,56) 1:A:110:ASN:HD22 1:A:112:LEU:HD12 15 1.04 (1,56) 1:A:110:ASN:HD22 1:A:112:LEU:HD13 15 1.04 (1,56) 1:A:110:ASN:HD22 1:A:112:LEU:HD13 15 1.04 (1,595) 1:A:10:ASN:HD22 1:A:112:LEU:HD13 15 1.04 (1,595) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD11 18 1.03 (1,595) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD11 18 1.03 (1,595) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD12 18 1.03 (1,595) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD13 18 1.03 (1,595) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD13 19 1.03 (1,1240) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD13 19 1.03 (1,1240) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD13 19 1.03 (1,1240) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD11 18 1.03 (1,1240) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD11 19 1.03 (1,1240) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD11 2 0.99 (1,595) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD11 2 0.99 (1,1240) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD11 2 0.99 (1,1240) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD11 2 0.99 (1,1240) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD11 1 0.	(1,701)		1:A:112:LEU:HD11	15	1.04
(1,56)	(1,701)	1:A:110:ASN:HD22	1:A:112:LEU:HD12	15	1.04
(1,56) 1:A:110:ASN:HD22 1:A:112:LEU:HD12 15 1.04 (1,56) 1:A:110:ASN:HD22 1:A:112:LEU:HD13 15 1.04 (1,162) 1:A:92:SER:H 1A:96:ASP:H 10 1.04 (1,595) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD11 18 1.03 (1,595) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD11 18 1.03 (1,595) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD11 18 1.03 (1,595) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD13 18 1.03 (1,595) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD13 18 1.03 (1,595) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD11 19 1.03 (1,595) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD11 19 1.03 (1,595) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD12 19 1.03 (1,1240) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD13 18 1.03 (1,1240) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD13 18 1.03 (1,1240) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD13 18 1.03 (1,1240) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD13 19 1.03 (1,1240) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD11 19 1.03 (1,1240) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD11 19 1.03 (1,1240) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD11 2 0.99 (1,1240) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD11 2 0.99 (1,595) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD13 19 1.03 (1,595) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD11 2 0.99 (1,595) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD11 2 0.99 (1,1240) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD11 13 0.95 (1,595) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD11 13 0.95 (1,595) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD11 13 0.95 (1,1240) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD11 18 0.93 (1,1240) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:144:LEU:HD11 18 0.93 (1,1240) 1:A:142:ASN:HD21 1:A:144:LEU:HD11 18 0.93 (1,1240) 1:A:142:ASN:HD21 1:A:144:LEU:HD	(1,701)	1:A:110:ASN:HD22	1:A:112:LEU:HD13	15	1.04
(1,56) 1:A:110:ASN:HD22 1:A:112:LEU:HD13 15 1.04 (1,162) 1:A:92:SER:H 1:A:96:ASP:H 10 1.04 (1,595) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD11 18 1.03 (1,595) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD11 18 1.03 (1,595) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD13 18 1.03 (1,595) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD13 18 1.03 (1,595) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD13 19 1.03 (1,595) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD12 19 1.03 (1,595) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD12 19 1.03 (1,595) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD13 19 1.03 (1,1240) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD13 19 1.03 (1,1240) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD11 18 1.03 (1,1240) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD11 18 1.03 (1,1240) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD13 18 1.03 (1,1240) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD13 18 1.03 (1,1240) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD13 19 1.03 (1,1240) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD12 19 1.03 (1,1240) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD13 19 1.03 (1,595) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD11 2 0.99 (1,595) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD13 2 0.99 (1,1240) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD13 2 0.99 (1,1240) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD11 2 0.99 (1,1240) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD11 13 0.95 (1,595) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:144:LEU:HD11 13 0.95 (1,595) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:144:LEU:HD11 13 0.95 (1,595) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:144:LEU:HD12 13 0.95 (1,595) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:144:LEU:HD12 13 0.95 (1,595) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:144:LEU:HD12 13 0.9	(1,56)	1:A:110:ASN:HD22	1:A:112:LEU:HD11	15	1.04
(1,162) 1:A:192:SER:H 1:A:96:ASP:H 10 1.04 (1,595) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD11 18 1.03 (1,595) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD12 18 1.03 (1,595) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD13 18 1.03 (1,595) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD11 19 1.03 (1,595) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD12 19 1.03 (1,595) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD12 19 1.03 (1,595) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD12 19 1.03 (1,595) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD13 19 1.03 (1,1240) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD13 19 1.03 (1,1240) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD13 19 1.03 (1,1240) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD13 18 1.03 (1,1240) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD11 18 1.03 (1,1240) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD11 19 1.03 (1,595) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD11 2	(1,56)	1:A:110:ASN:HD22	1:A:112:LEU:HD12	15	1.04
(1,595) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD11 18 1.03 (1,595) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD12 18 1.03 (1,595) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD13 18 1.03 (1,595) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD11 19 1.03 (1,595) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD11 19 1.03 (1,595) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD13 19 1.03 (1,1240) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD13 19 1.03 (1,1240) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD13 19 1.03 (1,1240) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD11 18 1.03 (1,1240) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD12 18 1.03 (1,1240) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD13 18 1.03 (1,1240) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD13 18 1.03 (1,1240) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD13 19 1.03 (1,1240) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD12 19 1.03 (1,1240) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD12 19 1.03 (1,595) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD13 19 1.03 (1,595) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD13 19 1.03 (1,595) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD11 2 0.99 (1,595) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD11 2 0.99 (1,1240) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD13 2 0.99 (1,1240) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD13 2 0.99 (1,1240) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD13 2 0.99 (1,1240) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD11 2 0.99 (1,595) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD11 2 0.99 (1,595) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD11 13 0.95 (1,595) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD11 18 0.93 (1,601) 1:A:142:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD11 18 0.93 (1,601) 1:A:142:ASN:HD21 1:A:144:LEU:HD11 18 0.93 (1,601) 1:A:142:ASN:HD21 1:A:144:LEU:HD11 18 0.93 (1,601) 1:A:142:ASN:HD21 1:A:144:LEU:HD11 18 0.93 (1,601) 1:A:142:ASN:HD21 1:A:144:LEU:HD11 18 0.93 (1,1246) 1:A:142:ASN:HD21 1:A:144:LEU:HD11 18 0.93 (1,1246) 1:A:142:ASN:HD21 1:A:144:LEU:HD11 18 0.93 (1,1246) 1:A:142:ASN:HD21 1:A:144:LEU:HD11 18 0.93 (1,1246) 1:A:144:LEU:HD11 1:A:144:LEU:HD11 18 0.93 (1,1246) 1:A:144:LEU:HD11 1:A:144:LEU:HD11 19 0	(1,56)	1:A:110:ASN:HD22	1:A:112:LEU:HD13	15	1.04
(1,595) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD12 18 1.03 (1,595) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD13 18 1.03 (1,595) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD11 19 1.03 (1,595) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD12 19 1.03 (1,595) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD13 19 1.03 (1,1240) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD11 18 1.03 (1,1240) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD11 18 1.03 (1,1240) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD13 19 1.03 (1,1240) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD12 19 1.03 (1,1240) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD12 19 1.03 (1,595) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD13 19 1.03 (1,595) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD13 2 0.99 (1,595) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD12 2 0.99 (1,1240) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD12 2 0.99 (1,1240) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD11 13 0.95 (1,595) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD11 18 0.93 (1,1240) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD11 18 0.93 (1,1240) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD11 18 0.93 (1,1240) 1:A:142:ASN:HD21 1:A:144:LEU:HD11 18 0.93 (1,1240) 1:A:142:ASN:HD21 1:A:144:LEU:HD11 18 0.93 (1,1246) 1:A:144:LEU:HD11 1:A:145:GLU:H 9 0.88 (1,603) 1:A:144:LEU:HD11 1:A:145:GLU:H 9 0.88 (1,1248) 1:A:144:LEU:HD11 1:A:145:GLU:H 9 0.88	(1,162)	1:A:92:SER:H	1:A:96:ASP:H	10	1.04
(1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         18         1.03           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         19         1.03           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD12         19         1.03           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         19         1.03           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         18         1.03           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         18         1.03           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         18         1.03           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         19         1.03           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD12         19         1.03           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         19         1.03           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         2         0.99           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         2         0.99           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         2         0.99           (1,1240)	(1,595)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD11	18	1.03
(1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         19         1.03           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD12         19         1.03           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         19         1.03           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         18         1.03           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD12         18         1.03           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         18         1.03           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         19         1.03           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD12         19         1.03           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         19         1.03           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         2         0.99           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         2         0.99           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         2         0.99           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         2         0.99           (1,1240)	(1,595)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD12	18	1.03
(1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD12         19         1.03           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         19         1.03           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         18         1.03           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD12         18         1.03           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         18         1.03           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD12         19         1.03           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD12         19         1.03           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         19         1.03           (1,240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         2         0.99           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD12         2         0.99           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         2         0.99           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         2         0.99           (1,240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         2         0.99           (1,240)	(1,595)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD13	18	1.03
(1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         19         1.03           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         18         1.03           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD12         18         1.03           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         18         1.03           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         19         1.03           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD12         19         1.03           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD12         19         1.03           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         19         1.03           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         2         0.99           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         2         0.99           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         2         0.99           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         2         0.99           (1,240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         2         0.99           (1,595)	(1,595)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD11	19	1.03
(1,1240) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD11 18 1.03 (1,1240) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD12 18 1.03 (1,1240) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD13 18 1.03 (1,1240) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD11 19 1.03 (1,1240) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD12 19 1.03 (1,1240) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD12 19 1.03 (1,1240) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD13 19 1.03 (1,595) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD13 2 0.99 (1,595) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD12 2 0.99 (1,595) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD13 2 0.99 (1,1240) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD13 2 0.99 (1,1240) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD11 2 0.99 (1,1240) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD11 2 0.99 (1,1240) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD11 2 0.99 (1,595) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD13 2 0.99 (1,595) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD13 2 0.99 (1,595) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD13 13 0.95 (1,595) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD11 13 0.95 (1,595) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD11 13 0.95 (1,595) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD11 13 0.95 (1,1240) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD11 13 0.95 (1,1240) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD11 13 0.95 (1,1240) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD11 13 0.95 (1,1240) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD11 18 0.93 (1,1240) 1:A:142:ASN:HD21 1:A:144:LEU:HD11 18 0.93 (1,1240) 1:A:142:ASN:HD21 1:A:144:LEU:HD11 18 0.93 (1,601) 1:A:142:ASN:HD21 1:A:144:LEU:HD11 18 0.93 (1,601) 1:A:142:ASN:HD21 1:A:144:LEU:HD11 18 0.93 (1,1246) 1:A:142:ASN:HD21 1:A:144:LEU:HD13 18 0.93 (1,1246) 1:A:142:ASN:HD21 1:A:144:LEU:HD11 18 0.93 (1,1246) 1:A:142:ASN:HD21 1:A:144:LEU:HD11 18 0.93 (1,1246) 1:A:144:LEU:HD11 1:A:144:LEU:HD11 18 0.93 (1,1246) 1:A:144:LEU:HD11 1:A:144:LEU:HD11 18 0.93	(1,595)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD12	19	1.03
(1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD12         18         1.03           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         18         1.03           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         19         1.03           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD12         19         1.03           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         19         1.03           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         2         0.99           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD12         2         0.99           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         2         0.99           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         2         0.99           (1,240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD12         2         0.99           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         2         0.99           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         13         0.95           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         13         0.95           (1,595)	(1,595)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD13	19	1.03
(1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         18         1.03           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         19         1.03           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD12         19         1.03           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         19         1.03           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         2         0.99           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD12         2         0.99           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         2         0.99           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         2         0.99           (1,240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD12         2         0.99           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         2         0.99           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         13         0.95           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         13         0.95           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         13         0.95           (1,1240)	(1,1240)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD11	18	1.03
(1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         19         1.03           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD12         19         1.03           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         19         1.03           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         2         0.99           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD12         2         0.99           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         2         0.99           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         2         0.99           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD12         2         0.99           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         2         0.99           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         13         0.95           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD12         13         0.95           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         13         0.95           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         13         0.95           (1,1240)	(1,1240)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD12	18	1.03
(1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD12         19         1.03           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         19         1.03           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         2         0.99           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD12         2         0.99           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         2         0.99           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         2         0.99           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD12         2         0.99           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         2         0.99           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         13         0.95           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD12         13         0.95           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         13         0.95           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         13         0.95           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         13         0.95           (1,1240)	(1,1240)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD13	18	1.03
(1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         19         1.03           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         2         0.99           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD12         2         0.99           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         2         0.99           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         2         0.99           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD12         2         0.99           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         2         0.99           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         2         0.99           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         13         0.95           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         13         0.95           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         13         0.95           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         13         0.95           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         13         0.95           (1,601)	(1,1240)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD11	19	1.03
(1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         2         0.99           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD12         2         0.99           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         2         0.99           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         2         0.99           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD12         2         0.99           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         2         0.99           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         13         0.95           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD12         13         0.95           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         13         0.95           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         13         0.95           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD12         13         0.95           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         13         0.95           (1,601)         1:A:142:ASN:HD21         1:A:144:LEU:HD13         18         0.93           (1,601)	(1,1240)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD12	19	1.03
(1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD12         2         0.99           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         2         0.99           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         2         0.99           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD12         2         0.99           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         2         0.99           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         13         0.95           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         13         0.95           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         13         0.95           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         13         0.95           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD12         13         0.95           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         13         0.95           (1,601)         1:A:142:ASN:HD21         1:A:144:LEU:HD11         18         0.93           (1,601)         1:A:142:ASN:HD21         1:A:144:LEU:HD13         18         0.93           (1,1246)	(1,1240)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD13	19	1.03
(1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         2         0.99           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         2         0.99           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD12         2         0.99           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         2         0.99           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         13         0.95           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD12         13         0.95           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         13         0.95           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         13         0.95           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD12         13         0.95           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         13         0.95           (1,601)         1:A:142:ASN:HD21         1:A:144:LEU:HD11         18         0.93           (1,601)         1:A:142:ASN:HD21         1:A:144:LEU:HD13         18         0.93           (1,1246)         1:A:142:ASN:HD21         1:A:144:LEU:HD11         18         0.93           (1,1246)	(1,595)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD11	2	0.99
(1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         2         0.99           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD12         2         0.99           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         2         0.99           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         13         0.95           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         13         0.95           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         13         0.95           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         13         0.95           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD12         13         0.95           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         13         0.95           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         13         0.95           (1,601)         1:A:142:ASN:HD21         1:A:144:LEU:HD11         18         0.93           (1,601)         1:A:142:ASN:HD21         1:A:144:LEU:HD13         18         0.93           (1,1246)         1:A:142:ASN:HD21         1:A:144:LEU:HD11         18         0.93           (1,1246)	(1,595)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD12	2	0.99
(1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD12         2         0.99           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         2         0.99           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         13         0.95           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD12         13         0.95           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         13         0.95           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         13         0.95           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD12         13         0.95           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         13         0.95           (1,1240)         1:A:142:ASN:HD21         1:A:144:LEU:HD11         18         0.93           (1,601)         1:A:142:ASN:HD21         1:A:144:LEU:HD12         18         0.93           (1,601)         1:A:142:ASN:HD21         1:A:144:LEU:HD11         18         0.93           (1,1246)         1:A:142:ASN:HD21         1:A:144:LEU:HD11         18         0.93           (1,1246)         1:A:142:ASN:HD21         1:A:144:LEU:HD13         18         0.93           (1,603)	(1,595)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD13	2	0.99
(1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         2         0.99           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         13         0.95           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD12         13         0.95           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         13         0.95           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         13         0.95           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD12         13         0.95           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         13         0.95           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:144:LEU:HD11         18         0.93           (1,601)         1:A:142:ASN:HD21         1:A:144:LEU:HD12         18         0.93           (1,601)         1:A:142:ASN:HD21         1:A:144:LEU:HD11         18         0.93           (1,1246)         1:A:142:ASN:HD21         1:A:144:LEU:HD11         18         0.93           (1,1246)         1:A:142:ASN:HD21         1:A:144:LEU:HD13         18         0.93           (1,603)         1:A:144:LEU:HD11         1:A:145:GLU:H         9         0.88           (1,603)	(1,1240)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD11	2	0.99
(1,595)       1:A:104:ASN:HD21       1:A:112:LEU:HD11       13       0.95         (1,595)       1:A:104:ASN:HD21       1:A:112:LEU:HD12       13       0.95         (1,595)       1:A:104:ASN:HD21       1:A:112:LEU:HD13       13       0.95         (1,1240)       1:A:104:ASN:HD21       1:A:112:LEU:HD11       13       0.95         (1,1240)       1:A:104:ASN:HD21       1:A:112:LEU:HD12       13       0.95         (1,1240)       1:A:104:ASN:HD21       1:A:112:LEU:HD13       13       0.95         (1,601)       1:A:142:ASN:HD21       1:A:144:LEU:HD11       18       0.93         (1,601)       1:A:142:ASN:HD21       1:A:144:LEU:HD12       18       0.93         (1,601)       1:A:142:ASN:HD21       1:A:144:LEU:HD11       18       0.93         (1,1246)       1:A:142:ASN:HD21       1:A:144:LEU:HD11       18       0.93         (1,1246)       1:A:142:ASN:HD21       1:A:144:LEU:HD12       18       0.93         (1,603)       1:A:144:LEU:HD11       1:A:145:GLU:H       9       0.88         (1,603)       1:A:144:LEU:HD13       1:A:145:GLU:H       9       0.88         (1,1248)       1:A:144:LEU:HD11       1:A:145:GLU:H       9       0.88	(1,1240)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD12	2	0.99
(1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD12         13         0.95           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         13         0.95           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         13         0.95           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD12         13         0.95           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         13         0.95           (1,601)         1:A:142:ASN:HD21         1:A:144:LEU:HD11         18         0.93           (1,601)         1:A:142:ASN:HD21         1:A:144:LEU:HD12         18         0.93           (1,601)         1:A:142:ASN:HD21         1:A:144:LEU:HD11         18         0.93           (1,1246)         1:A:142:ASN:HD21         1:A:144:LEU:HD11         18         0.93           (1,1246)         1:A:142:ASN:HD21         1:A:144:LEU:HD13         18         0.93           (1,603)         1:A:144:LEU:HD11         1:A:145:GLU:H         9         0.88           (1,603)         1:A:144:LEU:HD13         1:A:145:GLU:H         9         0.88           (1,248)         1:A:144:LEU:HD11         1:A:145:GLU:H         9         0.88	(1,1240)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD13	2	0.99
(1,595)       1:A:104:ASN:HD21       1:A:112:LEU:HD13       13       0.95         (1,1240)       1:A:104:ASN:HD21       1:A:112:LEU:HD11       13       0.95         (1,1240)       1:A:104:ASN:HD21       1:A:112:LEU:HD12       13       0.95         (1,1240)       1:A:104:ASN:HD21       1:A:112:LEU:HD13       13       0.95         (1,601)       1:A:142:ASN:HD21       1:A:144:LEU:HD11       18       0.93         (1,601)       1:A:142:ASN:HD21       1:A:144:LEU:HD12       18       0.93         (1,601)       1:A:142:ASN:HD21       1:A:144:LEU:HD13       18       0.93         (1,1246)       1:A:142:ASN:HD21       1:A:144:LEU:HD11       18       0.93         (1,1246)       1:A:142:ASN:HD21       1:A:144:LEU:HD12       18       0.93         (1,1246)       1:A:142:ASN:HD21       1:A:144:LEU:HD13       18       0.93         (1,603)       1:A:144:LEU:HD11       1:A:145:GLU:H       9       0.88         (1,603)       1:A:144:LEU:HD13       1:A:145:GLU:H       9       0.88         (1,248)       1:A:144:LEU:HD11       1:A:145:GLU:H       9       0.88         (1,248)       1:A:144:LEU:HD11       1:A:145:GLU:H       9       0.88	(1,595)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD11	13	0.95
(1,1240)       1:A:104:ASN:HD21       1:A:112:LEU:HD11       13       0.95         (1,1240)       1:A:104:ASN:HD21       1:A:112:LEU:HD12       13       0.95         (1,1240)       1:A:104:ASN:HD21       1:A:112:LEU:HD13       13       0.95         (1,601)       1:A:142:ASN:HD21       1:A:144:LEU:HD11       18       0.93         (1,601)       1:A:142:ASN:HD21       1:A:144:LEU:HD12       18       0.93         (1,601)       1:A:142:ASN:HD21       1:A:144:LEU:HD13       18       0.93         (1,1246)       1:A:142:ASN:HD21       1:A:144:LEU:HD11       18       0.93         (1,1246)       1:A:142:ASN:HD21       1:A:144:LEU:HD12       18       0.93         (1,1246)       1:A:142:ASN:HD21       1:A:144:LEU:HD13       18       0.93         (1,603)       1:A:144:LEU:HD11       1:A:145:GLU:H       9       0.88         (1,603)       1:A:144:LEU:HD13       1:A:145:GLU:H       9       0.88         (1,603)       1:A:144:LEU:HD13       1:A:145:GLU:H       9       0.88         (1,248)       1:A:144:LEU:HD11       1:A:145:GLU:H       9       0.88	(1,595)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD12	13	0.95
(1,1240)       1:A:104:ASN:HD21       1:A:112:LEU:HD12       13       0.95         (1,1240)       1:A:104:ASN:HD21       1:A:112:LEU:HD13       13       0.95         (1,601)       1:A:142:ASN:HD21       1:A:144:LEU:HD11       18       0.93         (1,601)       1:A:142:ASN:HD21       1:A:144:LEU:HD12       18       0.93         (1,601)       1:A:142:ASN:HD21       1:A:144:LEU:HD13       18       0.93         (1,1246)       1:A:142:ASN:HD21       1:A:144:LEU:HD12       18       0.93         (1,1246)       1:A:142:ASN:HD21       1:A:144:LEU:HD12       18       0.93         (1,1246)       1:A:142:ASN:HD21       1:A:144:LEU:HD13       18       0.93         (1,603)       1:A:144:LEU:HD11       1:A:145:GLU:H       9       0.88         (1,603)       1:A:144:LEU:HD13       1:A:145:GLU:H       9       0.88         (1,603)       1:A:144:LEU:HD13       1:A:145:GLU:H       9       0.88         (1,248)       1:A:144:LEU:HD11       1:A:145:GLU:H       9       0.88          (1,1248)       1:A:144:LEU:HD11       1:A:145:GLU:H       9       0.88	(1,595)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD13	13	0.95
(1,1240)       1:A:104:ASN:HD21       1:A:112:LEU:HD13       13       0.95         (1,601)       1:A:142:ASN:HD21       1:A:144:LEU:HD11       18       0.93         (1,601)       1:A:142:ASN:HD21       1:A:144:LEU:HD12       18       0.93         (1,601)       1:A:142:ASN:HD21       1:A:144:LEU:HD13       18       0.93         (1,1246)       1:A:142:ASN:HD21       1:A:144:LEU:HD11       18       0.93         (1,1246)       1:A:142:ASN:HD21       1:A:144:LEU:HD12       18       0.93         (1,1246)       1:A:142:ASN:HD21       1:A:144:LEU:HD13       18       0.93         (1,603)       1:A:144:LEU:HD11       1:A:145:GLU:H       9       0.88         (1,603)       1:A:144:LEU:HD13       1:A:145:GLU:H       9       0.88         (1,603)       1:A:144:LEU:HD13       1:A:145:GLU:H       9       0.88         (1,1248)       1:A:144:LEU:HD11       1:A:145:GLU:H       9       0.88	(1,1240)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD11	13	0.95
(1,601)       1:A:142:ASN:HD21       1:A:144:LEU:HD11       18       0.93         (1,601)       1:A:142:ASN:HD21       1:A:144:LEU:HD12       18       0.93         (1,601)       1:A:142:ASN:HD21       1:A:144:LEU:HD13       18       0.93         (1,1246)       1:A:142:ASN:HD21       1:A:144:LEU:HD11       18       0.93         (1,1246)       1:A:142:ASN:HD21       1:A:144:LEU:HD12       18       0.93         (1,1246)       1:A:142:ASN:HD21       1:A:144:LEU:HD13       18       0.93         (1,603)       1:A:144:LEU:HD11       1:A:145:GLU:H       9       0.88         (1,603)       1:A:144:LEU:HD12       1:A:145:GLU:H       9       0.88         (1,603)       1:A:144:LEU:HD13       1:A:145:GLU:H       9       0.88         (1,1248)       1:A:144:LEU:HD11       1:A:145:GLU:H       9       0.88	(1,1240)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD12	13	0.95
(1,601)       1:A:142:ASN:HD21       1:A:144:LEU:HD12       18       0.93         (1,601)       1:A:142:ASN:HD21       1:A:144:LEU:HD13       18       0.93         (1,1246)       1:A:142:ASN:HD21       1:A:144:LEU:HD11       18       0.93         (1,1246)       1:A:142:ASN:HD21       1:A:144:LEU:HD12       18       0.93         (1,1246)       1:A:142:ASN:HD21       1:A:144:LEU:HD13       18       0.93         (1,603)       1:A:144:LEU:HD11       1:A:145:GLU:H       9       0.88         (1,603)       1:A:144:LEU:HD12       1:A:145:GLU:H       9       0.88         (1,603)       1:A:144:LEU:HD13       1:A:145:GLU:H       9       0.88         (1,248)       1:A:144:LEU:HD11       1:A:145:GLU:H       9       0.88	(1,1240)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD13	13	0.95
(1,601)       1:A:142:ASN:HD21       1:A:144:LEU:HD12       18       0.93         (1,601)       1:A:142:ASN:HD21       1:A:144:LEU:HD13       18       0.93         (1,1246)       1:A:142:ASN:HD21       1:A:144:LEU:HD11       18       0.93         (1,1246)       1:A:142:ASN:HD21       1:A:144:LEU:HD12       18       0.93         (1,1246)       1:A:142:ASN:HD21       1:A:144:LEU:HD13       18       0.93         (1,603)       1:A:144:LEU:HD11       1:A:145:GLU:H       9       0.88         (1,603)       1:A:144:LEU:HD12       1:A:145:GLU:H       9       0.88         (1,603)       1:A:144:LEU:HD13       1:A:145:GLU:H       9       0.88         (1,248)       1:A:144:LEU:HD11       1:A:145:GLU:H       9       0.88	(1,601)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD11	18	0.93
(1,601)       1:A:142:ASN:HD21       1:A:144:LEU:HD13       18       0.93         (1,1246)       1:A:142:ASN:HD21       1:A:144:LEU:HD11       18       0.93         (1,1246)       1:A:142:ASN:HD21       1:A:144:LEU:HD12       18       0.93         (1,1246)       1:A:142:ASN:HD21       1:A:144:LEU:HD13       18       0.93         (1,603)       1:A:144:LEU:HD11       1:A:145:GLU:H       9       0.88         (1,603)       1:A:144:LEU:HD12       1:A:145:GLU:H       9       0.88         (1,603)       1:A:144:LEU:HD13       1:A:145:GLU:H       9       0.88         (1,1248)       1:A:144:LEU:HD11       1:A:145:GLU:H       9       0.88	, ,	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD12	18	0.93
(1,1246)       1:A:142:ASN:HD21       1:A:144:LEU:HD11       18       0.93         (1,1246)       1:A:142:ASN:HD21       1:A:144:LEU:HD12       18       0.93         (1,1246)       1:A:142:ASN:HD21       1:A:144:LEU:HD13       18       0.93         (1,603)       1:A:144:LEU:HD11       1:A:145:GLU:H       9       0.88         (1,603)       1:A:144:LEU:HD12       1:A:145:GLU:H       9       0.88         (1,603)       1:A:144:LEU:HD13       1:A:145:GLU:H       9       0.88         (1,1248)       1:A:144:LEU:HD11       1:A:145:GLU:H       9       0.88	/	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD13	18	0.93
(1,1246)       1:A:142:ASN:HD21       1:A:144:LEU:HD12       18       0.93         (1,1246)       1:A:142:ASN:HD21       1:A:144:LEU:HD13       18       0.93         (1,603)       1:A:144:LEU:HD11       1:A:145:GLU:H       9       0.88         (1,603)       1:A:144:LEU:HD12       1:A:145:GLU:H       9       0.88         (1,603)       1:A:144:LEU:HD13       1:A:145:GLU:H       9       0.88         (1,1248)       1:A:144:LEU:HD11       1:A:145:GLU:H       9       0.88	(1,1246)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD11	18	0.93
(1,1246)       1:A:142:ASN:HD21       1:A:144:LEU:HD13       18       0.93         (1,603)       1:A:144:LEU:HD11       1:A:145:GLU:H       9       0.88         (1,603)       1:A:144:LEU:HD12       1:A:145:GLU:H       9       0.88         (1,603)       1:A:144:LEU:HD13       1:A:145:GLU:H       9       0.88         (1,1248)       1:A:144:LEU:HD11       1:A:145:GLU:H       9       0.88	· · /	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD12	18	0.93
(1,603)       1:A:144:LEU:HD11       1:A:145:GLU:H       9       0.88         (1,603)       1:A:144:LEU:HD12       1:A:145:GLU:H       9       0.88         (1,603)       1:A:144:LEU:HD13       1:A:145:GLU:H       9       0.88         (1,1248)       1:A:144:LEU:HD11       1:A:145:GLU:H       9       0.88		1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD13	18	0.93
(1,603)       1:A:144:LEU:HD12       1:A:145:GLU:H       9       0.88         (1,603)       1:A:144:LEU:HD13       1:A:145:GLU:H       9       0.88         (1,1248)       1:A:144:LEU:HD11       1:A:145:GLU:H       9       0.88		1:A:144:LEU:HD11	1:A:145:GLU:H	9	0.88
(1,603)       1:A:144:LEU:HD13       1:A:145:GLU:H       9       0.88         (1,1248)       1:A:144:LEU:HD11       1:A:145:GLU:H       9       0.88		1:A:144:LEU:HD12	1:A:145:GLU:H	9	0.88
(1,1248) 1:A:144:LEU:HD11 1:A:145:GLU:H 9 0.88		1:A:144:LEU:HD13	1:A:145:GLU:H	9	0.88
	· · /	1:A:144:LEU:HD11	1:A:145:GLU:H	9	0.88
	· · /	1:A:144:LEU:HD12		9	



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1248)	1:A:144:LEU:HD13	1:A:145:GLU:H	9	0.88
(1,595)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD11	5	0.83
(1,595)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD12	5	0.83
(1,595)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD13	5	0.83
(1,1240)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD11	5	0.83
(1,1240)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD12	5	0.83
(1,1240)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD13	5	0.83
(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD11	12	0.58
(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD12	12	0.58
(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD13	12	0.58
(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD11	12	0.58
(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD12	12	0.58
(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD13	12	0.58
(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD11	12	0.58
(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD12	12	0.58
(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD13	12	0.58
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD11	12	0.58
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD12	12	0.58
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD13	12	0.58
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD11	12	0.58
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD12	12	0.58
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD13	12	0.58
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD11	12	0.58
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD12	12	0.58
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD13	12	0.58
(1,598)	1:A:110:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD11	15	0.57
(1,598)	1:A:110:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD12	15	0.57
(1,598)	1:A:110:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD13	15	0.57
(1,1243)	1:A:110:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD11	15	0.57
(1,1243)	1:A:110:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD12	15	0.57
(1,1243)	1:A:110:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD13	15	0.57
(1,596)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD21	18	0.56
(1,596)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD22	18	0.56
(1,596)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD23	18	0.56
(1,595)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD11	14	0.56
(1,595)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD12	14	0.56
(1,595)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD13	14	0.56
(1,1241)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD21	18	0.56
(1,1241)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD22	18	0.56
(1,1241)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD23	18	0.56
(1,1240)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD11	14	0.56
(1,1240)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD12	14	0.56



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1240)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD13	14	0.56
(1,595)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD11	9	0.55
(1,595)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD12	9	0.55
(1,595)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD13	9	0.55
(1,1240)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD11	9	0.55
(1,1240)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD12	9	0.55
(1,1240)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD13	9	0.55
(1,603)	1:A:144:LEU:HD11	1:A:145:GLU:H	1	0.54
(1,603)	1:A:144:LEU:HD12	1:A:145:GLU:H	1	0.54
(1,603)	1:A:144:LEU:HD13	1:A:145:GLU:H	1	0.54
(1,596)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD21	4	0.54
(1,596)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD22	4	0.54
(1,596)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD23	4	0.54
(1,1248)	1:A:144:LEU:HD11	1:A:145:GLU:H	1	0.54
(1,1248)	1:A:144:LEU:HD12	1:A:145:GLU:H	1	0.54
(1,1248)	1:A:144:LEU:HD13	1:A:145:GLU:H	1	0.54
(1,1241)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD21	4	0.54
(1,1241)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD22	4	0.54
(1,1241)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD23	4	0.54
(1,603)	1:A:144:LEU:HD11	1:A:145:GLU:H	11	0.51
(1,603)	1:A:144:LEU:HD12	1:A:145:GLU:H	11	0.51
(1,603)	1:A:144:LEU:HD13	1:A:145:GLU:H	11	0.51
(1,1248)	1:A:144:LEU:HD11	1:A:145:GLU:H	11	0.51
(1,1248)	1:A:144:LEU:HD12	1:A:145:GLU:H	11	0.51
(1,1248)	1:A:144:LEU:HD13	1:A:145:GLU:H	11	0.51
(1,601)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD11	19	0.49
(1,601)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD12	19	0.49
(1,601)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD13	19	0.49
(1,1246)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD11	19	0.49
(1,1246)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD12	19	0.49
(1,1246)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD13	19	0.49
(1,601)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD11	2	0.48
(1,601)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD12	2	0.48
(1,601)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD13	2	0.48
(1,572)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:141:PHE:H	8	0.48
(1,572)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:141:PHE:H	8	0.48
(1,572)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:141:PHE:H	8	0.48
(1,1246)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD11	2	0.48
(1,1246)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD12	2	0.48
(1,1246)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD13	2	0.48
(1,1217)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:141:PHE:H	8	0.48
(1,1217)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:141:PHE:H	8	0.48



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

(1,1217)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD21         5         0.44           (1,596)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD22         5         0.44           (1,596)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD23         5         0.44           (1,594)         1:A:22:ASN:HD21         1:A:12:LEU:HD23         5         0.44           (1,594)         1:A:22:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD21         5         0.44           (1,1241)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD22         5         0.44           (1,1241)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD23         5         0.44           (1,1241)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:12:LEU:HD23         5         0.44           (1,1231)         1:A:302:SER:H         1:A:306:ASP:H         17         0.43           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         1         0.43           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         1         0.43           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         1         0.43           (1,162)         1:A:302:SER:H         1:A:306:ASP:H         17         0.43           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21<	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,596)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD22         5         0.44           (1,596)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:12:LEU:HD23         5         0.44           (1,594)         1:A:22:ASN:HD21         1:A:12:LEU:HD21         5         0.44           (1,1241)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD22         5         0.44           (1,1241)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:12:LEU:HD23         5         0.44           (1,1241)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:12:LEU:HD23         5         0.44           (1,1239)         1:A:22:ASN:HD21         1:A:24:GLY:H         5         0.44           (1,807)         1:A:92:SER:H         1:A:96:ASP:H         17         0.43           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         1         0.43           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         1         0.43           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         1         0.43           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         1         0.43           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD12         1         0.43           (1,756)         1:A:104:ASN:HD21 <td>(1,1217)</td> <td>1:A:41:LEU:HD13</td> <td>1:A:141:PHE:H</td> <td>8</td> <td>0.48</td>	(1,1217)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:141:PHE:H	8	0.48
(1,596)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD23         5         0.44           (1,594)         1:A:22:ASN:HD21         1:A:24:GLY:H         5         0.44           (1,1241)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD21         5         0.44           (1,1241)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD23         5         0.44           (1,1241)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:12:LEU:HD13         5         0.44           (1,1239)         1:A:22:ASN:HD21         1:A:24:GLY:H         5         0.44           (1,807)         1:A:29:SER:H         1:A:96:ASP:H         17         0.43           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         1         0.43           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         1         0.43           (1,162)         1:A:29:SER:H         1:A:12:LEU:HD11         1         0.43           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         1         0.43           (1,240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         1         0.43           (1,756)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD22         2         0.42           (1,596)         1:A:104:ASN:HD21	(1,596)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD21	5	0.44
(1,594)         1:A:22:ASN:HD21         1:A:24:GLY:H         5         0.44           (1,1241)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD21         5         0.44           (1,1241)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD22         5         0.44           (1,1241)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD23         5         0.44           (1,1239)         1:A:22:ASN:HD21         1:A:24:GLY:H         5         0.44           (1,807)         1:A:92:SER:H         1:A:96:ASP:H         17         0.43           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         1         0.43           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD12         1         0.43           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         1         0.43           (1,162)         1:A:92:SER:H         1:A:96:ASP:H         17         0.43           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD12         1         0.43           (1,240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         1         0.43           (1,596)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD21         0.42           (1,596)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:H	(1,596)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD22	5	0.44
(1,1241) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD21 5 0.44 (1,1241) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD22 5 0.44 (1,1241) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD23 5 0.44 (1,1239) 1:A:22:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD23 5 0.44 (1,807) 1:A:92:SER:H 1:A:96:ASP:H 17 0.43 (1,595) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD11 1 0.43 (1,595) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD11 1 0.43 (1,595) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD12 1 0.43 (1,595) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD13 1 0.43 (1,1240) 1:A:92:SER:H 1:A:96:ASP:H 17 0.43 (1,1240) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD13 1 0.43 (1,1240) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD11 1 0.43 (1,1240) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD13 1 0.43 (1,1240) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD13 1 0.43 (1,1240) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD12 1 0.43 (1,1240) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD12 1 0.42 (1,596) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD22 2 0.42 (1,596) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD22 2 0.42 (1,1241) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD22 2 0.42 (1,1111) 1:A:92:SER:H 1:A:97:SER:H 7 0.42 (1,1341) 1:A:194:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD23 2 0.42 (1,1111) 1:A:92:SER:H 1:A:97:SER:H 5 0.41 (1,600) 1:A:142:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD23 2 0.42 (1,111) 1:A:92:SER:H 1:A:138:LEU:HD11 3 0.4 (1,408) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD13 3 0.4 (1,408) 1:A:41:LEU	(1,596)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD23	5	0.44
(1,1241)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD22         5         0.44           (1,1241)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD23         5         0.44           (1,1239)         1:A:22:ASN:HD21         1:A:24:GIY:H         5         0.44           (1,395)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:12:LEU:HD11         1         0.43           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD12         1         0.43           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         1         0.43           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         1         0.43           (1,162)         1:A:92:SER:H         1:A:96:ASP:H         17         0.43           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         1         0.43           (1,240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         1         0.43           (1,756)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         1         0.43           (1,596)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         1         0.42           (1,596)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD22         2         0.42           (1,596)         1:A:104:ASN:HD21 </td <td>(1,594)</td> <td>1:A:22:ASN:HD21</td> <td>1:A:24:GLY:H</td> <td>5</td> <td>0.44</td>	(1,594)	1:A:22:ASN:HD21	1:A:24:GLY:H	5	0.44
(1,1241)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD23         5         0.44           (1,1239)         1:A:22:ASN:HD21         1:A:24:GLY:H         5         0.44           (1,807)         1:A:29:SER:H         1:A:96:ASP:H         17         0.43           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD12         1         0.43           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         1         0.43           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         1         0.43           (1,162)         1:A:92:SER:H         1:A:96:ASP:H         17         0.43           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         1         0.43           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD12         1         0.43           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         1         0.43           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         1         0.43           (1,596)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD21         2         0.42           (1,596)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD22         2         0.42           (1,1241)         1:A:104:ASN:HD21	(1,1241)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD21	5	0.44
(1,1239)         1:A:22:ASN:HD21         1:A:24:GLY:H         5         0.44           (1,807)         1:A:92:SER:H         1:A:96:ASP:H         17         0.43           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         1         0.43           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         1         0.43           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         1         0.43           (1,162)         1:A:92:SER:H         1:A:96:ASP:H         17         0.43           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         1         0.43           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD12         1         0.43           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         1         0.43           (1,756)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD21         2         0.42           (1,596)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD22         2         0.42           (1,596)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD23         2         0.42           (1,1241)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD22         2         0.42           (1,1241)         1:A:104:ASN:HD21	(1,1241)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD22	5	0.44
(1,807)         1:A:92:SER:H         1:A:96:ASP:H         17         0.43           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         1         0.43           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD12         1         0.43           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         1         0.43           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         1         0.43           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         1         0.43           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD12         1         0.43           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         1         0.43           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD21         2         0.42           (1,596)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD21         2         0.42           (1,596)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD22         2         0.42           (1,1241)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD23         2         0.42           (1,1241)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD22         2         0.42           (1,1241)         1:A:104:A	(1,1241)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD23	5	0.44
(1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         1         0.43           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD12         1         0.43           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         1         0.43           (1,162)         1:A:92:SER:H         1:A:96:ASP:H         17         0.43           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         1         0.43           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         1         0.43           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         1         0.43           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         1         0.43           (1,756)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD21         2         0.42           (1,596)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD22         2         0.42           (1,596)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD23         2         0.42           (1,1241)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD22         2         0.42           (1,1241)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD23         2         0.42           (1,1241)         1:A:192:S	(1,1239)	1:A:22:ASN:HD21	1:A:24:GLY:H	5	0.44
(1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD12         1         0.43           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         1         0.43           (1,162)         1:A:92:SER:H         1:A:96:ASP:H         17         0.43           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         1         0.43           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD12         1         0.43           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         1         0.43           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         1         0.43           (1,756)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD21         2         0.42           (1,596)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD22         2         0.42           (1,596)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD23         2         0.42           (1,1241)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD22         2         0.42           (1,1241)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD22         2         0.42           (1,1241)         1:A:192:SER:H         1:A:192:SER:H         7         0.42           (1,111)         1:A:92:SER:H <td>(1,807)</td> <td>1:A:92:SER:H</td> <td>1:A:96:ASP:H</td> <td>17</td> <td>0.43</td>	(1,807)	1:A:92:SER:H	1:A:96:ASP:H	17	0.43
(1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         1         0.43           (1,162)         1:A:92:SER:H         1:A:96:ASP:H         17         0.43           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         1         0.43           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD12         1         0.43           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         1         0.43           (1,756)         1:A:92:SER:H         1:A:12:LEU:HD13         1         0.43           (1,756)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD21         2         0.42           (1,596)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD22         2         0.42           (1,596)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD23         2         0.42           (1,596)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD21         2         0.42           (1,1241)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD21         2         0.42           (1,1241)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD22         2         0.42           (1,1241)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD22         2         0.42           (1,1241)         1:A:134:ASN:HD	(1,595)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD11	1	0.43
(1,162)         1:A:92:SER:H         1:A:96:ASP:H         17         0.43           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         1         0.43           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD12         1         0.43           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         1         0.43           (1,756)         1:A:92:SER:H         1:A:97:SER:H         7         0.42           (1,596)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD21         2         0.42           (1,596)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD22         2         0.42           (1,596)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD23         2         0.42           (1,596)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD21         2         0.42           (1,596)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD22         2         0.42           (1,1241)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD22         2         0.42           (1,1241)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD23         2         0.42           (1,1241)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD23         2         0.42           (1,1241)         1:A:134:LEW:HD21<	(1,595)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD12	1	0.43
(1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         1         0.43           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD12         1         0.43           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         1         0.43           (1,756)         1:A:92:SER:H         1:A:97:SER:H         7         0.42           (1,596)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD21         2         0.42           (1,596)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD22         2         0.42           (1,596)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD23         2         0.42           (1,596)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD21         2         0.42           (1,241)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD22         2         0.42           (1,1241)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD23         2         0.42           (1,1241)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD23         2         0.42           (1,1241)         1:A:192:SER:H         1:A:97:SER:H         7         0.42           (1,1241)         1:A:43:SER:H         1:A:49:SER:H         7         0.42           (1,756)         1:A:49:SER:H	(1,595)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD13	1	0.43
(1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD12         1         0.43           (1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         1         0.43           (1,756)         1:A:92:SER:H         1:A:97:SER:H         7         0.42           (1,596)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD21         2         0.42           (1,596)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD23         2         0.42           (1,1241)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD21         2         0.42           (1,1241)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD22         2         0.42           (1,1241)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD23         2         0.42           (1,1241)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD23         2         0.42           (1,1241)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD23         2         0.42           (1,111)         1:A:92:SER:H         1:A:97:SER:H         7         0.42           (1,756)         1:A:12:ASN:H         1:A:142:ASN:HD21         2         0.41           (1,1245)         1:A:142:ASN:H         1:A:142:ASN:HD21         2         0.41           (1,1245)         1:A:2:12:EW:HD13	(1,162)	1:A:92:SER:H	1:A:96:ASP:H	17	0.43
(1,1240)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         1         0.43           (1,756)         1:A:92:SER:H         1:A:97:SER:H         7         0.42           (1,596)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD21         2         0.42           (1,596)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD22         2         0.42           (1,596)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD23         2         0.42           (1,1241)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD21         2         0.42           (1,1241)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD22         2         0.42           (1,1241)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD23         2         0.42           (1,1241)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD23         2         0.42           (1,111)         1:A:92:SER:H         1:A:97:SER:H         7         0.42           (1,756)         1:A:92:SER:H         1:A:142:ASN:HD21         2         0.41           (1,1245)         1:A:142:ASN:H         1:A:142:ASN:HD21         2         0.41           (1,111)         1:A:99:SER:H         1:A:97:SER:H         5         0.41           (1,1004)         1:A:41:LEU:HD11	(1,1240)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD11	1	0.43
(1,756)         1:A:92:SER:H         1:A:97:SER:H         7         0.42           (1,596)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD21         2         0.42           (1,596)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD22         2         0.42           (1,596)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD23         2         0.42           (1,1241)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD21         2         0.42           (1,1241)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD22         2         0.42           (1,1241)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD23         2         0.42           (1,1241)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD23         2         0.42           (1,111)         1:A:92:SER:H         1:A:112:LEU:HD23         2         0.42           (1,756)         1:A:92:SER:H         1:A:97:SER:H         7         0.42           (1,756)         1:A:142:ASN:H         1:A:142:ASN:HD21         2         0.41           (1,111)         1:A:192:SER:H         1:A:197:SER:H         5         0.41           (1,111)         1:A:292:SER:H         1:A:197:SER:H         5         0.41           (1,111)         1:A:292:SER:H         1:A:197:S	(1,1240)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD12	1	0.43
(1,596)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD21         2         0.42           (1,596)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD22         2         0.42           (1,596)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD23         2         0.42           (1,1241)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD21         2         0.42           (1,1241)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD22         2         0.42           (1,1241)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD23         2         0.42           (1,1241)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD23         2         0.42           (1,111)         1:A:292:SER:H         1:A:97:SER:H         7         0.42           (1,756)         1:A:92:SER:H         1:A:97:SER:H         5         0.41           (1,600)         1:A:142:ASN:H         1:A:142:ASN:HD21         2         0.41           (1,1245)         1:A:142:ASN:H         1:A:142:ASN:HD21         2         0.41           (1,111)         1:A:292:SER:H         1:A:97:SER:H         5         0.41           (1,245)         1:A:412:LEU:HD11         1:A:138:LEU:HD11         3         0.4           (1,408)         1:A:41:LEU:HD11	(1,1240)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD13	1	0.43
(1,596)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD22         2         0.42           (1,596)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD23         2         0.42           (1,1241)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD21         2         0.42           (1,1241)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD22         2         0.42           (1,1241)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD23         2         0.42           (1,111)         1:A:92:SER:H         1:A:97:SER:H         7         0.42           (1,756)         1:A:92:SER:H         1:A:97:SER:H         5         0.41           (1,600)         1:A:142:ASN:H         1:A:142:ASN:HD21         2         0.41           (1,1245)         1:A:142:ASN:H         1:A:142:ASN:HD21         2         0.41           (1,111)         1:A:92:SER:H         1:A:97:SER:H         5         0.41           (1,111)         1:A:292:SER:H         1:A:49:SER:H         5         0.41           (1,111)         1:A:292:SER:H         1:A:49:FER:H         5         0.41           (1,408)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:138:LEU:HD11         3         0.4           (1,408)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:138:LEU:HD13 </td <td>(1,756)</td> <td>1:A:92:SER:H</td> <td>1:A:97:SER:H</td> <td>7</td> <td>0.42</td>	(1,756)	1:A:92:SER:H	1:A:97:SER:H	7	0.42
(1,596)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD23         2         0.42           (1,1241)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD21         2         0.42           (1,1241)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD22         2         0.42           (1,1241)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD23         2         0.42           (1,111)         1:A:92:SER:H         1:A:97:SER:H         7         0.42           (1,756)         1:A:92:SER:H         1:A:142:ASN:HD21         2         0.41           (1,600)         1:A:142:ASN:H         1:A:142:ASN:HD21         2         0.41           (1,1245)         1:A:142:ASN:H         1:A:142:ASN:HD21         2         0.41           (1,111)         1:A:92:SER:H         1:A:97:SER:H         5         0.41           (1,111)         1:A:122:ASN:HD21         1:A:24:GLY:H         15         0.4           (1,408)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:138:LEU:HD11         3         0.4           (1,408)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:138:LEU:HD13         3         0.4           (1,408)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:138:LEU:HD13         3         0.4           (1,408)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:138:	(1,596)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD21	2	0.42
(1,1241)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD21         2         0.42           (1,1241)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD22         2         0.42           (1,1241)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD23         2         0.42           (1,111)         1:A:92:SER:H         1:A:97:SER:H         7         0.42           (1,756)         1:A:92:SER:H         1:A:97:SER:H         5         0.41           (1,600)         1:A:142:ASN:H         1:A:142:ASN:HD21         2         0.41           (1,1245)         1:A:142:ASN:H         1:A:142:ASN:HD21         2         0.41           (1,111)         1:A:92:SER:H         1:A:97:SER:H         5         0.41           (1,111)         1:A:92:SER:H         1:A:97:SER:H         5         0.41           (1,111)         1:A:92:ASN:HD21         1:A:24:GLY:H         15         0.4           (1,408)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:138:LEU:HD11         3         0.4           (1,408)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:138:LEU:HD11         3         0.4           (1,408)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:138:LEU:HD13         3         0.4           (1,408)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:138:LEU:HD13	(1,596)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD22	2	0.42
(1,1241)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD22         2         0.42           (1,1241)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD23         2         0.42           (1,111)         1:A:92:SER:H         1:A:97:SER:H         7         0.42           (1,756)         1:A:92:SER:H         1:A:97:SER:H         5         0.41           (1,600)         1:A:142:ASN:H         1:A:142:ASN:HD21         2         0.41           (1,1245)         1:A:142:ASN:H         1:A:142:ASN:HD21         2         0.41           (1,111)         1:A:92:SER:H         1:A:97:SER:H         5         0.41           (1,111)         1:A:92:SER:H         1:A:97:SER:H         5         0.41           (1,111)         1:A:92:SER:H         1:A:97:SER:H         5         0.41           (1,408)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:138:LEU:HD11         3         0.4           (1,408)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:138:LEU:HD13         3         0.4           (1,408)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:138:LEU:HD13         3         0.4           (1,408)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:138:LEU:HD13         3         0.4           (1,408)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:138:LEU:HD12	(1,596)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD23	2	0.42
(1,1241)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD23         2         0.42           (1,111)         1:A:92:SER:H         1:A:97:SER:H         7         0.42           (1,756)         1:A:92:SER:H         1:A:97:SER:H         5         0.41           (1,600)         1:A:142:ASN:H         1:A:142:ASN:HD21         2         0.41           (1,1245)         1:A:142:ASN:H         1:A:142:ASN:HD21         2         0.41           (1,111)         1:A:92:SER:H         1:A:97:SER:H         5         0.41           (1,594)         1:A:22:ASN:HD21         1:A:24:GLY:H         15         0.4           (1,408)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:138:LEU:HD11         3         0.4           (1,408)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:138:LEU:HD13         3         0.4           (1,408)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:138:LEU:HD11         3         0.4           (1,408)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:138:LEU:HD13         3         0.4           (1,408)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:138:LEU:HD11         3         0.4           (1,408)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:138:LEU:HD12         3         0.4           (1,408)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:138:LEU:HD12	(1,1241)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD21	2	0.42
(1,111)       1:A:92:SER:H       1:A:97:SER:H       7       0.42         (1,756)       1:A:92:SER:H       1:A:97:SER:H       5       0.41         (1,600)       1:A:142:ASN:H       1:A:142:ASN:HD21       2       0.41         (1,1245)       1:A:142:ASN:H       1:A:142:ASN:HD21       2       0.41         (1,111)       1:A:92:SER:H       1:A:97:SER:H       5       0.41         (1,594)       1:A:22:ASN:HD21       1:A:24:GLY:H       15       0.4         (1,408)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:138:LEU:HD11       3       0.4         (1,408)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:138:LEU:HD13       3       0.4         (1,408)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:138:LEU:HD11       3       0.4         (1,408)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:138:LEU:HD13       3       0.4         (1,408)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:138:LEU:HD11       3       0.4         (1,408)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:138:LEU:HD11       3       0.4         (1,408)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:138:LEU:HD13       3       0.4         (1,408)       1:A:24:CLU:HD13       1:A:138:LEU:HD13       3       0.4         (1,508)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:138:L	(1,1241)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD22	2	0.42
(1,756)         1:A:92:SER:H         1:A:97:SER:H         5         0.41           (1,600)         1:A:142:ASN:H         1:A:142:ASN:HD21         2         0.41           (1,1245)         1:A:142:ASN:H         1:A:142:ASN:HD21         2         0.41           (1,111)         1:A:92:SER:H         1:A:97:SER:H         5         0.41           (1,594)         1:A:22:ASN:HD21         1:A:24:GLY:H         15         0.4           (1,408)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:138:LEU:HD11         3         0.4           (1,408)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:138:LEU:HD13         3         0.4           (1,408)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:138:LEU:HD11         3         0.4           (1,408)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:138:LEU:HD13         3         0.4           (1,408)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:138:LEU:HD13         3         0.4           (1,408)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:138:LEU:HD11         3         0.4           (1,408)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:138:LEU:HD12         3         0.4           (1,408)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:138:LEU:HD13         3         0.4           (1,408)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:138:LEU:HD13 </td <td>(1,1241)</td> <td>1:A:104:ASN:HD21</td> <td>1:A:112:LEU:HD23</td> <td>2</td> <td>0.42</td>	(1,1241)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD23	2	0.42
(1,600)       1:A:142:ASN:H       1:A:142:ASN:HD21       2       0.41         (1,1245)       1:A:142:ASN:H       1:A:142:ASN:HD21       2       0.41         (1,111)       1:A:92:SER:H       1:A:97:SER:H       5       0.41         (1,594)       1:A:22:ASN:HD21       1:A:24:GLY:H       15       0.4         (1,408)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:138:LEU:HD11       3       0.4         (1,408)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:138:LEU:HD12       3       0.4         (1,408)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:138:LEU:HD11       3       0.4         (1,408)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:138:LEU:HD12       3       0.4         (1,408)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:138:LEU:HD13       3       0.4         (1,408)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:138:LEU:HD11       3       0.4         (1,408)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:138:LEU:HD12       3       0.4         (1,408)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:138:LEU:HD13       3       0.4         (1,408)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:138:LEU:HD13       3       0.4         (1,508)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:138:LEU:HD13       3       0.4         (1,508)       1:A:41:LEU:HD13       <	(1,111)	1:A:92:SER:H	1:A:97:SER:H	7	0.42
(1,1245)         1:A:142:ASN:H         1:A:142:ASN:HD21         2         0.41           (1,111)         1:A:92:SER:H         1:A:97:SER:H         5         0.41           (1,594)         1:A:22:ASN:HD21         1:A:24:GLY:H         15         0.4           (1,408)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:138:LEU:HD11         3         0.4           (1,408)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:138:LEU:HD12         3         0.4           (1,408)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:138:LEU:HD11         3         0.4           (1,408)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:138:LEU:HD12         3         0.4           (1,408)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:138:LEU:HD13         3         0.4           (1,408)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:138:LEU:HD11         3         0.4           (1,408)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:138:LEU:HD12         3         0.4           (1,408)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:138:LEU:HD13         3         0.4           (1,408)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:138:LEU:HD13         3         0.4           (1,408)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:138:LEU:HD13         3         0.4           (1,408)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:138:LEU	(1,756)	1:A:92:SER:H	1:A:97:SER:H	5	0.41
(1,111)       1:A:92:SER:H       1:A:97:SER:H       5       0.41         (1,594)       1:A:22:ASN:HD21       1:A:24:GLY:H       15       0.4         (1,408)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:138:LEU:HD11       3       0.4         (1,408)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:138:LEU:HD12       3       0.4         (1,408)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:138:LEU:HD11       3       0.4         (1,408)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:138:LEU:HD12       3       0.4         (1,408)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:138:LEU:HD13       3       0.4         (1,408)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:138:LEU:HD11       3       0.4         (1,408)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:138:LEU:HD12       3       0.4         (1,408)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:138:LEU:HD13       3       0.4         (1,408)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:138:LEU:HD13       3       0.4         (1,1053)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:24:GLY:H       15       0.4         (1,1053)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:138:LEU:HD11       3       0.4	(1,600)	1:A:142:ASN:H	1:A:142:ASN:HD21	2	0.41
(1,594)       1:A:22:ASN:HD21       1:A:24:GLY:H       15       0.4         (1,408)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:138:LEU:HD11       3       0.4         (1,408)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:138:LEU:HD12       3       0.4         (1,408)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:138:LEU:HD11       3       0.4         (1,408)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:138:LEU:HD12       3       0.4         (1,408)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:138:LEU:HD13       3       0.4         (1,408)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:138:LEU:HD11       3       0.4         (1,408)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:138:LEU:HD12       3       0.4         (1,408)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:138:LEU:HD13       3       0.4         (1,408)       1:A:24:GLY:HD13       1:A:24:GLY:H       15       0.4         (1,1053)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:138:LEU:HD11       3       0.4	(1,1245)	1:A:142:ASN:H	1:A:142:ASN:HD21	2	0.41
(1,408)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:138:LEU:HD11       3       0.4         (1,408)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:138:LEU:HD12       3       0.4         (1,408)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:138:LEU:HD13       3       0.4         (1,408)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:138:LEU:HD11       3       0.4         (1,408)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:138:LEU:HD13       3       0.4         (1,408)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:138:LEU:HD11       3       0.4         (1,408)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:138:LEU:HD12       3       0.4         (1,408)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:138:LEU:HD13       3       0.4         (1,408)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:138:LEU:HD13       3       0.4         (1,1039)       1:A:22:ASN:HD21       1:A:24:GLY:H       15       0.4         (1,1053)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:138:LEU:HD11       3       0.4	(1,111)	1:A:92:SER:H	1:A:97:SER:H	5	0.41
(1,408)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:138:LEU:HD12       3       0.4         (1,408)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:138:LEU:HD13       3       0.4         (1,408)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:138:LEU:HD11       3       0.4         (1,408)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:138:LEU:HD12       3       0.4         (1,408)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:138:LEU:HD11       3       0.4         (1,408)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:138:LEU:HD12       3       0.4         (1,408)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:138:LEU:HD13       3       0.4         (1,408)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:138:LEU:HD13       3       0.4         (1,1239)       1:A:22:ASN:HD21       1:A:24:GLY:H       15       0.4         (1,1053)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:138:LEU:HD11       3       0.4	(1,594)	1:A:22:ASN:HD21	1:A:24:GLY:H	15	0.4
(1,408)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:138:LEU:HD13       3       0.4         (1,408)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:138:LEU:HD11       3       0.4         (1,408)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:138:LEU:HD12       3       0.4         (1,408)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:138:LEU:HD13       3       0.4         (1,408)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:138:LEU:HD11       3       0.4         (1,408)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:138:LEU:HD12       3       0.4         (1,408)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:138:LEU:HD13       3       0.4         (1,1239)       1:A:22:ASN:HD21       1:A:24:GLY:H       15       0.4         (1,1053)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:138:LEU:HD11       3       0.4	(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD11	3	0.4
(1,408)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:138:LEU:HD11       3       0.4         (1,408)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:138:LEU:HD12       3       0.4         (1,408)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:138:LEU:HD13       3       0.4         (1,408)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:138:LEU:HD11       3       0.4         (1,408)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:138:LEU:HD12       3       0.4         (1,408)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:138:LEU:HD13       3       0.4         (1,1239)       1:A:22:ASN:HD21       1:A:24:GLY:H       15       0.4         (1,1053)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:138:LEU:HD11       3       0.4	(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD12	3	0.4
(1,408)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:138:LEU:HD12       3       0.4         (1,408)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:138:LEU:HD13       3       0.4         (1,408)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:138:LEU:HD11       3       0.4         (1,408)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:138:LEU:HD12       3       0.4         (1,408)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:138:LEU:HD13       3       0.4         (1,1239)       1:A:22:ASN:HD21       1:A:24:GLY:H       15       0.4         (1,1053)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:138:LEU:HD11       3       0.4	(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD13	3	0.4
(1,408)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:138:LEU:HD12       3       0.4         (1,408)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:138:LEU:HD13       3       0.4         (1,408)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:138:LEU:HD11       3       0.4         (1,408)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:138:LEU:HD12       3       0.4         (1,408)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:138:LEU:HD13       3       0.4         (1,1239)       1:A:22:ASN:HD21       1:A:24:GLY:H       15       0.4         (1,1053)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:138:LEU:HD11       3       0.4	(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD11	3	0.4
(1,408)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:138:LEU:HD11       3       0.4         (1,408)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:138:LEU:HD12       3       0.4         (1,408)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:138:LEU:HD13       3       0.4         (1,1239)       1:A:22:ASN:HD21       1:A:24:GLY:H       15       0.4         (1,1053)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:138:LEU:HD11       3       0.4		1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD12	3	0.4
(1,408)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:138:LEU:HD12       3       0.4         (1,408)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:138:LEU:HD13       3       0.4         (1,1239)       1:A:22:ASN:HD21       1:A:24:GLY:H       15       0.4         (1,1053)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:138:LEU:HD11       3       0.4	(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD13	3	0.4
(1,408)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:138:LEU:HD12       3       0.4         (1,408)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:138:LEU:HD13       3       0.4         (1,1239)       1:A:22:ASN:HD21       1:A:24:GLY:H       15       0.4         (1,1053)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:138:LEU:HD11       3       0.4		1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD11	3	0.4
(1,1239)       1:A:22:ASN:HD21       1:A:24:GLY:H       15       0.4         (1,1053)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:138:LEU:HD11       3       0.4		1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD12	3	0.4
(1,1053) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD11 3 0.4	(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD13	3	0.4
		1:A:22:ASN:HD21	1:A:24:GLY:H	15	0.4
(1.1052) 1.4.41.1 EU.HD11 1.4.120 LEH HD10 2	(1,1053)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD11	3	0.4
(1,1003)   1:A:41:LEU:HD11   1:A:138:LEU:HD12   3   0.4	(1,1053)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD12	3	0.4



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD13	3	0.4
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD11	3	0.4
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD12	3	0.4
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD13	3	0.4
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD11	3	0.4
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD12	3	0.4
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD13	3	0.4
(1,600)	1:A:142:ASN:H	1:A:142:ASN:HD21	15	0.39
(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD11	18	0.39
(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD12	18	0.39
(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD13	18	0.39
(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD11	18	0.39
(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD12	18	0.39
(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD13	18	0.39
(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD11	18	0.39
(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD12	18	0.39
(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD13	18	0.39
(1,1245)	1:A:142:ASN:H	1:A:142:ASN:HD21	15	0.39
	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD11	18	0.39
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD12	18	0.39
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD13	18	0.39
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD11	18	0.39
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD12	18	0.39
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD13	18	0.39
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD11	18	0.39
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD12	18	0.39
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD13	18	0.39
(1,685)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:97:SER:H	20	0.37
(1,685)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:97:SER:H	20	0.37
(1,685)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:97:SER:H	20	0.37
(1,601)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD11	14	0.37
(1,601)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD12	14	0.37
(1,601)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD13	14	0.37
(1,596)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD21	12	0.37
(1,596)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD22	12	0.37
(1,596)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD23	12	0.37
(1,572)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:141:PHE:H	9	0.37
(1,572)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:141:PHE:H	9	0.37
(1,572)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:141:PHE:H	9	0.37
(1,451)	1:A:75:VAL:HG11	1:A:91:ARG:H	17	0.37
(1,451)	1:A:75:VAL:HG12	1:A:91:ARG:H	17	0.37
(1,451)	1:A:75:VAL:HG13	1:A:91:ARG:H	17	0.37



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD21	19	0.37
(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD22	19	0.37
(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD23	19	0.37
(1,40)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:97:SER:H	20	0.37
(1,40)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:97:SER:H	20	0.37
(1,40)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:97:SER:H	20	0.37
(1,1246)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD11	14	0.37
(1,1246)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD12	14	0.37
(1,1246)	1:A:142:ASN:HD21	1:A:144:LEU:HD13	14	0.37
(1,1241)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD21	12	0.37
(1,1241)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD22	12	0.37
(1,1241)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD23	12	0.37
(1,1217)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:141:PHE:H	9	0.37
(1,1217)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:141:PHE:H	9	0.37
(1,1217)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:141:PHE:H	9	0.37
(1,1096)	1:A:75:VAL:HG11	1:A:91:ARG:H	17	0.37
(1,1096)	1:A:75:VAL:HG12	1:A:91:ARG:H	17	0.37
(1,1096)	1:A:75:VAL:HG13	1:A:91:ARG:H	17	0.37
(1,1064)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD21	19	0.37
(1,1064)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD22	19	0.37
(1,1064)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD23	19	0.37
(1,880)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:13:ASN:HD21	9	0.36
(1,880)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:13:ASN:HD21	9	0.36
(1,880)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:13:ASN:HD21	9	0.36
(1,595)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD11	15	0.36
(1,595)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD12	15	0.36
(1,595)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD13	15	0.36
(1,550)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG21	11	0.36
(1,550)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG22	11	0.36
(1,550)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG23	11	0.36
(1,235)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:13:ASN:HD21	9	0.36
(1,235)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:13:ASN:HD21	9	0.36
(1,235)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:13:ASN:HD21	9	0.36
(1,1240)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD11	15	0.36
(1,1240)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD12	15	0.36
(1,1240)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD13	15	0.36
(1,1195)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG21	11	0.36
(1,1195)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG22	11	0.36
(1,1195)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG23	11	0.36
(1,593)	1:A:22:ASN:HD21	1:A:23:ASN:H	1	0.35
(1,453)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG21	6	0.35
(1,453)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG22	6	0.35



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,453)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG23	6	0.35
(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD11	13	0.35
(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD12	13	0.35
(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD13	13	0.35
(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD11	13	0.35
(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD12	13	0.35
(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD13	13	0.35
(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD11	13	0.35
(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD12	13	0.35
(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD13	13	0.35
(1,1238)	1:A:22:ASN:HD21	1:A:23:ASN:H	1	0.35
(1,1098)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG21	6	0.35
(1,1098)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG22	6	0.35
(1,1098)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG23	6	0.35
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD11	13	0.35
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD12	13	0.35
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD13	13	0.35
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD11	13	0.35
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD12	13	0.35
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD13	13	0.35
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD11	13	0.35
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD12	13	0.35
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD13	13	0.35
(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD11	4	0.34
(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD12	4	0.34
(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD13	4	0.34
(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD11	4	0.34
(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD12	4	0.34
(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD13	4	0.34
(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD11	4	0.34
(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD12	4	0.34
(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD13	4	0.34
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD11	4	0.34
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD12	4	0.34
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD13	4	0.34
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD11	4	0.34
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD12	4	0.34
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD13	4	0.34
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD11	4	0.34
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD12	4	0.34
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD13	4	0.34
(1,698)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD21	16	0.33



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,698)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD22	16	0.33
(1,698)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD23	16	0.33
(1,572)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:141:PHE:H	10	0.33
(1,572)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:141:PHE:H	10	0.33
(1,572)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:141:PHE:H	10	0.33
(1,568)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:140:LEU:H	10	0.33
(1,568)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:140:LEU:H	10	0.33
(1,568)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:140:LEU:H	10	0.33
(1,53)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD21	16	0.33
(1,53)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD22	16	0.33
(1,53)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD23	16	0.33
(1,1217)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:141:PHE:H	10	0.33
(1,1217)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:141:PHE:H	10	0.33
(1,1217)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:141:PHE:H	10	0.33
(1,1213)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:140:LEU:H	10	0.33
(1,1213)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:140:LEU:H	10	0.33
(1,1213)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:140:LEU:H	10	0.33
(1,678)	1:A:92:SER:H	1:A:99:LEU:HD11	17	0.32
(1,678)	1:A:92:SER:H	1:A:99:LEU:HD12	17	0.32
(1,678)	1:A:92:SER:H	1:A:99:LEU:HD13	17	0.32
(1,493)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:52:PHE:H	14	0.32
(1,493)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:52:PHE:H	14	0.32
(1,493)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:52:PHE:H	14	0.32
(1,454)	1:A:134:TYR:H	1:A:138:LEU:HD21	14	0.32
(1,454)	1:A:134:TYR:H	1:A:138:LEU:HD22	14	0.32
(1,454)	1:A:134:TYR:H	1:A:138:LEU:HD23	14	0.32
(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD11	5	0.32
(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD12	5	0.32
(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD13	5	0.32
(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD11	5	0.32
(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD12	5	0.32
(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD13	5	0.32
(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD11	5	0.32
(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD12	5	0.32
(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD13	5	0.32
(1,33)	1:A:92:SER:H	1:A:99:LEU:HD11	17	0.32
(1,33)	1:A:92:SER:H	1:A:99:LEU:HD12	17	0.32
(1,33)	1:A:92:SER:H	1:A:99:LEU:HD13	17	0.32
(1,1138)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:52:PHE:H	14	0.32
(1,1138)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:52:PHE:H	14	0.32
(1,1138)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:52:PHE:H	14	0.32
(1,1099)	1:A:134:TYR:H	1:A:138:LEU:HD21	14	0.32



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1099)	1:A:134:TYR:H	1:A:138:LEU:HD22	14	0.32
(1,1099)	1:A:134:TYR:H	1:A:138:LEU:HD23	14	0.32
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD11	5	0.32
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD12	5	0.32
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD13	5	0.32
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD11	5	0.32
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD12	5	0.32
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD13	5	0.32
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD11	5	0.32
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD12	5	0.32
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD13	5	0.32
(1,893)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD11	7	0.31
(1,893)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD12	7	0.31
(1,893)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD13	7	0.31
(1,644)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD11	20	0.31
(1,644)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD12	20	0.31
(1,644)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD13	20	0.31
(1,497)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:H	3	0.31
(1,497)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:H	3	0.31
(1,497)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:H	3	0.31
(1,377)	1:A:134:TYR:H	1:A:135:GLU:H	5	0.31
(1,248)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD11	7	0.31
(1,248)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD12	7	0.31
(1,248)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD13	7	0.31
(1,1289)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD11	20	0.31
(1,1289)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD12	20	0.31
(1,1289)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD13	20	0.31
(1,1142)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:H	3	0.31
(1,1142)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:H	3	0.31
(1,1142)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:H	3	0.31
(1,1022)	1:A:134:TYR:H	1:A:135:GLU:H	5	0.31
(1,998)	1:A:104:ASN:H	1:A:106:GLY:H	15	0.3
(1,98)	1:A:31:ASN:H	1:A:34:TRP:H	6	0.3
(1,954)	1:A:33:TYR:H	1:A:36:HIS:H	6	0.3
(1,743)	1:A:31:ASN:H	1:A:34:TRP:H	6	0.3
(1,493)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:52:PHE:H	6	0.3
(1,493)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:52:PHE:H	6	0.3
(1,493)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:52:PHE:H	6	0.3
(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD21	12	0.3
(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD22	12	0.3
(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD23	12	0.3
(1,353)	1:A:104:ASN:H	1:A:106:GLY:H	15	0.3



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

(1,1309)         1:A:33:TYR:H         1:A:36:HIS:H         6         0.3           (1,1138)         1:A:43:VAL:HG11         1:A:52:PHE:H         6         0.3           (1,1138)         1:A:43:VAL:HG12         1:A:52:PHE:H         6         0.3           (1,1138)         1:A:43:VAL:HG13         1:A:52:PHE:H         6         0.3           (1,1064)         1:A:120:ALA:H         1:A:121:LEU:HD21         12         0.3           (1,1064)         1:A:120:ALA:H         1:A:121:LEU:HD22         12         0.3           (1,1064)         1:A:120:ALA:H         1:A:121:LEU:HD22         12         0.3           (1,1064)         1:A:120:ALA:H         1:A:121:LEU:HD23         12         0.3           (1,904)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:51:LEU:HD13         18         0.29           (1,901)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:51:LEU:HD12         18         0.29           (1,901)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:51:LEU:HD13         18         0.29           (1,901)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD12         18         0.29           (1,901)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD13         18         0.29           (1,901)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:H	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1138)         1:A:43:VAL:HG12         1:A:52:PHE:H         6         0.3           (1,1138)         1:A:43:VAL:HG13         1:A:52:PHE:H         6         0.3           (1,1064)         1:A:120:ALA:H         1:A:121:LEU:HD21         12         0.3           (1,1064)         1:A:120:ALA:H         1:A:121:LEU:HD22         12         0.3           (1,1064)         1:A:120:ALA:H         1:A:121:LEU:HD23         12         0.3           (1,1064)         1:A:120:ALA:H         1:A:121:LEU:HD22         12         0.3           (1,1064)         1:A:120:ALA:H         1:A:121:LEU:HD13         18         0.29           (1,901)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:51:LEU:HD11         18         0.29           (1,901)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:51:LEU:HD11         18         0.29           (1,901)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD11         18         0.29           (1,901)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:	(1,309)	1:A:33:TYR:H	1:A:36:HIS:H	6	0.3
(1,1138)         1:A:43:VAL:HG13         1:A:52:PHE:H         6         0.3           (1,1064)         1:A:120:ALA:H         1:A:121:LEU:HD21         12         0.3           (1,1064)         1:A:120:ALA:H         1:A:121:LEU:HD22         12         0.3           (1,1064)         1:A:120:ALA:H         1:A:121:LEU:HD23         12         0.3           (1,904)         1:A:29:SER:H         1:A:51:LEU:HD12         12         0.3           (1,904)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:51:LEU:HD11         18         0.29           (1,901)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:51:LEU:HD12         18         0.29           (1,901)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:51:LEU:HD13         18         0.29           (1,901)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:51:LEU:HD11         18         0.29           (1,901)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:51:LEU:HD13         18         0.29           (1,901)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD11         18         0.29           (1,901)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD13         18         0.29           (1,901)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD13         18         0.29           (1,901)         1:A:46:VAL:HG23	(1,1138)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:52:PHE:H	6	0.3
(1,1064) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD21 12 0.3 (1,1064) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD22 12 0.3 (1,1064) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD23 12 0.3 (1,984) 1:A:92:SER:H 1:A:98:HIS:H 10 0.29 (1,991) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD11 18 0.29 (1,901) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD12 18 0.29 (1,901) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD13 18 0.29 (1,901) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD13 18 0.29 (1,901) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD11 18 0.29 (1,901) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD11 18 0.29 (1,901) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD13 18 0.29 (1,901) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 18 0.29 (1,901) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD11 18 0.29 (1,901) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD11 18 0.29 (1,901) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD12 18 0.29 (1,901) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD12 18 0.29 (1,601) 1:A:90:VAL:HG31 1:A:99:LEU:HD12 17 0.29 (1,630) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD21 17 0.29 (1,630) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD21 17 0.29 (1,630) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD21 17 0.29 (1,630) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:99:LEU:HD21 17 0.29 (1,630) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:99:LEU:HD21 17 0.29 (1,630) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:99:LEU:HD21 17 0.29 (1,630) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD22 17 0.29 (1,630) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD21 17 0.29 (1,630) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD22 17 0.29 (1,630) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD23 17 0.29 (1,630) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD21 17 0.29 (1,630) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD21 17 0.29 (1,630) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD22 16 0.29 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD23 16 0.29 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD23 16 0.29 (1,411) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LE	(1,1138)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:52:PHE:H	6	0.3
(1,1064)         1:A:120:ALA:H         1:A:121:LEU:HD22         12         0.3           (1,1064)         1:A:120:ALA:H         1:A:121:LEU:HD23         12         0.3           (1,984)         1:A:92:SER:H         1:A:98:HIS:H         10         0.29           (1,901)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:51:LEU:HD11         18         0.29           (1,901)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:51:LEU:HD13         18         0.29           (1,901)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:51:LEU:HD11         18         0.29           (1,901)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:51:LEU:HD11         18         0.29           (1,901)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:51:LEU:HD11         18         0.29           (1,901)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:51:LEU:HD12         18         0.29           (1,901)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD13         18         0.29           (1,901)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD12         18         0.29           (1,901)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD12         18         0.29           (1,901)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD12         18         0.29           (1,901)         1:A:46:VAL:HG23         <	(1,1138)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:52:PHE:H	6	0.3
(1,1064)         1:A:120:ALA:H         1:A:121:LEU:HD23         12         0.3           (1,984)         1:A:92:SER:H         1:A:98:HIS:H         10         0.29           (1,901)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:51:LEU:HD11         18         0.29           (1,901)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:51:LEU:HD13         18         0.29           (1,901)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:51:LEU:HD11         18         0.29           (1,901)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:51:LEU:HD12         18         0.29           (1,901)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:51:LEU:HD12         18         0.29           (1,901)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:51:LEU:HD13         18         0.29           (1,901)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD11         18         0.29           (1,901)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD12         18         0.29           (1,901)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD13         18         0.29           (1,901)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD12         18         0.29           (1,901)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD13         18         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13	(1,1064)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD21	12	0.3
(1,984)         1:A:92:SER:H         1:A:98:HIS:H         10         0.29           (1,901)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:51:LEU:HD11         18         0.29           (1,901)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:51:LEU:HD12         18         0.29           (1,901)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:51:LEU:HD11         18         0.29           (1,901)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:51:LEU:HD11         18         0.29           (1,901)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:51:LEU:HD13         18         0.29           (1,901)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD13         18         0.29           (1,901)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD13         18         0.29           (1,901)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD12         18         0.29           (1,901)         1:A:49:LEU:HD23         17         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD22	(1,1064)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD22	12	0.3
(1,901)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:51:LEU:HD11         18         0.29           (1,901)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:51:LEU:HD12         18         0.29           (1,901)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:51:LEU:HD13         18         0.29           (1,901)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:51:LEU:HD11         18         0.29           (1,901)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:51:LEU:HD13         18         0.29           (1,901)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD11         18         0.29           (1,901)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD11         18         0.29           (1,901)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD12         18         0.29           (1,630)         1:A:490:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD12         17         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG11	(1,1064)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD23	12	0.3
(1,901)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:51:LEU:HD12         18         0.29           (1,901)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:51:LEU:HD13         18         0.29           (1,901)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:51:LEU:HD11         18         0.29           (1,901)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:51:LEU:HD12         18         0.29           (1,901)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD13         18         0.29           (1,901)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD11         18         0.29           (1,901)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD12         18         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:57:LEU:HD21         17         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD22         17         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG12	(1,984)	1:A:92:SER:H	1:A:98:HIS:H	10	0.29
(1,901)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:51:LEU:HD13         18         0.29           (1,901)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:51:LEU:HD11         18         0.29           (1,901)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:51:LEU:HD12         18         0.29           (1,901)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:51:LEU:HD13         18         0.29           (1,901)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD11         18         0.29           (1,901)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD12         18         0.29           (1,901)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD13         18         0.29           (1,901)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD12         18         0.29           (1,901)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD13         18         0.29           (1,901)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD13         18         0.29           (1,630)         1:A:49:VAL:HG13         1:A:59:LEU:HD21         17         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD23         17         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD21         17         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13	(1,901)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD11	18	0.29
(1,901)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:51:LEU:HD11         18         0.29           (1,901)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:51:LEU:HD12         18         0.29           (1,901)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:51:LEU:HD13         18         0.29           (1,901)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD11         18         0.29           (1,901)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD12         18         0.29           (1,901)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD13         18         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD21         17         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD23         17         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD22         17         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD21         17         0.29           (1,630)         1:A:490:VAL:HG13	(1,901)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD12	18	0.29
(1,901)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:51:LEU:HD12         18         0.29           (1,901)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:51:LEU:HD13         18         0.29           (1,901)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD11         18         0.29           (1,901)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD12         18         0.29           (1,901)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD13         18         0.29           (1,708)         1:A:54:SER:HG         1:A:57:LYS:H         11         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD21         17         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD22         17         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD23         17         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD21         17         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD22         17         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD21         17         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD22         17         0.29           (1,630)         1:A:135:GLU:H	(1,901)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD13	18	0.29
(1,901)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:51:LEU:HD13         18         0.29           (1,901)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD11         18         0.29           (1,901)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD12         18         0.29           (1,901)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD13         18         0.29           (1,708)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:57:LYS:H         11         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD21         17         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD22         17         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD23         17         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD21         17         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD22         17         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD23         17         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD21         17         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD22         17         0.29           (1,630)         1:A:135:GLU:H	(1,901)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD11	18	0.29
(1,901)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD11         18         0.29           (1,901)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD12         18         0.29           (1,901)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD13         18         0.29           (1,708)         1:A:54:SER:HG         1:A:57:LYS:H         11         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD21         17         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD22         17         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD23         17         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD21         17         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD22         17         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD23         17         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD21         17         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD22         17         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD22         17         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13	(1,901)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD12	18	0.29
(1,901)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD12         18         0.29           (1,901)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD13         18         0.29           (1,708)         1:A:54:SER:HG         1:A:57:LYS:H         11         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD21         17         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD22         17         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD23         17         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD22         17         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD23         17         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD23         17         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD21         17         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD22         17         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD22         17         0.29           (1,630)         1:A:135:GLU:H         1:A:135:FLU:HD23         17         0.29           (1,630)         1:A:135:GLU:H         <	(1,901)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD13	18	0.29
(1,901)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD13         18         0.29           (1,708)         1:A:54:SER:HG         1:A:57:LYS:H         11         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD21         17         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD22         17         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD23         17         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD21         17         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD22         17         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD23         17         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD21         17         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD22         17         0.29           (1,630)         1:A:54:SER:HG         1:A:57:LYS:H         11         0.29           (1,630)         1:A:135:GLU:H         1:A:138:LEU:HD23         17         0.29           (1,562)         1:A:135:GLU:H         1:A:138:LEU:HD21         13         0.29           (1,562)         1:A:135:GLU:H         1:A	(1,901)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD11	18	0.29
(1,708)         1:A:54:SER:HG         1:A:57:LYS:H         11         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD21         17         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD22         17         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD23         17         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD21         17         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD22         17         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD23         17         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD21         17         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD22         17         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD23         17         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD23         17         0.29           (1,630)         1:A:135:GLU:H         1:A:138:LEU:HD23         17         0.29           (1,630)         1:A:135:GLU:H         1:A:138:LEU:HD21         13         0.29           (1,630)         1:A:135:GLU:H <t< td=""><td>(1,901)</td><td>1:A:46:VAL:HG23</td><td>1:A:51:LEU:HD12</td><td>18</td><td>0.29</td></t<>	(1,901)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD12	18	0.29
(1,630)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD21         17         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD22         17         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD23         17         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD21         17         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD22         17         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD21         17         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD22         17         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD23         17         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD23         17         0.29           (1,630)         1:A:135:GLU:H         1:A:55:LYS:H         11         0.29           (1,630)         1:A:135:GLU:H         1:A:138:LEU:HD21         13         0.29           (1,630)         1:A:135:GLU:H         1:A:138:LEU:HD22         13         0.29           (1,630)         1:A:135:GLU:H         1:A:138:LEU:HD22         13         0.29           (1,562)         1:A:135:GLU:H <td< td=""><td>(1,901)</td><td>1:A:46:VAL:HG23</td><td>1:A:51:LEU:HD13</td><td>18</td><td>0.29</td></td<>	(1,901)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD13	18	0.29
(1,630)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD21         17         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD22         17         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD23         17         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD21         17         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD22         17         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD21         17         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD22         17         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD23         17         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD23         17         0.29           (1,630)         1:A:135:GLU:H         1:A:55:LYS:H         11         0.29           (1,630)         1:A:135:GLU:H         1:A:138:LEU:HD21         13         0.29           (1,630)         1:A:135:GLU:H         1:A:138:LEU:HD22         13         0.29           (1,630)         1:A:135:GLU:H         1:A:138:LEU:HD22         13         0.29           (1,562)         1:A:135:GLU:H <td< td=""><td>(1,708)</td><td>1:A:54:SER:HG</td><td>1:A:57:LYS:H</td><td>11</td><td>0.29</td></td<>	(1,708)	1:A:54:SER:HG	1:A:57:LYS:H	11	0.29
(1,630)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD23         17         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD21         17         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD22         17         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD23         17         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD21         17         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD22         17         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD23         17         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD23         17         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD23         17         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD21         13         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD21         13         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD21         13         0.29           (1,630)         1:A:135:GLU:H         1:A:138:LEU:HD23         13         0.29           (1,562)         1:A:135:GLU:H	(1,630)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD21	17	0.29
(1,630)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD21         17         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD22         17         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD23         17         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD21         17         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD22         17         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD23         17         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD21         13         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD21         13         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD21         13         0.29           (1,630)         1:A:135:GLU:H         1:A:138:LEU:HD21         13         0.29           (1,562)         1:A:135:GLU:H	(1,630)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD22	17	0.29
(1,630)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD22         17         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD23         17         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD21         17         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD22         17         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD23         17         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD23         17         0.29           (1,63)         1:A:454:SER:HG         1:A:57:LYS:H         11         0.29           (1,562)         1:A:135:GLU:H         1:A:138:LEU:HD21         13         0.29           (1,562)         1:A:135:GLU:H         1:A:138:LEU:HD22         13         0.29           (1,562)         1:A:135:GLU:H         1:A:138:LEU:HD23         13         0.29           (1,411)         1:A:129:LEU:HD11         1:A:138:LEU:HD21         16         0.29           (1,411)         1:A:129:LEU:HD11         1:A:138:LEU:HD23         16         0.29           (1,411)         1:A:129:LEU:HD12         1:A:138:LEU:HD22         16         0.29           (1,411)         1:A:129:LEU:HD12	(1,630)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD23	17	0.29
(1,630)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD23         17         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD21         17         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD22         17         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD23         17         0.29           (1,63)         1:A:54:SER:HG         1:A:57:LYS:H         11         0.29           (1,562)         1:A:135:GLU:H         1:A:138:LEU:HD21         13         0.29           (1,562)         1:A:135:GLU:H         1:A:138:LEU:HD22         13         0.29           (1,562)         1:A:135:GLU:H         1:A:138:LEU:HD23         13         0.29           (1,411)         1:A:129:LEU:HD11         1:A:138:LEU:HD21         16         0.29           (1,411)         1:A:129:LEU:HD11         1:A:138:LEU:HD23         16         0.29           (1,411)         1:A:129:LEU:HD12         1:A:138:LEU:HD21         16         0.29           (1,411)         1:A:129:LEU:HD12         1:A:138:LEU:HD22         16         0.29           (1,411)         1:A:129:LEU:HD12         1:A:138:LEU:HD22         16         0.29           (1,411)         1:A:129:LEU:HD12	(1,630)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD21	17	0.29
(1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD21         17         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD22         17         0.29           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD23         17         0.29           (1,63)         1:A:54:SER:HG         1:A:57:LYS:H         11         0.29           (1,562)         1:A:135:GLU:H         1:A:138:LEU:HD21         13         0.29           (1,562)         1:A:135:GLU:H         1:A:138:LEU:HD22         13         0.29           (1,562)         1:A:135:GLU:H         1:A:138:LEU:HD23         13         0.29           (1,411)         1:A:129:LEU:HD11         1:A:138:LEU:HD21         16         0.29           (1,411)         1:A:129:LEU:HD11         1:A:138:LEU:HD23         16         0.29           (1,411)         1:A:129:LEU:HD12         1:A:138:LEU:HD21         16         0.29           (1,411)         1:A:129:LEU:HD12         1:A:138:LEU:HD22         16         0.29           (1,411)         1:A:129:LEU:HD12         1:A:138:LEU:HD23         16         0.29           (1,411)         1:A:129:LEU:HD12         1:A:138:LEU:HD23         16         0.29	(1,630)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD22	17	0.29
(1,630)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD22       17       0.29         (1,630)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD23       17       0.29         (1,63)       1:A:54:SER:HG       1:A:57:LYS:H       11       0.29         (1,562)       1:A:135:GLU:H       1:A:138:LEU:HD21       13       0.29         (1,562)       1:A:135:GLU:H       1:A:138:LEU:HD22       13       0.29         (1,562)       1:A:135:GLU:H       1:A:138:LEU:HD23       13       0.29         (1,411)       1:A:129:LEU:HD11       1:A:138:LEU:HD21       16       0.29         (1,411)       1:A:129:LEU:HD11       1:A:138:LEU:HD23       16       0.29         (1,411)       1:A:129:LEU:HD12       1:A:138:LEU:HD21       16       0.29         (1,411)       1:A:129:LEU:HD12       1:A:138:LEU:HD22       16       0.29         (1,411)       1:A:129:LEU:HD12       1:A:138:LEU:HD22       16       0.29         (1,411)       1:A:129:LEU:HD12       1:A:138:LEU:HD23       16       0.29         (1,411)       1:A:129:LEU:HD12       1:A:138:LEU:HD23       16       0.29	(1,630)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD23	17	0.29
(1,630)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD23       17       0.29         (1,63)       1:A:54:SER:HG       1:A:57:LYS:H       11       0.29         (1,562)       1:A:135:GLU:H       1:A:138:LEU:HD21       13       0.29         (1,562)       1:A:135:GLU:H       1:A:138:LEU:HD22       13       0.29         (1,562)       1:A:135:GLU:H       1:A:138:LEU:HD23       13       0.29         (1,411)       1:A:129:LEU:HD11       1:A:138:LEU:HD21       16       0.29         (1,411)       1:A:129:LEU:HD11       1:A:138:LEU:HD23       16       0.29         (1,411)       1:A:129:LEU:HD12       1:A:138:LEU:HD21       16       0.29         (1,411)       1:A:129:LEU:HD12       1:A:138:LEU:HD22       16       0.29         (1,411)       1:A:129:LEU:HD12       1:A:138:LEU:HD23       16       0.29         (1,411)       1:A:129:LEU:HD12       1:A:138:LEU:HD23       16       0.29	(1,630)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD21	17	0.29
(1,63)       1:A:54:SER:HG       1:A:57:LYS:H       11       0.29         (1,562)       1:A:135:GLU:H       1:A:138:LEU:HD21       13       0.29         (1,562)       1:A:135:GLU:H       1:A:138:LEU:HD22       13       0.29         (1,562)       1:A:135:GLU:H       1:A:138:LEU:HD23       13       0.29         (1,411)       1:A:129:LEU:HD11       1:A:138:LEU:HD21       16       0.29         (1,411)       1:A:129:LEU:HD11       1:A:138:LEU:HD23       16       0.29         (1,411)       1:A:129:LEU:HD12       1:A:138:LEU:HD21       16       0.29         (1,411)       1:A:129:LEU:HD12       1:A:138:LEU:HD22       16       0.29         (1,411)       1:A:129:LEU:HD12       1:A:138:LEU:HD23       16       0.29         (1,411)       1:A:129:LEU:HD12       1:A:138:LEU:HD23       16       0.29	(1,630)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD22	17	0.29
(1,562)       1:A:135:GLU:H       1:A:138:LEU:HD21       13       0.29         (1,562)       1:A:135:GLU:H       1:A:138:LEU:HD22       13       0.29         (1,562)       1:A:135:GLU:H       1:A:138:LEU:HD23       13       0.29         (1,411)       1:A:129:LEU:HD11       1:A:138:LEU:HD21       16       0.29         (1,411)       1:A:129:LEU:HD11       1:A:138:LEU:HD22       16       0.29         (1,411)       1:A:129:LEU:HD12       1:A:138:LEU:HD21       16       0.29         (1,411)       1:A:129:LEU:HD12       1:A:138:LEU:HD22       16       0.29         (1,411)       1:A:129:LEU:HD12       1:A:138:LEU:HD23       16       0.29         (1,411)       1:A:129:LEU:HD12       1:A:138:LEU:HD23       16       0.29	(1,630)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD23	17	0.29
(1,562)       1:A:135:GLU:H       1:A:138:LEU:HD22       13       0.29         (1,562)       1:A:135:GLU:H       1:A:138:LEU:HD23       13       0.29         (1,411)       1:A:129:LEU:HD11       1:A:138:LEU:HD21       16       0.29         (1,411)       1:A:129:LEU:HD11       1:A:138:LEU:HD22       16       0.29         (1,411)       1:A:129:LEU:HD11       1:A:138:LEU:HD23       16       0.29         (1,411)       1:A:129:LEU:HD12       1:A:138:LEU:HD21       16       0.29         (1,411)       1:A:129:LEU:HD12       1:A:138:LEU:HD22       16       0.29         (1,411)       1:A:129:LEU:HD12       1:A:138:LEU:HD23       16       0.29	(1,63)	1:A:54:SER:HG	1:A:57:LYS:H	11	0.29
(1,562)       1:A:135:GLU:H       1:A:138:LEU:HD23       13       0.29         (1,411)       1:A:129:LEU:HD11       1:A:138:LEU:HD21       16       0.29         (1,411)       1:A:129:LEU:HD11       1:A:138:LEU:HD22       16       0.29         (1,411)       1:A:129:LEU:HD11       1:A:138:LEU:HD23       16       0.29         (1,411)       1:A:129:LEU:HD12       1:A:138:LEU:HD21       16       0.29         (1,411)       1:A:129:LEU:HD12       1:A:138:LEU:HD22       16       0.29         (1,411)       1:A:129:LEU:HD12       1:A:138:LEU:HD23       16       0.29	(1,562)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD21	13	0.29
(1,411)       1:A:129:LEU:HD11       1:A:138:LEU:HD21       16       0.29         (1,411)       1:A:129:LEU:HD11       1:A:138:LEU:HD22       16       0.29         (1,411)       1:A:129:LEU:HD11       1:A:138:LEU:HD23       16       0.29         (1,411)       1:A:129:LEU:HD12       1:A:138:LEU:HD21       16       0.29         (1,411)       1:A:129:LEU:HD12       1:A:138:LEU:HD22       16       0.29         (1,411)       1:A:129:LEU:HD12       1:A:138:LEU:HD23       16       0.29	(1,562)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD22	13	0.29
(1,411)       1:A:129:LEU:HD11       1:A:138:LEU:HD22       16       0.29         (1,411)       1:A:129:LEU:HD11       1:A:138:LEU:HD23       16       0.29         (1,411)       1:A:129:LEU:HD12       1:A:138:LEU:HD21       16       0.29         (1,411)       1:A:129:LEU:HD12       1:A:138:LEU:HD22       16       0.29         (1,411)       1:A:129:LEU:HD12       1:A:138:LEU:HD23       16       0.29         (1,411)       1:A:129:LEU:HD12       1:A:138:LEU:HD23       16       0.29	(1,562)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD23	13	0.29
(1,411)       1:A:129:LEU:HD11       1:A:138:LEU:HD23       16       0.29         (1,411)       1:A:129:LEU:HD12       1:A:138:LEU:HD21       16       0.29         (1,411)       1:A:129:LEU:HD12       1:A:138:LEU:HD22       16       0.29         (1,411)       1:A:129:LEU:HD12       1:A:138:LEU:HD23       16       0.29	(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD21	16	0.29
(1,411)       1:A:129:LEU:HD12       1:A:138:LEU:HD21       16       0.29         (1,411)       1:A:129:LEU:HD12       1:A:138:LEU:HD22       16       0.29         (1,411)       1:A:129:LEU:HD12       1:A:138:LEU:HD23       16       0.29	(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD22	16	0.29
(1,411)       1:A:129:LEU:HD12       1:A:138:LEU:HD21       16       0.29         (1,411)       1:A:129:LEU:HD12       1:A:138:LEU:HD22       16       0.29         (1,411)       1:A:129:LEU:HD12       1:A:138:LEU:HD23       16       0.29	(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD23	16	0.29
(1,411)       1:A:129:LEU:HD12       1:A:138:LEU:HD22       16       0.29         (1,411)       1:A:129:LEU:HD12       1:A:138:LEU:HD23       16       0.29	_ `	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD21	16	0.29
(1,411) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD23 16 0.29	<del> </del>	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD22	16	0.29
(4.444) 4.400 I DI I II II II I I I I I I I I I I I		1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD23	16	0.29
(1,411)   1:A:129:LEU:HD13   1:A:138:LEU:HD21   16   0.29	(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD21	16	0.29
(1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD22 16 0.29	(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD22	16	0.29
(1,411) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD23 16 0.29	(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD23	16	0.29
(1,384) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:99:LEU:HD21 3 0.29	(1,384)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:99:LEU:HD21	3	0.29
(1,384) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:99:LEU:HD22 3 0.29	(1,384)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:99:LEU:HD22	3	0.29



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,384)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:99:LEU:HD23	3	0.29
(1,384)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:99:LEU:HD21	3	0.29
(1,384)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:99:LEU:HD22	3	0.29
(1,384)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:99:LEU:HD23	3	0.29
(1,384)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:99:LEU:HD21	3	0.29
(1,384)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:99:LEU:HD22	3	0.29
(1,384)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:99:LEU:HD23	3	0.29
(1,339)	1:A:92:SER:H	1:A:98:HIS:H	10	0.29
(1,256)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD11	18	0.29
(1,256)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD12	18	0.29
(1,256)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD13	18	0.29
(1,256)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD11	18	0.29
(1,256)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD12	18	0.29
(1,256)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD13	18	0.29
(1,256)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD11	18	0.29
(1,256)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD12	18	0.29
(1,256)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD13	18	0.29
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD21	17	0.29
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD22	17	0.29
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD23	17	0.29
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD21	17	0.29
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD22	17	0.29
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD23	17	0.29
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD21	17	0.29
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD22	17	0.29
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD23	17	0.29
(1,1207)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD21	13	0.29
(1,1207)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD22	13	0.29
(1,1207)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD23	13	0.29
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD21	16	0.29
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD22	16	0.29
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD23	16	0.29
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD21	16	0.29
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD22	16	0.29
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD23	16	0.29
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD21	16	0.29
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD22	16	0.29
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD23	16	0.29
(1,1029)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:99:LEU:HD21	3	0.29
(1,1029)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:99:LEU:HD22	3	0.29
(1,1029)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:99:LEU:HD23	3	0.29
(1,1029)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:99:LEU:HD21	3	0.29



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1029)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:99:LEU:HD22	3	0.29
(1,1029)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:99:LEU:HD23	3	0.29
(1,1029)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:99:LEU:HD21	3	0.29
(1,1029)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:99:LEU:HD22	3	0.29
(1,1029)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:99:LEU:HD23	3	0.29
(1,892)	1:A:121:LEU:HD11	1:A:122:ARG:H	6	0.28
(1,892)	1:A:121:LEU:HD12	1:A:122:ARG:H	6	0.28
(1,892)	1:A:121:LEU:HD13	1:A:122:ARG:H	6	0.28
(1,8)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:42:TYR:H	2	0.28
(1,8)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:42:TYR:H	2	0.28
(1,8)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:42:TYR:H	2	0.28
(1,792)	1:A:130:LYS:H	1:A:134:TYR:H	10	0.28
(1,759)	1:A:29:PHE:H	1:A:31:ASN:H	1	0.28
(1,756)	1:A:92:SER:H	1:A:97:SER:H	4	0.28
(1,653)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:42:TYR:H	2	0.28
(1,653)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:42:TYR:H	2	0.28
(1,653)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:42:TYR:H	2	0.28
(1,630)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD21	14	0.28
(1,630)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD22	14	0.28
(1,630)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD23	14	0.28
(1,630)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD21	14	0.28
(1,630)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD22	14	0.28
(1,630)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD23	14	0.28
(1,630)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD21	14	0.28
(1,630)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD22	14	0.28
(1,630)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD23	14	0.28
(1,612)	1:A:102:VAL:H	1:A:88:THR:H	15	0.28
(1,592)	1:A:22:ASN:H	1:A:22:ASN:HD21	1	0.28
(1,568)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:140:LEU:H	9	0.28
(1,568)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:140:LEU:H	9	0.28
(1,568)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:140:LEU:H	9	0.28
(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD21	13	0.28
(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD22	13	0.28
(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD23	13	0.28
(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD21	13	0.28
(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD22	13	0.28
(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD23	13	0.28
(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD21	13	0.28
(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD22	13	0.28
(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD23	13	0.28
(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD11	15	0.28
(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD12	15	0.28



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD13	15	0.28
(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD11	15	0.28
(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD12	15	0.28
(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD13	15	0.28
(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD11	15	0.28
(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD12	15	0.28
(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD13	15	0.28
(1,247)	1:A:121:LEU:HD11	1:A:122:ARG:H	6	0.28
(1,247)	1:A:121:LEU:HD12	1:A:122:ARG:H	6	0.28
(1,247)	1:A:121:LEU:HD13	1:A:122:ARG:H	6	0.28
(1,147)	1:A:130:LYS:H	1:A:134:TYR:H	10	0.28
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD21	14	0.28
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD22	14	0.28
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD23	14	0.28
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD21	14	0.28
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD22	14	0.28
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD23	14	0.28
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD21	14	0.28
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD22	14	0.28
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD23	14	0.28
(1,1257)	1:A:102:VAL:H	1:A:88:THR:H	15	0.28
(1,1237)	1:A:22:ASN:H	1:A:22:ASN:HD21	1	0.28
(1,1213)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:140:LEU:H	9	0.28
(1,1213)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:140:LEU:H	9	0.28
(1,1213)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:140:LEU:H	9	0.28
(1,114)	1:A:29:PHE:H	1:A:31:ASN:H	1	0.28
(1,111)	1:A:92:SER:H	1:A:97:SER:H	4	0.28
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD21	13	0.28
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD22	13	0.28
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD23	13	0.28
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD21	13	0.28
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD22	13	0.28
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD23	13	0.28
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD21	13	0.28
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD22	13	0.28
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD23	13	0.28
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD11	15	0.28
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD12	15	0.28
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD13	15	0.28
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD11	15	0.28
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD12	15	0.28
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD13	15	0.28



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD11	15	0.28
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD12	15	0.28
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD13	15	0.28
(1,984)	1:A:92:SER:H	1:A:98:HIS:H	17	0.27
(1,893)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD11	4	0.27
(1,893)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD12	4	0.27
(1,893)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD13	4	0.27
(1,871)	1:A:92:SER:H	1:A:99:LEU:HD21	19	0.27
(1,871)	1:A:92:SER:H	1:A:99:LEU:HD22	19	0.27
(1,871)	1:A:92:SER:H	1:A:99:LEU:HD23	19	0.27
(1,821)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:45:ILE:HD11	5	0.27
(1,821)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:45:ILE:HD12	5	0.27
(1,821)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:45:ILE:HD13	5	0.27
(1,821)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:45:ILE:HD11	5	0.27
(1,821)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:45:ILE:HD12	5	0.27
(1,821)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:45:ILE:HD13	5	0.27
(1,821)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:45:ILE:HD11	5	0.27
(1,821)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:45:ILE:HD12	5	0.27
(1,821)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:45:ILE:HD13	5	0.27
(1,792)	1:A:130:LYS:H	1:A:134:TYR:H	2	0.27
(1,792)	1:A:130:LYS:H	1:A:134:TYR:H	14	0.27
(1,74)	1:A:30:GLN:H	1:A:31:ASN:H	1	0.27
(1,719)	1:A:30:GLN:H	1:A:31:ASN:H	1	0.27
(1,685)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:97:SER:H	2	0.27
(1,685)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:97:SER:H	2	0.27
(1,685)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:97:SER:H	2	0.27
(1,682)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:13:ASN:HD21	7	0.27
(1,682)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:13:ASN:HD21	7	0.27
(1,682)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:13:ASN:HD21	7	0.27
(1,513)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:87:ARG:H	9	0.27
(1,513)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:87:ARG:H	9	0.27
(1,513)	1:A:79:LEU:HD13	1:A:87:ARG:H	9	0.27
(1,468)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:23:ASN:H	7	0.27
(1,468)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:23:ASN:H	7	0.27
(1,468)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:23:ASN:H	7	0.27
(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD21	5	0.27
(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD22	5	0.27
(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD23	5	0.27
(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD21	5	0.27
(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD22	5	0.27
(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD23	5	0.27
(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD21	5	0.27



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD22	5	0.27
(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD23	5	0.27
(1,40)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:97:SER:H	2	0.27
(1,40)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:97:SER:H	2	0.27
(1,40)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:97:SER:H	2	0.27
(1,37)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:13:ASN:HD21	7	0.27
(1,37)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:13:ASN:HD21	7	0.27
(1,37)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:13:ASN:HD21	7	0.27
(1,339)	1:A:92:SER:H	1:A:98:HIS:H	17	0.27
(1,248)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD11	4	0.27
(1,248)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD12	4	0.27
(1,248)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD13	4	0.27
(1,226)	1:A:92:SER:H	1:A:99:LEU:HD21	19	0.27
(1,226)	1:A:92:SER:H	1:A:99:LEU:HD22	19	0.27
(1,226)	1:A:92:SER:H	1:A:99:LEU:HD23	19	0.27
(1,176)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:45:ILE:HD11	5	0.27
(1,176)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:45:ILE:HD12	5	0.27
(1,176)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:45:ILE:HD13	5	0.27
(1,176)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:45:ILE:HD11	5	0.27
(1,176)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:45:ILE:HD12	5	0.27
(1,176)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:45:ILE:HD13	5	0.27
(1,176)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:45:ILE:HD11	5	0.27
(1,176)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:45:ILE:HD12	5	0.27
(1,176)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:45:ILE:HD13	5	0.27
(1,147)	1:A:130:LYS:H	1:A:134:TYR:H	2	0.27
(1,147)	1:A:130:LYS:H	1:A:134:TYR:H	14	0.27
(1,1158)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:87:ARG:H	9	0.27
(1,1158)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:87:ARG:H	9	0.27
(1,1158)	1:A:79:LEU:HD13	1:A:87:ARG:H	9	0.27
(1,1113)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:23:ASN:H	7	0.27
(1,1113)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:23:ASN:H	7	0.27
(1,1113)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:23:ASN:H	7	0.27
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD21	5	0.27
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD22	5	0.27
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD23	5	0.27
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD21	5	0.27
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD22	5	0.27
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD23	5	0.27
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD21	5	0.27
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD22	5	0.27
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD23	5	0.27
(1,901)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD11	1	0.26



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,901)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD12	1	0.26
(1,901)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD13	1	0.26
(1,901)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD11	1	0.26
(1,901)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD12	1	0.26
(1,901)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD13	1	0.26
(1,901)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD11	1	0.26
(1,901)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD12	1	0.26
(1,901)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD13	1	0.26
(1,864)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:74:GLU:H	16	0.26
(1,864)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:74:GLU:H	16	0.26
(1,864)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:74:GLU:H	16	0.26
(1,816)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG11	5	0.26
(1,816)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG12	5	0.26
(1,816)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG13	5	0.26
(1,658)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:131:GLU:H	17	0.26
(1,658)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:131:GLU:H	17	0.26
(1,658)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:131:GLU:H	17	0.26
(1,644)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD11	19	0.26
(1,644)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD12	19	0.26
(1,644)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD13	19	0.26
(1,630)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD21	6	0.26
(1,630)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD22	6	0.26
(1,630)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD23	6	0.26
(1,630)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD21	6	0.26
(1,630)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD22	6	0.26
(1,630)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD23	6	0.26
(1,630)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD21	6	0.26
(1,630)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD22	6	0.26
(1,630)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD23	6	0.26
(1,613)	1:A:115:CYS:H	1:A:101:HIS:H	20	0.26
(1,593)	1:A:22:ASN:HD21	1:A:23:ASN:H	18	0.26
(1,592)	1:A:22:ASN:H	1:A:22:ASN:HD21	13	0.26
(1,497)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:H	7	0.26
(1,497)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:H	7	0.26
(1,497)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:H	7	0.26
(1,465)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG11	8	0.26
(1,465)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG12	8	0.26
(1,465)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG13	8	0.26
(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD21	8	0.26
(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD22	8	0.26
(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD23	8	0.26
(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD21	8	0.26



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD22	8	0.26
(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD23	8	0.26
(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD21	8	0.26
(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD22	8	0.26
(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD23	8	0.26
(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD21	20	0.26
(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD22	20	0.26
(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD23	20	0.26
(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD21	20	0.26
(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD22	20	0.26
(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD23	20	0.26
(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD21	20	0.26
(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD22	20	0.26
(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD23	20	0.26
(1,393)	1:A:12:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HG11	19	0.26
(1,393)	1:A:12:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HG12	19	0.26
(1,393)	1:A:12:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HG13	19	0.26
(1,393)	1:A:12:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HG11	19	0.26
(1,393)	1:A:12:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HG12	19	0.26
(1,393)	1:A:12:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HG13	19	0.26
(1,393)	1:A:12:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HG11	19	0.26
(1,393)	1:A:12:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HG12	19	0.26
(1,393)	1:A:12:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HG13	19	0.26
(1,256)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD11	1	0.26
(1,256)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD12	1	0.26
(1,256)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD13	1	0.26
(1,256)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD11	1	0.26
(1,256)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD12	1	0.26
(1,256)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD13	1	0.26
(1,256)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD11	1	0.26
(1,256)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD12	1	0.26
(1,256)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD13	1	0.26
(1,219)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:74:GLU:H	16	0.26
(1,219)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:74:GLU:H	16	0.26
(1,219)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:74:GLU:H	16	0.26
(1,171)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG11	5	0.26
(1,171)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG12	5	0.26
(1,171)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG13	5	0.26
(1,13)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:131:GLU:H	17	0.26
(1,13)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:131:GLU:H	17	0.26
(1,13)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:131:GLU:H	17	0.26
(1,1289)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD11	19	0.26



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1289)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD12	19	0.26
(1,1289)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD13	19	0.26
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD21	6	0.26
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD22	6	0.26
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD23	6	0.26
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD21	6	0.26
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD22	6	0.26
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD23	6	0.26
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD21	6	0.26
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD22	6	0.26
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD23	6	0.26
(1,1258)	1:A:115:CYS:H	1:A:101:HIS:H	20	0.26
(1,1238)	1:A:22:ASN:HD21	1:A:23:ASN:H	18	0.26
(1,1237)	1:A:22:ASN:H	1:A:22:ASN:HD21	13	0.26
(1,1142)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:H	7	0.26
(1,1142)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:H	7	0.26
(1,1142)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:H	7	0.26
(1,1110)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG11	8	0.26
(1,1110)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG12	8	0.26
(1,1110)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG13	8	0.26
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD21	8	0.26
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD22	8	0.26
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD23	8	0.26
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD21	8	0.26
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD22	8	0.26
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD23	8	0.26
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD21	8	0.26
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD22	8	0.26
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD23	8	0.26
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD21	20	0.26
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD22	20	0.26
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD23	20	0.26
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD21	20	0.26
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD22	20	0.26
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD23	20	0.26
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD21	20	0.26
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD22	20	0.26
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD23	20	0.26
(1,1038)	1:A:12:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HG11	19	0.26
(1,1038)	1:A:12:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HG12	19	0.26
(1,1038)	1:A:12:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HG13	19	0.26
(1,1038)	1:A:12:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HG11	19	0.26



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1038)	1:A:12:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HG12	19	0.26
(1,1038)	1:A:12:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HG13	19	0.26
(1,1038)	1:A:12:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HG11	19	0.26
(1,1038)	1:A:12:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HG12	19	0.26
(1,1038)	1:A:12:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HG13	19	0.26
(1,901)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD11	6	0.25
(1,901)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD12	6	0.25
(1,901)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD13	6	0.25
(1,901)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD11	6	0.25
(1,901)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD12	6	0.25
(1,901)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD13	6	0.25
(1,901)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD11	6	0.25
(1,901)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD12	6	0.25
(1,901)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD13	6	0.25
(1,84)	1:A:10:LYS:H	1:A:12:LEU:H	18	0.25
(1,729)	1:A:10:LYS:H	1:A:12:LEU:H	18	0.25
(1,678)	1:A:92:SER:H	1:A:99:LEU:HD11	10	0.25
(1,678)	1:A:92:SER:H	1:A:99:LEU:HD12	10	0.25
(1,678)	1:A:92:SER:H	1:A:99:LEU:HD13	10	0.25
(1,669)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:134:TYR:H	17	0.25
(1,669)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:134:TYR:H	17	0.25
(1,669)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:134:TYR:H	17	0.25
(1,669)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:134:TYR:H	19	0.25
(1,669)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:134:TYR:H	19	0.25
(1,669)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:134:TYR:H	19	0.25
(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG11	13	0.25
(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG12	13	0.25
(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG13	13	0.25
(1,562)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD21	16	0.25
(1,562)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD22	16	0.25
(1,562)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD23	16	0.25
(1,558)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:132:GLU:H	2	0.25
(1,558)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:132:GLU:H	2	0.25
(1,558)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:132:GLU:H	2	0.25
(1,524)	1:A:91:ARG:H	1:A:99:LEU:HD11	19	0.25
(1,524)	1:A:91:ARG:H	1:A:99:LEU:HD12	19	0.25
(1,524)	1:A:91:ARG:H	1:A:99:LEU:HD13	19	0.25
(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD21	1	0.25
(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD22	1	0.25
(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD23	1	0.25
(1,33)	1:A:92:SER:H	1:A:99:LEU:HD11	10	0.25
(1,33)	1:A:92:SER:H	1:A:99:LEU:HD12	10	0.25



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,33)	1:A:92:SER:H	1:A:99:LEU:HD13	10	0.25
(1,256)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD11	6	0.25
(1,256)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD12	6	0.25
(1,256)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD13	6	0.25
(1,256)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD11	6	0.25
(1,256)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD12	6	0.25
(1,256)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD13	6	0.25
(1,256)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD11	6	0.25
(1,256)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD12	6	0.25
(1,256)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD13	6	0.25
(1,24)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:134:TYR:H	17	0.25
(1,24)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:134:TYR:H	17	0.25
(1,24)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:134:TYR:H	17	0.25
(1,24)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:134:TYR:H	19	0.25
(1,24)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:134:TYR:H	19	0.25
(1,24)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:134:TYR:H	19	0.25
(1,1230)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG11	13	0.25
(1,1230)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG12	13	0.25
(1,1230)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG13	13	0.25
(1,1207)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD21	16	0.25
(1,1207)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD22	16	0.25
(1,1207)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD23	16	0.25
(1,1203)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:132:GLU:H	2	0.25
(1,1203)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:132:GLU:H	2	0.25
(1,1203)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:132:GLU:H	2	0.25
(1,1169)	1:A:91:ARG:H	1:A:99:LEU:HD11	19	0.25
(1,1169)	1:A:91:ARG:H	1:A:99:LEU:HD12	19	0.25
(1,1169)	1:A:91:ARG:H	1:A:99:LEU:HD13	19	0.25
(1,1064)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD21	1	0.25
(1,1064)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD22	1	0.25
(1,1064)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD23	1	0.25
(1,98)	1:A:31:ASN:H	1:A:34:TRP:H	13	0.24
(1,952)	1:A:32:GLU:H	1:A:34:TRP:H	14	0.24
(1,944)	1:A:15:MET:H	1:A:18:GLU:H	6	0.24
(1,929)	1:A:6:GLU:H	1:A:8:LYS:H	12	0.24
(1,920)	1:A:92:SER:H	1:A:99:LEU:H	17	0.24
(1,904)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD11	20	0.24
(1,904)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD12	20	0.24
(1,904)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD13	20	0.24
(1,904)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD11	20	0.24
(1,904)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD12	20	0.24
(1,904)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD13	20	0.24



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

(1,904)         1:A:51:LEU:HD23         1:A:71:ILE:HD12         20         0.24           (1,904)         1:A:51:LEU:HD23         1:A:71:ILE:HD12         20         0.24           (1,904)         1:A:51:LEU:HD23         1:A:71:ILE:HD13         20         0.24           (1,893)         1:A:120:ALA:H         1:A:121:LEU:HD11         11         0.24           (1,893)         1:A:120:ALA:H         1:A:121:LEU:HD12         11         0.24           (1,892)         1:A:121:LEU:HD11         1:A:122:ARG:H         1         0.24           (1,892)         1:A:121:LEU:HD13         1:A:122:ARG:H         1         0.24           (1,892)         1:A:121:LEU:HD13         1:A:122:ARG:H         1         0.24           (1,892)         1:A:121:LEU:HD11         1:A:122:ARG:H         1         0.24           (1,892)         1:A:121:LEU:HD12         1:A:122:ARG:H         16         0.24           (1,892)         1:A:121:LEU:HD11         1:A:122:ARG:H         16         0.24           (1,892)         1:A:121:LEU:HD12         1:A:140:LEU:HD21         12         0.24           (1,867)         1:A:71:ILE:HD11         1:A:140:LEU:HD23         12         0.24           (1,867)         1:A:71:ILE:HD13 <t< th=""><th>Key</th><th>Atom-1</th><th>Atom-2</th><th>Model</th><th>Violation (Å)</th></t<>	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,904) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 20 0.24 (1,893) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD11 11 0.24 (1,893) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD11 11 0.24 (1,893) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD12 11 0.24 (1,893) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 11 0.24 (1,892) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 1 0.24 (1,892) 1:A:121:LEU:HD12 1:A:122:ARG:H 1 0.24 (1,892) 1:A:121:LEU:HD12 1:A:122:ARG:H 1 0.24 (1,892) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 1 0.24 (1,892) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 1 0.24 (1,892) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 16 0.24 (1,892) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 16 0.24 (1,892) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 16 0.24 (1,892) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:140:LEU:HD21 12 0.24 (1,867) 1:A:71:ILE:HD11 1:A:140:LEU:HD21 12 0.24 (1,867) 1:A:71:ILE:HD11 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,867) 1:A:71:ILE:HD11 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,867) 1:A:71:ILE:HD12 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,867) 1:A:71:ILE:HD12 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,867) 1:A:71:ILE:HD12 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,867) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,867) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 3 0.24 (1,868) 1:A:16:LYS:H 1:A:13:GLU:H 10 0.24 (1,665) 1:A:18:LYS:H 1:A:19:LEU:H 10 0.24 (1,665) 1:A:18:LYS:H 1:A:19:LEU:H 10 0.24 (1,665) 1:A:18:LYS:H 1:A:19:LEU:H 10 0.24 (1,665) 1:A:18:LYS:H 1:A:19:LEU:HD11 10 0.24 (1,665) 1:A:14:LEU:HD11 1:A:140:LEU:HD11 10 0.24 (1,665) 1:A:14:LEU:HD11 1:A:140:LEU:HD11 10 0.24 (1,625) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:140:LEU:HD11 10 0.24 (1,625)	(1,904)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD11	20	0.24
(1,893) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD11 11 0.24 (1,893) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD12 11 0.24 (1,893) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 11 0.24 (1,892) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 1 0.24 (1,892) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 1 0.24 (1,892) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 1 0.24 (1,892) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 1 0.24 (1,892) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 1 0.24 (1,892) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 16 0.24 (1,892) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 16 0.24 (1,892) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 16 0.24 (1,892) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 16 0.24 (1,892) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:140:LEU:HD22 12 0.24 (1,867) 1:A:71:ILE:HD11 1:A:140:LEU:HD22 12 0.24 (1,867) 1:A:71:ILE:HD11 1:A:140:LEU:HD22 12 0.24 (1,867) 1:A:71:ILE:HD11 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,867) 1:A:71:ILE:HD12 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,867) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,867) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 3 0.24 (1,844) 1:A:10:LYS:H 1:A:13:LB:HD13 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,656) 1:A:13:3:GIV:H 1:A:13:GIU:H 3 0.24 (1,656) 1:A:13:S:SIV:H 1:A:13:LB:LEU:H 14 0.24 (1,665) 1:A:14:LEU:HD13 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,665) 1:A:14:LEU:HD13 1:A:140:LEU:HD13 10 0.24 (1,665) 1:A:14:LEU:HD13 1:A:140:LEU:HD11 10 0.24 (1,665) 1:A:14:LEU:HD11 1:A:140:LEU:HD11 10 0.24 (1,656) 1:A:14:LEU:HD11 1:A:140:LEU:HD11 10 0.24 (1,656) 1:A:14:LEU:HD11 1:A:140:LEU:HD11 10 0.24 (1,625) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:140:LEU:HD11 10 0.24 (1,625) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:140:LEU:HD11 10 0.24 (1,625) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:140:LEU:HD11 10 0.24 (1,625) 1:A:41:LEU:H	(1,904)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD12	20	0.24
(1,893) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD12 11 0.24 (1,893) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 11 0.24 (1,892) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 1 0.24 (1,892) 1:A:121:LEU:HD12 1:A:122:ARG:H 1 0.24 (1,892) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 1 0.24 (1,892) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 1 0.24 (1,892) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 1 0.24 (1,892) 1:A:121:LEU:HD12 1:A:122:ARG:H 16 0.24 (1,892) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 16 0.24 (1,892) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 16 0.24 (1,892) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:140:LEU:HD21 12 0.24 (1,867) 1:A:71:ILE:HD11 1:A:140:LEU:HD21 12 0.24 (1,867) 1:A:71:ILE:HD11 1:A:140:LEU:HD21 12 0.24 (1,867) 1:A:71:ILE:HD11 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,867) 1:A:71:ILE:HD12 1:A:140:LEU:HD22 12 0.24 (1,867) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,867) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 3 0.24 (1,84) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 3 0.24 (1,685) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:97:SER:H 10 0.24 (1,666) 1:A:128:LYS:H 1:A:12:LEU:H 14 0.24 (1,665) 1:A:128:LYS:H 1:A:12:LEU:H 14 0.24 (1,665) 1:A:128:LYS:H 1:A:12:LEU:HD11 1 0 0.24 (1,656) 1:A:128:LYS:H 1:A:12:LEU:HD11 1 0 0.24 (1,656) 1:A:128:LYS:H 1:A:12:LEU:HD11 1 0 0.24 (1,625) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:140:LEU:HD11 10 0.24 (1	(1,904)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD13	20	0.24
(1,892) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 11 0.24 (1,892) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 1 0.24 (1,892) 1:A:121:LEU:HD12 1:A:122:ARG:H 1 0.24 (1,892) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 1 0.24 (1,892) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 1 0.24 (1,892) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 16 0.24 (1,892) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 16 0.24 (1,892) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 16 0.24 (1,892) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 16 0.24 (1,867) 1:A:71:ILE:HD11 1:A:140:LEU:HD21 12 0.24 (1,867) 1:A:71:ILE:HD11 1:A:140:LEU:HD22 12 0.24 (1,867) 1:A:71:ILE:HD11 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,867) 1:A:71:ILE:HD11 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,867) 1:A:71:ILE:HD12 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,867) 1:A:71:ILE:HD12 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,867) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,868) 1:A:13:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 3 0.24 (1,866) 1:A:13:G:LYS:H 1:A:12:LEU:H 3 0.24 (1,865) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:9:SER:H 10 0.24 (1,665) 1:A:12:LS:HS:H 1:A:12:LEU:H 3 0.24 (1,665) 1:A:12:LS:HS:H 1:A:12:LEU:H 3 0.24 (1,665) 1:A:12:LS:HS:H 1:A:12:LEU:H 14 0.24 (1,685) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:9:SER:H 10 0.24 (1,685) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:9:SER:H 10 0.24 (1,665) 1:A:12:LS:LYS:H 1:A:12:LEU:HD21 2 0.24 (1,656) 1:A:12:LS:LYS:H 1:A:12:LEU:HD21 2 0.24 (1,656) 1:A:12:LS:LYS:H 1:A:12:LEU:HD21 2 0.24 (1,655) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:140:LEU:HD13 10 0.24 (1,625) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:140:LEU:HD11 10 0.24 (1,625) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:140:LEU:HD11 10 0.24 (1,625) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:140:LEU:HD11 10 0.24 (1,625) 1:	(1,893)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD11	11	0.24
(1,892)         1:A:121:LEU:HD11         1:A:122:ARG:H         1         0.24           (1,892)         1:A:121:LEU:HD12         1:A:122:ARG:H         1         0.24           (1,892)         1:A:121:LEU:HD13         1:A:122:ARG:H         1         0.24           (1,892)         1:A:121:LEU:HD11         1:A:122:ARG:H         16         0.24           (1,892)         1:A:121:LEU:HD13         1:A:122:ARG:H         16         0.24           (1,892)         1:A:121:LEU:HD13         1:A:122:ARG:H         16         0.24           (1,892)         1:A:121:LEU:HD13         1:A:122:ARG:H         16         0.24           (1,892)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD21         12         0.24           (1,867)         1:A:71:ILE:HD11         1:A:140:LEU:HD23         12         0.24           (1,867)         1:A:71:ILE:HD12         1:A:140:LEU:HD22         12         0.24           (1,867)         1:A:71:ILE:HD12         1:A:140:LEU:HD23         12         0.24           (1,867)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD23         12         0.24           (1,867)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD23         12         0.24           (1,867)         1:A:13:ILE:HD13	(1,893)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD12	11	0.24
(1,892) 1:A:121:LEU:HD12 1:A:122:ARG:H 1 0.24 (1,892) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 1 0.24 (1,892) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 16 0.24 (1,892) 1:A:121:LEU:HD12 1:A:122:ARG:H 16 0.24 (1,892) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 16 0.24 (1,892) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 16 0.24 (1,867) 1:A:71:II.E:HD11 1:A:140:LEU:HD21 12 0.24 (1,867) 1:A:71:II.E:HD11 1:A:140:LEU:HD22 12 0.24 (1,867) 1:A:71:II.E:HD11 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,867) 1:A:71:II.E:HD12 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,867) 1:A:71:II.E:HD12 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,867) 1:A:71:II.E:HD12 1:A:140:LEU:HD21 12 0.24 (1,867) 1:A:71:II.E:HD12 1:A:140:LEU:HD22 12 0.24 (1,867) 1:A:71:II.E:HD12 1:A:140:LEU:HD22 12 0.24 (1,867) 1:A:71:II.E:HD13 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,867) 1:A:71:II.E:HD13 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,867) 1:A:71:II.E:HD13 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,867) 1:A:71:II.E:HD13 1:A:140:LEU:HD22 12 0.24 (1,867) 1:A:71:II.E:HD13 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,867) 1:A:71:II.E:HD13 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,867) 1:A:71:II.E:HD13 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,84) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 3 0.24 (1,84) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 3 0.24 (1,84) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 3 0.24 (1,606) 1:A:133:GLY:H 1:A:13:LEU:H 14 0.24 (1,606) 1:A:133:GLY:H 1:A:13:SEU:H 14 0.24 (1,606) 1:A:138:LYS:H 1:A:12:LEU:H 3 0.24 (1,729) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 3 0.24 (1,605) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:97:SER:H 10 0.24 (1,606) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:H 14 0.24 (1,606) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD12 2 0.24 (1,606) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD12 2 0.24 (1,606) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD12 2 0.24 (1,606) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD12 1 0 0.24 (1,605) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:140:LEU:HD11 10 0.24 (1,605) 1:A	(1,893)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD13	11	0.24
(1,892) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 1 0.24 (1,892) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 16 0.24 (1,892) 1:A:121:LEU:HD12 1:A:122:ARG:H 16 0.24 (1,892) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 16 0.24 (1,892) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 16 0.24 (1,867) 1:A:71:ILE:HD11 1:A:140:LEU:HD21 12 0.24 (1,867) 1:A:71:ILE:HD11 1:A:140:LEU:HD22 12 0.24 (1,867) 1:A:71:ILE:HD11 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,867) 1:A:71:ILE:HD11 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,867) 1:A:71:ILE:HD12 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,867) 1:A:71:ILE:HD12 1:A:140:LEU:HD22 12 0.24 (1,867) 1:A:71:ILE:HD12 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,867) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,867) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,867) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD21 12 0.24 (1,867) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,867) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD21 12 0.24 (1,868) 1:A:131:GLYS:H 1:A:12:LEU:H 3 0.24 (1,84) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 3 0.24 (1,84) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 3 0.24 (1,84) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 3 0.24 (1,729) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 3 0.24 (1,729) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 3 0.24 (1,729) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 3 0.24 (1,685) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:97:SER:H 10 0.24 (1,685) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:97:SER:H 10 0.24 (1,685) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:97:SER:H 10 0.24 (1,685) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:12:LEU:HD21 2 0.24 (1,666) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 2 0.24 (1,656) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 2 0.24 (1,656) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 2 0.24 (1,656) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 10 0.24 (1,625) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:140:LEU:HD11 10 0.24	(1,892)	1:A:121:LEU:HD11	1:A:122:ARG:H	1	0.24
(1,892)         1:A:121:LEU:HD11         1:A:122:ARG:H         16         0.24           (1,892)         1:A:121:LEU:HD12         1:A:122:ARG:H         16         0.24           (1,892)         1:A:121:LEU:HD13         1:A:122:ARG:H         16         0.24           (1,867)         1:A:71:ILE:HD11         1:A:140:LEU:HD21         12         0.24           (1,867)         1:A:71:ILE:HD11         1:A:140:LEU:HD22         12         0.24           (1,867)         1:A:71:ILE:HD11         1:A:140:LEU:HD23         12         0.24           (1,867)         1:A:71:ILE:HD12         1:A:140:LEU:HD21         12         0.24           (1,867)         1:A:71:ILE:HD12         1:A:140:LEU:HD23         12         0.24           (1,867)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD23         12         0.24           (1,867)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD21         12         0.24           (1,867)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD23         12         0.24           (1,867)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD21         12         0.24           (1,867)         1:A:15:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD23         12         0.24           (1,867)         1:A:15:ILE:HD13	(1,892)	1:A:121:LEU:HD12	1:A:122:ARG:H	1	0.24
(1,892) 1:A:121:LEU:HD12 1:A:122:ARG:H 16 0.24 (1,892) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 16 0.24 (1,867) 1:A:71:ILE:HD11 1:A:140:LEU:HD21 12 0.24 (1,867) 1:A:71:ILE:HD11 1:A:140:LEU:HD22 12 0.24 (1,867) 1:A:71:ILE:HD11 1:A:140:LEU:HD22 12 0.24 (1,867) 1:A:71:ILE:HD11 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,867) 1:A:71:ILE:HD12 1:A:140:LEU:HD21 12 0.24 (1,867) 1:A:71:ILE:HD12 1:A:140:LEU:HD21 12 0.24 (1,867) 1:A:71:ILE:HD12 1:A:140:LEU:HD22 12 0.24 (1,867) 1:A:71:ILE:HD12 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,867) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,867) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,867) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD21 12 0.24 (1,867) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD22 12 0.24 (1,867) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,84) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 3 0.24 (1,84) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 3 0.24 (1,84) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 14 0.24 (1,806) 1:A:133:GLY:H 1:A:135:GLU:H 5 0.24 (1,729) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 3 0.24 (1,729) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 3 0.24 (1,729) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 14 0.24 (1,685) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:97:SER:H 10 0.24 (1,685) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:97:SER:H 10 0.24 (1,685) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:97:SER:H 10 0.24 (1,685) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:97:SER:H 10 0.24 (1,666) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 2 0.24 (1,656) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 2 0.24 (1,656) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 2 0.24 (1,625) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:140:LEU:HD11 10 0.24 (1,625) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:140:LEU:HD13 10 0.24 (1,625) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:140:LEU:HD11 10 0.24 (1,625) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:140:LEU:HD11 10 0.24 (1,625) 1:A:41:LEU:HD13	(1,892)	1:A:121:LEU:HD13	1:A:122:ARG:H	1	0.24
(1,892)         1:A:121:LEU:HD13         1:A:122:ARG:H         16         0.24           (1,867)         1:A:71:ILE:HD11         1:A:140:LEU:HD21         12         0.24           (1,867)         1:A:71:ILE:HD11         1:A:140:LEU:HD22         12         0.24           (1,867)         1:A:71:ILE:HD11         1:A:140:LEU:HD23         12         0.24           (1,867)         1:A:71:ILE:HD12         1:A:140:LEU:HD22         12         0.24           (1,867)         1:A:71:ILE:HD12         1:A:140:LEU:HD23         12         0.24           (1,867)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD23         12         0.24           (1,867)         1:A:13:IO:LYS:H         1:A:12:LEU:H         3         0.24           (1,84)         1:A:10:LYS:H	(1,892)	1:A:121:LEU:HD11	1:A:122:ARG:H	16	0.24
(1,867)         1:A:71:ILE:HD11         1:A:140:LEU:HD21         12         0.24           (1,867)         1:A:71:ILE:HD11         1:A:140:LEU:HD22         12         0.24           (1,867)         1:A:71:ILE:HD11         1:A:140:LEU:HD23         12         0.24           (1,867)         1:A:71:ILE:HD12         1:A:140:LEU:HD21         12         0.24           (1,867)         1:A:71:ILE:HD12         1:A:140:LEU:HD22         12         0.24           (1,867)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD23         12         0.24           (1,867)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD21         12         0.24           (1,867)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD22         12         0.24           (1,867)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD23         12         0.24           (1,867)         1:A:13:IS:IM         1:A:12:LEU:H         3         0.24           (1,849)         1:A:13:IS:IM	(1,892)	1:A:121:LEU:HD12	1:A:122:ARG:H	16	0.24
(1,867)         1:A:71:ILE:HD11         1:A:140:LEU:HD22         12         0.24           (1,867)         1:A:71:ILE:HD11         1:A:140:LEU:HD23         12         0.24           (1,867)         1:A:71:ILE:HD12         1:A:140:LEU:HD21         12         0.24           (1,867)         1:A:71:ILE:HD12         1:A:140:LEU:HD22         12         0.24           (1,867)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD23         12         0.24           (1,867)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD21         12         0.24           (1,867)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD22         12         0.24           (1,867)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD23         12         0.24           (1,84)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD23         12         0.24           (1,84)         1:A:13:3:GL	(1,892)	1:A:121:LEU:HD13	1:A:122:ARG:H	16	0.24
(1,867)         1:A:71:ILE:HD11         1:A:140:LEU:HD23         12         0.24           (1,867)         1:A:71:ILE:HD12         1:A:140:LEU:HD21         12         0.24           (1,867)         1:A:71:ILE:HD12         1:A:140:LEU:HD22         12         0.24           (1,867)         1:A:71:ILE:HD12         1:A:140:LEU:HD23         12         0.24           (1,867)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD22         12         0.24           (1,867)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD22         12         0.24           (1,867)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD23         12         0.24           (1,867)         1:A:13:ILE:HD13         1:A:12:LEU:H         3         0.24           (1,84)         1:A:13:ILE:HD13         1:A:12:LEU:H         3         0.24           (1,84)         1:A:13:ILE:HD13	(1,867)	1:A:71:ILE:HD11	1:A:140:LEU:HD21	12	0.24
(1,867)         1:A:71:ILE:HD11         1:A:140:LEU:HD23         12         0.24           (1,867)         1:A:71:ILE:HD12         1:A:140:LEU:HD21         12         0.24           (1,867)         1:A:71:ILE:HD12         1:A:140:LEU:HD22         12         0.24           (1,867)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD23         12         0.24           (1,867)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD22         12         0.24           (1,867)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD22         12         0.24           (1,867)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD23         12         0.24           (1,84)         1:A:133:GLY:H         1:A:123:LEU:H         3         0.24           (1,84)         1:A:133:GLY:H <td>(1,867)</td> <td>1:A:71:ILE:HD11</td> <td>1:A:140:LEU:HD22</td> <td>12</td> <td>0.24</td>	(1,867)	1:A:71:ILE:HD11	1:A:140:LEU:HD22	12	0.24
(1,867)         1:A:71:ILE:HD12         1:A:140:LEU:HD21         12         0.24           (1,867)         1:A:71:ILE:HD12         1:A:140:LEU:HD22         12         0.24           (1,867)         1:A:71:ILE:HD12         1:A:140:LEU:HD23         12         0.24           (1,867)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD21         12         0.24           (1,867)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD22         12         0.24           (1,867)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD23         12         0.24           (1,867)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD33         12         0.24           (1,84)         1:A:10:LYS:H         1:A:12:LEU:H         3         0.24           (1,84)         1:A:133:GLY:H         1:A:132:LEU:H         5         0.24           (1,806)         1:A:132:S.HS:H         1:A:12:LEU:H         3         0.24           (1,729)         1:A:10:LYS:H         1		1:A:71:ILE:HD11	1:A:140:LEU:HD23	12	0.24
(1,867)         1:A:71:ILE:HD12         1:A:140:LEU:HD23         12         0.24           (1,867)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD21         12         0.24           (1,867)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD22         12         0.24           (1,867)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD23         12         0.24           (1,867)         1:A:10:LYS:H         1:A:12:LEU:H         3         0.24           (1,867)         1:A:10:LYS:H         1:A:12:LEU:H         3         0.24           (1,867)         1:A:10:LYS:H         1:A:13:GLU:H         5         0.24           (1,80)         1:A:133:GLY:H         1:A:135:GLU:H         5         0.24           (1,743)         1:A:133:GLY:H         1:A:135:GLU:H         5         0.24           (1,743)         1:A:133:GLY:H         1:A:135:GLU:H         5         0.24           (1,729)         1:A:10:LYS:H         1:A:12:LEU:H         3         0.24           (1,685)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:97:SER:H         10         0.24           (1,685)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:97:SER:H         10         0.24           (1,685)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD21         2 </td <td></td> <td>1:A:71:ILE:HD12</td> <td>1:A:140:LEU:HD21</td> <td>12</td> <td>0.24</td>		1:A:71:ILE:HD12	1:A:140:LEU:HD21	12	0.24
(1,867)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD21         12         0.24           (1,867)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD22         12         0.24           (1,867)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD23         12         0.24           (1,867)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD23         12         0.24           (1,84)         1:A:10:IYS:H         1:A:12:LEU:H         3         0.24           (1,806)         1:A:133:GLY:H         1:A:12:LEU:H         14         0.24           (1,806)         1:A:133:GLY:H         1:A:135:GLU:H         5         0.24           (1,743)         1:A:31:ASN:H         1:A:34:TRP:H         13         0.24           (1,743)         1:A:10:LYS:H         1:A:34:TRP:H         13         0.24           (1,729)         1:A:10:LYS:H         1:A:12:LEU:H         3         0.24           (1,729)         1:A:10:LYS:H         1:A:97:SER:H         10         0.24           (1,685)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:97:SER:H         10         0.24           (1,685)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:97:SER:H         10         0.24           (1,685)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:97:SER:H         10 </td <td>(1,867)</td> <td>1:A:71:ILE:HD12</td> <td>1:A:140:LEU:HD22</td> <td>12</td> <td>0.24</td>	(1,867)	1:A:71:ILE:HD12	1:A:140:LEU:HD22	12	0.24
(1,867)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD22         12         0.24           (1,867)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD23         12         0.24           (1,84)         1:A:10:LYS:H         1:A:12:LEU:H         3         0.24           (1,84)         1:A:10:LYS:H         1:A:12:LEU:H         14         0.24           (1,806)         1:A:133:GLY:H         1:A:135:GLU:H         5         0.24           (1,743)         1:A:31:ASN:H         1:A:34:TRP:H         13         0.24           (1,729)         1:A:10:LYS:H         1:A:12:LEU:H         3         0.24           (1,729)         1:A:10:LYS:H         1:A:97:SER:H         10         0.24           (1,685)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:97:SER:H         10         0.24           (1,685)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:97:SER:H         10         0.24           (1,685)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:97:SER:H         10         0.24           (1,666)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD21         2         0.24           (1,656)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD22         2         0.24           (1,625)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:140:LEU:HD11         10 <td>(1,867)</td> <td>1:A:71:ILE:HD12</td> <td>1:A:140:LEU:HD23</td> <td>12</td> <td>0.24</td>	(1,867)	1:A:71:ILE:HD12	1:A:140:LEU:HD23	12	0.24
(1,867)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD23         12         0.24           (1,84)         1:A:10:LYS:H         1:A:12:LEU:H         3         0.24           (1,84)         1:A:10:LYS:H         1:A:12:LEU:H         14         0.24           (1,806)         1:A:133:GLY:H         1:A:135:GLU:H         5         0.24           (1,743)         1:A:31:ASN:H         1:A:34:TRP:H         13         0.24           (1,729)         1:A:10:LYS:H         1:A:12:LEU:H         3         0.24           (1,729)         1:A:10:LYS:H         1:A:12:LEU:H         14         0.24           (1,685)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:97:SER:H         10         0.24           (1,685)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:97:SER:H         10         0.24           (1,685)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:97:SER:H         10         0.24           (1,685)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:97:SER:H         10         0.24           (1,656)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD21         2         0.24           (1,656)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD22         2         0.24           (1,656)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:140:LEU:HD11         10	(1,867)	1:A:71:ILE:HD13	1:A:140:LEU:HD21	12	0.24
(1,84)         1:A:10:LYS:H         1:A:12:LEU:H         3         0.24           (1,84)         1:A:10:LYS:H         1:A:12:LEU:H         14         0.24           (1,806)         1:A:133:GLY:H         1:A:135:GLU:H         5         0.24           (1,743)         1:A:31:ASN:H         1:A:34:TRP:H         13         0.24           (1,729)         1:A:10:LYS:H         1:A:12:LEU:H         3         0.24           (1,729)         1:A:10:LYS:H         1:A:12:LEU:H         14         0.24           (1,685)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:97:SER:H         10         0.24           (1,685)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:97:SER:H         10         0.24           (1,685)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:97:SER:H         10         0.24           (1,685)         1:A:412:LEU:HG23         1:A:129:LEU:HD21         2         0.24           (1,656)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD22         2         0.24           (1,656)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:140:LEU:HD11         10         0.24           (1,625)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:140:LEU:HD12         10         0.24           (1,625)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:140:LEU:HD13         10	(1,867)	1:A:71:ILE:HD13	1:A:140:LEU:HD22	12	0.24
(1,84)         1:A:10:LYS:H         1:A:12:LEU:H         14         0.24           (1,806)         1:A:133:GLY:H         1:A:135:GLU:H         5         0.24           (1,743)         1:A:31:ASN:H         1:A:34:TRP:H         13         0.24           (1,729)         1:A:10:LYS:H         1:A:12:LEU:H         14         0.24           (1,685)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:97:SER:H         10         0.24           (1,685)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:97:SER:H         10         0.24           (1,685)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:97:SER:H         10         0.24           (1,685)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:97:SER:H         10         0.24           (1,685)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:129:LEU:HD21         2         0.24           (1,685)         1:A:4128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD22         2         0.24           (1,656)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD22         2         0.24           (1,656)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:140:LEU:HD11         10         0.24           (1,625)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:140:LEU:HD13         10         0.24           (1,625)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:140:LEU:HD13	(1,867)	1:A:71:ILE:HD13	1:A:140:LEU:HD23	12	0.24
(1,806)         1:A:133:GLY:H         1:A:135:GLU:H         5         0.24           (1,743)         1:A:31:ASN:H         1:A:34:TRP:H         13         0.24           (1,729)         1:A:10:LYS:H         1:A:12:LEU:H         14         0.24           (1,729)         1:A:10:LYS:H         1:A:12:LEU:H         14         0.24           (1,685)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:97:SER:H         10         0.24           (1,685)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:97:SER:H         10         0.24           (1,685)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:97:SER:H         10         0.24           (1,685)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:97:SER:H         10         0.24           (1,685)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:97:SER:H         10         0.24           (1,656)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD21         2         0.24           (1,656)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD22         2         0.24           (1,656)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:140:LEU:HD11         10         0.24           (1,625)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:140:LEU:HD13         10         0.24           (1,625)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:140:LEU:HD13	(1,84)	1:A:10:LYS:H	1:A:12:LEU:H	3	0.24
(1,743)         1:A:31:ASN:H         1:A:34:TRP:H         13         0.24           (1,729)         1:A:10:LYS:H         1:A:12:LEU:H         14         0.24           (1,729)         1:A:10:LYS:H         1:A:12:LEU:H         14         0.24           (1,685)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:97:SER:H         10         0.24           (1,685)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:97:SER:H         10         0.24           (1,685)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:97:SER:H         10         0.24           (1,685)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD21         2         0.24           (1,656)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD22         2         0.24           (1,656)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD23         2         0.24           (1,656)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:140:LEU:HD11         10         0.24           (1,625)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:140:LEU:HD13         10         0.24           (1,625)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:140:LEU:HD13         10         0.24           (1,625)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:140:LEU:HD13         10         0.24           (1,625)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:140:LEU:HD11 </td <td>(1,84)</td> <td>1:A:10:LYS:H</td> <td>1:A:12:LEU:H</td> <td>14</td> <td>0.24</td>	(1,84)	1:A:10:LYS:H	1:A:12:LEU:H	14	0.24
(1,729)       1:A:10:LYS:H       1:A:12:LEU:H       3       0.24         (1,729)       1:A:10:LYS:H       1:A:12:LEU:H       14       0.24         (1,685)       1:A:46:VAL:HG21       1:A:97:SER:H       10       0.24         (1,685)       1:A:46:VAL:HG22       1:A:97:SER:H       10       0.24         (1,685)       1:A:46:VAL:HG23       1:A:97:SER:H       10       0.24         (1,686)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD21       2       0.24         (1,656)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD22       2       0.24         (1,656)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD23       2       0.24         (1,656)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD23       2       0.24         (1,656)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:140:LEU:HD11       10       0.24         (1,625)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:140:LEU:HD13       10       0.24         (1,625)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD13       10       0.24         (1,625)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD13       10       0.24         (1,625)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD11       10       0.24         (1,625)       1:A:41:LEU:HD13 <t< td=""><td>(1,806)</td><td>1:A:133:GLY:H</td><td>1:A:135:GLU:H</td><td>5</td><td>0.24</td></t<>	(1,806)	1:A:133:GLY:H	1:A:135:GLU:H	5	0.24
(1,729)         1:A:10:LYS:H         1:A:12:LEU:H         14         0.24           (1,685)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:97:SER:H         10         0.24           (1,685)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:97:SER:H         10         0.24           (1,685)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:97:SER:H         10         0.24           (1,656)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD21         2         0.24           (1,656)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD22         2         0.24           (1,656)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD23         2         0.24           (1,656)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD23         2         0.24           (1,656)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD23         2         0.24           (1,625)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:140:LEU:HD11         10         0.24           (1,625)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:140:LEU:HD13         10         0.24           (1,625)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:140:LEU:HD13         10         0.24           (1,625)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:140:LEU:HD13         10         0.24           (1,625)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:140:LE	(1,743)	1:A:31:ASN:H	1:A:34:TRP:H	13	0.24
(1,685)       1:A:46:VAL:HG21       1:A:97:SER:H       10       0.24         (1,685)       1:A:46:VAL:HG22       1:A:97:SER:H       10       0.24         (1,685)       1:A:46:VAL:HG23       1:A:97:SER:H       10       0.24         (1,686)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD21       2       0.24         (1,656)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD22       2       0.24         (1,656)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD23       2       0.24         (1,656)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD23       2       0.24         (1,625)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:140:LEU:HD11       10       0.24         (1,625)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:140:LEU:HD13       10       0.24         (1,625)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD12       10       0.24         (1,625)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD13       10       0.24         (1,625)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD11       10       0.24         (1,625)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD11       10       0.24         (1,625)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD11       10       0.24         (1,625)       1:A:41:LEU:HD1	(1,729)	1:A:10:LYS:H	1:A:12:LEU:H	3	0.24
(1,685)       1:A:46:VAL:HG22       1:A:97:SER:H       10       0.24         (1,685)       1:A:46:VAL:HG23       1:A:97:SER:H       10       0.24         (1,656)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD21       2       0.24         (1,656)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD22       2       0.24         (1,656)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD23       2       0.24         (1,656)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:140:LEU:HD11       10       0.24         (1,625)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:140:LEU:HD12       10       0.24         (1,625)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD11       10       0.24         (1,625)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD12       10       0.24         (1,625)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD13       10       0.24         (1,625)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD13       10       0.24         (1,625)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD11       10       0.24         (1,625)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD11       10       0.24         (1,625)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD11       10       0.24	(1,729)	1:A:10:LYS:H	1:A:12:LEU:H	14	0.24
(1,685)       1:A:46:VAL:HG23       1:A:97:SER:H       10       0.24         (1,656)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD21       2       0.24         (1,656)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD22       2       0.24         (1,656)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD23       2       0.24         (1,656)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:140:LEU:HD11       10       0.24         (1,625)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:140:LEU:HD12       10       0.24         (1,625)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD11       10       0.24         (1,625)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD12       10       0.24         (1,625)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD13       10       0.24         (1,625)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD11       10       0.24         (1,625)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD11       10       0.24         (1,625)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD11       10       0.24         (1,625)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD12       10       0.24	(1,685)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:97:SER:H	10	0.24
(1,656)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD21       2       0.24         (1,656)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD22       2       0.24         (1,656)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD23       2       0.24         (1,656)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:140:LEU:HD11       10       0.24         (1,625)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:140:LEU:HD12       10       0.24         (1,625)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD11       10       0.24         (1,625)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD12       10       0.24         (1,625)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD13       0.24         (1,625)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD11       0.24         (1,625)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD11       0.24         (1,625)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD12       10       0.24            (1,625)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD12       10       0.24	(1,685)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:97:SER:H	10	0.24
(1,656)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD22       2       0.24         (1,656)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD23       2       0.24         (1,625)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:140:LEU:HD11       10       0.24         (1,625)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:140:LEU:HD12       10       0.24         (1,625)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:140:LEU:HD13       10       0.24         (1,625)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD12       10       0.24         (1,625)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD13       10       0.24         (1,625)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD13       0.24         (1,625)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD11       10       0.24         (1,625)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD11       10       0.24	(1,685)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:97:SER:H	10	0.24
(1,656)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD23       2       0.24         (1,625)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:140:LEU:HD11       10       0.24         (1,625)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:140:LEU:HD12       10       0.24         (1,625)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:140:LEU:HD13       10       0.24         (1,625)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD11       10       0.24         (1,625)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD12       10       0.24         (1,625)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD13       10       0.24         (1,625)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD11       10       0.24         (1,625)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD11       10       0.24         (1,625)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD12       10       0.24	(1,656)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD21	2	0.24
(1,656)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD23       2       0.24         (1,625)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:140:LEU:HD11       10       0.24         (1,625)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:140:LEU:HD12       10       0.24         (1,625)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:140:LEU:HD13       10       0.24         (1,625)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD11       10       0.24         (1,625)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD13       10       0.24         (1,625)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD11       10       0.24         (1,625)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD11       10       0.24         (1,625)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD12       10       0.24	· · /	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD22	2	0.24
(1,625)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:140:LEU:HD12       10       0.24         (1,625)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:140:LEU:HD13       10       0.24         (1,625)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD11       10       0.24         (1,625)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD12       10       0.24         (1,625)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD13       10       0.24         (1,625)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD11       10       0.24         (1,625)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD12       10       0.24		1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD23	2	0.24
(1,625)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:140:LEU:HD12       10       0.24         (1,625)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:140:LEU:HD13       10       0.24         (1,625)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD11       10       0.24         (1,625)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD12       10       0.24         (1,625)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD13       10       0.24         (1,625)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD11       10       0.24         (1,625)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD12       10       0.24	· · /	1:A:41:LEU:HD11	1:A:140:LEU:HD11	10	0.24
(1,625)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:140:LEU:HD13       10       0.24         (1,625)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD11       10       0.24         (1,625)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD12       10       0.24         (1,625)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD13       10       0.24         (1,625)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD11       10       0.24         (1,625)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD12       10       0.24		1:A:41:LEU:HD11	1:A:140:LEU:HD12	10	0.24
(1,625)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD11       10       0.24         (1,625)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD12       10       0.24         (1,625)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD13       10       0.24         (1,625)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD11       10       0.24         (1,625)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD12       10       0.24		1:A:41:LEU:HD11	1:A:140:LEU:HD13	10	0.24
(1,625)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD12       10       0.24         (1,625)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD13       10       0.24         (1,625)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD11       10       0.24         (1,625)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD12       10       0.24		1:A:41:LEU:HD12	1:A:140:LEU:HD11	10	0.24
(1,625)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD13       10       0.24         (1,625)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD11       10       0.24         (1,625)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD12       10       0.24	, ,	1:A:41:LEU:HD12	1:A:140:LEU:HD12	10	0.24
(1,625)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD11       10       0.24         (1,625)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD12       10       0.24		1:A:41:LEU:HD12	1:A:140:LEU:HD13	10	0.24
(1,625) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:140:LEU:HD12 10 0.24		1:A:41:LEU:HD13	1:A:140:LEU:HD11	10	0.24
	,	1:A:41:LEU:HD13	1:A:140:LEU:HD12	10	0.24
(1,020)   1.A.41.DEU.HD13   1.A.140.DEU.HD13   10   0.24	(1,625)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:140:LEU:HD13	10	0.24



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

(1,625)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:140:LEU:HD11         15         0.24           (1,625)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:140:LEU:HD12         15         0.24           (1,625)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:140:LEU:HD13         15         0.24           (1,625)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:140:LEU:HD11         15         0.24           (1,625)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:140:LEU:HD13         15         0.24           (1,625)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:140:LEU:HD13         15         0.24           (1,625)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:140:LEU:HD13         15         0.24           (1,625)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:10:HIS:H         5         0.24           (1,625)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:10:HIS:H         5         0.24           (1,625)         1:A:10:VAL:H         1:A:88:THR:H         2         0.24           (1,625)         1:A:10:A:ASN:HD21         1:A:11:LEU:HD11         16         0.24           (1,613)         1:A:10:A:ASN:HD21         1:A:11:LEU:HD11         16         0.24           (1,595)         1:A:10:ASN:HD21         1:A:11:LEU:HD11         16         0.24           (1,595)         1:A:14:LEU:HD21	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,625) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:140:LEU:HD13 15 0.24 (1,625) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:140:LEU:HD11 15 0.24 (1,625) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:140:LEU:HD12 15 0.24 (1,625) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:140:LEU:HD13 15 0.24 (1,625) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:140:LEU:HD13 15 0.24 (1,625) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:140:LEU:HD11 15 0.24 (1,625) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:140:LEU:HD12 15 0.24 (1,625) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:140:LEU:HD13 15 0.24 (1,625) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:140:LEU:HD13 15 0.24 (1,625) 1:A:10:2VAL:H 1:A:10:HIS:H 5 0.24 (1,612) 1:A:10:2VAL:H 1:A:10:HIS:H 5 0.24 (1,612) 1:A:10:2VAL:H 1:A:10:HIS:H 5 0.24 (1,612) 1:A:10:ASN:HD21 1:A:12:LEU:HD11 16 0.24 (1,595) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD12 16 0.24 (1,595) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD12 16 0.24 (1,595) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD12 16 0.24 (1,483) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:49:LYS:H 9 0.24 (1,419) 1:A:12:ALA:H 1:A:121:LEU:HD21 8 0.24 (1,419) 1:A:12:ALA:H 1:A:121:LEU:HD21 8 0.24 (1,419) 1:A:12:ALA:H 1:A:121:LEU:HD23 8 0.24 (1,419) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD11 9 0.24 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD11 9 0.24 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD11 9 0.24 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD11 9 0.24 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD11 1 0.24 (1,259) 1:A:51:LEU:HD12 1:A:71:LE:HD11 20 0.24 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:LE:HD13 20 0.24 (1,259) 1:A:	(1,625)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:140:LEU:HD11	15	0.24
(1,625)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:140:LEU:HD12         15         0.24           (1,625)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:140:LEU:HD12         15         0.24           (1,625)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:140:LEU:HD13         15         0.24           (1,625)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:140:LEU:HD13         15         0.24           (1,625)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:140:LEU:HD13         15         0.24           (1,625)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:10:HIS:H         5         0.24           (1,613)         1:A:115:CYS:H         1:A:101:HIS:H         5         0.24           (1,612)         1:A:102:VAL:H         1:A:88:THR:H         2         0.24           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         16         0.24           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:12:LEU:HD13         16         0.24           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:12:LEU:HD13         16         0.24           (1,483)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:49:LYS:H         9         0.24           (1,483)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:49:LYS:H         9         0.24           (1,4493)         1:A:120:ALA:H         1:A:	(1,625)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:140:LEU:HD12	15	0.24
(1,625) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:140:LEU:HD12 15 0.24 (1,625) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:140:LEU:HD13 15 0.24 (1,625) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:140:LEU:HD11 15 0.24 (1,625) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:140:LEU:HD11 15 0.24 (1,625) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:140:LEU:HD13 15 0.24 (1,625) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:140:LEU:HD13 15 0.24 (1,625) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:140:LEU:HD13 15 0.24 (1,613) 1:A:115:CYS:H 1:A:101:HIS:H 5 0.24 (1,612) 1:A:102:VAL:H 1:A:88:THR:H 2 0.24 (1,595) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD11 16 0.24 (1,595) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD11 16 0.24 (1,595) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD13 16 0.24 (1,483) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:49:LYS:H 9 0.24 (1,483) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:49:LYS:H 9 0.24 (1,483) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:49:LYS:H 9 0.24 (1,483) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:49:LYS:H 9 0.24 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD12 8 0.24 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD12 8 0.24 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD12 8 0.24 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD12 9 0.24 (1,408) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD11 9 0.24 (1,408) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD13 9 0.24 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD13 9 0.24 (1,259) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD13 19 0.24 (1,259) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD13 19 0.24 (1	(1,625)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:140:LEU:HD13	15	0.24
(1,625)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:410:LEU:HD13         15         0.24           (1,625)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:140:LEU:HD11         15         0.24           (1,625)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:140:LEU:HD12         15         0.24           (1,625)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:140:LEU:HD13         15         0.24           (1,613)         1:A:10:CYS:H         1:A:101:HIS:H         5         0.24           (1,612)         1:A:102:VAL:H         1:A:88:THR:H         2         0.24           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         16         0.24           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD12         16         0.24           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         16         0.24           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         16         0.24           (1,483)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:49:LYS:H         9         0.24           (1,483)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:49:LYS:H         9         0.24           (1,483)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:49:LYS:H         9         0.24           (1,419)         1:A:12:CALA:H         1:A	(1,625)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:140:LEU:HD11	15	0.24
(1,625)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:140:LEU:HD11         15         0.24           (1,625)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:140:LEU:HD12         15         0.24           (1,625)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:140:LEU:HD13         15         0.24           (1,613)         1:A:115:CYS:H         1:A:101:HIS:H         5         0.24           (1,612)         1:A:102:VAL:H         1:A:88:THR:H         2         0.24           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         16         0.24           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         16         0.24           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:49:LYS:H         9         0.24           (1,483)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:49:LYS:H         9         0.24           (1,483)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:49:LYS:H         9         0.24           (1,483)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:49:LYS:H         9         0.24           (1,419)         1:A:120:ALA:H         1:A:121:LEU:HD12         8         0.24           (1,419)         1:A:120:ALA:H         1:A:121:LEU:HD12         8         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:138:LEU:	(1,625)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:140:LEU:HD12	15	0.24
(1,625)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:140:LEU:HD13         15         0.24           (1,625)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:140:LEU:HD13         15         0.24           (1,613)         1:A:115:CYS:H         1:A:101:HIS:H         5         0.24           (1,612)         1:A:102:VAL:H         1:A:88:THR:H         2         0.24           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         16         0.24           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         16         0.24           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:49:LYS:H         9         0.24           (1,483)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:49:LYS:H         9         0.24           (1,483)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:49:LYS:H         9         0.24           (1,483)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:49:LYS:H         9         0.24           (1,419)         1:A:120:ALA:H         1:A:121:LEU:HD21         8         0.24           (1,419)         1:A:120:ALA:H         1:A:121:LEU:HD23         8         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:138:LEU:HD11         9         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:138:LEU:H	(1,625)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:140:LEU:HD13	15	0.24
(1,625) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:140:LEU:HD13 15 0.24 (1,613) 1:A:115:CYS:H 1:A:101:HIS:H 5 0.24 (1,612) 1:A:102:VAL:H 1:A:88:THR:H 2 0.24 (1,595) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD11 16 0.24 (1,595) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD12 16 0.24 (1,595) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD13 16 0.24 (1,595) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD13 16 0.24 (1,483) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:49:LYS:H 9 0.24 (1,483) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:49:LYS:H 9 0.24 (1,483) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:49:LYS:H 9 0.24 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD21 8 0.24 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD21 8 0.24 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD22 8 0.24 (1,408) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD12 9 0.24 (1,408) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD11 9 0.24 (1,408) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD11 9 0.24 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD13 9 0.24 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD11 9 0.24 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD11 1 9 0.24 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD11 1 9 0.24 (1,409) 1:A:6:VAL:HG23 1:A:97:SER:H 10 0.24 (1,400) 1:A:6:VAL:HG23 1:A:97:SER:H 10 0.24 (1,401) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:97:SER:H 10 0.24 (1,402) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:97:SER:H 10 0.24 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD11 20 0.24 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD11 20 0.24	(1,625)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:140:LEU:HD11	15	0.24
(1,613) 1:A:115:CYS:H 1:A:101:HIS:H 5 0.24 (1,612) 1:A:102:VAL:H 1:A:88:THR:H 2 0.24 (1,595) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD11 16 0.24 (1,595) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD12 16 0.24 (1,595) 1:A:104:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD13 16 0.24 (1,483) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:49:LYS:H 9 0.24 (1,483) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:49:LYS:H 9 0.24 (1,483) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:49:LYS:H 9 0.24 (1,483) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:49:LYS:H 9 0.24 (1,483) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:49:LYS:H 9 0.24 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD21 8 0.24 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD22 8 0.24 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD22 8 0.24 (1,419) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD23 8 0.24 (1,408) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD11 9 0.24 (1,408) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD11 9 0.24 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD11 9 0.24 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD11 9 0.24 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD13 9 0.24 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD13 9 0.24 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD11 9 0.24 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD13 9 0.24 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD14 9 0.24 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD11 9 0.24 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD14 9 0.24 (1,408) 1:A:41:LEU:HD14 1:A:41:LEU:HD15 9 0.24 (1,408) 1:A:41:LEU:HD14 1:A:41:LEU:HD15 1 0.24 (1,259) 1:A:51:LE	(1,625)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:140:LEU:HD12	15	0.24
(1,612)         1:A:102:VAL:H         1:A:88:THR:H         2         0.24           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         16         0.24           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         16         0.24           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:412:LEU:HD13         16         0.24           (1,483)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:49:LYS:H         9         0.24           (1,483)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:49:LYS:H         9         0.24           (1,483)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:49:LYS:H         9         0.24           (1,483)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:49:LYS:H         9         0.24           (1,483)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:49:LYS:H         9         0.24           (1,419)         1:A:120:ALA:H         1:A:121:LEU:HD21         8         0.24           (1,419)         1:A:120:ALA:H         1:A:121:LEU:HD23         8         0.24           (1,419)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:138:LEU:HD11         9         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:138:LEU:HD13         9         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:138:LEU:H	(1,625)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:140:LEU:HD13	15	0.24
(1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         16         0.24           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD12         16         0.24           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         16         0.24           (1,483)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:49:LYS:H         9         0.24           (1,483)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:49:LYS:H         9         0.24           (1,483)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:49:LYS:H         9         0.24           (1,419)         1:A:120:ALA:H         1:A:121:LEU:HD21         8         0.24           (1,419)         1:A:120:ALA:H         1:A:121:LEU:HD22         8         0.24           (1,419)         1:A:120:ALA:H         1:A:121:LEU:HD23         8         0.24           (1,419)         1:A:120:ALA:H         1:A:121:LEU:HD23         8         0.24           (1,419)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:138:LEU:HD12         9         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:138:LEU:HD11         9         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:138:LEU:HD13         9         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD13         1:A	(1,613)	1:A:115:CYS:H	1:A:101:HIS:H	5	0.24
(1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD12         16         0.24           (1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         16         0.24           (1,483)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:49:LYS:H         9         0.24           (1,483)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:49:LYS:H         9         0.24           (1,483)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:49:LYS:H         9         0.24           (1,419)         1:A:120:ALA:H         1:A:121:LEU:HD21         8         0.24           (1,419)         1:A:120:ALA:H         1:A:121:LEU:HD22         8         0.24           (1,419)         1:A:120:ALA:H         1:A:121:LEU:HD23         8         0.24           (1,419)         1:A:121:LEU:HD11         1:A:138:LEU:HD11         9         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:138:LEU:HD12         9         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:138:LEU:HD13         9         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:138:LEU:HD13         9         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:138:LEU:HD13         9         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD13         1:	(1,612)	1:A:102:VAL:H	1:A:88:THR:H	2	0.24
(1,595)         1:A:104:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         16         0.24           (1,483)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:49:LYS:H         9         0.24           (1,483)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:49:LYS:H         9         0.24           (1,483)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:49:LYS:H         9         0.24           (1,419)         1:A:120:ALA:H         1:A:121:LEU:HD21         8         0.24           (1,419)         1:A:120:ALA:H         1:A:121:LEU:HD23         8         0.24           (1,419)         1:A:120:ALA:H         1:A:121:LEU:HD23         8         0.24           (1,419)         1:A:120:ALA:H         1:A:138:LEU:HD12         9         0.24           (1,419)         1:A:120:ALA:H         1:A:138:LEU:HD11         9         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:138:LEU:HD12         9         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:138:LEU:HD13         9         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:138:LEU:HD13         9         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:138:LEU:HD13         9         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:138:L	(1,595)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD11	16	0.24
(1,483)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:49:LYS:H         9         0.24           (1,483)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:49:LYS:H         9         0.24           (1,483)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:49:LYS:H         9         0.24           (1,419)         1:A:120:ALA:H         1:A:121:LEU:HD21         8         0.24           (1,419)         1:A:120:ALA:H         1:A:121:LEU:HD22         8         0.24           (1,419)         1:A:120:ALA:H         1:A:13:LEU:HD23         8         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:138:LEU:HD11         9         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:138:LEU:HD12         9         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:138:LEU:HD13         9         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:138:LEU:HD12         9         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:138:LEU:HD13         9         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:138:LEU:HD12         9         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:138:LEU:HD13         9         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:13:9	(1,595)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD12	16	0.24
(1,483)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:49:LYS:H         9         0.24           (1,483)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:49:LYS:H         9         0.24           (1,483)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:49:LYS:H         9         0.24           (1,419)         1:A:120:ALA:H         1:A:121:LEU:HD21         8         0.24           (1,419)         1:A:120:ALA:H         1:A:121:LEU:HD22         8         0.24           (1,419)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:138:LEU:HD12         8         0.24           (1,419)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:138:LEU:HD11         9         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:138:LEU:HD12         9         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:138:LEU:HD13         9         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:138:LEU:HD12         9         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:138:LEU:HD13         9         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:138:LEU:HD13         9         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:138:LEU:HD13         9         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:1	(1,595)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD13	16	0.24
(1,483)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:49:LYS:H         9         0.24           (1,483)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:49:LYS:H         9         0.24           (1,419)         1:A:120:ALA:H         1:A:121:LEU:HD21         8         0.24           (1,419)         1:A:120:ALA:H         1:A:121:LEU:HD22         8         0.24           (1,419)         1:A:120:ALA:H         1:A:121:LEU:HD23         8         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:138:LEU:HD11         9         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:138:LEU:HD12         9         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:138:LEU:HD13         9         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:138:LEU:HD11         9         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:138:LEU:HD13         9         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:138:LEU:HD13         9         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:138:LEU:HD13         9         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:138:LEU:HD13         9         0.24           (1,409)         1:A:46:VAL:HG23         1:A	· · /	1:A:46:VAL:HG21	1:A:49:LYS:H	9	0.24
(1,483)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:49:LYS:H         9         0.24           (1,419)         1:A:120:ALA:H         1:A:121:LEU:HD21         8         0.24           (1,419)         1:A:120:ALA:H         1:A:121:LEU:HD22         8         0.24           (1,419)         1:A:120:ALA:H         1:A:121:LEU:HD23         8         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:138:LEU:HD11         9         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:138:LEU:HD12         9         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:138:LEU:HD13         9         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:138:LEU:HD11         9         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:138:LEU:HD12         9         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:138:LEU:HD13         9         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:138:LEU:HD11         9         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:138:LEU:HD13         9         0.24           (1,408)         1:A:44:LEU:HD13         1:A:138:LEU:HD13         9         0.24           (1,409)         1:A:46:VAL:HG21 <td< td=""><td></td><td>1:A:46:VAL:HG22</td><td>1:A:49:LYS:H</td><td>9</td><td>0.24</td></td<>		1:A:46:VAL:HG22	1:A:49:LYS:H	9	0.24
(1,419)         1:A:120:ALA:H         1:A:121:LEU:HD21         8         0.24           (1,419)         1:A:120:ALA:H         1:A:121:LEU:HD22         8         0.24           (1,419)         1:A:120:ALA:H         1:A:121:LEU:HD23         8         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:138:LEU:HD11         9         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:138:LEU:HD12         9         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:138:LEU:HD11         9         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:138:LEU:HD12         9         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:138:LEU:HD13         9         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:138:LEU:HD13         9         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:138:LEU:HD13         9         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:138:LEU:HD12         9         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:138:LEU:HD13         9         0.24           (1,408)         1:A:44:LEU:HD13         1:A:138:LEU:HD13         9         0.24           (1,409)         1:A:46:VAL:HG21	_ `	1:A:46:VAL:HG23	1:A:49:LYS:H	9	
(1,419)         1:A:120:ALA:H         1:A:121:LEU:HD22         8         0.24           (1,419)         1:A:120:ALA:H         1:A:121:LEU:HD23         8         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:138:LEU:HD11         9         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:138:LEU:HD12         9         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:138:LEU:HD11         9         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:138:LEU:HD12         9         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:138:LEU:HD13         9         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:138:LEU:HD13         9         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:138:LEU:HD12         9         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:138:LEU:HD13         9         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:138:LEU:HD13         9         0.24           (1,408)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:97:SER:H         10         0.24           (1,409)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:97:SER:H         10         0.24           (1,40)         1:A:46:VAL:HG23	· · /	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD21	8	0.24
(1,419)         1:A:120:ALA:H         1:A:121:LEU:HD23         8         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:138:LEU:HD11         9         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:138:LEU:HD12         9         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:138:LEU:HD13         9         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:138:LEU:HD11         9         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:138:LEU:HD12         9         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:138:LEU:HD13         9         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:138:LEU:HD12         9         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:138:LEU:HD12         9         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:138:LEU:HD13         9         0.24           (1,408)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:99:SER:H         10         0.24           (1,40)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:97:SER:H         10         0.24           (1,40)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:97:SER:H         10         0.24           (1,299)         1:A:15:MET:H         1:A:3	· · /	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD22	8	0.24
(1,408)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:138:LEU:HD12         9         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:138:LEU:HD13         9         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:138:LEU:HD11         9         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:138:LEU:HD12         9         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:138:LEU:HD13         9         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:138:LEU:HD11         9         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:138:LEU:HD12         9         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:138:LEU:HD13         9         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:138:LEU:HD13         9         0.24           (1,408)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:97:SER:H         10         0.24           (1,40)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:97:SER:H         10         0.24           (1,40)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:97:SER:H         10         0.24           (1,299)         1:A:15:MET:H         1:A:34:TRP:H         14         0.24           (1,299)         1:A:6:GLU:H         1:A:8:LEU:		1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD23	8	0.24
(1,408)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:138:LEU:HD12         9         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:138:LEU:HD13         9         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:138:LEU:HD11         9         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:138:LEU:HD12         9         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:138:LEU:HD13         9         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:138:LEU:HD12         9         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:138:LEU:HD13         9         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:138:LEU:HD13         9         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:97:SER:H         10         0.24           (1,409)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:97:SER:H         10         0.24           (1,40)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:97:SER:H         10         0.24           (1,40)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:97:SER:H         10         0.24           (1,299)         1:A:15:MET:H         1:A:34:TRP:H         14         0.24           (1,299)         1:A:6:GLU:H         1:A:71:ILE:HD	(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD11	9	0.24
(1,408)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:138:LEU:HD13         9         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:138:LEU:HD11         9         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:138:LEU:HD12         9         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:138:LEU:HD13         9         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:138:LEU:HD12         9         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:138:LEU:HD13         9         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:97:SER:H         10         0.24           (1,408)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:97:SER:H         10         0.24           (1,40)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:97:SER:H         10         0.24           (1,40)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:97:SER:H         10         0.24           (1,307)         1:A:32:GLU:H         1:A:34:TRP:H         14         0.24           (1,299)         1:A:6:GLU:H         1:A:8:LYS:H         12         0.24           (1,259)         1:A:51:LEU:HD21         1:A:71:ILE:HD11         20         0.24           (1,259)         1:A:51:LEU:HD21         1:A:71:ILE:HD11 </td <td>· · /</td> <td>1:A:41:LEU:HD11</td> <td>1:A:138:LEU:HD12</td> <td>9</td> <td>0.24</td>	· · /	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD12	9	0.24
(1,408)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:138:LEU:HD11         9         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:138:LEU:HD12         9         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:138:LEU:HD13         9         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:138:LEU:HD11         9         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:138:LEU:HD12         9         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:138:LEU:HD13         9         0.24           (1,408)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:97:SER:H         10         0.24           (1,40)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:97:SER:H         10         0.24           (1,40)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:97:SER:H         10         0.24           (1,307)         1:A:33:GLU:H         1:A:34:TRP:H         14         0.24           (1,299)         1:A:15:MET:H         1:A:18:GLU:H         6         0.24           (1,284)         1:A:6:GLU:H         1:A:8:LYS:H         12         0.24           (1,259)         1:A:51:LEU:HD21         1:A:71:ILE:HD11         20         0.24           (1,259)         1:A:51:LEU:HD21         1:A:71:ILE:HD13	(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD13	9	0.24
(1,408)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:138:LEU:HD12       9       0.24         (1,408)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:138:LEU:HD13       9       0.24         (1,408)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:138:LEU:HD11       9       0.24         (1,408)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:138:LEU:HD12       9       0.24         (1,408)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:138:LEU:HD13       9       0.24         (1,40)       1:A:46:VAL:HG21       1:A:97:SER:H       10       0.24         (1,40)       1:A:46:VAL:HG22       1:A:97:SER:H       10       0.24         (1,40)       1:A:46:VAL:HG23       1:A:97:SER:H       10       0.24         (1,307)       1:A:32:GLU:H       1:A:34:TRP:H       14       0.24         (1,299)       1:A:15:MET:H       1:A:18:GLU:H       6       0.24         (1,284)       1:A:6:GLU:H       1:A:8:LYS:H       12       0.24         (1,259)       1:A:51:LEU:HD21       1:A:71:ILE:HD11       20       0.24         (1,259)       1:A:51:LEU:HD21       1:A:71:ILE:HD13       20       0.24         (1,259)       1:A:51:LEU:HD22       1:A:71:ILE:HD11       20       0.24         (1,259)       1:A:51:LEU:HD22       1:A:71	· · /	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD11	9	0.24
(1,408)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:138:LEU:HD12       9       0.24         (1,408)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:138:LEU:HD12       9       0.24         (1,408)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:138:LEU:HD13       9       0.24         (1,40)       1:A:46:VAL:HG21       1:A:97:SER:H       10       0.24         (1,40)       1:A:46:VAL:HG22       1:A:97:SER:H       10       0.24         (1,40)       1:A:46:VAL:HG23       1:A:97:SER:H       10       0.24         (1,307)       1:A:32:GLU:H       1:A:34:TRP:H       14       0.24         (1,299)       1:A:15:MET:H       1:A:18:GLU:H       6       0.24         (1,284)       1:A:6:GLU:H       1:A:8:LYS:H       12       0.24         (1,275)       1:A:92:SER:H       1:A:99:LEU:H       17       0.24         (1,259)       1:A:51:LEU:HD21       1:A:71:ILE:HD11       20       0.24         (1,259)       1:A:51:LEU:HD21       1:A:71:ILE:HD13       20       0.24         (1,259)       1:A:51:LEU:HD22       1:A:71:ILE:HD11       20       0.24         (1,259)       1:A:51:LEU:HD22       1:A:71:ILE:HD12       20       0.24         (1,259)       1:A:51:LEU:HD22       1:A:71:ILE:H	· · /	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD12	9	0.24
(1,408)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:138:LEU:HD12         9         0.24           (1,408)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:138:LEU:HD13         9         0.24           (1,40)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:97:SER:H         10         0.24           (1,40)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:97:SER:H         10         0.24           (1,40)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:97:SER:H         10         0.24           (1,307)         1:A:32:GLU:H         1:A:34:TRP:H         14         0.24           (1,299)         1:A:15:MET:H         1:A:18:GLU:H         6         0.24           (1,284)         1:A:6:GLU:H         1:A:8:LYS:H         12         0.24           (1,275)         1:A:92:SER:H         1:A:99:LEU:H         17         0.24           (1,259)         1:A:51:LEU:HD21         1:A:71:ILE:HD11         20         0.24           (1,259)         1:A:51:LEU:HD21         1:A:71:ILE:HD13         20         0.24           (1,259)         1:A:51:LEU:HD22         1:A:71:ILE:HD11         20         0.24           (1,259)         1:A:51:LEU:HD22         1:A:71:ILE:HD11         20         0.24           (1,259)         1:A:51:LEU:HD22         1:A:71:ILE:HD12	(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD13	9	0.24
(1,408)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:138:LEU:HD13       9       0.24         (1,40)       1:A:46:VAL:HG21       1:A:97:SER:H       10       0.24         (1,40)       1:A:46:VAL:HG22       1:A:97:SER:H       10       0.24         (1,40)       1:A:46:VAL:HG23       1:A:97:SER:H       10       0.24         (1,307)       1:A:32:GLU:H       1:A:34:TRP:H       14       0.24         (1,299)       1:A:15:MET:H       1:A:18:GLU:H       6       0.24         (1,284)       1:A:6:GLU:H       1:A:8:LYS:H       12       0.24         (1,275)       1:A:92:SER:H       1:A:99:LEU:H       17       0.24         (1,259)       1:A:51:LEU:HD21       1:A:71:ILE:HD11       20       0.24         (1,259)       1:A:51:LEU:HD21       1:A:71:ILE:HD12       20       0.24         (1,259)       1:A:51:LEU:HD22       1:A:71:ILE:HD11       20       0.24         (1,259)       1:A:51:LEU:HD22       1:A:71:ILE:HD11       20       0.24         (1,259)       1:A:51:LEU:HD22       1:A:71:ILE:HD11       20       0.24         (1,259)       1:A:51:LEU:HD22       1:A:71:ILE:HD12       20       0.24	( ' /	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD11	9	0.24
(1,40)       1:A:46:VAL:HG21       1:A:97:SER:H       10       0.24         (1,40)       1:A:46:VAL:HG22       1:A:97:SER:H       10       0.24         (1,40)       1:A:46:VAL:HG23       1:A:97:SER:H       10       0.24         (1,307)       1:A:32:GLU:H       1:A:34:TRP:H       14       0.24         (1,299)       1:A:15:MET:H       1:A:18:GLU:H       6       0.24         (1,284)       1:A:6:GLU:H       1:A:8:LYS:H       12       0.24         (1,275)       1:A:92:SER:H       1:A:99:LEU:H       17       0.24         (1,259)       1:A:51:LEU:HD21       1:A:71:ILE:HD11       20       0.24         (1,259)       1:A:51:LEU:HD21       1:A:71:ILE:HD12       20       0.24         (1,259)       1:A:51:LEU:HD22       1:A:71:ILE:HD11       20       0.24         (1,259)       1:A:51:LEU:HD22       1:A:71:ILE:HD11       20       0.24         (1,259)       1:A:51:LEU:HD22       1:A:71:ILE:HD11       20       0.24         (1,259)       1:A:51:LEU:HD22       1:A:71:ILE:HD12       20       0.24	(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD12	9	0.24
(1,40)       1:A:46:VAL:HG22       1:A:97:SER:H       10       0.24         (1,40)       1:A:46:VAL:HG23       1:A:97:SER:H       10       0.24         (1,307)       1:A:32:GLU:H       1:A:34:TRP:H       14       0.24         (1,299)       1:A:15:MET:H       1:A:18:GLU:H       6       0.24         (1,284)       1:A:6:GLU:H       1:A:8:LYS:H       12       0.24         (1,275)       1:A:92:SER:H       1:A:99:LEU:H       17       0.24         (1,259)       1:A:51:LEU:HD21       1:A:71:ILE:HD11       20       0.24         (1,259)       1:A:51:LEU:HD21       1:A:71:ILE:HD13       20       0.24         (1,259)       1:A:51:LEU:HD22       1:A:71:ILE:HD11       20       0.24         (1,259)       1:A:51:LEU:HD22       1:A:71:ILE:HD11       20       0.24         (1,259)       1:A:51:LEU:HD22       1:A:71:ILE:HD12       20       0.24	(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD13	9	0.24
(1,40)       1:A:46:VAL:HG23       1:A:97:SER:H       10       0.24         (1,307)       1:A:32:GLU:H       1:A:34:TRP:H       14       0.24         (1,299)       1:A:15:MET:H       1:A:18:GLU:H       6       0.24         (1,284)       1:A:6:GLU:H       1:A:8:LYS:H       12       0.24         (1,275)       1:A:92:SER:H       1:A:99:LEU:H       17       0.24         (1,259)       1:A:51:LEU:HD21       1:A:71:ILE:HD11       20       0.24         (1,259)       1:A:51:LEU:HD21       1:A:71:ILE:HD12       20       0.24         (1,259)       1:A:51:LEU:HD22       1:A:71:ILE:HD11       20       0.24         (1,259)       1:A:51:LEU:HD22       1:A:71:ILE:HD11       20       0.24         (1,259)       1:A:51:LEU:HD22       1:A:71:ILE:HD12       20       0.24	(1,40)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:97:SER:H	10	0.24
(1,307)       1:A:32:GLU:H       1:A:34:TRP:H       14       0.24         (1,299)       1:A:15:MET:H       1:A:18:GLU:H       6       0.24         (1,284)       1:A:6:GLU:H       1:A:8:LYS:H       12       0.24         (1,275)       1:A:92:SER:H       1:A:99:LEU:H       17       0.24         (1,259)       1:A:51:LEU:HD21       1:A:71:ILE:HD11       20       0.24         (1,259)       1:A:51:LEU:HD21       1:A:71:ILE:HD12       20       0.24         (1,259)       1:A:51:LEU:HD22       1:A:71:ILE:HD11       20       0.24         (1,259)       1:A:51:LEU:HD22       1:A:71:ILE:HD11       20       0.24         (1,259)       1:A:51:LEU:HD22       1:A:71:ILE:HD12       20       0.24         (1,259)       1:A:51:LEU:HD22       1:A:71:ILE:HD12       20       0.24	(1,40)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:97:SER:H	10	0.24
(1,307)       1:A:32:GLU:H       1:A:34:TRP:H       14       0.24         (1,299)       1:A:15:MET:H       1:A:18:GLU:H       6       0.24         (1,284)       1:A:6:GLU:H       1:A:8:LYS:H       12       0.24         (1,275)       1:A:92:SER:H       1:A:99:LEU:H       17       0.24         (1,259)       1:A:51:LEU:HD21       1:A:71:ILE:HD11       20       0.24         (1,259)       1:A:51:LEU:HD21       1:A:71:ILE:HD13       20       0.24         (1,259)       1:A:51:LEU:HD22       1:A:71:ILE:HD11       20       0.24         (1,259)       1:A:51:LEU:HD22       1:A:71:ILE:HD11       20       0.24         (1,259)       1:A:51:LEU:HD22       1:A:71:ILE:HD12       20       0.24		1:A:46:VAL:HG23	1:A:97:SER:H	10	0.24
(1,299)       1:A:15:MET:H       1:A:18:GLU:H       6       0.24         (1,284)       1:A:6:GLU:H       1:A:8:LYS:H       12       0.24         (1,275)       1:A:92:SER:H       1:A:99:LEU:H       17       0.24         (1,259)       1:A:51:LEU:HD21       1:A:71:ILE:HD11       20       0.24         (1,259)       1:A:51:LEU:HD21       1:A:71:ILE:HD12       20       0.24         (1,259)       1:A:51:LEU:HD21       1:A:71:ILE:HD13       20       0.24         (1,259)       1:A:51:LEU:HD22       1:A:71:ILE:HD11       20       0.24         (1,259)       1:A:51:LEU:HD22       1:A:71:ILE:HD12       20       0.24	, ,	1:A:32:GLU:H	1:A:34:TRP:H	14	0.24
(1,284)       1:A:6:GLU:H       1:A:8:LYS:H       12       0.24         (1,275)       1:A:92:SER:H       1:A:99:LEU:H       17       0.24         (1,259)       1:A:51:LEU:HD21       1:A:71:ILE:HD11       20       0.24         (1,259)       1:A:51:LEU:HD21       1:A:71:ILE:HD12       20       0.24         (1,259)       1:A:51:LEU:HD21       1:A:71:ILE:HD13       20       0.24         (1,259)       1:A:51:LEU:HD22       1:A:71:ILE:HD11       20       0.24         (1,259)       1:A:51:LEU:HD22       1:A:71:ILE:HD12       20       0.24	( ' /	1:A:15:MET:H	1:A:18:GLU:H		0.24
(1,275)       1:A:92:SER:H       1:A:99:LEU:H       17       0.24         (1,259)       1:A:51:LEU:HD21       1:A:71:ILE:HD11       20       0.24         (1,259)       1:A:51:LEU:HD21       1:A:71:ILE:HD12       20       0.24         (1,259)       1:A:51:LEU:HD21       1:A:71:ILE:HD13       20       0.24         (1,259)       1:A:51:LEU:HD22       1:A:71:ILE:HD11       20       0.24         (1,259)       1:A:51:LEU:HD22       1:A:71:ILE:HD12       20       0.24	· · /				
(1,259)       1:A:51:LEU:HD21       1:A:71:ILE:HD11       20       0.24         (1,259)       1:A:51:LEU:HD21       1:A:71:ILE:HD12       20       0.24         (1,259)       1:A:51:LEU:HD21       1:A:71:ILE:HD13       20       0.24         (1,259)       1:A:51:LEU:HD22       1:A:71:ILE:HD11       20       0.24         (1,259)       1:A:51:LEU:HD22       1:A:71:ILE:HD12       20       0.24					
(1,259)       1:A:51:LEU:HD21       1:A:71:ILE:HD12       20       0.24         (1,259)       1:A:51:LEU:HD21       1:A:71:ILE:HD13       20       0.24         (1,259)       1:A:51:LEU:HD22       1:A:71:ILE:HD11       20       0.24         (1,259)       1:A:51:LEU:HD22       1:A:71:ILE:HD12       20       0.24         (1,259)       1:A:51:LEU:HD22       1:A:71:ILE:HD12       20       0.24	/		1:A:71:ILE:HD11		
(1,259)       1:A:51:LEU:HD21       1:A:71:ILE:HD13       20       0.24         (1,259)       1:A:51:LEU:HD22       1:A:71:ILE:HD11       20       0.24         (1,259)       1:A:51:LEU:HD22       1:A:71:ILE:HD12       20       0.24	, ,	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD12	20	
(1,259)       1:A:51:LEU:HD22       1:A:71:ILE:HD11       20       0.24         (1,259)       1:A:51:LEU:HD22       1:A:71:ILE:HD12       20       0.24	· · /		1:A:71:ILE:HD13		
(1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD12 20 0.24	,				
	( ' /				
(1,259)   1:A:51:LEU:HD22   1:A:71:ILE:HD13   20   0.24	· · /	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD13		



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

(1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD11 20 0.24 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 20 0.24 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 20 0.24 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 20 0.24 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD11 11 0.24 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD12 11 0.24 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 11 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 1 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 16 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 16 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 16 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 16 0.24 (1,227) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:122:ARG:H 16 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD11 1:A:140:LEU:HD21 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD11 1:A:140:LEU:HD22 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD11 1:A:140:LEU:HD22 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD11 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD12 1:A:140:LEU:HD21 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD22 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD21 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD21 12 0.24 (1,220) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:140:LEU:HD11 10 0.24 (1,1270) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:140:LEU:HD11 10 0.24 (1,1270) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:140:LEU:HD13 15 0.24 (1,1270) 1:A:41	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 20 0.24 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD11 11 0.24 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD12 11 0.24 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 11 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 1 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 1 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 1 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 1 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 1 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 16 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD12 1:A:122:ARG:H 16 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 16 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD11 1:A:140:LEU:HD21 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD11 1:A:140:LEU:HD21 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD11 1:A:140:LEU:HD21 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD12 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD12 1:A:140:LEU:HD21 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD21 12 0.24 (1,220) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:140:LEU:HD11 10 0.24 (1,1270) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:140:LEU:HD11 15 0.24 (1,1270) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:140:LEU:HD11 15 0.24 (1,1270) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:140:LEU:HD11 15 0.24 (1	(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD11	20	0.24
(1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD11 11 0.24 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD12 11 0.24 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 11 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 1 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 1 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD12 1:A:122:ARG:H 1 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 1 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 1 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 16 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD12 1:A:122:ARG:H 16 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 16 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:140:LEU:HD21 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD11 1:A:140:LEU:HD21 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD11 1:A:140:LEU:HD22 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD11 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD12 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD12 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD12 1:A:140:LEU:HD22 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD12 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD12 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD21 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD21 12 0.24 (1,220) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:140:LEU:HD11 10 0.24 (1,1270) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:140:LEU:HD11 15 0.24	(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD12	20	0.24
(1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD12 11 0.24 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 11 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 1 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD12 1:A:122:ARG:H 1 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 1 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 1 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 16 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 16 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 16 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 16 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:120:ARG:H 16 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD11 1:A:140:LEU:HD21 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD11 1:A:140:LEU:HD22 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD11 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD12 1:A:140:LEU:HD21 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD12 1:A:140:LEU:HD21 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD12 1:A:140:LEU:HD21 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD21 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD22 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD21 12 0.24 (1,220) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD21 10 0.24 (1,1270) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:140:LEU:HD13 10 0.24 (1,1270) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:140:LEU:HD11 10 0.24 (1,1270) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:140:LEU:HD11 10 0.24 (1,1270) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:140:LEU:HD11 15 0.24 (1,1270) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:140:LEU:HD11 15 0.24 (1,1270) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:140:LEU:HD11 15 0	(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD13	20	0.24
(1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 11 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 1 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD12 1:A:122:ARG:H 1 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 1 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 1 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 1 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 16 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD12 1:A:122:ARG:H 16 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 16 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:140:LEU:HD21 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD11 1:A:140:LEU:HD21 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD11 1:A:140:LEU:HD22 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD11 1:A:140:LEU:HD22 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD12 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD12 1:A:140:LEU:HD21 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD12 1:A:140:LEU:HD22 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD12 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,220) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,220) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,220) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD13 10 0.24 (1,1270) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:140:LEU:HD13 10 0.24 (1,1270) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:140:LEU:HD11 10 0.24 (1,1270) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:140:LEU:HD11 10 0.24 (1,1270) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:140:LEU:HD13 10 0.24 (1,1270) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:140:LEU:HD13 15 0.24 (1,1270) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:140:LEU:HD13 15 0.24 (1,1270) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:140:LEU:HD13 15	(1,248)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD11	11	0.24
(1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 1 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD12 1:A:122:ARG:H 1 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 1 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 16 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD12 1:A:122:ARG:H 16 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 16 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 16 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 16 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD11 1:A:140:LEU:HD21 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD11 1:A:140:LEU:HD22 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD11 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD12 1:A:140:LEU:HD21 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD12 1:A:140:LEU:HD22 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD12 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD21 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD21 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD22 12 0.24 (1,122) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,1220) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,1270) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:140:LEU:HD13 10 0.24 (1,1270) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:140:LEU:HD11 10 0.24 (1,1270) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:140:LEU:HD13 10 0.24 (1,1270) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:140:LEU:HD13 10 0.24 (1,1270) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:140:LEU:HD13 10 0.24 (1,1270) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:140:LEU:HD13 10 0.24 (1,1270) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:140:LEU:HD13 10 0.24 (1,1270) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:140:LEU:HD11 10 0.24 (1,1270) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:140:LEU:HD11 10 0.24 (1,1270) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:140:LEU:HD11 15 0.24 (1,1270) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:140:LEU:HD11 15 0.24 (1,1270) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:140:LEU:HD11 15	(1,248)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD12	11	0.24
(1,247)	(1,248)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD13	11	0.24
(1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 1 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 16 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD12 1:A:122:ARG:H 16 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 16 0.24 (1,247) 1:A:71:ILE:HD11 1:A:140:LEU:HD21 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD11 1:A:140:LEU:HD22 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD11 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD11 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD12 1:A:140:LEU:HD21 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD12 1:A:140:LEU:HD22 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD12 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD21 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD22 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,122) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,1220) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:140:LEU:HD13 10 0.24 (1,1270) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:140:LEU:HD11 10 0.24 (1,1270) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:140:LEU:HD11 10 0.24 (1,1270) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:140:LEU:HD11 10 0.24 (1,1270) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:140:LEU:HD13 10 0.24 (1,1270) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:140:LEU:HD11 10 0.24 (1,1270) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:140:LEU:HD11 10 0.24 (1,1270) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:140:LEU:HD11 15 0.24 (1,1270) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:140:LEU:HD11 15 0.24 (1,1270) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:140:LEU:HD11 15 0.24 (1,1270) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:140:LEU:HD11 15 0.24 (1,1270) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:140:LEU:HD13 15 0.24 (1,1270) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:140:LEU:HD11 15 0.24 (1,1270) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:140:LEU:HD11 15 0.24 (1,1270) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:140:LEU:HD13 15 0.24 (1,1270) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:140:LEU:HD11 15 0.24 (1,1270) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:140:LEU:HD11 15 0.24 (1,1270) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:140:LEU:HD11 15 0.24 (1,1270) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:140:LEU:HD11 15 0.24 (1,1270) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:140	(1,247)	1:A:121:LEU:HD11	1:A:122:ARG:H	1	0.24
(1,247)         1:A:121:LEU:HD11         1:A:122:ARG:H         16         0.24           (1,247)         1:A:121:LEU:HD12         1:A:122:ARG:H         16         0.24           (1,247)         1:A:121:LEU:HD13         1:A:122:ARG:H         16         0.24           (1,247)         1:A:71:ILE:HD11         1:A:140:LEU:HD21         12         0.24           (1,222)         1:A:71:ILE:HD11         1:A:140:LEU:HD22         12         0.24           (1,222)         1:A:71:ILE:HD11         1:A:140:LEU:HD23         12         0.24           (1,222)         1:A:71:ILE:HD12         1:A:140:LEU:HD21         12         0.24           (1,222)         1:A:71:ILE:HD12         1:A:140:LEU:HD23         12         0.24           (1,222)         1:A:71:ILE:HD12         1:A:140:LEU:HD23         12         0.24           (1,222)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD21         12         0.24           (1,222)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD21         12         0.24           (1,222)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD23         12         0.24           (1,222)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD12         10         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD1	(1,247)	1:A:121:LEU:HD12	1:A:122:ARG:H	1	0.24
(1,247) 1:A:121:LEU:HD12 1:A:122:ARG:H 16 0.24 (1,247) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 16 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD11 1:A:140:LEU:HD21 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD11 1:A:140:LEU:HD22 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD11 1:A:140:LEU:HD22 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD11 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD12 1:A:140:LEU:HD21 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD12 1:A:140:LEU:HD21 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD12 1:A:140:LEU:HD22 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD12 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD21 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD22 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD22 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,222) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD23 12 0.24 (1,161) 1:A:133:GIV:H 1:A:135:GIU:H 5 0.24 (1,161) 1:A:133:GIV:H 1:A:140:LEU:HD12 10 0.24 (1,1270) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:140:LEU:HD11 10 0.24 (1,1270) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:140:LEU:HD11 10 0.24 (1,1270) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:140:LEU:HD12 10 0.24 (1,1270) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:140:LEU:HD11 10 0.24 (1,1270) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:140:LEU:HD11 10 0.24 (1,1270) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:140:LEU:HD11 10 0.24 (1,1270) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:140:LEU:HD11 15 0.24 (1,1270) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:140:LEU:HD11 15 0.24 (1,1270) 1:A:41:LEU:HD12 1	(1,247)	1:A:121:LEU:HD13	1:A:122:ARG:H	1	0.24
(1,247)         1:A:121:LEU:HD13         1:A:122:ARG:H         16         0.24           (1,222)         1:A:71:ILE:HD11         1:A:140:LEU:HD21         12         0.24           (1,222)         1:A:71:ILE:HD11         1:A:140:LEU:HD22         12         0.24           (1,222)         1:A:71:ILE:HD12         1:A:140:LEU:HD23         12         0.24           (1,222)         1:A:71:ILE:HD12         1:A:140:LEU:HD21         12         0.24           (1,222)         1:A:71:ILE:HD12         1:A:140:LEU:HD22         12         0.24           (1,222)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD23         12         0.24           (1,222)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD21         12         0.24           (1,222)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD21         12         0.24           (1,222)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD22         12         0.24           (1,222)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD22         12         0.24           (1,222)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD23         12         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:140:LEU:HD12         10         0.24           (1,1270)         1:A:41:LE	(1,247)	1:A:121:LEU:HD11	1:A:122:ARG:H	16	0.24
(1,222)         1:A:71:ILE:HD11         1:A:140:LEU:HD21         12         0.24           (1,222)         1:A:71:ILE:HD11         1:A:140:LEU:HD22         12         0.24           (1,222)         1:A:71:ILE:HD11         1:A:140:LEU:HD23         12         0.24           (1,222)         1:A:71:ILE:HD12         1:A:140:LEU:HD21         12         0.24           (1,222)         1:A:71:ILE:HD12         1:A:140:LEU:HD22         12         0.24           (1,222)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD23         12         0.24           (1,222)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD21         12         0.24           (1,222)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD22         12         0.24           (1,222)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD22         12         0.24           (1,222)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD23         12         0.24           (1,222)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD23         12         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:13:35:GLU:H         5         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:140:LEU:HD13         10         0.24           (1,1270)         1:A:41:L	(1,247)	1:A:121:LEU:HD12	1:A:122:ARG:H	16	0.24
(1,222)         1:A:71:ILE:HD11         1:A:140:LEU:HD22         12         0.24           (1,222)         1:A:71:ILE:HD11         1:A:140:LEU:HD23         12         0.24           (1,222)         1:A:71:ILE:HD12         1:A:140:LEU:HD21         12         0.24           (1,222)         1:A:71:ILE:HD12         1:A:140:LEU:HD22         12         0.24           (1,222)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD21         12         0.24           (1,222)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD21         12         0.24           (1,222)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD22         12         0.24           (1,222)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD23         12         0.24           (1,222)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD23         12         0.24           (1,161)         1:A:133:GLY:H         1:A:135:GLU:H         5         0.24           (1,161)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:140:LEU:HD11         10         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:140:LEU:HD13         10         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:140:LEU:HD13         10         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:H	(1,247)	1:A:121:LEU:HD13	1:A:122:ARG:H	16	0.24
(1,222)         1:A:71:ILE:HD11         1:A:140:LEU:HD23         12         0.24           (1,222)         1:A:71:ILE:HD12         1:A:140:LEU:HD21         12         0.24           (1,222)         1:A:71:ILE:HD12         1:A:140:LEU:HD22         12         0.24           (1,222)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD23         12         0.24           (1,222)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD22         12         0.24           (1,222)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD22         12         0.24           (1,222)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD23         12         0.24           (1,222)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD23         12         0.24           (1,161)         1:A:133:GLY:H         1:A:135:GLU:H         5         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:140:LEU:HD11         10         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:140:LEU:HD13         10         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:140:LEU:HD13         10         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:140:LEU:HD13         10         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU	(1,222)	1:A:71:ILE:HD11	1:A:140:LEU:HD21	12	0.24
(1,222)         1:A:71:ILE:HD12         1:A:140:LEU:HD21         12         0.24           (1,222)         1:A:71:ILE:HD12         1:A:140:LEU:HD23         12         0.24           (1,222)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD21         12         0.24           (1,222)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD22         12         0.24           (1,222)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD23         12         0.24           (1,161)         1:A:133:GLY:H         1:A:135:GLU:H         5         0.24           (1,161)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:140:LEU:HD11         10         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:140:LEU:HD11         10         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:140:LEU:HD13         10         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:140:LEU:HD11         10         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:140:LEU:HD13         10         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:140:LEU:HD13         10         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:140:LEU:HD13         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD13	(1,222)	1:A:71:ILE:HD11	1:A:140:LEU:HD22	12	0.24
(1,222)         1:A:71:ILE:HD12         1:A:140:LEU:HD22         12         0.24           (1,222)         1:A:71:ILE:HD12         1:A:140:LEU:HD23         12         0.24           (1,222)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD21         12         0.24           (1,222)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD23         12         0.24           (1,161)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD23         12         0.24           (1,161)         1:A:133:GLY:H         1:A:135:GLU:H         5         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:140:LEU:HD11         10         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:140:LEU:HD12         10         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:140:LEU:HD13         10         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:140:LEU:HD12         10         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:140:LEU:HD13         10         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:140:LEU:HD13         10         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:140:LEU:HD13         10         0.24           (1,1270)         1:A:41:	(1,222)	1:A:71:ILE:HD11	1:A:140:LEU:HD23	12	0.24
(1,222)         1:A:71:ILE:HD12         1:A:140:LEU:HD23         12         0.24           (1,222)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD21         12         0.24           (1,222)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD22         12         0.24           (1,222)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD23         12         0.24           (1,161)         1:A:133:GLY:H         1:A:135:GLU:H         5         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:140:LEU:HD11         10         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:140:LEU:HD12         10         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:140:LEU:HD13         10         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:140:LEU:HD12         10         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:140:LEU:HD13         10         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:140:LEU:HD11         10         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:140:LEU:HD13         10         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:140:LEU:HD13         10         0.24           (1,1270)         1:A:41	(1,222)	1:A:71:ILE:HD12	1:A:140:LEU:HD21	12	0.24
(1,222)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD21         12         0.24           (1,222)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD22         12         0.24           (1,222)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD23         12         0.24           (1,161)         1:A:133:GLY:H         1:A:135:GLU:H         5         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:140:LEU:HD11         10         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:140:LEU:HD12         10         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:140:LEU:HD13         10         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:140:LEU:HD11         10         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:140:LEU:HD13         10         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:140:LEU:HD11         10         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:140:LEU:HD11         10         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:140:LEU:HD12         10         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:140:LEU:HD13         10         0.24           (1,1270)         1:A:4	(1,222)	1:A:71:ILE:HD12	1:A:140:LEU:HD22	12	0.24
(1,222)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD22         12         0.24           (1,222)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD23         12         0.24           (1,161)         1:A:133:GLY:H         1:A:135:GLU:H         5         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:140:LEU:HD11         10         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:140:LEU:HD12         10         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:140:LEU:HD13         10         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:140:LEU:HD11         10         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:140:LEU:HD13         10         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:140:LEU:HD13         10         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:140:LEU:HD12         10         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:140:LEU:HD13         10         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:140:LEU:HD11         15         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:140:LEU:HD13         15         0.24           (1,1270)         1:A:	(1,222)	1:A:71:ILE:HD12	1:A:140:LEU:HD23	12	0.24
(1,222)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD23         12         0.24           (1,161)         1:A:133:GLY:H         1:A:135:GLU:H         5         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:140:LEU:HD11         10         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:140:LEU:HD12         10         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:140:LEU:HD13         10         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:140:LEU:HD11         10         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:140:LEU:HD13         10         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:140:LEU:HD13         10         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:140:LEU:HD11         10         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:140:LEU:HD13         10         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:140:LEU:HD11         15         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:140:LEU:HD12         15         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:140:LEU:HD13         15         0.24           (1,1270)         1:A	(1,222)	1:A:71:ILE:HD13	1:A:140:LEU:HD21	12	0.24
(1,161)         1:A:133:GLY:H         1:A:135:GLU:H         5         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:140:LEU:HD11         10         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:140:LEU:HD12         10         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:140:LEU:HD13         10         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:140:LEU:HD11         10         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:140:LEU:HD12         10         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:140:LEU:HD13         10         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:140:LEU:HD12         10         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:140:LEU:HD13         10         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:140:LEU:HD11         15         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:140:LEU:HD12         15         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:140:LEU:HD13         15         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:140:LEU:HD11         15         0.24           (1,1270)         1:	(1,222)	1:A:71:ILE:HD13	1:A:140:LEU:HD22	12	0.24
(1,1270)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:140:LEU:HD11         10         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:140:LEU:HD12         10         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:140:LEU:HD13         10         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:140:LEU:HD11         10         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:140:LEU:HD12         10         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:140:LEU:HD13         10         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:140:LEU:HD11         10         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:140:LEU:HD12         10         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:140:LEU:HD13         10         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:140:LEU:HD11         15         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:140:LEU:HD13         15         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:140:LEU:HD11         15         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:140:LEU:HD13         15         0.24           (1,1270)	(1,222)	1:A:71:ILE:HD13	1:A:140:LEU:HD23	12	0.24
(1,1270)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:140:LEU:HD12         10         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:140:LEU:HD13         10         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:140:LEU:HD11         10         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:140:LEU:HD12         10         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:140:LEU:HD13         10         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:140:LEU:HD11         10         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:140:LEU:HD13         10         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:140:LEU:HD13         10         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:140:LEU:HD11         15         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:140:LEU:HD13         15         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:140:LEU:HD11         15         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:140:LEU:HD13         15         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:140:LEU:HD13         15         0.24           (1,1270)	(1,161)	1:A:133:GLY:H	1:A:135:GLU:H	5	0.24
(1,1270)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:140:LEU:HD13         10         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:140:LEU:HD11         10         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:140:LEU:HD12         10         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:140:LEU:HD13         10         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:140:LEU:HD11         10         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:140:LEU:HD12         10         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:140:LEU:HD13         10         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:140:LEU:HD11         15         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:140:LEU:HD13         15         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:140:LEU:HD11         15         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:140:LEU:HD13         15         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:140:LEU:HD13         15         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:140:LEU:HD11         15         0.24           (1,1270)	(1,1270)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:140:LEU:HD11	10	0.24
(1,1270)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:140:LEU:HD11         10         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:140:LEU:HD12         10         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:140:LEU:HD13         10         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:140:LEU:HD11         10         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:140:LEU:HD12         10         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:140:LEU:HD13         10         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:140:LEU:HD12         15         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:140:LEU:HD13         15         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:140:LEU:HD11         15         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:140:LEU:HD12         15         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:140:LEU:HD13         15         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:140:LEU:HD13         15         0.24           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:140:LEU:HD11         15         0.24           (1,1270)	(1,1270)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:140:LEU:HD12	10	0.24
(1,1270)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD12       10       0.24         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD13       10       0.24         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD11       10       0.24         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD12       10       0.24         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD13       10       0.24         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:140:LEU:HD11       15       0.24         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:140:LEU:HD12       15       0.24         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD11       15       0.24         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD12       15       0.24         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD13       15       0.24         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD11       15       0.24 <td>(1,1270)</td> <td>1:A:41:LEU:HD11</td> <td>1:A:140:LEU:HD13</td> <td>10</td> <td>0.24</td>	(1,1270)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:140:LEU:HD13	10	0.24
(1,1270)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD13       10       0.24         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD11       10       0.24         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD12       10       0.24         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD13       10       0.24         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:140:LEU:HD11       15       0.24         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:140:LEU:HD12       15       0.24         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD11       15       0.24         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD12       15       0.24         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD13       15       0.24         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD11       15       0.24         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD11       15       0.24         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD11       15       0.24         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD12       15       0.24	(1,1270)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:140:LEU:HD11	10	0.24
(1,1270)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD11       10       0.24         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD12       10       0.24         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD13       10       0.24         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:140:LEU:HD11       15       0.24         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:140:LEU:HD12       15       0.24         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD11       15       0.24         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD12       15       0.24         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD13       15       0.24         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD11       15       0.24         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD11       15       0.24         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD12       15       0.24         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD12       15       0.24	(1,1270)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:140:LEU:HD12	10	0.24
(1,1270)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD12       10       0.24         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD13       10       0.24         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:140:LEU:HD11       15       0.24         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:140:LEU:HD12       15       0.24         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:140:LEU:HD13       15       0.24         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD12       15       0.24         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD13       15       0.24         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD11       15       0.24         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD11       15       0.24         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD11       15       0.24         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD12       15       0.24	(1,1270)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:140:LEU:HD13	10	0.24
(1,1270)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD13       10       0.24         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:140:LEU:HD11       15       0.24         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:140:LEU:HD12       15       0.24         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:140:LEU:HD13       15       0.24         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD11       15       0.24         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD12       15       0.24         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD11       15       0.24         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD11       15       0.24         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD12       15       0.24         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD12       15       0.24          (1,1270)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD12       15       0.24	(1,1270)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:140:LEU:HD11	10	0.24
(1,1270)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:140:LEU:HD11       15       0.24         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:140:LEU:HD12       15       0.24         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:140:LEU:HD13       15       0.24         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD11       15       0.24         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD12       15       0.24         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD13       15       0.24         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD11       15       0.24         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD12       15       0.24	(1,1270)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:140:LEU:HD12	10	0.24
(1,1270)     1:A:41:LEU:HD11     1:A:140:LEU:HD12     15     0.24       (1,1270)     1:A:41:LEU:HD11     1:A:140:LEU:HD13     15     0.24       (1,1270)     1:A:41:LEU:HD12     1:A:140:LEU:HD11     15     0.24       (1,1270)     1:A:41:LEU:HD12     1:A:140:LEU:HD12     15     0.24       (1,1270)     1:A:41:LEU:HD12     1:A:140:LEU:HD13     15     0.24       (1,1270)     1:A:41:LEU:HD13     1:A:140:LEU:HD11     15     0.24       (1,1270)     1:A:41:LEU:HD13     1:A:140:LEU:HD12     15     0.24       (1,1270)     1:A:41:LEU:HD13     1:A:140:LEU:HD12     15     0.24	(1,1270)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:140:LEU:HD13	10	0.24
(1,1270)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:140:LEU:HD13       15       0.24         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD11       15       0.24         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD12       15       0.24         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD13       15       0.24         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD11       15       0.24         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD12       15       0.24	(1,1270)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:140:LEU:HD11	15	0.24
(1,1270)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD11       15       0.24         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD12       15       0.24         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD13       15       0.24         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD11       15       0.24         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD12       15       0.24         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD12       15       0.24	(1,1270)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:140:LEU:HD12	15	0.24
(1,1270)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD12       15       0.24         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD13       15       0.24         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD11       15       0.24         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD12       15       0.24	(1,1270)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:140:LEU:HD13	15	0.24
(1,1270)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD12       15       0.24         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD13       15       0.24         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD11       15       0.24         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD12       15       0.24	(1,1270)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:140:LEU:HD11	15	0.24
(1,1270)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD11       15       0.24         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD12       15       0.24		1:A:41:LEU:HD12	1:A:140:LEU:HD12	15	0.24
(1,1270)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD11       15       0.24         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD12       15       0.24	(1,1270)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:140:LEU:HD13	15	0.24
		1:A:41:LEU:HD13	1:A:140:LEU:HD11	15	0.24
(1 1970) 1.A.41.I FILID19 1.A.140.I FILID19 15 0.04	(1,1270)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:140:LEU:HD12	15	0.24
(1,1270)  1:A:41:LEU:DD13   1:A:140:LEU:DD13   15   0.24	(1,1270)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:140:LEU:HD13	15	0.24
(1,1258) 1:A:115:CYS:H 1:A:101:HIS:H 5 0.24	(1,1258)	1:A:115:CYS:H	1:A:101:HIS:H	5	0.24
(1,1257) 1:A:102:VAL:H 1:A:88:THR:H 2 0.24		1:A:102:VAL:H	1:A:88:THR:H	2	0.24



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1240)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD11	16	0.24
(1,1240)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD12	16	0.24
(1,1240)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD13	16	0.24
(1,1128)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:49:LYS:H	9	0.24
(1,1128)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:49:LYS:H	9	0.24
(1,1128)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:49:LYS:H	9	0.24
(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD21	2	0.24
(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD22	2	0.24
(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD23	2	0.24
(1,1064)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD21	8	0.24
(1,1064)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD22	8	0.24
(1,1064)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD23	8	0.24
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD11	9	0.24
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD12	9	0.24
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD13	9	0.24
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD11	9	0.24
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD12	9	0.24
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD13	9	0.24
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD11	9	0.24
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD12	9	0.24
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD13	9	0.24
(1,915)	1:A:42:TYR:H	1:A:54:SER:H	17	0.23
(1,904)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD11	12	0.23
(1,904)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD12	12	0.23
(1,904)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD13	12	0.23
(1,904)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD11	12	0.23
(1,904)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD12	12	0.23
(1,904)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD13	12	0.23
(1,904)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD11	12	0.23
(1,904)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD12	12	0.23
(1,904)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD13	12	0.23
(1,893)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD11	1	0.23
(1,893)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD12	1	0.23
(1,893)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD13	1	0.23
(1,893)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD11	8	0.23
(1,893)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD12	8	0.23
(1,893)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD13	8	0.23
(1,892)	1:A:121:LEU:HD11	1:A:122:ARG:H	17	0.23
(1,892)	1:A:121:LEU:HD12	1:A:122:ARG:H	17	0.23
(1,892)	1:A:121:LEU:HD13	1:A:122:ARG:H	17	0.23
(1,856)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:138:LEU:HD11	2	0.23
(1,856)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:138:LEU:HD12	2	0.23



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,856)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:138:LEU:HD13	2	0.23
(1,856)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:138:LEU:HD11	2	0.23
(1,856)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:138:LEU:HD12	2	0.23
(1,856)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:138:LEU:HD13	2	0.23
(1,856)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:138:LEU:HD11	2	0.23
(1,856)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:138:LEU:HD12	2	0.23
(1,856)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:138:LEU:HD13	2	0.23
(1,8)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:42:TYR:H	11	0.23
(1,8)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:42:TYR:H	11	0.23
(1,8)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:42:TYR:H	11	0.23
(1,776)	1:A:17:TYR:H	1:A:19:VAL:H	8	0.23
(1,685)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:97:SER:H	12	0.23
(1,685)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:97:SER:H	12	0.23
(1,685)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:97:SER:H	12	0.23
(1,671)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD11	16	0.23
(1,671)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD12	16	0.23
(1,671)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD13	16	0.23
(1,653)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:42:TYR:H	11	0.23
(1,653)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:42:TYR:H	11	0.23
(1,653)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:42:TYR:H	11	0.23
(1,630)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD21	18	0.23
(1,630)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD22	18	0.23
(1,630)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD23	18	0.23
(1,630)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD21	18	0.23
(1,630)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD22	18	0.23
(1,630)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD23	18	0.23
(1,630)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD21	18	0.23
(1,630)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD22	18	0.23
(1,630)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD23	18	0.23
(1,626)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:140:LEU:HD11	10	0.23
(1,626)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:140:LEU:HD12	10	0.23
(1,626)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:140:LEU:HD13	10	0.23
(1,626)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:140:LEU:HD11	10	0.23
(1,626)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:140:LEU:HD12	10	0.23
(1,626)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:140:LEU:HD13	10	0.23
(1,626)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:140:LEU:HD11	10	0.23
(1,626)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:140:LEU:HD12	10	0.23
(1,626)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:140:LEU:HD13	10	0.23
(1,503)	1:A:76:GLU:H	1:A:99:LEU:HD21	10	0.23
(1,503)	1:A:76:GLU:H	1:A:99:LEU:HD22	10	0.23
(1,503)	1:A:76:GLU:H	1:A:99:LEU:HD23	10	0.23
	1:A:46:VAL:HG21	1:A:49:LYS:H	6	0.23



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,483)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:49:LYS:H	6	0.23
(1,483)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:49:LYS:H	6	0.23
(1,454)	1:A:134:TYR:H	1:A:138:LEU:HD21	17	0.23
(1,454)	1:A:134:TYR:H	1:A:138:LEU:HD22	17	0.23
(1,454)	1:A:134:TYR:H	1:A:138:LEU:HD23	17	0.23
(1,452)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG21	5	0.23
(1,452)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG22	5	0.23
(1,452)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG23	5	0.23
(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD21	18	0.23
(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD22	18	0.23
(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD23	18	0.23
(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD21	6	0.23
(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD22	6	0.23
(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD23	6	0.23
(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD21	6	0.23
(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD22	6	0.23
(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD23	6	0.23
(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD21	6	0.23
(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD22	6	0.23
(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD23	6	0.23
(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD21	12	0.23
(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD22	12	0.23
(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD23	12	0.23
(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD21	12	0.23
(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD22	12	0.23
(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD23	12	0.23
(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD21	12	0.23
(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD22	12	0.23
(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD23	12	0.23
(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD21	15	0.23
(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD22	15	0.23
(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD23	15	0.23
(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD21	15	0.23
(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD22	15	0.23
(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD23	15	0.23
(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD21	15	0.23
(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD22	15	0.23
(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD23	15	0.23
(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD11	8	0.23
(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD12	8	0.23
(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD13	8	0.23
(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD11	8	0.23



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD12	8	0.23
(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD13	8	0.23
(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD11	8	0.23
(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD12	8	0.23
(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD13	8	0.23
(1,40)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:97:SER:H	12	0.23
(1,40)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:97:SER:H	12	0.23
(1,40)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:97:SER:H	12	0.23
(1,368)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:H	3	0.23
(1,270)	1:A:42:TYR:H	1:A:54:SER:H	17	0.23
(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD11	16	0.23
(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD12	16	0.23
(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD13	16	0.23
(1,259)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD11	12	0.23
(1,259)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD12	12	0.23
(1,259)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD13	12	0.23
(1,259)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD11	12	0.23
(1,259)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD12	12	0.23
(1,259)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD13	12	0.23
(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD11	12	0.23
(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD12	12	0.23
(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD13	12	0.23
(1,248)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD11	1	0.23
(1,248)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD12	1	0.23
(1,248)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD13	1	0.23
(1,248)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD11	8	0.23
(1,248)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD12	8	0.23
(1,248)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD13	8	0.23
(1,247)	1:A:121:LEU:HD11	1:A:122:ARG:H	17	0.23
(1,247)	1:A:121:LEU:HD12	1:A:122:ARG:H	17	0.23
(1,247)	1:A:121:LEU:HD13	1:A:122:ARG:H	17	0.23
(1,211)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:138:LEU:HD11	2	0.23
(1,211)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:138:LEU:HD12	2	0.23
(1,211)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:138:LEU:HD13	2	0.23
(1,211)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:138:LEU:HD11	2	0.23
(1,211)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:138:LEU:HD12	2	0.23
(1,211)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:138:LEU:HD13	2	0.23
(1,211)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:138:LEU:HD11	2	0.23
(1,211)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:138:LEU:HD12	2	0.23
(1,211)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:138:LEU:HD13	2	0.23
(1,131)	1:A:17:TYR:H	1:A:19:VAL:H	8	0.23
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD21	18	0.23



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD22	18	0.23
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD23	18	0.23
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD21	18	0.23
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD22	18	0.23
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD23	18	0.23
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD21	18	0.23
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD22	18	0.23
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD23	18	0.23
(1,1271)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:140:LEU:HD11	10	0.23
(1,1271)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:140:LEU:HD12	10	0.23
(1,1271)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:140:LEU:HD13	10	0.23
(1,1271)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:140:LEU:HD11	10	0.23
(1,1271)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:140:LEU:HD12	10	0.23
(1,1271)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:140:LEU:HD13	10	0.23
(1,1271)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:140:LEU:HD11	10	0.23
(1,1271)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:140:LEU:HD12	10	0.23
(1,1271)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:140:LEU:HD13	10	0.23
(1,1148)	1:A:76:GLU:H	1:A:99:LEU:HD21	10	0.23
(1,1148)	1:A:76:GLU:H	1:A:99:LEU:HD22	10	0.23
(1,1148)	1:A:76:GLU:H	1:A:99:LEU:HD23	10	0.23
(1,1128)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:49:LYS:H	6	0.23
(1,1128)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:49:LYS:H	6	0.23
(1,1128)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:49:LYS:H	6	0.23
(1,1099)	1:A:134:TYR:H	1:A:138:LEU:HD21	17	0.23
(1,1099)	1:A:134:TYR:H	1:A:138:LEU:HD22	17	0.23
(1,1099)	1:A:134:TYR:H	1:A:138:LEU:HD23	17	0.23
(1,1097)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG21	5	0.23
(1,1097)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG22	5	0.23
(1,1097)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG23	5	0.23
(1,1064)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD21	18	0.23
(1,1064)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD22	18	0.23
(1,1064)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD23	18	0.23
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD21	6	0.23
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD22	6	0.23
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD23	6	0.23
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD21	6	0.23
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD22	6	0.23
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD23	6	0.23
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD21	6	0.23
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD22	6	0.23
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD23	6	0.23
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD21	12	0.23



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD22	12	0.23
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD23	12	0.23
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD21	12	0.23
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD22	12	0.23
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD23	12	0.23
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD21	12	0.23
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD22	12	0.23
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD23	12	0.23
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD21	15	0.23
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD22	15	0.23
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD23	15	0.23
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD21	15	0.23
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD22	15	0.23
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD23	15	0.23
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD21	15	0.23
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD22	15	0.23
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD23	15	0.23
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD11	8	0.23
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD12	8	0.23
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD13	8	0.23
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD11	8	0.23
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD12	8	0.23
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD13	8	0.23
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD11	8	0.23
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD12	8	0.23
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD13	8	0.23
(1,1013)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:H	3	0.23
(1,974)	1:A:79:LEU:H	1:A:89:GLU:H	3	0.22
(1,893)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD11	15	0.22
(1,893)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD12	15	0.22
(1,893)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD13	15	0.22
(1,837)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:H	10	0.22
(1,837)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:H	10	0.22
(1,837)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:H	10	0.22
(1,806)	1:A:133:GLY:H	1:A:135:GLU:H	17	0.22
(1,760)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:H	16	0.22
(1,698)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD21	11	0.22
(1,698)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD22	11	0.22
(1,698)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD23	11	0.22
(1,692)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:115:CYS:H	15	0.22
(1,692)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:115:CYS:H	15	0.22
(1,692)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:115:CYS:H	15	0.22



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,670)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:123:PHE:H	5	0.22
(1,670)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:123:PHE:H	5	0.22
(1,670)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:123:PHE:H	5	0.22
(1,669)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:134:TYR:H	11	0.22
(1,669)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:134:TYR:H	11	0.22
(1,669)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:134:TYR:H	11	0.22
(1,625)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:140:LEU:HD11	4	0.22
(1,625)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:140:LEU:HD12	4	0.22
(1,625)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:140:LEU:HD13	4	0.22
(1,625)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:140:LEU:HD11	4	0.22
(1,625)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:140:LEU:HD12	4	0.22
(1,625)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:140:LEU:HD13	4	0.22
(1,625)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:140:LEU:HD11	4	0.22
(1,625)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:140:LEU:HD12	4	0.22
(1,625)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:140:LEU:HD13	4	0.22
(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG11	9	0.22
(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG12	9	0.22
(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG13	9	0.22
(1,571)	1:A:140:LEU:HD11	1:A:141:PHE:H	16	0.22
(1,571)	1:A:140:LEU:HD12	1:A:141:PHE:H	16	0.22
(1,571)	1:A:140:LEU:HD13	1:A:141:PHE:H	16	0.22
(1,549)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD21	11	0.22
(1,549)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD22	11	0.22
(1,549)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD23	11	0.22
(1,53)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD21	11	0.22
(1,53)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD22	11	0.22
(1,53)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD23	11	0.22
(1,47)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:115:CYS:H	15	0.22
(1,47)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:115:CYS:H	15	0.22
(1,47)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:115:CYS:H	15	0.22
(1,468)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:23:ASN:H	15	0.22
(1,468)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:23:ASN:H	15	0.22
(1,468)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:23:ASN:H	15	0.22
(1,464)	1:A:16:GLN:H	1:A:46:VAL:HG11	4	0.22
(1,464)	1:A:16:GLN:H	1:A:46:VAL:HG12	4	0.22
(1,464)	1:A:16:GLN:H	1:A:46:VAL:HG13	4	0.22
(1,453)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG21	8	0.22
(1,453)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG22	8	0.22
(1,453)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG23	8	0.22
(1,445)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:113:ARG:H	14	0.22
(1,445)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:113:ARG:H	14	0.22
(1,445)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:113:ARG:H	14	0.22



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

( / /	1 A 100 AT A TT			Violation (Å)
(1.410)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD21	9	0.22
(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD22	9	0.22
(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD23	9	0.22
(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD21	15	0.22
(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD22	15	0.22
(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD23	15	0.22
(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD11	11	0.22
(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD12	11	0.22
(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD13	11	0.22
(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD11	11	0.22
(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD12	11	0.22
(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD13	11	0.22
(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD11	11	0.22
(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD12	11	0.22
(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD13	11	0.22
(1,384)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:99:LEU:HD21	2	0.22
(1,384)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:99:LEU:HD22	2	0.22
(1,384)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:99:LEU:HD23	2	0.22
(1,384)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:99:LEU:HD21	2	0.22
(1,384)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:99:LEU:HD22	2	0.22
(1,384)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:99:LEU:HD23	2	0.22
(1,384)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:99:LEU:HD21	2	0.22
(1,384)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:99:LEU:HD22	2	0.22
(1,384)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:99:LEU:HD23	2	0.22
(1,374)	1:A:132:GLU:H	1:A:134:TYR:H	20	0.22
(1,329)	1:A:79:LEU:H	1:A:89:GLU:H	3	0.22
(1,25)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:123:PHE:H	5	0.22
(1,25)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:123:PHE:H	5	0.22
(1,25)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:123:PHE:H	5	0.22
(1,248)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD11	15	0.22
(1,248)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD12	15	0.22
(1,248)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD13	15	0.22
(1,24)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:134:TYR:H	11	0.22
(1,24)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:134:TYR:H	11	0.22
(1,24)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:134:TYR:H	11	0.22
(1,192)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:H	10	0.22
(1,192)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:H	10	0.22
(1,192)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:H	10	0.22
(1,161)	1:A:133:GLY:H	1:A:135:GLU:H	17	0.22
(1,1270)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:140:LEU:HD11	4	0.22
(1,1270)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:140:LEU:HD12	4	0.22
(1,1270)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:140:LEU:HD13	4	0.22



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1270)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:140:LEU:HD11	4	0.22
(1,1270)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:140:LEU:HD12	4	0.22
(1,1270)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:140:LEU:HD13	4	0.22
(1,1270)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:140:LEU:HD11	4	0.22
(1,1270)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:140:LEU:HD12	4	0.22
(1,1270)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:140:LEU:HD13	4	0.22
(1,1230)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG11	9	0.22
(1,1230)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG12	9	0.22
(1,1230)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG13	9	0.22
(1,1216)	1:A:140:LEU:HD11	1:A:141:PHE:H	16	0.22
(1,1216)	1:A:140:LEU:HD12	1:A:141:PHE:H	16	0.22
(1,1216)	1:A:140:LEU:HD13	1:A:141:PHE:H	16	0.22
(1,1194)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD21	11	0.22
(1,1194)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD22	11	0.22
(1,1194)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD23	11	0.22
(1,115)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:H	16	0.22
(1,1113)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:23:ASN:H	15	0.22
(1,1113)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:23:ASN:H	15	0.22
(1,1113)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:23:ASN:H	15	0.22
(1,1109)	1:A:16:GLN:H	1:A:46:VAL:HG11	4	0.22
(1,1109)	1:A:16:GLN:H	1:A:46:VAL:HG12	4	0.22
(1,1109)	1:A:16:GLN:H	1:A:46:VAL:HG13	4	0.22
(1,1098)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG21	8	0.22
(1,1098)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG22	8	0.22
(1,1098)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG23	8	0.22
(1,1090)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:113:ARG:H	14	0.22
(1,1090)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:113:ARG:H	14	0.22
(1,1090)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:113:ARG:H	14	0.22
(1,1064)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD21	9	0.22
(1,1064)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD22	9	0.22
(1,1064)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD23	9	0.22
(1,1064)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD21	15	0.22
(1,1064)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD22	15	0.22
(1,1064)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD23	15	0.22
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD11	11	0.22
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD12	11	0.22
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD13	11	0.22
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD11	11	0.22
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD12	11	0.22
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD13	11	0.22
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD11	11	0.22
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD12	11	0.22



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD13	11	0.22
(1,1029)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:99:LEU:HD21	2	0.22
(1,1029)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:99:LEU:HD22	2	0.22
(1,1029)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:99:LEU:HD23	2	0.22
(1,1029)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:99:LEU:HD21	2	0.22
(1,1029)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:99:LEU:HD22	2	0.22
(1,1029)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:99:LEU:HD23	2	0.22
(1,1029)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:99:LEU:HD21	2	0.22
(1,1029)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:99:LEU:HD22	2	0.22
(1,1029)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:99:LEU:HD23	2	0.22
(1,1019)	1:A:132:GLU:H	1:A:134:TYR:H	20	0.22
(1,982)	1:A:76:GLU:H	1:A:91:ARG:H	16	0.21
(1,974)	1:A:79:LEU:H	1:A:89:GLU:H	10	0.21
(1,944)	1:A:15:MET:H	1:A:18:GLU:H	19	0.21
(1,928)	1:A:131:GLU:H	1:A:134:TYR:H	8	0.21
(1,922)	1:A:103:PHE:H	1:A:106:GLY:H	15	0.21
(1,904)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD11	9	0.21
(1,904)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD12	9	0.21
(1,904)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD13	9	0.21
(1,904)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD11	9	0.21
(1,904)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD12	9	0.21
(1,904)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD13	9	0.21
(1,904)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD11	9	0.21
(1,904)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD12	9	0.21
(1,904)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD13	9	0.21
(1,901)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD11	16	0.21
(1,901)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD12	16	0.21
(1,901)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD13	16	0.21
(1,901)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD11	16	0.21
(1,901)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD12	16	0.21
(1,901)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD13	16	0.21
(1,901)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD11	16	0.21
(1,901)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD12	16	0.21
(1,901)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD13	16	0.21
(1,893)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD11	17	0.21
(1,893)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD12	17	0.21
(1,893)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD13	17	0.21
(1,793)	1:A:44:ASP:H	1:A:122:ARG:H	1	0.21
(1,776)	1:A:17:TYR:H	1:A:19:VAL:H	13	0.21
(1,678)	1:A:92:SER:H	1:A:99:LEU:HD11	16	0.21
(1,678)	1:A:92:SER:H	1:A:99:LEU:HD12	16	0.21
(1,678)	1:A:92:SER:H	1:A:99:LEU:HD13	16	0.21



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,671)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD11	10	0.21
(1,671)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD12	10	0.21
(1,671)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD13	10	0.21
(1,656)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD21	12	0.21
(1,656)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD22	12	0.21
(1,656)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD23	12	0.21
(1,656)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD21	14	0.21
(1,656)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD22	14	0.21
(1,656)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD23	14	0.21
(1,649)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:124:VAL:H	20	0.21
(1,649)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:H	20	0.21
(1,649)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:H	20	0.21
(1,613)	1:A:115:CYS:H	1:A:101:HIS:H	7	0.21
(1,596)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD21	19	0.21
(1,596)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD22	19	0.21
(1,596)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD23	19	0.21
(1,593)	1:A:22:ASN:HD21	1:A:23:ASN:H	7	0.21
(1,592)	1:A:22:ASN:H	1:A:22:ASN:HD21	18	0.21
(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG11	5	0.21
(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG12	5	0.21
(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG13	5	0.21
(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG11	6	0.21
(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG12	6	0.21
(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG13	6	0.21
(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG11	7	0.21
(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG12	7	0.21
(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG13	7	0.21
(1,548)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD11	4	0.21
(1,548)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD12	4	0.21
(1,548)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD13	4	0.21
(1,505)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:76:GLU:H	10	0.21
(1,505)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:76:GLU:H	10	0.21
(1,505)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:76:GLU:H	10	0.21
(1,493)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:52:PHE:H	16	0.21
(1,493)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:52:PHE:H	16	0.21
(1,493)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:52:PHE:H	16	0.21
(1,468)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:23:ASN:H	19	0.21
(1,468)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:23:ASN:H	19	0.21
(1,468)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:23:ASN:H	19	0.21
(1,453)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG21	16	0.21
(1,453)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG22	16	0.21
(1,453)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG23	16	0.21



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,445)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:113:ARG:H	15	0.21
(1,445)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:113:ARG:H	15	0.21
(1,445)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:113:ARG:H	15	0.21
(1,438)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:120:ALA:H	11	0.21
(1,438)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:120:ALA:H	11	0.21
(1,438)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:120:ALA:H	11	0.21
(1,431)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:103:PHE:H	4	0.21
(1,431)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:103:PHE:H	4	0.21
(1,431)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:103:PHE:H	4	0.21
(1,431)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:103:PHE:H	10	0.21
(1,431)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:103:PHE:H	10	0.21
(1,431)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:103:PHE:H	10	0.21
(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD21	7	0.21
(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD22	7	0.21
(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD23	7	0.21
(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD21	11	0.21
(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD22	11	0.21
(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD23	11	0.21
(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD21	3	0.21
(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD22	3	0.21
(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD23	3	0.21
(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD21	3	0.21
(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD22	3	0.21
(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD23	3	0.21
(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD21	3	0.21
(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD22	3	0.21
(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD23	3	0.21
(1,407)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:46:VAL:HG21	19	0.21
(1,407)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:46:VAL:HG22	19	0.21
(1,407)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:46:VAL:HG23	19	0.21
(1,407)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:46:VAL:HG21	19	0.21
(1,407)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:46:VAL:HG22	19	0.21
(1,407)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:46:VAL:HG23	19	0.21
(1,407)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:46:VAL:HG21	19	0.21
(1,407)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:46:VAL:HG22	19	0.21
(1,407)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:46:VAL:HG23	19	0.21
(1,4)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:124:VAL:H	20	0.21
(1,4)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:H	20	0.21
(1,4)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:H	20	0.21
(1,393)	1:A:12:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HG11	11	0.21
(1,393)	1:A:12:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HG12	11	0.21
(1,393)	1:A:12:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HG13	11	0.21
/				od on next nage



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,393)	1:A:12:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HG11	11	0.21
(1,393)	1:A:12:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HG12	11	0.21
(1,393)	1:A:12:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HG13	11	0.21
(1,393)	1:A:12:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HG11	11	0.21
(1,393)	1:A:12:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HG12	11	0.21
(1,393)	1:A:12:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HG13	11	0.21
(1,361)	1:A:45:ILE:H	1:A:122:ARG:H	15	0.21
(1,337)	1:A:76:GLU:H	1:A:91:ARG:H	16	0.21
(1,33)	1:A:92:SER:H	1:A:99:LEU:HD11	16	0.21
(1,33)	1:A:92:SER:H	1:A:99:LEU:HD12	16	0.21
(1,33)	1:A:92:SER:H	1:A:99:LEU:HD13	16	0.21
(1,329)	1:A:79:LEU:H	1:A:89:GLU:H	10	0.21
(1,299)	1:A:15:MET:H	1:A:18:GLU:H	19	0.21
(1,283)	1:A:131:GLU:H	1:A:134:TYR:H	8	0.21
(1,277)	1:A:103:PHE:H	1:A:106:GLY:H	15	0.21
(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD11	10	0.21
(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD12	10	0.21
(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD13	10	0.21
(1,259)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD11	9	0.21
(1,259)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD12	9	0.21
(1,259)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD13	9	0.21
(1,259)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD11	9	0.21
(1,259)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD12	9	0.21
(1,259)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD13	9	0.21
(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD11	9	0.21
(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD12	9	0.21
(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD13	9	0.21
(1,256)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD11	16	0.21
(1,256)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD12	16	0.21
(1,256)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD13	16	0.21
(1,256)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD11	16	0.21
(1,256)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD12	16	0.21
(1,256)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD13	16	0.21
(1,256)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD11	16	0.21
(1,256)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD12	16	0.21
(1,256)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD13	16	0.21
(1,248)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD11	17	0.21
(1,248)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD12	17	0.21
(1,248)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD13	17	0.21
(1,148)	1:A:44:ASP:H	1:A:122:ARG:H	1	0.21
(1,131)	1:A:17:TYR:H	1:A:19:VAL:H	13	0.21
(1,1258)	1:A:115:CYS:H	1:A:101:HIS:H	7	0.21



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1241)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD21	19	0.21
(1,1241)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD22	19	0.21
(1,1241)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD23	19	0.21
(1,1238)	1:A:22:ASN:HD21	1:A:23:ASN:H	7	0.21
(1,1237)	1:A:22:ASN:H	1:A:22:ASN:HD21	18	0.21
(1,1230)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG11	5	0.21
(1,1230)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG12	5	0.21
(1,1230)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG13	5	0.21
(1,1230)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG11	6	0.21
(1,1230)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG12	6	0.21
(1,1230)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG13	6	0.21
(1,1230)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG11	7	0.21
(1,1230)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG12	7	0.21
(1,1230)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG13	7	0.21
(1,1193)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD11	4	0.21
(1,1193)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD12	4	0.21
(1,1193)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD13	4	0.21
(1,1150)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:76:GLU:H	10	0.21
(1,1150)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:76:GLU:H	10	0.21
(1,1150)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:76:GLU:H	10	0.21
(1,1138)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:52:PHE:H	16	0.21
(1,1138)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:52:PHE:H	16	0.21
(1,1138)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:52:PHE:H	16	0.21
(1,1113)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:23:ASN:H	19	0.21
(1,1113)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:23:ASN:H	19	0.21
(1,1113)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:23:ASN:H	19	0.21
(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD21	12	0.21
(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD22	12	0.21
(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD23	12	0.21
(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD21	14	0.21
(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD22	14	0.21
(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD23	14	0.21
(1,1098)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG21	16	0.21
(1,1098)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG22	16	0.21
(1,1098)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG23	16	0.21
(1,1090)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:113:ARG:H	15	0.21
(1,1090)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:113:ARG:H	15	0.21
(1,1090)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:113:ARG:H	15	0.21
(1,1083)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:120:ALA:H	11	0.21
(1,1083)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:120:ALA:H	11	0.21
(1,1083)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:120:ALA:H	11	0.21
(1,1076)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:103:PHE:H	4	0.21



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1076)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:103:PHE:H	4	0.21
(1,1076)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:103:PHE:H	4	0.21
(1,1076)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:103:PHE:H	10	0.21
(1,1076)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:103:PHE:H	10	0.21
(1,1076)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:103:PHE:H	10	0.21
(1,1064)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD21	7	0.21
(1,1064)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD22	7	0.21
(1,1064)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD23	7	0.21
(1,1064)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD21	11	0.21
(1,1064)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD22	11	0.21
(1,1064)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD23	11	0.21
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD21	3	0.21
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD22	3	0.21
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD23	3	0.21
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD21	3	0.21
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD22	3	0.21
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD23	3	0.21
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD21	3	0.21
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD22	3	0.21
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD23	3	0.21
(1,1052)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:46:VAL:HG21	19	0.21
(1,1052)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:46:VAL:HG22	19	0.21
(1,1052)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:46:VAL:HG23	19	0.21
(1,1052)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:46:VAL:HG21	19	0.21
(1,1052)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:46:VAL:HG22	19	0.21
(1,1052)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:46:VAL:HG23	19	0.21
(1,1052)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:46:VAL:HG21	19	0.21
(1,1052)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:46:VAL:HG22	19	0.21
(1,1052)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:46:VAL:HG23	19	0.21
(1,1038)	1:A:12:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HG11	11	0.21
(1,1038)	1:A:12:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HG12	11	0.21
(1,1038)	1:A:12:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HG13	11	0.21
(1,1038)	1:A:12:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HG11	11	0.21
(1,1038)	1:A:12:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HG12	11	0.21
(1,1038)	1:A:12:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HG13	11	0.21
(1,1038)	1:A:12:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HG11	11	0.21
(1,1038)	1:A:12:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HG12	11	0.21
(1,1038)	1:A:12:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HG13	11	0.21
(1,1006)	1:A:45:ILE:H	1:A:122:ARG:H	15	0.21
(1,926)	1:A:110:ASN:HD22	1:A:112:LEU:H	4	0.2
(1,893)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD11	20	0.2
(1,893)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD12	20	0.2



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,893)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD13	20	0.2
(1,885)	1:A:75:VAL:H	1:A:99:LEU:HD11	19	0.2
(1,885)	1:A:75:VAL:H	1:A:99:LEU:HD12	19	0.2
(1,885)	1:A:75:VAL:H	1:A:99:LEU:HD13	19	0.2
(1,864)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:74:GLU:H	4	0.2
(1,864)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:74:GLU:H	4	0.2
(1,864)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:74:GLU:H	4	0.2
(1,837)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:H	3	0.2
(1,837)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:H	3	0.2
(1,837)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:H	3	0.2
(1,751)	1:A:105:ASP:H	1:A:113:ARG:H	14	0.2
(1,678)	1:A:92:SER:H	1:A:99:LEU:HD11	14	0.2
(1,678)	1:A:92:SER:H	1:A:99:LEU:HD12	14	0.2
(1,678)	1:A:92:SER:H	1:A:99:LEU:HD13	14	0.2
(1,671)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD11	6	0.2
(1,671)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD12	6	0.2
(1,671)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD13	6	0.2
(1,671)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD11	11	0.2
(1,671)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD12	11	0.2
(1,671)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD13	11	0.2
(1,670)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:123:PHE:H	1	0.2
(1,670)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:123:PHE:H	1	0.2
(1,670)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:123:PHE:H	1	0.2
(1,656)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD21	9	0.2
(1,656)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD22	9	0.2
(1,656)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD23	9	0.2
(1,644)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD11	5	0.2
(1,644)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD12	5	0.2
(1,644)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD13	5	0.2
(1,619)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:H	10	0.2
(1,619)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:H	10	0.2
(1,619)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:H	10	0.2
(1,612)	1:A:102:VAL:H	1:A:88:THR:H	19	0.2
(1,611)	1:A:100:GLY:H	1:A:90:VAL:H	19	0.2
(1,592)	1:A:22:ASN:H	1:A:22:ASN:HD21	7	0.2
(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG11	16	0.2
(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG12	16	0.2
(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG13	16	0.2
(1,550)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG21	3	0.2
(1,550)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG22	3	0.2
(1,550)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG23	3	0.2
(1,493)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:52:PHE:H	12	0.2



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,493)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:52:PHE:H	12	0.2
(1,493)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:52:PHE:H	12	0.2
(1,493)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:52:PHE:H	17	0.2
(1,493)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:52:PHE:H	17	0.2
(1,493)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:52:PHE:H	17	0.2
(1,468)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:23:ASN:H	16	0.2
(1,468)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:23:ASN:H	16	0.2
(1,468)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:23:ASN:H	16	0.2
(1,465)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG11	1	0.2
(1,465)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG12	1	0.2
(1,465)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG13	1	0.2
(1,465)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG11	16	0.2
(1,465)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG12	16	0.2
(1,465)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG13	16	0.2
(1,465)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG11	18	0.2
(1,465)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG12	18	0.2
(1,465)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG13	18	0.2
(1,435)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:26:GLU:H	5	0.2
(1,435)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:26:GLU:H	5	0.2
(1,435)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:26:GLU:H	5	0.2
(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD21	6	0.2
(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD22	6	0.2
(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD23	6	0.2
(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD21	1	0.2
(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD22	1	0.2
(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD23	1	0.2
(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD21	1	0.2
(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD22	1	0.2
(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD23	1	0.2
(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD21	1	0.2
(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD22	1	0.2
(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD23	1	0.2
(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD21	18	0.2
(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD22	18	0.2
(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD23	18	0.2
(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD21	18	0.2
(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD22	18	0.2
(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD23	18	0.2
(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD21	18	0.2
(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD22	18	0.2
(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD23	18	0.2
(1,33)	1:A:92:SER:H	1:A:99:LEU:HD11	14	0.2



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

(1,33) 1:A:92:SER:H 1:A:99:LEU:HD13 14 0.2 (1,281) 1:A:10:ASN:HD22 1:A:112:LEU:H 4 0.2 (1,281) 1:A:110:ASN:HD22 1:A:112:LEU:H 4 0.2 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD11 6 0.2 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD12 6 0.2 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD13 6 0.2 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD13 6 0.2 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD11 11 0.2 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD11 11 0.2 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD11 11 0.2 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD13 11 0.2 (1,26) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:123:PHE:H 1 0.2 (1,25) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:123:PHE:H 1 0.2 (1,25) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:123:PHE:H 1 0.2 (1,25) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:123:PHE:H 1 0.2 (1,25) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:123:PHE:H 1 0.2 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD11 20 0.2 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD11 20 0.2 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD11 20 0.2 (1,248) 1:A:75:VAL:H 1:A:99:LEU:HD11 19 0.2 (1,240) 1:A:75:VAL:H 1:A:99:LEU:HD11 19 0.2 (1,219) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:74:GLU:H 4 0.2 (1,219) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:74:GLU:H 4 0.2 (1,192) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:17:ASN:H 3 0.2 (1,192) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:17:ASN:H 3 0.2 (1,192) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 3 0.2 (1,192) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 3 0.2 (1,1289) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 5 0.2 (1,1264) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 10 0.2 (1,1264) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 10 0.2 (1,1264) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 10 0.2 (1,1289) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 5 0.2 (1,1289) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 5 0.2 (1,1289) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 5 0.2 (1,1264) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 10 0.2 (1,1264) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:15:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 10 0.2 (1,1264) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:15:VAL:HG11 1:A:19:VAL:HG12 16 0.2 (1,1230) 1:A:74:GLU:H 1:A:15:VAL:HG11 16 0.2 (1,1230) 1:A:74:GLU:H 1:A:15:VAL:HG12 16 0.2 (1,1138) 1:A:43:V	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,28)         1:A:110:ASN:HD22         1:A:112:LEU:H         4         0.2           (1,26)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD11         6         0.2           (1,26)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD12         6         0.2           (1,26)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD13         6         0.2           (1,26)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD12         11         0.2           (1,26)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD13         11         0.2           (1,26)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD13         11         0.2           (1,25)         1:A:43:VAL:HG21         1:A:123:PHE:H         1         0.2           (1,25)         1:A:43:VAL:HG23         1:A:123:PHE:H         1         0.2           (1,248)         1:A:120:ALA:H         1:A:121:LEU:HD11         20         0.2           (1,248)         1:A:120:ALA:H         1:A:121:LEU:HD12         20         0.2           (1,248)         1:A:75:VAL:H         1:A:99:LEU:HD12         19         0.2           (1,240)         1:A:75:VAL:H         1:A:99:LEU:HD13         19         0.2           (1,240)         1:A:75:VAL:H         1:A:99:LEU:HD13         19 <td>(1,33)</td> <td>1:A:92:SER:H</td> <td>1:A:99:LEU:HD12</td> <td>14</td> <td>0.2</td>	(1,33)	1:A:92:SER:H	1:A:99:LEU:HD12	14	0.2
(1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD11 6 0.2 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD12 6 0.2 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD13 6 0.2 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD13 11 0.2 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD11 11 0.2 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD11 11 0.2 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD12 11 0.2 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD13 11 0.2 (1,25) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:123:PHE:H 1 0.2 (1,25) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:123:PHE:H 1 0.2 (1,25) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:123:PHE:H 1 0.2 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD11 20 0.2 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD11 20 0.2 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD11 20 0.2 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 20 0.2 (1,240) 1:A:75:VAL:H 1:A:99:LEU:HD11 19 0.2 (1,240) 1:A:75:VAL:H 1:A:99:LEU:HD11 19 0.2 (1,240) 1:A:75:VAL:H 1:A:99:LEU:HD12 19 0.2 (1,219) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:74:GLU:H 4 0.2 (1,219) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:74:GLU:H 4 0.2 (1,219) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:74:GLU:H 4 0.2 (1,219) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:74:GLU:H 4 0.2 (1,192) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 3 0.2 (1,192) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 3 0.2 (1,1289) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 5 0.2 (1,1289) 1:A:17:TYR:H 1:A:117:ASN:H 3 0.2 (1,1289) 1:A:17:TYR:H 1:A:117:ASN:H 3 0.2 (1,1289) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD12 5 0.2 (1,1289) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD12 7 0.2 (1,1289) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 7 0.2 (1,1289) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 7 0.2 (1,1264) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:17:ASN:H 10 0.2 (1,1264) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:19:VAL:HG21 3 0.2 (1,1195) 1:A:123:PHE:H 1:A:124:VAL:HG21 3 0.2 (1,1195) 1:A:123:PHE:H 1:A:124:VAL:HG21 3 0.2 (1,1	(1,33)	1:A:92:SER:H	1:A:99:LEU:HD13	14	0.2
(1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD12 6 0.2 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD13 6 0.2 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD11 11 0.2 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD11 11 0.2 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD12 11 0.2 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD13 11 0.2 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD13 11 0.2 (1,25) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:123:PHE:H 1 0.2 (1,25) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:123:PHE:H 1 0.2 (1,25) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:123:PHE:H 1 0.2 (1,25) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:123:PHE:H 1 0.2 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD11 20 0.2 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD12 20 0.2 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD12 20 0.2 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD12 20 0.2 (1,240) 1:A:75:VAL:H 1:A:99:LEU:HD11 19 0.2 (1,240) 1:A:75:VAL:H 1:A:99:LEU:HD12 19 0.2 (1,240) 1:A:75:VAL:H 1:A:99:LEU:HD12 19 0.2 (1,219) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:74:GLU:H 4 0.2 (1,219) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:74:GLU:H 4 0.2 (1,219) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:74:GLU:H 4 0.2 (1,219) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:74:GLU:H 4 0.2 (1,192) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 3 0.2 (1,192) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 3 0.2 (1,192) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:117:ASN:H 3 0.2 (1,1289) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 5 0.2 (1,1289) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 5 0.2 (1,1289) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 5 0.2 (1,1264) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 10 0.2 (1,1264) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 10 0.2 (1,1264) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 10 0.2 (1,1264) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:17:ASN:H 10 0.2 (1,1264) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:19:	(1,281)	1:A:110:ASN:HD22	1:A:112:LEU:H	4	0.2
(1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD13 6 0.2 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD11 11 0.2 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD12 11 0.2 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD12 11 0.2 (1,26) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:129:LEU:HD13 11 0.2 (1,25) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:123:PHE:H 1 0.2 (1,25) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:123:PHE:H 1 0.2 (1,25) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:123:PHE:H 1 0.2 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD11 20 0.2 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD11 20 0.2 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD12 20 0.2 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 20 0.2 (1,240) 1:A:75:VAL:H 1:A:99:LEU:HD11 19 0.2 (1,240) 1:A:75:VAL:H 1:A:99:LEU:HD12 19 0.2 (1,240) 1:A:75:VAL:H 1:A:99:LEU:HD13 19 0.2 (1,240) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:74:GLU:H 4 0.2 (1,219) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:74:GLU:H 4 0.2 (1,219) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:74:GLU:H 4 0.2 (1,192) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 3 0.2 (1,192) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 3 0.2 (1,192) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 3 0.2 (1,1289) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 5 0.2 (1,1289) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 5 0.2 (1,1289) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 5 0.2 (1,1264) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 10 0.2 (1,1289) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 5 0.2 (1,1289) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 5 0.2 (1,1289) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 5 0.2 (1,1289) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 5 0.2 (1,1264) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 10 0.2 (1,1264) 1:A:19:VAL:HG11	(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD11	6	0.2
(1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD11 11 0.2 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD12 11 0.2 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD13 11 0.2 (1,25) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:123:PHE:H 1 0.2 (1,25) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:123:PHE:H 1 0.2 (1,25) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:123:PHE:H 1 0.2 (1,25) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:123:PHE:H 1 0.2 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD11 20 0.2 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD11 20 0.2 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD11 20 0.2 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 20 0.2 (1,240) 1:A:75:VAL:H 1:A:99:LEU:HD13 19 0.2 (1,240) 1:A:75:VAL:H 1:A:99:LEU:HD12 19 0.2 (1,240) 1:A:75:VAL:H 1:A:99:LEU:HD12 19 0.2 (1,240) 1:A:75:VAL:H 1:A:99:LEU:HD13 19 0.2 (1,219) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:74:GLU:H 4 0.2 (1,219) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:74:GLU:H 4 0.2 (1,219) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:74:GLU:H 4 0.2 (1,192) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 3 0.2 (1,192) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 3 0.2 (1,192) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:117:ASN:H 3 0.2 (1,192) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:117:ASN:H 3 0.2 (1,1289) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 5 0.2 (1,1289) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 5 0.2 (1,1264) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 10 0.2 (1,1264) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 10 0.2 (1,1264) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 10 0.2 (1,1264) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:117:ASN:H 10 0.2 (1,1264) 1:A:19:VAL:HG14 1:A:18:S:THR:H 19 0.2 (1,1230) 1:A:17:GU:H 1:A:17:S:VAL:HG13 16 0.2 (1,1230) 1:A:	(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD12	6	0.2
(1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD12 11 0.2 (1,26) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD13 11 0.2 (1,25) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:123:PHE:H 1 0.2 (1,25) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:123:PHE:H 1 0.2 (1,25) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:123:PHE:H 1 0.2 (1,25) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:123:PHE:H 1 0.2 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD11 20 0.2 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD11 20 0.2 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD12 20 0.2 (1,248) 1:A:75:VAL:H 1:A:99:LEU:HD11 19 0.2 (1,240) 1:A:75:VAL:H 1:A:99:LEU:HD11 19 0.2 (1,240) 1:A:75:VAL:H 1:A:99:LEU:HD11 19 0.2 (1,240) 1:A:75:VAL:H 1:A:99:LEU:HD13 19 0.2 (1,240) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:74:GLU:H 4 0.2 (1,219) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:74:GLU:H 4 0.2 (1,219) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:74:GLU:H 4 0.2 (1,219) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:74:GLU:H 4 0.2 (1,219) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:17:ASN:H 3 0.2 (1,192) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:117:ASN:H 3 0.2 (1,192) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:117:ASN:H 3 0.2 (1,192) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:117:ASN:H 3 0.2 (1,128) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 5 0.2 (1,1289) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 5 0.2 (1,1289) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 5 0.2 (1,1289) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 5 0.2 (1,1264) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 10 0.2 (1,1264) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:117:ASN:H 10 0.2 (1,1264) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:18:VAL:HG13 1:A:117:ASN:H 10 0.2 (1,1264) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:117:TASN:H 10 0.2 (1,1264) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:129:VAL:HG13 1:A:129:VAL:HG1	(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD13	6	0.2
(1,26)	(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD11	11	0.2
(1,25) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:123:PHE:H 1 0.2 (1,25) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:123:PHE:H 1 0.2 (1,25) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:123:PHE:H 1 0.2 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD11 20 0.2 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD11 20 0.2 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD12 20 0.2 (1,248) 1:A:120:ALA:H 1:A:121:LEU:HD13 20 0.2 (1,240) 1:A:75:VAL:H 1:A:99:LEU:HD11 19 0.2 (1,240) 1:A:75:VAL:H 1:A:99:LEU:HD11 19 0.2 (1,240) 1:A:75:VAL:H 1:A:99:LEU:HD13 19 0.2 (1,240) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:74:GLU:H 4 0.2 (1,219) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:74:GLU:H 4 0.2 (1,219) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:74:GLU:H 4 0.2 (1,219) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:74:GLU:H 4 0.2 (1,192) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 3 0.2 (1,192) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:117:ASN:H 3 0.2 (1,192) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:117:ASN:H 3 0.2 (1,192) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:117:ASN:H 3 0.2 (1,1289) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 5 0.2 (1,1289) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 5 0.2 (1,1264) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 10 0.2 (1,1264) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:117:ASN:H 10 0.2 (1,1264) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 10 0.2 (1,1264) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:117:ASN:H 10 0.2 (1,1264) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:17:ASN:H 10 0.2 (1,1264) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:17:XSN:H 10 0.2 (1,1264) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:17:XSN:H 10 0.2 (1,1264) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:17:XSN:H 10 0.2 (1,1265) 1:A:100:GLY:H 1:A:88:THR:H 19 0.2 (1,1260) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 16 0.2 (1,1230) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 16 0.2 (1,1230) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 16 0.2 (1,1195) 1:A:123:PHE:H 1:A:124:VAL:HG22 3 0.2 (1,1195) 1:A:123:PHE:H 1:A:124:VAL:HG23 3 0.2 (1,1195) 1:A:123:PHE:H 1:A:124:VAL:HG23 3 0.2 (1,1195) 1:A:133:PHE:H 1:A:124:VAL:HG23 3 0.2 (1,1138) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:52:PHE:H 12 0.2	(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD12	11	0.2
(1,25)         1:A:43:VAL:HG22         1:A:123:PHE:H         1         0.2           (1,25)         1:A:43:VAL:HG23         1:A:123:PHE:H         1         0.2           (1,248)         1:A:120:ALA:H         1:A:121:LEU:HD11         20         0.2           (1,248)         1:A:120:ALA:H         1:A:121:LEU:HD12         20         0.2           (1,248)         1:A:120:ALA:H         1:A:121:LEU:HD13         20         0.2           (1,240)         1:A:75:VAL:H         1:A:99:LEU:HD11         19         0.2           (1,240)         1:A:75:VAL:H         1:A:99:LEU:HD12         19         0.2           (1,240)         1:A:75:VAL:H         1:A:99:LEU:HD13         19         0.2           (1,240)         1:A:75:VAL:H         1:A:39:LEU:HD13         19         0.2           (1,240)         1:A:51:LEU:HD21         1:A:74:GLU:H         4         0.2           (1,219)         1:A:419:VAL:HG11         1:A:74:GLU:H         4	(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD13	11	0.2
(1,25)         1:A:43:VAL:HG23         1:A:123:PHE:H         1         0.2           (1,248)         1:A:120:ALA:H         1:A:121:LEU:HD11         20         0.2           (1,248)         1:A:120:ALA:H         1:A:121:LEU:HD12         20         0.2           (1,248)         1:A:120:ALA:H         1:A:121:LEU:HD13         20         0.2           (1,240)         1:A:75:VAL:H         1:A:99:LEU:HD11         19         0.2           (1,240)         1:A:75:VAL:H         1:A:99:LEU:HD12         19         0.2           (1,240)         1:A:75:VAL:H         1:A:99:LEU:HD13         19         0.2           (1,240)         1:A:75:VAL:H         1:A:39:LEU:HD13         19         0.2           (1,240)         1:A:75:VAL:H         1:A:39:LEU:HD13         19         0.2           (1,219)         1:A:51:LEU:HD21         1:A:74:GLU:H         4         0.2           (1,219)         1:A:51:LEU:HD23         1:A:74:GLU:H         4         0.2           (1,192)         1:A:19:VAL:HG11         1:A:117:ASN:H         3         0.2           (1,192)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         3         0.2           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD13         5	(1,25)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:123:PHE:H	1	0.2
(1,248)         1:A:120:ALA:H         1:A:121:LEU:HD11         20         0.2           (1,248)         1:A:120:ALA:H         1:A:121:LEU:HD12         20         0.2           (1,248)         1:A:120:ALA:H         1:A:121:LEU:HD13         20         0.2           (1,240)         1:A:75:VAL:H         1:A:99:LEU:HD11         19         0.2           (1,240)         1:A:75:VAL:H         1:A:99:LEU:HD12         19         0.2           (1,240)         1:A:75:VAL:H         1:A:99:LEU:HD13         19         0.2           (1,240)         1:A:51:LEU:HD21         1:A:74:GLU:H         4         0.2           (1,219)         1:A:51:LEU:HD22         1:A:74:GLU:H         4         0.2           (1,219)         1:A:15:LEU:HD23         1:A:74:GLU:H         4         0.2           (1,192)         1:A:19:VAL:HG11         1:A:117:ASN:H         3         0.2           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD12         5	(1,25)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:123:PHE:H	1	0.2
(1,248)         1:A:120:ALA:H         1:A:121:LEU:HD12         20         0.2           (1,248)         1:A:120:ALA:H         1:A:121:LEU:HD13         20         0.2           (1,240)         1:A:75:VAL:H         1:A:99:LEU:HD11         19         0.2           (1,240)         1:A:75:VAL:H         1:A:99:LEU:HD12         19         0.2           (1,240)         1:A:75:VAL:H         1:A:99:LEU:HD13         19         0.2           (1,219)         1:A:51:LEU:HD21         1:A:74:GLU:H         4         0.2           (1,219)         1:A:51:LEU:HD22         1:A:74:GLU:H         4         0.2           (1,219)         1:A:51:LEU:HD23         1:A:74:GLU:H         4         0.2           (1,219)         1:A:51:LEU:HD23         1:A:74:GLU:H         4         0.2           (1,219)         1:A:15:VAL:HG13         1:A:17:ASN:H         3         0.2           (1,192)         1:A:19:VAL:HG11         1:A:117:ASN:H         3         0.2           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD11         5         0.2           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:17:ASN:H         10         0.2           (1,1264)         1:A:19:VAL:HG11         1:A:117:ASN:H         10	(1,25)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:123:PHE:H	1	0.2
(1,248)         1:A:120:ALA:H         1:A:121:LEU:HD13         20         0.2           (1,240)         1:A:75:VAL:H         1:A:99:LEU:HD11         19         0.2           (1,240)         1:A:75:VAL:H         1:A:99:LEU:HD12         19         0.2           (1,240)         1:A:75:VAL:H         1:A:99:LEU:HD13         19         0.2           (1,219)         1:A:51:LEU:HD21         1:A:74:GLU:H         4         0.2           (1,219)         1:A:51:LEU:HD22         1:A:74:GLU:H         4         0.2           (1,219)         1:A:51:LEU:HD23         1:A:74:GLU:H         4         0.2           (1,192)         1:A:19:VAL:HG11         1:A:117:ASN:H         3         0.2           (1,192)         1:A:19:VAL:HG12         1:A:117:ASN:H         3         0.2           (1,192)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         3         0.2           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD12         5         0.2           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD13         5         0.2           (1,1289)         1:A:19:VAL:HG11         1:A:117:ASN:H         10         0.2           (1,1264)         1:A:19:VAL:HG11         1:A:117:ASN:H         10	(1,248)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD11	20	0.2
(1,240)         1:A:75:VAL:H         1:A:99:LEU:HD11         19         0.2           (1,240)         1:A:75:VAL:H         1:A:99:LEU:HD12         19         0.2           (1,240)         1:A:75:VAL:H         1:A:99:LEU:HD13         19         0.2           (1,219)         1:A:51:LEU:HD21         1:A:74:GLU:H         4         0.2           (1,219)         1:A:51:LEU:HD22         1:A:74:GLU:H         4         0.2           (1,219)         1:A:51:LEU:HD23         1:A:74:GLU:H         4         0.2           (1,192)         1:A:19:VAL:HG11         1:A:117:ASN:H         3         0.2           (1,192)         1:A:19:VAL:HG12         1:A:117:ASN:H         3         0.2           (1,192)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         3         0.2           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD12         5         0.2           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD13         5         0.2           (1,1264)         1:A:19:VAL:HG11         1:A:117:ASN:H         10         0.2           (1,1264)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         10         0.2           (1,1264)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         10	(1,248)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD12	20	0.2
(1,240)         1:A:75:VAL:H         1:A:99:LEU:HD11         19         0.2           (1,240)         1:A:75:VAL:H         1:A:99:LEU:HD12         19         0.2           (1,240)         1:A:75:VAL:H         1:A:99:LEU:HD13         19         0.2           (1,219)         1:A:51:LEU:HD21         1:A:74:GLU:H         4         0.2           (1,219)         1:A:51:LEU:HD22         1:A:74:GLU:H         4         0.2           (1,219)         1:A:51:LEU:HD23         1:A:74:GLU:H         4         0.2           (1,192)         1:A:19:VAL:HG11         1:A:117:ASN:H         3         0.2           (1,192)         1:A:19:VAL:HG12         1:A:117:ASN:H         3         0.2           (1,192)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         3         0.2           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD12         5         0.2           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD13         5         0.2           (1,1264)         1:A:19:VAL:HG11         1:A:117:ASN:H         10         0.2           (1,1264)         1:A:19:VAL:HG12         1:A:117:ASN:H         10         0.2           (1,1264)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         10	(1,248)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD13	20	0.2
(1,240)         1:A:75:VAL:H         1:A:99:LEU:HD13         19         0.2           (1,219)         1:A:51:LEU:HD21         1:A:74:GLU:H         4         0.2           (1,219)         1:A:51:LEU:HD22         1:A:74:GLU:H         4         0.2           (1,219)         1:A:51:LEU:HD23         1:A:74:GLU:H         4         0.2           (1,192)         1:A:19:VAL:HG11         1:A:17:ASN:H         3         0.2           (1,192)         1:A:19:VAL:HG12         1:A:117:ASN:H         3         0.2           (1,192)         1:A:17:YR:H         1:A:117:ASN:H         3         0.2           (1,192)         1:A:17:YR:H         1:A:12:LEU:HD11         5         0.2           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD12         5         0.2           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD13         5         0.2           (1,1289)         1:A:17:YR:H         1:A:117:ASN:H         10         0.2           (1,1284)         1:A:19:VAL:HG11         1:A:117:ASN:H         10         0.2           (1,1264)         1:A:19:VAL:HG12         1:A:117:ASN:H         10         0.2           (1,1264)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         10         <		1:A:75:VAL:H	1:A:99:LEU:HD11	19	0.2
(1,219)         1:A:51:LEU:HD21         1:A:74:GLU:H         4         0.2           (1,219)         1:A:51:LEU:HD22         1:A:74:GLU:H         4         0.2           (1,219)         1:A:51:LEU:HD23         1:A:74:GLU:H         4         0.2           (1,192)         1:A:19:VAL:HG11         1:A:117:ASN:H         3         0.2           (1,192)         1:A:19:VAL:HG12         1:A:117:ASN:H         3         0.2           (1,192)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         3         0.2           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD11         5         0.2           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD12         5         0.2           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD13         5         0.2           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD13         5         0.2           (1,1289)         1:A:19:VAL:HG11         1:A:117:ASN:H         10         0.2           (1,1264)         1:A:19:VAL:HG11         1:A:117:ASN:H         10         0.2           (1,1264)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         10         0.2           (1,1257)         1:A:100:CHY:H         1:A:88:THR:H         19	(1,240)	1:A:75:VAL:H	1:A:99:LEU:HD12	19	0.2
(1,219)         1:A:51:LEU:HD22         1:A:74:GLU:H         4         0.2           (1,219)         1:A:51:LEU:HD23         1:A:74:GLU:H         4         0.2           (1,192)         1:A:19:VAL:HG11         1:A:117:ASN:H         3         0.2           (1,192)         1:A:19:VAL:HG12         1:A:117:ASN:H         3         0.2           (1,192)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         3         0.2           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD11         5         0.2           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD13         5         0.2           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD13         5         0.2           (1,1280)         1:A:19:VAL:HG11         1:A:117:ASN:H         10         0.2           (1,1264)         1:A:19:VAL:HG12         1:A:117:ASN:H         10         0.2           (1,1264)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         10         0.2           (1,1264)         1:A:100:GLY:H         1:A:88:THR:H         19         0.2           (1,1257)         1:A:100:GLY:H         1:A:29:VAL:HG11         16         0.2           (1,1230)         1:A:74:GLU:H         1:A:75:VAL:HG11         16 <td> ,</td> <td>1:A:75:VAL:H</td> <td>1:A:99:LEU:HD13</td> <td>19</td> <td>0.2</td>	,	1:A:75:VAL:H	1:A:99:LEU:HD13	19	0.2
(1,219)         1:A:51:LEU:HD23         1:A:74:GLU:H         4         0.2           (1,192)         1:A:19:VAL:HG11         1:A:117:ASN:H         3         0.2           (1,192)         1:A:19:VAL:HG12         1:A:117:ASN:H         3         0.2           (1,192)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         3         0.2           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD11         5         0.2           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD12         5         0.2           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:117:ASN:H         10         0.2           (1,1284)         1:A:19:VAL:HG11         1:A:117:ASN:H         10         0.2           (1,1264)         1:A:19:VAL:HG12         1:A:117:ASN:H         10         0.2           (1,1264)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         10         0.2           (1,1264)         1:A:10:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         10         0.2           (1,1257)         1:A:100:GLY:H         1:A:88:THR:H         19         0.2           (1,1230)         1:A:74:GLU:H         1:A:75:VAL:HG11         16         0.2           (1,1230)         1:A:74:GLU:H         1:A:75:VAL:HG13         16 </td <td>(1,219)</td> <td>1:A:51:LEU:HD21</td> <td>1:A:74:GLU:H</td> <td>4</td> <td>0.2</td>	(1,219)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:74:GLU:H	4	0.2
(1,192)         1:A:19:VAL:HG11         1:A:117:ASN:H         3         0.2           (1,192)         1:A:19:VAL:HG12         1:A:117:ASN:H         3         0.2           (1,192)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         3         0.2           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD11         5         0.2           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD12         5         0.2           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD13         5         0.2           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD13         5         0.2           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD13         5         0.2           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:117:ASN:H         10         0.2           (1,1264)         1:A:19:VAL:HG11         1:A:117:ASN:H         10         0.2           (1,1264)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         10         0.2           (1,1257)         1:A:102:VAL:HG13         1:A:88:THR:H         19         0.2           (1,1256)         1:A:100:GLY:H         1:A:90:VAL:H         19         0.2           (1,1230)         1:A:74:GLU:H         1:A:75:VAL:HG11         16 <td>(1,219)</td> <td>1:A:51:LEU:HD22</td> <td>1:A:74:GLU:H</td> <td>4</td> <td>0.2</td>	(1,219)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:74:GLU:H	4	0.2
(1,192)         1:A:19:VAL:HG12         1:A:117:ASN:H         3         0.2           (1,192)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         3         0.2           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD11         5         0.2           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD12         5         0.2           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD13         5         0.2           (1,1264)         1:A:19:VAL:HG11         1:A:117:ASN:H         10         0.2           (1,1264)         1:A:19:VAL:HG12         1:A:117:ASN:H         10         0.2           (1,1264)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         10         0.2           (1,1264)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         10         0.2           (1,1257)         1:A:100:GLY:H         1:A:88:THR:H         19         0.2           (1,1256)         1:A:100:GLY:H         1:A:90:VAL:H         19         0.2           (1,1237)         1:A:22:ASN:H         15         0.2           (1,1230)         1:A:74:GLU:H         1:A:75:VAL:HG11         16         0.2           (1,1230)         1:A:74:GLU:H         1:A:75:VAL:HG13         16         0.2 </td <td>(1,219)</td> <td>1:A:51:LEU:HD23</td> <td>1:A:74:GLU:H</td> <td>4</td> <td>0.2</td>	(1,219)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:74:GLU:H	4	0.2
(1,192)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         3         0.2           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD11         5         0.2           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD12         5         0.2           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD13         5         0.2           (1,1264)         1:A:19:VAL:HG11         1:A:117:ASN:H         10         0.2           (1,1264)         1:A:19:VAL:HG12         1:A:117:ASN:H         10         0.2           (1,1264)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         10         0.2           (1,1264)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         10         0.2           (1,1264)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:90:VAL:H         19         0.2           (1,1257)         1:A:100:GLY:H         1:A:88:THR:H         19         0.2           (1,1256)         1:A:100:GLY:H         1:A:90:VAL:H         19         0.2           (1,1237)         1:A:22:ASN:H         1:A:02         0.2           (1,1230)         1:A:74:GLU:H         1:A:75:VAL:HG11         16         0.2           (1,1230)         1:A:74:GLU:H         1:A:75:VAL:HG13         16         0.2	(1,192)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:H	3	0.2
(1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD11         5         0.2           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD12         5         0.2           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD13         5         0.2           (1,1264)         1:A:19:VAL:HG11         1:A:17:ASN:H         10         0.2           (1,1264)         1:A:19:VAL:HG12         1:A:117:ASN:H         10         0.2           (1,1264)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         10         0.2           (1,1264)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         10         0.2           (1,1257)         1:A:100:CLY:H         1:A:88:THR:H         19         0.2           (1,1256)         1:A:100:GLY:H         1:A:90:VAL:H         19         0.2           (1,1237)         1:A:22:ASN:H         1:A:29:VAL:H         19         0.2           (1,1230)         1:A:74:GLU:H         1:A:75:VAL:HG11         16         0.2           (1,1230)         1:A:74:GLU:H         1:A:75:VAL:HG12         16         0.2           (1,1195)         1:A:123:PHE:H         1:A:124:VAL:HG21         3         0.2           (1,1195)         1:A:123:PHE:H         1:A:124:VAL:HG23         3	(1,192)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:H	3	0.2
(1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD12         5         0.2           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD13         5         0.2           (1,1264)         1:A:19:VAL:HG11         1:A:117:ASN:H         10         0.2           (1,1264)         1:A:19:VAL:HG12         1:A:117:ASN:H         10         0.2           (1,1264)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         10         0.2           (1,1264)         1:A:102:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         10         0.2           (1,1257)         1:A:100:VAL:H         1:A:88:THR:H         19         0.2           (1,1256)         1:A:100:GLY:H         1:A:90:VAL:H         19         0.2           (1,1237)         1:A:22:ASN:H         1:A:22:ASN:HD21         7         0.2           (1,1230)         1:A:74:GLU:H         1:A:75:VAL:HG11         16         0.2           (1,1230)         1:A:74:GLU:H         1:A:75:VAL:HG12         16         0.2           (1,1230)         1:A:74:GLU:H         1:A:75:VAL:HG13         16         0.2           (1,1195)         1:A:123:PHE:H         1:A:124:VAL:HG21         3         0.2           (1,1195)         1:A:123:PHE:H         1:A:124:VAL:HG23	(1,192)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:H	3	0.2
(1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD13         5         0.2           (1,1264)         1:A:19:VAL:HG11         1:A:117:ASN:H         10         0.2           (1,1264)         1:A:19:VAL:HG12         1:A:117:ASN:H         10         0.2           (1,1264)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         10         0.2           (1,1264)         1:A:10:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         10         0.2           (1,1257)         1:A:10:Q:VAL:H         1:A:88:THR:H         19         0.2           (1,1256)         1:A:100:GLY:H         1:A:90:VAL:H         19         0.2           (1,1237)         1:A:22:ASN:H         1:A:22:ASN:HD21         7         0.2           (1,1230)         1:A:74:GLU:H         1:A:75:VAL:HG11         16         0.2           (1,1230)         1:A:74:GLU:H         1:A:75:VAL:HG12         16         0.2           (1,1195)         1:A:123:PHE:H         1:A:124:VAL:HG21         3         0.2           (1,1195)         1:A:123:PHE:H         1:A:124:VAL:HG23         3         0.2           (1,1138)         1:A:43:VAL:HG11         1:A:52:PHE:H         12         0.2           (1,1138)         1:A:43:VAL:HG12         1:A:52:PHE:H	(1,1289)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD11	5	0.2
(1,1264)         1:A:19:VAL:HG11         1:A:117:ASN:H         10         0.2           (1,1264)         1:A:19:VAL:HG12         1:A:117:ASN:H         10         0.2           (1,1264)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         10         0.2           (1,1257)         1:A:100:VAL:H         1:A:88:THR:H         19         0.2           (1,1256)         1:A:100:GLY:H         1:A:90:VAL:H         19         0.2           (1,1237)         1:A:22:ASN:H         1:A:22:ASN:HD21         7         0.2           (1,1230)         1:A:74:GLU:H         1:A:75:VAL:HG11         16         0.2           (1,1230)         1:A:74:GLU:H         1:A:75:VAL:HG12         16         0.2           (1,1230)         1:A:74:GLU:H         1:A:75:VAL:HG13         16         0.2           (1,1195)         1:A:123:PHE:H         1:A:124:VAL:HG21         3         0.2           (1,1195)         1:A:123:PHE:H         1:A:124:VAL:HG22         3         0.2           (1,1138)         1:A:43:VAL:HG11         1:A:52:PHE:H         12         0.2           (1,1138)         1:A:43:VAL:HG12         1:A:52:PHE:H         12         0.2	(1,1289)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD12	5	0.2
(1,1264)         1:A:19:VAL:HG12         1:A:117:ASN:H         10         0.2           (1,1264)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         10         0.2           (1,1257)         1:A:102:VAL:H         1:A:88:THR:H         19         0.2           (1,1256)         1:A:100:GLY:H         1:A:90:VAL:H         19         0.2           (1,1237)         1:A:22:ASN:H         1:A:22:ASN:HD21         7         0.2           (1,1230)         1:A:74:GLU:H         1:A:75:VAL:HG11         16         0.2           (1,1230)         1:A:74:GLU:H         1:A:75:VAL:HG12         16         0.2           (1,1230)         1:A:74:GLU:H         1:A:75:VAL:HG13         16         0.2           (1,1195)         1:A:123:PHE:H         1:A:124:VAL:HG21         3         0.2           (1,1195)         1:A:123:PHE:H         1:A:124:VAL:HG22         3         0.2           (1,1138)         1:A:43:VAL:HG11         1:A:52:PHE:H         12         0.2           (1,1138)         1:A:43:VAL:HG12         1:A:52:PHE:H         12         0.2	(1,1289)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD13	5	0.2
(1,1264)       1:A:19:VAL:HG13       1:A:117:ASN:H       10       0.2         (1,1257)       1:A:102:VAL:H       1:A:88:THR:H       19       0.2         (1,1256)       1:A:100:GLY:H       1:A:90:VAL:H       19       0.2         (1,1237)       1:A:22:ASN:H       1:A:22:ASN:HD21       7       0.2         (1,1230)       1:A:74:GLU:H       1:A:75:VAL:HG11       16       0.2         (1,1230)       1:A:74:GLU:H       1:A:75:VAL:HG12       16       0.2         (1,1230)       1:A:74:GLU:H       1:A:75:VAL:HG13       16       0.2         (1,1195)       1:A:123:PHE:H       1:A:124:VAL:HG21       3       0.2         (1,1195)       1:A:123:PHE:H       1:A:124:VAL:HG22       3       0.2         (1,1195)       1:A:123:PHE:H       1:A:124:VAL:HG23       3       0.2         (1,1138)       1:A:43:VAL:HG11       1:A:52:PHE:H       12       0.2         (1,1138)       1:A:43:VAL:HG12       1:A:52:PHE:H       12       0.2	(1,1264)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:H	10	0.2
(1,1257)       1:A:102:VAL:H       1:A:88:THR:H       19       0.2         (1,1256)       1:A:100:GLY:H       1:A:90:VAL:H       19       0.2         (1,1237)       1:A:22:ASN:H       1:A:22:ASN:HD21       7       0.2         (1,1230)       1:A:74:GLU:H       1:A:75:VAL:HG11       16       0.2         (1,1230)       1:A:74:GLU:H       1:A:75:VAL:HG12       16       0.2         (1,1230)       1:A:74:GLU:H       1:A:75:VAL:HG13       16       0.2         (1,1195)       1:A:123:PHE:H       1:A:124:VAL:HG21       3       0.2         (1,1195)       1:A:123:PHE:H       1:A:124:VAL:HG22       3       0.2         (1,1195)       1:A:123:PHE:H       1:A:124:VAL:HG23       3       0.2         (1,1138)       1:A:43:VAL:HG11       1:A:52:PHE:H       12       0.2         (1,1138)       1:A:43:VAL:HG12       1:A:52:PHE:H       12       0.2	(1,1264)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:H	10	0.2
(1,1256)       1:A:100:GLY:H       1:A:90:VAL:H       19       0.2         (1,1237)       1:A:22:ASN:H       1:A:22:ASN:HD21       7       0.2         (1,1230)       1:A:74:GLU:H       1:A:75:VAL:HG11       16       0.2         (1,1230)       1:A:74:GLU:H       1:A:75:VAL:HG12       16       0.2         (1,1230)       1:A:74:GLU:H       1:A:75:VAL:HG13       16       0.2         (1,1195)       1:A:123:PHE:H       1:A:124:VAL:HG21       3       0.2         (1,1195)       1:A:123:PHE:H       1:A:124:VAL:HG22       3       0.2         (1,1195)       1:A:123:PHE:H       1:A:124:VAL:HG23       3       0.2         (1,1138)       1:A:43:VAL:HG11       1:A:52:PHE:H       12       0.2         (1,1138)       1:A:43:VAL:HG12       1:A:52:PHE:H       12       0.2	(1,1264)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:H	10	0.2
(1,1237)       1:A:22:ASN:H       1:A:22:ASN:HD21       7       0.2         (1,1230)       1:A:74:GLU:H       1:A:75:VAL:HG11       16       0.2         (1,1230)       1:A:74:GLU:H       1:A:75:VAL:HG12       16       0.2         (1,1230)       1:A:74:GLU:H       1:A:75:VAL:HG13       16       0.2         (1,1195)       1:A:123:PHE:H       1:A:124:VAL:HG21       3       0.2         (1,1195)       1:A:123:PHE:H       1:A:124:VAL:HG22       3       0.2         (1,1195)       1:A:123:PHE:H       1:A:124:VAL:HG23       3       0.2         (1,1138)       1:A:43:VAL:HG11       1:A:52:PHE:H       12       0.2         (1,1138)       1:A:43:VAL:HG12       1:A:52:PHE:H       12       0.2	(1,1257)	1:A:102:VAL:H	1:A:88:THR:H	19	0.2
(1,1230)       1:A:74:GLU:H       1:A:75:VAL:HG11       16       0.2         (1,1230)       1:A:74:GLU:H       1:A:75:VAL:HG12       16       0.2         (1,1230)       1:A:74:GLU:H       1:A:75:VAL:HG13       16       0.2         (1,1195)       1:A:123:PHE:H       1:A:124:VAL:HG21       3       0.2         (1,1195)       1:A:123:PHE:H       1:A:124:VAL:HG22       3       0.2         (1,1195)       1:A:123:PHE:H       1:A:124:VAL:HG23       3       0.2         (1,1138)       1:A:43:VAL:HG11       1:A:52:PHE:H       12       0.2         (1,1138)       1:A:43:VAL:HG12       1:A:52:PHE:H       12       0.2	(1,1256)	1:A:100:GLY:H	1:A:90:VAL:H	19	0.2
(1,1230)       1:A:74:GLU:H       1:A:75:VAL:HG11       16       0.2         (1,1230)       1:A:74:GLU:H       1:A:75:VAL:HG12       16       0.2         (1,1230)       1:A:74:GLU:H       1:A:75:VAL:HG13       16       0.2         (1,1195)       1:A:123:PHE:H       1:A:124:VAL:HG21       3       0.2         (1,1195)       1:A:123:PHE:H       1:A:124:VAL:HG22       3       0.2         (1,1195)       1:A:123:PHE:H       1:A:124:VAL:HG23       3       0.2         (1,1138)       1:A:43:VAL:HG11       1:A:52:PHE:H       12       0.2         (1,1138)       1:A:43:VAL:HG12       1:A:52:PHE:H       12       0.2	(1,1237)	1:A:22:ASN:H	1:A:22:ASN:HD21	7	0.2
(1,1230)       1:A:74:GLU:H       1:A:75:VAL:HG12       16       0.2         (1,1230)       1:A:74:GLU:H       1:A:75:VAL:HG13       16       0.2         (1,1195)       1:A:123:PHE:H       1:A:124:VAL:HG21       3       0.2         (1,1195)       1:A:123:PHE:H       1:A:124:VAL:HG22       3       0.2         (1,1195)       1:A:123:PHE:H       1:A:124:VAL:HG23       3       0.2         (1,1138)       1:A:43:VAL:HG11       1:A:52:PHE:H       12       0.2         (1,1138)       1:A:43:VAL:HG12       1:A:52:PHE:H       12       0.2		1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG11	16	0.2
(1,1230)       1:A:74:GLU:H       1:A:75:VAL:HG13       16       0.2         (1,1195)       1:A:123:PHE:H       1:A:124:VAL:HG21       3       0.2         (1,1195)       1:A:123:PHE:H       1:A:124:VAL:HG22       3       0.2         (1,1195)       1:A:123:PHE:H       1:A:124:VAL:HG23       3       0.2         (1,1138)       1:A:43:VAL:HG11       1:A:52:PHE:H       12       0.2         (1,1138)       1:A:43:VAL:HG12       1:A:52:PHE:H       12       0.2		1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG12	16	0.2
(1,1195)       1:A:123:PHE:H       1:A:124:VAL:HG21       3       0.2         (1,1195)       1:A:123:PHE:H       1:A:124:VAL:HG22       3       0.2         (1,1195)       1:A:123:PHE:H       1:A:124:VAL:HG23       3       0.2         (1,1138)       1:A:43:VAL:HG11       1:A:52:PHE:H       12       0.2         (1,1138)       1:A:43:VAL:HG12       1:A:52:PHE:H       12       0.2	, ,	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG13	16	0.2
(1,1195)       1:A:123:PHE:H       1:A:124:VAL:HG22       3       0.2         (1,1195)       1:A:123:PHE:H       1:A:124:VAL:HG23       3       0.2         (1,1138)       1:A:43:VAL:HG11       1:A:52:PHE:H       12       0.2         (1,1138)       1:A:43:VAL:HG12       1:A:52:PHE:H       12       0.2	(1,1195)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG21	3	0.2
(1,1195)       1:A:123:PHE:H       1:A:124:VAL:HG23       3       0.2         (1,1138)       1:A:43:VAL:HG11       1:A:52:PHE:H       12       0.2         (1,1138)       1:A:43:VAL:HG12       1:A:52:PHE:H       12       0.2	(1,1195)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG22	3	0.2
(1,1138)       1:A:43:VAL:HG11       1:A:52:PHE:H       12       0.2         (1,1138)       1:A:43:VAL:HG12       1:A:52:PHE:H       12       0.2		1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG23	3	0.2
		1:A:43:VAL:HG11	1:A:52:PHE:H	12	0.2
	(1,1138)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:52:PHE:H	12	0.2
		1:A:43:VAL:HG13	1:A:52:PHE:H	12	0.2



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1138)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:52:PHE:H	17	0.2
. ,		1:A:52:PHE:H	17	0.2
(1,1138)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:52:PHE:H	17	0.2
(1,1113)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:23:ASN:H	16	0.2
(1,1113)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:23:ASN:H	16	0.2
(1,1113)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:23:ASN:H	16	0.2
(1,1110)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG11	1	0.2
(1,1110)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG12	1	0.2
(1,1110)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG13	1	0.2
(1,1110)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG11	16	0.2
(1,1110)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG12	16	0.2
(1,1110)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG13	16	0.2
(1,1110)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG11	18	0.2
(1,1110)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG12	18	0.2
(1,1110)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG13	18	0.2
(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD21	9	0.2
(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD22	9	0.2
(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD23	9	0.2
(1,1080)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:26:GLU:H	5	0.2
(1,1080)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:26:GLU:H	5	0.2
(1,1080)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:26:GLU:H	5	0.2
(1,1064)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD21	6	0.2
(1,1064)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD22	6	0.2
(1,1064)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD23	6	0.2
(1,106)	1:A:105:ASP:H	1:A:113:ARG:H	14	0.2
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD21	1	0.2
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD22	1	0.2
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD23	1	0.2
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD21	1	0.2
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD22	1	0.2
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD23	1	0.2
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD21	1	0.2
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD22	1	0.2
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD23	1	0.2
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD21	18	0.2
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD22	18	0.2
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD23	18	0.2
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD21	18	0.2
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD22	18	0.2
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD23	18	0.2
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD21	18	0.2
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD22	18	0.2



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD23	18	0.2
(1,974)	1:A:79:LEU:H	1:A:89:GLU:H	6	0.19
(1,943)	1:A:14:ARG:H	1:A:17:TYR:H	4	0.19
(1,943)	1:A:14:ARG:H	1:A:17:TYR:H	7	0.19
(1,943)	1:A:14:ARG:H	1:A:17:TYR:H	14	0.19
(1,904)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD11	8	0.19
(1,904)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD12	8	0.19
(1,904)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD13	8	0.19
(1,904)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD11	8	0.19
(1,904)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD12	8	0.19
(1,904)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD13	8	0.19
(1,904)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD11	8	0.19
(1,904)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD12	8	0.19
(1,904)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD13	8	0.19
(1,901)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD11	9	0.19
(1,901)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD12	9	0.19
(1,901)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD13	9	0.19
(1,901)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD11	9	0.19
(1,901)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD12	9	0.19
(1,901)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD13	9	0.19
(1,901)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD11	9	0.19
(1,901)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD12	9	0.19
(1,901)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD13	9	0.19
(1,882)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:129:LEU:HD11	3	0.19
(1,882)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:129:LEU:HD12	3	0.19
(1,882)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:129:LEU:HD13	3	0.19
(1,882)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:129:LEU:HD11	3	0.19
(1,882)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:129:LEU:HD12	3	0.19
(1,882)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:129:LEU:HD13	3	0.19
(1,882)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:129:LEU:HD11	3	0.19
(1,882)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:129:LEU:HD12	3	0.19
(1,882)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:129:LEU:HD13	3	0.19
(1,846)	1:A:88:THR:H	1:A:102:VAL:HG11	12	0.19
(1,846)	1:A:88:THR:H	1:A:102:VAL:HG12	12	0.19
(1,846)	1:A:88:THR:H	1:A:102:VAL:HG13	12	0.19
(1,84)	1:A:10:LYS:H	1:A:12:LEU:H	5	0.19
(1,84)	1:A:10:LYS:H	1:A:12:LEU:H	6	0.19
(1,837)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:H	2	0.19
(1,837)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:H	2	0.19
(1,837)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:H	2	0.19
(1,807)	1:A:92:SER:H	1:A:96:ASP:H	20	0.19
(1,776)	1:A:17:TYR:H	1:A:19:VAL:H	12	0.19



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,729)	1:A:10:LYS:H	1:A:12:LEU:H	5	0.19
(1,729)	1:A:10:LYS:H	1:A:12:LEU:H	6	0.19
(1,715)	1:A:16:GLN:HE21	1:A:46:VAL:H	17	0.19
(1,713)	1:A:34:TRP:H	1:A:36:HIS:H	19	0.19
(1,70)	1:A:16:GLN:HE21	1:A:46:VAL:H	17	0.19
(1,68)	1:A:34:TRP:H	1:A:36:HIS:H	19	0.19
(1,669)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:134:TYR:H	7	0.19
(1,669)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:134:TYR:H	7	0.19
(1,669)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:134:TYR:H	7	0.19
(1,656)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD21	13	0.19
(1,656)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD22	13	0.19
(1,656)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD23	13	0.19
(1,644)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD11	10	0.19
(1,644)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD12	10	0.19
(1,644)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD13	10	0.19
(1,588)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:22:ASN:H	7	0.19
(1,588)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:22:ASN:H	7	0.19
(1,588)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:22:ASN:H	7	0.19
(1,580)	1:A:112:LEU:HD21	1:A:113:ARG:H	15	0.19
(1,580)	1:A:112:LEU:HD22	1:A:113:ARG:H	15	0.19
(1,580)	1:A:112:LEU:HD23	1:A:113:ARG:H	15	0.19
(1,571)	1:A:140:LEU:HD11	1:A:141:PHE:H	1	0.19
(1,571)	1:A:140:LEU:HD12	1:A:141:PHE:H	1	0.19
(1,571)	1:A:140:LEU:HD13	1:A:141:PHE:H	1	0.19
(1,565)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:H	9	0.19
(1,565)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:H	9	0.19
(1,565)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:H	9	0.19
(1,546)	1:A:121:LEU:H	1:A:121:LEU:HD21	18	0.19
(1,546)	1:A:121:LEU:H	1:A:121:LEU:HD22	18	0.19
(1,546)	1:A:121:LEU:H	1:A:121:LEU:HD23	18	0.19
(1,536)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:102:VAL:H	5	0.19
(1,536)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:102:VAL:H	5	0.19
(1,536)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:102:VAL:H	5	0.19
(1,493)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:52:PHE:H	9	0.19
(1,493)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:52:PHE:H	9	0.19
(1,493)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:52:PHE:H	9	0.19
(1,493)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:52:PHE:H	11	0.19
(1,493)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:52:PHE:H	11	0.19
(1,493)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:52:PHE:H	11	0.19
(1,473)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD11	20	0.19
(1,473)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD12	20	0.19
(1,473)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD13	20	0.19



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,469)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:24:GLY:H	11	0.19
(1,469)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:24:GLY:H	11	0.19
(1,469)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:24:GLY:H	11	0.19
(1,454)	1:A:134:TYR:H	1:A:138:LEU:HD21	2	0.19
(1,454)	1:A:134:TYR:H	1:A:138:LEU:HD22	2	0.19
(1,454)	1:A:134:TYR:H	1:A:138:LEU:HD23	2	0.19
(1,451)	1:A:75:VAL:HG11	1:A:91:ARG:H	11	0.19
(1,451)	1:A:75:VAL:HG12	1:A:91:ARG:H	11	0.19
(1,451)	1:A:75:VAL:HG13	1:A:91:ARG:H	11	0.19
(1,416)	1:A:86:ILE:H	1:A:86:ILE:HD11	19	0.19
(1,416)	1:A:86:ILE:H	1:A:86:ILE:HD12	19	0.19
(1,416)	1:A:86:ILE:H	1:A:86:ILE:HD13	19	0.19
(1,329)	1:A:79:LEU:H	1:A:89:GLU:H	6	0.19
(1,298)	1:A:14:ARG:H	1:A:17:TYR:H	4	0.19
(1,298)	1:A:14:ARG:H	1:A:17:TYR:H	7	0.19
(1,298)	1:A:14:ARG:H	1:A:17:TYR:H	14	0.19
(1,259)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD11	8	0.19
(1,259)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD12	8	0.19
(1,259)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD13	8	0.19
(1,259)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD11	8	0.19
(1,259)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD12	8	0.19
(1,259)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD13	8	0.19
(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD11	8	0.19
(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD12	8	0.19
(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD13	8	0.19
(1,256)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD11	9	0.19
(1,256)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD12	9	0.19
(1,256)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD13	9	0.19
(1,256)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD11	9	0.19
(1,256)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD12	9	0.19
(1,256)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD13	9	0.19
(1,256)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD11	9	0.19
(1,256)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD12	9	0.19
(1,256)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD13	9	0.19
(1,24)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:134:TYR:H	7	0.19
(1,24)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:134:TYR:H	7	0.19
(1,24)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:134:TYR:H	7	0.19
(1,237)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:129:LEU:HD11	3	0.19
(1,237)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:129:LEU:HD12	3	0.19
(1,237)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:129:LEU:HD13	3	0.19
(1,237)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:129:LEU:HD11	3	0.19
(1,237)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:129:LEU:HD12	3	0.19



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,237)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:129:LEU:HD13	3	0.19
(1,237)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:129:LEU:HD11	3	0.19
(1,237)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:129:LEU:HD12	3	0.19
(1,237)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:129:LEU:HD13	3	0.19
(1,201)	1:A:88:THR:H	1:A:102:VAL:HG11	12	0.19
(1,201)	1:A:88:THR:H	1:A:102:VAL:HG12	12	0.19
(1,201)	1:A:88:THR:H	1:A:102:VAL:HG13	12	0.19
(1,192)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:H	2	0.19
(1,192)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:H	2	0.19
(1,192)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:H	2	0.19
(1,162)	1:A:92:SER:H	1:A:96:ASP:H	20	0.19
(1,131)	1:A:17:TYR:H	1:A:19:VAL:H	12	0.19
(1,1289)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD11	10	0.19
(1,1289)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD12	10	0.19
(1,1289)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD13	10	0.19
(1,1233)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:22:ASN:H	7	0.19
(1,1233)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:22:ASN:H	7	0.19
(1,1233)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:22:ASN:H	7	0.19
(1,1225)	1:A:112:LEU:HD21	1:A:113:ARG:H	15	0.19
(1,1225)	1:A:112:LEU:HD22	1:A:113:ARG:H	15	0.19
(1,1225)	1:A:112:LEU:HD23	1:A:113:ARG:H	15	0.19
(1,1216)	1:A:140:LEU:HD11	1:A:141:PHE:H	1	0.19
(1,1216)	1:A:140:LEU:HD12	1:A:141:PHE:H	1	0.19
(1,1216)	1:A:140:LEU:HD13	1:A:141:PHE:H	1	0.19
(1,1210)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:H	9	0.19
(1,1210)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:H	9	0.19
(1,1210)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:H	9	0.19
(1,1191)	1:A:121:LEU:H	1:A:121:LEU:HD21	18	0.19
(1,1191)	1:A:121:LEU:H	1:A:121:LEU:HD22	18	0.19
(1,1191)	1:A:121:LEU:H	1:A:121:LEU:HD23	18	0.19
(1,1181)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:102:VAL:H	5	0.19
(1,1181)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:102:VAL:H	5	0.19
(1,1181)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:102:VAL:H	5	0.19
(1,1138)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:52:PHE:H	9	0.19
(1,1138)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:52:PHE:H	9	0.19
(1,1138)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:52:PHE:H	9	0.19
(1,1138)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:52:PHE:H	11	0.19
(1,1138)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:52:PHE:H	11	0.19
(1,1138)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:52:PHE:H	11	0.19
(1,1118)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD11	20	0.19
(1,1118)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD12	20	0.19
(1,1118)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD13	20	0.19



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1114)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:24:GLY:H	11	0.19
(1,1114)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:24:GLY:H	11	0.19
(1,1114)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:24:GLY:H	11	0.19
(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD21	13	0.19
(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD22	13	0.19
(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD23	13	0.19
(1,1099)	1:A:134:TYR:H	1:A:138:LEU:HD21	2	0.19
(1,1099)	1:A:134:TYR:H	1:A:138:LEU:HD22	2	0.19
(1,1099)	1:A:134:TYR:H	1:A:138:LEU:HD23	2	0.19
(1,1096)	1:A:75:VAL:HG11	1:A:91:ARG:H	11	0.19
(1,1096)	1:A:75:VAL:HG12	1:A:91:ARG:H	11	0.19
(1,1096)	1:A:75:VAL:HG13	1:A:91:ARG:H	11	0.19
(1,1061)	1:A:86:ILE:H	1:A:86:ILE:HD11	19	0.19
(1,1061)	1:A:86:ILE:H	1:A:86:ILE:HD12	19	0.19
(1,1061)	1:A:86:ILE:H	1:A:86:ILE:HD13	19	0.19
(1,998)	1:A:104:ASN:H	1:A:106:GLY:H	13	0.18
(1,948)	1:A:18:GLU:H	1:A:20:THR:H	20	0.18
(1,911)	1:A:19:VAL:H	1:A:21:GLN:H	1	0.18
(1,911)	1:A:19:VAL:H	1:A:21:GLN:H	2	0.18
(1,904)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD11	7	0.18
(1,904)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD12	7	0.18
(1,904)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD13	7	0.18
(1,904)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD11	7	0.18
(1,904)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD12	7	0.18
(1,904)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD13	7	0.18
(1,904)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD11	7	0.18
(1,904)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD12	7	0.18
(1,904)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD13	7	0.18
(1,9)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:138:LEU:H	8	0.18
(1,9)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:138:LEU:H	8	0.18
(1,9)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:138:LEU:H	8	0.18
(1,893)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD11	12	0.18
(1,893)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD12	12	0.18
(1,893)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD13	12	0.18
(1,892)	1:A:121:LEU:HD11	1:A:122:ARG:H	20	0.18
(1,892)	1:A:121:LEU:HD12	1:A:122:ARG:H	20	0.18
(1,892)	1:A:121:LEU:HD13	1:A:122:ARG:H	20	0.18
(1,864)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:74:GLU:H	5	0.18
(1,864)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:74:GLU:H	5	0.18
(1,864)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:74:GLU:H	5	0.18
(1,837)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:H	13	0.18
(1,837)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:H	13	0.18



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,837)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:H	13	0.18
(1,827)	1:A:90:VAL:HG21	1:A:99:LEU:H	19	0.18
(1,827)	1:A:90:VAL:HG22	1:A:99:LEU:H	19	0.18
(1,827)	1:A:90:VAL:HG23	1:A:99:LEU:H	19	0.18
(1,821)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:45:ILE:HD11	12	0.18
(1,821)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:45:ILE:HD12	12	0.18
(1,821)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:45:ILE:HD13	12	0.18
(1,821)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:45:ILE:HD11	12	0.18
(1,821)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:45:ILE:HD12	12	0.18
(1,821)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:45:ILE:HD13	12	0.18
(1,821)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:45:ILE:HD11	12	0.18
(1,821)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:45:ILE:HD12	12	0.18
(1,821)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:45:ILE:HD13	12	0.18
(1,790)	1:A:128:LYS:H	1:A:130:LYS:H	3	0.18
(1,760)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:H	10	0.18
(1,715)	1:A:16:GLN:HE21	1:A:46:VAL:H	2	0.18
(1,715)	1:A:16:GLN:HE21	1:A:46:VAL:H	10	0.18
(1,70)	1:A:16:GLN:HE21	1:A:46:VAL:H	2	0.18
(1,70)	1:A:16:GLN:HE21	1:A:46:VAL:H	10	0.18
(1,698)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD21	1	0.18
(1,698)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD22	1	0.18
(1,698)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD23	1	0.18
(1,698)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD21	7	0.18
(1,698)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD22	7	0.18
(1,698)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD23	7	0.18
(1,692)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:115:CYS:H	14	0.18
(1,692)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:115:CYS:H	14	0.18
(1,692)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:115:CYS:H	14	0.18
(1,690)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD11	10	0.18
(1,690)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD12	10	0.18
(1,690)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD13	10	0.18
(1,678)	1:A:92:SER:H	1:A:99:LEU:HD11	20	0.18
(1,678)	1:A:92:SER:H	1:A:99:LEU:HD12	20	0.18
(1,678)	1:A:92:SER:H	1:A:99:LEU:HD13	20	0.18
(1,671)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD11	7	0.18
(1,671)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD12	7	0.18
(1,671)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD13	7	0.18
(1,671)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD11	14	0.18
(1,671)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD12	14	0.18
(1,671)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD13	14	0.18
(1,669)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:134:TYR:H	6	0.18
(1,669)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:134:TYR:H	6	0.18



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,669)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:134:TYR:H	6	0.18
(1,654)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:138:LEU:H	8	0.18
(1,654)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:138:LEU:H	8	0.18
(1,654)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:138:LEU:H	8	0.18
(1,630)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD21	1	0.18
(1,630)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD22	1	0.18
(1,630)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD23	1	0.18
(1,630)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD21	1	0.18
(1,630)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD22	1	0.18
(1,630)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD23	1	0.18
(1,630)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD21	1	0.18
(1,630)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD22	1	0.18
(1,630)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD23	1	0.18
(1,630)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD21	11	0.18
(1,630)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD22	11	0.18
(1,630)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD23	11	0.18
(1,630)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD21	11	0.18
(1,630)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD22	11	0.18
(1,630)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD23	11	0.18
(1,630)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD21	11	0.18
(1,630)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD22	11	0.18
(1,630)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD23	11	0.18
(1,630)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD21	13	0.18
(1,630)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD22	13	0.18
(1,630)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD23	13	0.18
(1,630)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD21	13	0.18
(1,630)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD22	13	0.18
(1,630)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD23	13	0.18
(1,630)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD21	13	0.18
(1,630)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD22	13	0.18
(1,630)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD23	13	0.18
(1,619)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:H	3	0.18
(1,619)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:H	3	0.18
(1,619)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:H	3	0.18
(1,613)	1:A:115:CYS:H	1:A:101:HIS:H	3	0.18
(1,613)	1:A:115:CYS:H	1:A:101:HIS:H	4	0.18
(1,605)	1:A:54:SER:H	1:A:40:GLY:H	15	0.18
(1,565)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:H	10	0.18
(1,565)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:H	10	0.18
(1,565)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:H	10	0.18
(1,550)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG21	4	0.18
(1,550)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG22	4	0.18



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,550)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG23	4	0.18
(1,550)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG21	10	0.18
(1,550)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG22	10	0.18
(1,550)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG23	10	0.18
(1,53)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD21	1	0.18
(1,53)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD22	1	0.18
(1,53)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD23	1	0.18
(1,53)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD21	7	0.18
(1,53)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD22	7	0.18
(1,53)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD23	7	0.18
(1,507)	1:A:75:VAL:HG11	1:A:77:GLU:H	4	0.18
(1,507)	1:A:75:VAL:HG12	1:A:77:GLU:H	4	0.18
(1,507)	1:A:75:VAL:HG13	1:A:77:GLU:H	4	0.18
(1,505)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:76:GLU:H	17	0.18
(1,505)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:76:GLU:H	17	0.18
(1,505)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:76:GLU:H	17	0.18
(1,497)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:H	9	0.18
(1,497)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:H	9	0.18
(1,497)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:H	9	0.18
(1,493)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:52:PHE:H	4	0.18
(1,493)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:52:PHE:H	4	0.18
(1,493)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:52:PHE:H	4	0.18
(1,47)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:115:CYS:H	14	0.18
(1,47)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:115:CYS:H	14	0.18
(1,47)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:115:CYS:H	14	0.18
(1,451)	1:A:75:VAL:HG11	1:A:91:ARG:H	3	0.18
(1,451)	1:A:75:VAL:HG12	1:A:91:ARG:H	3	0.18
(1,451)	1:A:75:VAL:HG13	1:A:91:ARG:H	3	0.18
(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD11	10	0.18
(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD12	10	0.18
(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD13	10	0.18
(1,435)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:26:GLU:H	2	0.18
(1,435)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:26:GLU:H	2	0.18
(1,435)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:26:GLU:H	2	0.18
(1,431)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:103:PHE:H	12	0.18
(1,431)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:103:PHE:H	12	0.18
(1,431)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:103:PHE:H	12	0.18
(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD21	14	0.18
(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD22	14	0.18
(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD23	14	0.18
(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD21	14	0.18
(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD22	14	0.18



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

(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	4		
( ) )		1:A:138:LEU:HD23	14	0.18
(1 /111)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD21	14	0.18
(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD22	14	0.18
(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD23	14	0.18
(1,375)	1:A:131:GLU:H	1:A:133:GLY:H	15	0.18
(1,353)	1:A:104:ASN:H	1:A:106:GLY:H	13	0.18
(1,33)	1:A:92:SER:H	1:A:99:LEU:HD11	20	0.18
(1,33)	1:A:92:SER:H	1:A:99:LEU:HD12	20	0.18
(1,33)	1:A:92:SER:H	1:A:99:LEU:HD13	20	0.18
(1,303)	1:A:18:GLU:H	1:A:20:THR:H	20	0.18
(1,266)	1:A:19:VAL:H	1:A:21:GLN:H	1	0.18
(1,266)	1:A:19:VAL:H	1:A:21:GLN:H	2	0.18
(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD11	7	0.18
(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD12	7	0.18
(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD13	7	0.18
(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD11	14	0.18
(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD12	14	0.18
(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD13	14	0.18
(1,259)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD11	7	0.18
(1,259)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD12	7	0.18
(1,259)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD13	7	0.18
(1,259)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD11	7	0.18
(1,259)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD12	7	0.18
(1,259)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD13	7	0.18
(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD11	7	0.18
(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD12	7	0.18
(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD13	7	0.18
(1,248)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD11	12	0.18
(1,248)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD12	12	0.18
(1,248)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD13	12	0.18
(1,247)	1:A:121:LEU:HD11	1:A:122:ARG:H	20	0.18
(1,247)	1:A:121:LEU:HD12	1:A:122:ARG:H	20	0.18
(1,247)	1:A:121:LEU:HD13	1:A:122:ARG:H	20	0.18
(1,24)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:134:TYR:H	6	0.18
(1,24)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:134:TYR:H	6	0.18
(1,24)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:134:TYR:H	6	0.18
(1,219)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:74:GLU:H	5	0.18
(1,219)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:74:GLU:H	5	0.18
(1,219)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:74:GLU:H	5	0.18
(1,192)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:H	13	0.18
(1,192)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:H	13	0.18
(1,192)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:H	13	0.18



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

(1,182) 1:A:90:VAL:HG21 1:A:99:LEU:H 19 0.18 (1,182) 1:A:90:VAL:HG22 1:A:99:LEU:H 19 0.18 (1,182) 1:A:90:VAL:HG23 1:A:99:LEU:H 19 0.18 (1,176) 1:A:33:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD11 12 0.18 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD11 12 0.18 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD13 12 0.18 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD13 12 0.18 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD11 12 0.18 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD13 12 0.18 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD11 12 0.18 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD11 12 0.18 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD11 12 0.18 (1,175) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD21 1 0.18 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD21 1 0.18 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD22 1 0.18 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD22 1 0.18 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:99:LEU:HD22 1 0.18 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD22 1 0.18 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD22 1 0.18 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD22 1 0.18 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD22 11 0.18 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD22 11 0.18 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD23 11 0.18 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:H	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,182) 1:A:90:VAL:HG23 1:A:49:LEU:H 19 0.18 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD11 12 0.18 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD12 12 0.18 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD13 12 0.18 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD13 12 0.18 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD11 12 0.18 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD11 12 0.18 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD12 12 0.18 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD13 12 0.18 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD13 12 0.18 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD13 12 0.18 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD11 12 0.18 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD11 12 0.18 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD13 12 0.18 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD13 12 0.18 (1,175) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD13 12 0.18 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD21 1 0.18 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD21 1 0.18 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD22 1 0.18 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD22 1 0.18 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:99:LEU:HD23 1 0.18 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:99:LEU:HD23 1 0.18 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:99:LEU:HD23 1 0.18 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD22 1 0.18 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD22 1 0.18 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD22 1 1 0.18 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG1	(1,182)	1:A:90:VAL:HG21	1:A:99:LEU:H	19	0.18
(1,176)	(1,182)	1:A:90:VAL:HG22	1:A:99:LEU:H	19	0.18
(1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD12 12 0.18 (1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD13 12 0.18 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD11 12 0.18 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD11 12 0.18 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD12 12 0.18 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD13 12 0.18 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD13 12 0.18 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD11 12 0.18 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD11 12 0.18 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD12 12 0.18 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD12 12 0.18 (1,176) 1:A:128:LYS:H 1:A:130:LYS:H 3 0.18 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD21 1 0.18 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD22 1 0.18 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD22 1 0.18 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD23 1 0.18 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:99:LEU:HD21 1 0.18 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD23 1 0.18 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD23 1 0.18 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD23 1 0.18 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD22 1 0.18 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD22 1 0.18 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD23 1 0.18 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD23 1 0.18 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD23 1 0.18 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD23 1 0.18 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD21 11 0.18 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD22 11 0.18 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD21 11 0.18 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD22 11 0.18 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD22 11 0.18 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD22 11 0.18 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD22 13 0.18 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD22 13 0.18 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD22 13 0.18 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG1	(1,182)	1:A:90:VAL:HG23	1:A:99:LEU:H	19	0.18
(1,176) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD13 12 0.18 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD11 12 0.18 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD12 12 0.18 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD13 12 0.18 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD13 12 0.18 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD13 12 0.18 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD11 12 0.18 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD11 12 0.18 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD12 12 0.18 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD13 12 0.18 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD13 12 0.18 (1,145) 1:A:190:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD21 1 0.18 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD21 1 0.18 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD21 1 0.18 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD23 1 0.18 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:99:LEU:HD23 1 0.18 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD23 1 0.18 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD23 1 0.18 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD23 1 0.18 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD23 1 0.18 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD23 1 0.18 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:9	(1,176)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:45:ILE:HD11	12	0.18
(1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD11 12 0.18 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD12 12 0.18 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD13 12 0.18 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD11 12 0.18 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD11 12 0.18 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD11 12 0.18 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD12 12 0.18 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD13 12 0.18 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD13 12 0.18 (1,145) 1:A:128:IYS:H 1:A:130:IXYS:H 3 0.18 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD21 1 0.18 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD22 1 0.18 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD22 1 0.18 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD23 1 0.18 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:99:LEU:HD23 1 0.18 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:99:LEU:HD21 1 0.18 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:99:LEU:HD23 1 0.18 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD22 1 0.18 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD22 1 0.18 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD23 1 0.18 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD21 11 0.18 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:99:LEU:HD22 11 0.18 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD21 11 0.18 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD21 11 0.18 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD22 11 0.18 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD21 13 0.18 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD22 13 0.18 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD22 13 0.18 (1,1275) 1:A:90:VA	(1,176)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:45:ILE:HD12	12	0.18
(1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD12 12 0.18 (1,176) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD13 12 0.18 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD11 12 0.18 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD11 12 0.18 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD12 12 0.18 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD12 12 0.18 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD13 12 0.18 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD13 12 0.18 (1,176) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD13 12 0.18 (1,145) 1:A:128:LYS:H 1:A:130:LYS:H 3 0.18 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD21 1 0.18 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD22 1 0.18 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD23 1 0.18 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:99:LEU:HD23 1 0.18 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:99:LEU:HD22 1 0.18 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:99:LEU:HD23 1 0.18 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD23 1 0.18 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD23 1 0.18 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD21 1 0.18 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD22 1 0.18 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD21 1 0.18 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD22 1 0.18 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD23 1 0.18 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD21 11 0.18 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD22 11 0.18 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD22 11 0.18 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD21 11 0.18 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:99:LEU:HD22 11 0.18 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:99:LEU:HD23 11 0.18 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD23 13 0.18 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD23 13 0.18 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD23 13 0.18 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD23 13 0.18 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD23 13 0.18 (1,1275) 1:A:90:	(1,176)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:45:ILE:HD13	12	0.18
(1,176)	(1,176)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:45:ILE:HD11	12	0.18
(1,176)	(1,176)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:45:ILE:HD12	12	0.18
(1,176)         1:A:43:VAL:HG23         1:A:45:ILE:HD12         12         0.18           (1,176)         1:A:43:VAL:HG23         1:A:45:ILE:HD13         12         0.18           (1,145)         1:A:43:VAL:HG23         1:A:45:ILE:HD13         12         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD21         1         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD22         1         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD23         1         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD22         1         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD23         1         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD23         1         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD21         1         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD22         1         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD23         1         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD21         11         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG11	(1,176)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:45:ILE:HD13	12	0.18
(1,176)         1:A:43:VAL:HG23         1:A:45:ILE:HD13         12         0.18           (1,145)         1:A:128:LYS:H         1:A:130:LYS:H         3         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD21         1         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD22         1         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD23         1         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD22         1         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD22         1         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD23         1         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD21         1         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD22         1         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD23         1         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD23         1         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD22         1         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG12	(1,176)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:45:ILE:HD11	12	0.18
(1,145)         1:A:128:LYS:H         1:A:130:LYS:H         3         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD21         1         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD22         1         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD23         1         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD21         1         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD22         1         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD23         1         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD23         1         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD22         1         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD22         1         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD21         1         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD23         1         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD23         1         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG12	(1,176)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:45:ILE:HD12	12	0.18
(1,1275)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD21         1         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD22         1         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD23         1         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD21         1         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD22         1         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD23         1         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD21         1         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD22         1         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD22         1         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD23         1         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD22         1         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD23         1         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD23         1         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG13	(1,176)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:45:ILE:HD13	12	0.18
(1,1275)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD22         1         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD23         1         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD21         1         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD22         1         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD23         1         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD21         1         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD22         1         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD23         1         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD23         1         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD22         11         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD23         11         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD23         11         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD21         11         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG13 </td <td>(1,145)</td> <td>1:A:128:LYS:H</td> <td>1:A:130:LYS:H</td> <td>3</td> <td>0.18</td>	(1,145)	1:A:128:LYS:H	1:A:130:LYS:H	3	0.18
(1,1275)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD22         1         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD23         1         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD21         1         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD22         1         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD23         1         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD21         1         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD22         1         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD23         1         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD23         1         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD22         11         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD23         11         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD23         11         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD23         11         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG13 </td <td>(1,1275)</td> <td>1:A:90:VAL:HG11</td> <td>1:A:99:LEU:HD21</td> <td>1</td> <td>0.18</td>	(1,1275)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD21	1	0.18
(1,1275)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD21         1         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD22         1         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD23         1         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD21         1         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD22         1         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD23         1         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD21         11         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD22         11         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD22         11         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD23         11         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD22         11         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD23         11         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD23         11         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG1	(1,1275)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD22	1	0.18
(1,1275)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD22         1         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD23         1         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD21         1         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD22         1         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD23         1         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD21         11         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD22         11         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD23         11         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD23         11         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD22         11         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD23         11         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD23         11         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD22         11         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG	(1,1275)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD23	1	0.18
(1,1275)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD23         1         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD21         1         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD22         1         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD23         1         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD21         11         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD22         11         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD22         11         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD23         11         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD21         11         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD22         11         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD23         11         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD23         11         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD22         11         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:H	(1,1275)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD21	1	0.18
(1,1275)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD21         1         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD22         1         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD23         1         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD21         11         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD22         11         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD23         11         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD21         11         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD22         11         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD23         11         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD21         11         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD22         11         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD23         11         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD21         13         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:	(1,1275)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD22	1	0.18
(1,1275)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD22         1         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD23         1         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD21         11         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD22         11         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD23         11         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD21         11         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD22         11         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD23         11         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD21         11         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD22         11         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD23         11         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD23         11         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD23         13         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL	(1,1275)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD23	1	0.18
(1,1275)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD23         1         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD21         11         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD22         11         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD23         11         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD21         11         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD22         11         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD23         11         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD23         11         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD22         11         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD22         11         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD23         11         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD22         13         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD23         13         0.18           (1,1275)         1:A:90:VA	(1,1275)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD21	1	0.18
(1,1275)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD21         11         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD22         11         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD23         11         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD21         11         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD22         11         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD23         11         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD21         11         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD22         11         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD23         11         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD23         11         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD22         13         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD23         13         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD22         13         0.18           (1,1275)         1:A:90:V	(1,1275)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD22	1	0.18
(1,1275)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD22         11         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD23         11         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD21         11         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD22         11         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD23         11         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD21         11         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD22         11         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD23         11         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD21         13         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD22         13         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD21         13         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD22         13         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD22         13         0.18           (1,1275)         1:A:90:V	(1,1275)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD23	1	0.18
(1,1275)       1:A:90:VAL:HG11       1:A:99:LEU:HD23       11       0.18         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG12       1:A:99:LEU:HD21       11       0.18         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG12       1:A:99:LEU:HD22       11       0.18         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG12       1:A:99:LEU:HD23       11       0.18         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD21       11       0.18         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD22       11       0.18         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD23       11       0.18         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG11       1:A:99:LEU:HD21       13       0.18         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG11       1:A:99:LEU:HD23       13       0.18         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG12       1:A:99:LEU:HD21       13       0.18         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG12       1:A:99:LEU:HD22       13       0.18         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD23       13       0.18         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD21       13       0.18         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD22       13       0.18         (1,1275)	(1,1275)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD21	11	0.18
(1,1275)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD21         11         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD22         11         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD23         11         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD21         11         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD22         11         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD23         11         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD21         13         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD22         13         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD23         13         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD22         13         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD23         13         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD21         13         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD22         13         0.18           (1,1275)         1:A:90:V	(1,1275)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD22	11	0.18
(1,1275)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD22         11         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD23         11         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD21         11         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD22         11         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD23         11         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD21         13         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD23         13         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD21         13         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD22         13         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD23         13         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD21         13         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD23         13         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD23         13         0.18           (1,1275)         1:A:90:V	(1,1275)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD23	11	0.18
(1,1275)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD23         11         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD21         11         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD22         11         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD23         11         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD21         13         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD22         13         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD23         13         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD22         13         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD23         13         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD21         13         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD22         13         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD22         13         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD23         13         0.18           (1,1264)         1:A:19:V	(1,1275)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD21	11	0.18
(1,1275)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD21         11         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD22         11         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD23         11         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD21         13         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD22         13         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD23         13         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD21         13         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD23         13         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD21         13         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD22         13         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD22         13         0.18           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD23         13         0.18           (1,1264)         1:A:19:VAL:HG11         1:A:117:ASN:H         3         0.18	(1,1275)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD22	11	0.18
(1,1275)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD22       11       0.18         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD23       11       0.18         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG11       1:A:99:LEU:HD21       13       0.18         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG11       1:A:99:LEU:HD22       13       0.18         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG12       1:A:99:LEU:HD23       13       0.18         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG12       1:A:99:LEU:HD21       13       0.18         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG12       1:A:99:LEU:HD23       13       0.18         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD21       13       0.18         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD22       13       0.18         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD22       13       0.18         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD23       13       0.18         (1,1264)       1:A:19:VAL:HG11       1:A:117:ASN:H       3       0.18	(1,1275)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD23	11	0.18
(1,1275)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD23       11       0.18         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG11       1:A:99:LEU:HD21       13       0.18         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG11       1:A:99:LEU:HD22       13       0.18         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG11       1:A:99:LEU:HD23       13       0.18         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG12       1:A:99:LEU:HD21       13       0.18         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG12       1:A:99:LEU:HD22       13       0.18         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD21       13       0.18         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD22       13       0.18         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD23       13       0.18         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD23       13       0.18         (1,1264)       1:A:19:VAL:HG11       1:A:117:ASN:H       3       0.18	(1,1275)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD21	11	0.18
(1,1275)       1:A:90:VAL:HG11       1:A:99:LEU:HD21       13       0.18         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG11       1:A:99:LEU:HD22       13       0.18         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG11       1:A:99:LEU:HD23       13       0.18         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG12       1:A:99:LEU:HD21       13       0.18         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG12       1:A:99:LEU:HD22       13       0.18         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD21       13       0.18         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD22       13       0.18         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD22       13       0.18         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD23       13       0.18         (1,1264)       1:A:19:VAL:HG11       1:A:117:ASN:H       3       0.18	(1,1275)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD22	11	0.18
(1,1275)       1:A:90:VAL:HG11       1:A:99:LEU:HD22       13       0.18         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG11       1:A:99:LEU:HD23       13       0.18         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG12       1:A:99:LEU:HD21       13       0.18         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG12       1:A:99:LEU:HD22       13       0.18         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG12       1:A:99:LEU:HD23       13       0.18         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD21       13       0.18         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD22       13       0.18         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD23       13       0.18         (1,1264)       1:A:19:VAL:HG11       1:A:117:ASN:H       3       0.18	(1,1275)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD23	11	0.18
(1,1275)       1:A:90:VAL:HG11       1:A:99:LEU:HD23       13       0.18         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG12       1:A:99:LEU:HD21       13       0.18         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG12       1:A:99:LEU:HD22       13       0.18         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG12       1:A:99:LEU:HD23       13       0.18         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD21       13       0.18         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD22       13       0.18         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD23       13       0.18         (1,1264)       1:A:19:VAL:HG11       1:A:117:ASN:H       3       0.18	(1,1275)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD21	13	0.18
(1,1275)       1:A:90:VAL:HG12       1:A:99:LEU:HD21       13       0.18         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG12       1:A:99:LEU:HD22       13       0.18         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG12       1:A:99:LEU:HD23       13       0.18         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD21       13       0.18         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD22       13       0.18         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD23       13       0.18         (1,1264)       1:A:19:VAL:HG11       1:A:117:ASN:H       3       0.18	(1,1275)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD22	13	0.18
(1,1275)       1:A:90:VAL:HG12       1:A:99:LEU:HD22       13       0.18         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG12       1:A:99:LEU:HD23       13       0.18         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD21       13       0.18         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD22       13       0.18         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD23       13       0.18         (1,1264)       1:A:19:VAL:HG11       1:A:117:ASN:H       3       0.18	(1,1275)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD23	13	0.18
(1,1275)       1:A:90:VAL:HG12       1:A:99:LEU:HD23       13       0.18         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD21       13       0.18         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD22       13       0.18         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD23       13       0.18         (1,1264)       1:A:19:VAL:HG11       1:A:117:ASN:H       3       0.18	(1,1275)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD21	13	0.18
(1,1275)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD21       13       0.18         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD22       13       0.18         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD23       13       0.18         (1,1264)       1:A:19:VAL:HG11       1:A:117:ASN:H       3       0.18	(1,1275)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD22	13	0.18
(1,1275)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD21       13       0.18         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD22       13       0.18         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD23       13       0.18         (1,1264)       1:A:19:VAL:HG11       1:A:117:ASN:H       3       0.18	(1,1275)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD23	13	0.18
(1,1275)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD23       13       0.18         (1,1264)       1:A:19:VAL:HG11       1:A:117:ASN:H       3       0.18		1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD21	13	0.18
(1,1264) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 3 0.18	(1,1275)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD22	13	0.18
	(1,1275)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD23	13	0.18
(1 1264) 1·A·19·VAL·HG12 1·A·117·ASN·H 3 0.18	(1,1264)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:H	3	0.18
(1,1201)   1.11.10.1111012   1.11.1111.11011.11	(1,1264)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:H	3	0.18



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1264)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:H	3	0.18
(1,1258)	1:A:115:CYS:H	1:A:101:HIS:H	3	0.18
(1,1258)	1:A:115:CYS:H	1:A:101:HIS:H	4	0.18
(1,1250)	1:A:54:SER:H	1:A:40:GLY:H	15	0.18
(1,1210)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:H	10	0.18
(1,1210)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:H	10	0.18
(1,1210)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:H	10	0.18
(1,1195)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG21	4	0.18
(1,1195)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG22	4	0.18
(1,1195)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG23	4	0.18
(1,1195)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG21	10	0.18
(1,1195)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG22	10	0.18
(1,1195)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG23	10	0.18
(1,1152)	1:A:75:VAL:HG11	1:A:77:GLU:H	4	0.18
(1,1152)	1:A:75:VAL:HG12	1:A:77:GLU:H	4	0.18
(1,1152)	1:A:75:VAL:HG13	1:A:77:GLU:H	4	0.18
(1,1150)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:76:GLU:H	17	0.18
(1,1150)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:76:GLU:H	17	0.18
(1,1150)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:76:GLU:H	17	0.18
(1,115)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:H	10	0.18
(1,1142)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:H	9	0.18
(1,1142)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:H	9	0.18
(1,1142)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:H	9	0.18
(1,1138)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:52:PHE:H	4	0.18
(1,1138)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:52:PHE:H	4	0.18
(1,1138)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:52:PHE:H	4	0.18
(1,1096)	1:A:75:VAL:HG11	1:A:91:ARG:H	3	0.18
(1,1096)	1:A:75:VAL:HG12	1:A:91:ARG:H	3	0.18
(1,1096)	1:A:75:VAL:HG13	1:A:91:ARG:H	3	0.18
(1,1080)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:26:GLU:H	2	0.18
(1,1080)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:26:GLU:H	2	0.18
(1,1080)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:26:GLU:H	2	0.18
(1,1076)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:103:PHE:H	12	0.18
(1,1076)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:103:PHE:H	12	0.18
(1,1076)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:103:PHE:H	12	0.18
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD21	14	0.18
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD22	14	0.18
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD23	14	0.18
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD21	14	0.18
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD22	14	0.18
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD23	14	0.18
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD21	14	0.18



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

Key	Atom-1	$\mathbf{Atom-2}$	Model	Violation (Å)
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD22	14	0.18
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD23	14	0.18
(1,1020)	1:A:131:GLU:H	1:A:133:GLY:H	15	0.18
(1,928)	1:A:131:GLU:H	1:A:134:TYR:H	17	0.17
(1,924)	1:A:26:GLU:H	1:A:64:TRP:HE1	18	0.17
(1,911)	1:A:19:VAL:H	1:A:21:GLN:H	5	0.17
(1,911)	1:A:19:VAL:H	1:A:21:GLN:H	10	0.17
(1,901)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD11	4	0.17
(1,901)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD12	4	0.17
(1,901)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD13	4	0.17
(1,901)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD11	4	0.17
(1,901)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD12	4	0.17
(1,901)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD13	4	0.17
(1,901)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD11	4	0.17
(1,901)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD12	4	0.17
(1,901)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD13	4	0.17
(1,892)	1:A:121:LEU:HD11	1:A:122:ARG:H	11	0.17
(1,892)	1:A:121:LEU:HD12	1:A:122:ARG:H	11	0.17
(1,892)	1:A:121:LEU:HD13	1:A:122:ARG:H	11	0.17
(1,877)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:13:ASN:HD22	9	0.17
(1,877)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:13:ASN:HD22	9	0.17
(1,877)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:13:ASN:HD22	9	0.17
(1,846)	1:A:88:THR:H	1:A:102:VAL:HG11	1	0.17
(1,846)	1:A:88:THR:H	1:A:102:VAL:HG12	1	0.17
(1,846)	1:A:88:THR:H	1:A:102:VAL:HG13	1	0.17
(1,837)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:H	6	0.17
(1,837)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:H	6	0.17
(1,837)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:H	6	0.17
(1,836)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:HD21	13	0.17
(1,836)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:HD21	13	0.17
(1,836)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:HD21	13	0.17
(1,83)	1:A:9:ILE:H	1:A:12:LEU:H	13	0.17
(1,8)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:42:TYR:H	6	0.17
(1,8)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:42:TYR:H	6	0.17
(1,8)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:42:TYR:H	6	0.17
(1,792)	1:A:130:LYS:H	1:A:134:TYR:H	13	0.17
(1,784)	1:A:46:VAL:H	1:A:48:GLY:H	3	0.17
(1,764)	1:A:88:THR:H	1:A:102:VAL:H	15	0.17
(1,728)	1:A:9:ILE:H	1:A:12:LEU:H	13	0.17
(1,708)	1:A:54:SER:HG	1:A:57:LYS:H	7	0.17
(1,693)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:88:THR:H	3	0.17
(1,693)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:88:THR:H	3	0.17



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,693)	1:A:79:LEU:HD13	1:A:88:THR:H	3	0.17
(1,692)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:115:CYS:H	3	0.17
(1,692)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:115:CYS:H	3	0.17
(1,692)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:115:CYS:H	3	0.17
(1,692)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:115:CYS:H	13	0.17
(1,692)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:115:CYS:H	13	0.17
(1,692)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:115:CYS:H	13	0.17
(1,664)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:127:HIS:H	11	0.17
(1,664)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:127:HIS:H	11	0.17
(1,664)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:127:HIS:H	11	0.17
(1,660)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG11	20	0.17
(1,660)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG12	20	0.17
(1,660)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG13	20	0.17
(1,658)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:131:GLU:H	19	0.17
(1,658)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:131:GLU:H	19	0.17
(1,658)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:131:GLU:H	19	0.17
(1,656)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD21	1	0.17
(1,656)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD22	1	0.17
(1,656)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD23	1	0.17
(1,653)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:42:TYR:H	6	0.17
(1,653)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:42:TYR:H	6	0.17
(1,653)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:42:TYR:H	6	0.17
(1,63)	1:A:54:SER:HG	1:A:57:LYS:H	7	0.17
(1,619)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:H	2	0.17
(1,619)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:H	2	0.17
(1,619)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:H	2	0.17
(1,611)	1:A:100:GLY:H	1:A:90:VAL:H	20	0.17
(1,600)	1:A:142:ASN:H	1:A:142:ASN:HD21	12	0.17
(1,600)	1:A:142:ASN:H	1:A:142:ASN:HD21	17	0.17
(1,593)	1:A:22:ASN:HD21	1:A:23:ASN:H	3	0.17
(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG11	3	0.17
(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG12	3	0.17
(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG13	3	0.17
(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG11	19	0.17
(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG12	19	0.17
(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG13	19	0.17
(1,561)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:134:TYR:H	1	0.17
(1,561)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:134:TYR:H	1	0.17
(1,561)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:134:TYR:H	1	0.17
(1,561)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:134:TYR:H	6	0.17
(1,561)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:134:TYR:H	6	0.17
(1,561)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:134:TYR:H	6	0.17
( ) )	1 3 30	1		od on next nage



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,548)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD11	18	0.17
(1,548)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD12	18	0.17
(1,548)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD13	18	0.17
(1,525)	1:A:98:HIS:H	1:A:99:LEU:HD21	20	0.17
(1,525)	1:A:98:HIS:H	1:A:99:LEU:HD22	20	0.17
(1,525)	1:A:98:HIS:H	1:A:99:LEU:HD23	20	0.17
(1,514)	1:A:86:ILE:HD11	1:A:87:ARG:H	1	0.17
(1,514)	1:A:86:ILE:HD12	1:A:87:ARG:H	1	0.17
(1,514)	1:A:86:ILE:HD13	1:A:87:ARG:H	1	0.17
(1,512)	1:A:79:LEU:HD21	1:A:87:ARG:H	9	0.17
(1,512)	1:A:79:LEU:HD22	1:A:87:ARG:H	9	0.17
(1,512)	1:A:79:LEU:HD23	1:A:87:ARG:H	9	0.17
(1,493)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:52:PHE:H	15	0.17
(1,493)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:52:PHE:H	15	0.17
(1,493)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:52:PHE:H	15	0.17
(1,48)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:88:THR:H	3	0.17
(1,48)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:88:THR:H	3	0.17
(1,48)	1:A:79:LEU:HD13	1:A:88:THR:H	3	0.17
(1,472)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:42:TYR:H	5	0.17
(1,472)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:42:TYR:H	5	0.17
(1,472)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:42:TYR:H	5	0.17
(1,47)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:115:CYS:H	3	0.17
(1,47)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:115:CYS:H	3	0.17
(1,47)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:115:CYS:H	3	0.17
(1,47)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:115:CYS:H	13	0.17
(1,47)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:115:CYS:H	13	0.17
(1,47)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:115:CYS:H	13	0.17
(1,468)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:23:ASN:H	8	0.17
(1,468)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:23:ASN:H	8	0.17
(1,468)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:23:ASN:H	8	0.17
(1,453)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG21	12	0.17
(1,453)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG22	12	0.17
(1,453)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG23	12	0.17
(1,443)	1:A:90:VAL:HG21	1:A:101:HIS:H	5	0.17
(1,443)	1:A:90:VAL:HG22	1:A:101:HIS:H	5	0.17
(1,443)	1:A:90:VAL:HG23	1:A:101:HIS:H	5	0.17
(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD21	19	0.17
(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD22	19	0.17
(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD23	19	0.17
(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD21	19	0.17
(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD22	19	0.17
(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD23	19	0.17



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD21	19	0.17
(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD22	19	0.17
(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD23	19	0.17
(1,387)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:90:VAL:HG21	2	0.17
(1,387)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:90:VAL:HG22	2	0.17
(1,387)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:90:VAL:HG23	2	0.17
(1,387)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:90:VAL:HG21	2	0.17
(1,387)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:90:VAL:HG22	2	0.17
(1,387)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:90:VAL:HG23	2	0.17
(1,387)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG21	2	0.17
(1,387)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG22	2	0.17
(1,387)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG23	2	0.17
(1,384)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:99:LEU:HD21	7	0.17
(1,384)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:99:LEU:HD22	7	0.17
(1,384)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:99:LEU:HD23	7	0.17
(1,384)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:99:LEU:HD21	7	0.17
(1,384)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:99:LEU:HD22	7	0.17
(1,384)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:99:LEU:HD23	7	0.17
(1,384)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:99:LEU:HD21	7	0.17
(1,384)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:99:LEU:HD22	7	0.17
(1,384)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:99:LEU:HD23	7	0.17
(1,379)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:H	14	0.17
(1,377)	1:A:134:TYR:H	1:A:135:GLU:H	7	0.17
(1,283)	1:A:131:GLU:H	1:A:134:TYR:H	17	0.17
(1,279)	1:A:26:GLU:H	1:A:64:TRP:HE1	18	0.17
(1,266)	1:A:19:VAL:H	1:A:21:GLN:H	5	0.17
(1,266)	1:A:19:VAL:H	1:A:21:GLN:H	10	0.17
(1,256)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD11	4	0.17
(1,256)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD12	4	0.17
(1,256)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD13	4	0.17
(1,256)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD11	4	0.17
(1,256)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD12	4	0.17
(1,256)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD13	4	0.17
(1,256)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD11	4	0.17
(1,256)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD12	4	0.17
(1,256)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD13	4	0.17
(1,247)	1:A:121:LEU:HD11	1:A:122:ARG:H	11	0.17
(1,247)	1:A:121:LEU:HD12	1:A:122:ARG:H	11	0.17
(1,247)	1:A:121:LEU:HD13	1:A:122:ARG:H	11	0.17
(1,232)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:13:ASN:HD22	9	0.17
(1,232)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:13:ASN:HD22	9	0.17
(1,232)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:13:ASN:HD22	9	0.17



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,201)	1:A:88:THR:H	1:A:102:VAL:HG11	1	0.17
(1,201)	1:A:88:THR:H	1:A:102:VAL:HG12	1	0.17
(1,201)	1:A:88:THR:H	1:A:102:VAL:HG13	1	0.17
(1,192)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:H	6	0.17
(1,192)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:H	6	0.17
(1,192)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:H	6	0.17
(1,191)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:HD21	13	0.17
(1,191)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:HD21	13	0.17
(1,191)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:HD21	13	0.17
(1,19)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:127:HIS:H	11	0.17
(1,19)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:127:HIS:H	11	0.17
(1,19)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:127:HIS:H	11	0.17
(1,15)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG11	20	0.17
(1,15)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG12	20	0.17
(1,15)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG13	20	0.17
(1,147)	1:A:130:LYS:H	1:A:134:TYR:H	13	0.17
(1,139)	1:A:46:VAL:H	1:A:48:GLY:H	3	0.17
(1,13)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:131:GLU:H	19	0.17
(1,13)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:131:GLU:H	19	0.17
(1,13)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:131:GLU:H	19	0.17
(1,1264)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:H	2	0.17
(1,1264)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:H	2	0.17
(1,1264)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:H	2	0.17
(1,1256)	1:A:100:GLY:H	1:A:90:VAL:H	20	0.17
(1,1245)	1:A:142:ASN:H	1:A:142:ASN:HD21	12	0.17
(1,1245)	1:A:142:ASN:H	1:A:142:ASN:HD21	17	0.17
(1,1238)	1:A:22:ASN:HD21	1:A:23:ASN:H	3	0.17
(1,1230)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG11	3	0.17
(1,1230)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG12	3	0.17
(1,1230)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG13	3	0.17
(1,1230)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG11	19	0.17
(1,1230)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG12	19	0.17
(1,1230)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG13	19	0.17
(1,1206)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:134:TYR:H	1	0.17
(1,1206)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:134:TYR:H	1	0.17
(1,1206)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:134:TYR:H	1	0.17
(1,1206)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:134:TYR:H	6	0.17
(1,1206)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:134:TYR:H	6	0.17
(1,1206)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:134:TYR:H	6	0.17
(1,1193)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD11	18	0.17
(1,1193)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD12	18	0.17
(1,1193)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD13	18	0.17



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,119)	1:A:88:THR:H	1:A:102:VAL:H	15	0.17
(1,1170)	1:A:98:HIS:H	1:A:99:LEU:HD21	20	0.17
(1,1170)	1:A:98:HIS:H	1:A:99:LEU:HD22	20	0.17
(1,1170)	1:A:98:HIS:H	1:A:99:LEU:HD23	20	0.17
(1,1159)	1:A:86:ILE:HD11	1:A:87:ARG:H	1	0.17
(1,1159)	1:A:86:ILE:HD12	1:A:87:ARG:H	1	0.17
(1,1159)	1:A:86:ILE:HD13	1:A:87:ARG:H	1	0.17
(1,1157)	1:A:79:LEU:HD21	1:A:87:ARG:H	9	0.17
(1,1157)	1:A:79:LEU:HD22	1:A:87:ARG:H	9	0.17
(1,1157)	1:A:79:LEU:HD23	1:A:87:ARG:H	9	0.17
(1,1138)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:52:PHE:H	15	0.17
(1,1138)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:52:PHE:H	15	0.17
(1,1138)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:52:PHE:H	15	0.17
(1,1117)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:42:TYR:H	5	0.17
(1,1117)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:42:TYR:H	5	0.17
(1,1117)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:42:TYR:H	5	0.17
(1,1113)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:23:ASN:H	8	0.17
(1,1113)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:23:ASN:H	8	0.17
(1,1113)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:23:ASN:H	8	0.17
(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD21	1	0.17
(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD22	1	0.17
(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD23	1	0.17
(1,1098)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG21	12	0.17
(1,1098)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG22	12	0.17
(1,1098)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG23	12	0.17
(1,1088)	1:A:90:VAL:HG21	1:A:101:HIS:H	5	0.17
(1,1088)	1:A:90:VAL:HG22	1:A:101:HIS:H	5	0.17
(1,1088)	1:A:90:VAL:HG23	1:A:101:HIS:H	5	0.17
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD21	19	0.17
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD22	19	0.17
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD23	19	0.17
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD21	19	0.17
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD22	19	0.17
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD23	19	0.17
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD21	19	0.17
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD22	19	0.17
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD23	19	0.17
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:90:VAL:HG21	2	0.17
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:90:VAL:HG22	2	0.17
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:90:VAL:HG23	2	0.17
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:90:VAL:HG21	2	0.17
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:90:VAL:HG22	2	0.17



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:90:VAL:HG23	2	0.17
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG21	2	0.17
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG22	2	0.17
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG23	2	0.17
(1,1029)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:99:LEU:HD21	7	0.17
(1,1029)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:99:LEU:HD22	7	0.17
(1,1029)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:99:LEU:HD23	7	0.17
(1,1029)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:99:LEU:HD21	7	0.17
(1,1029)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:99:LEU:HD22	7	0.17
(1,1029)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:99:LEU:HD23	7	0.17
(1,1029)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:99:LEU:HD21	7	0.17
(1,1029)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:99:LEU:HD22	7	0.17
(1,1029)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:99:LEU:HD23	7	0.17
(1,1024)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:H	14	0.17
(1,1022)	1:A:134:TYR:H	1:A:135:GLU:H	7	0.17
(1,98)	1:A:31:ASN:H	1:A:34:TRP:H	12	0.16
(1,974)	1:A:79:LEU:H	1:A:89:GLU:H	1	0.16
(1,943)	1:A:14:ARG:H	1:A:17:TYR:H	12	0.16
(1,93)	1:A:8:LYS:H	1:A:10:LYS:H	12	0.16
(1,912)	1:A:21:GLN:H	1:A:24:GLY:H	2	0.16
(1,9)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:138:LEU:H	9	0.16
(1,9)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:138:LEU:H	9	0.16
(1,9)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:138:LEU:H	9	0.16
(1,9)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:138:LEU:H	10	0.16
(1,9)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:138:LEU:H	10	0.16
(1,9)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:138:LEU:H	10	0.16
(1,895)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:25:THR:H	19	0.16
(1,895)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:25:THR:H	19	0.16
(1,895)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:25:THR:H	19	0.16
(1,856)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:138:LEU:HD11	17	0.16
(1,856)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:138:LEU:HD12	17	0.16
(1,856)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:138:LEU:HD13	17	0.16
(1,856)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:138:LEU:HD11	17	0.16
(1,856)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:138:LEU:HD12	17	0.16
(1,856)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:138:LEU:HD13	17	0.16
(1,856)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:138:LEU:HD11	17	0.16
(1,856)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:138:LEU:HD12	17	0.16
(1,856)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:138:LEU:HD13	17	0.16
(1,807)	1:A:92:SER:H	1:A:96:ASP:H	14	0.16
(1,743)	1:A:31:ASN:H	1:A:34:TRP:H	12	0.16
(1,738)	1:A:8:LYS:H	1:A:10:LYS:H	12	0.16
(1,706)	1:A:54:SER:HG	1:A:55:LYS:H	17	0.16



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,702)	1:A:112:LEU:HD11	1:A:113:ARG:H	7	0.16
(1,702)	1:A:112:LEU:HD12	1:A:113:ARG:H	7	0.16
(1,702)	1:A:112:LEU:HD13	1:A:113:ARG:H	7	0.16
(1,702)	1:A:112:LEU:HD11	1:A:113:ARG:H	14	0.16
(1,702)	1:A:112:LEU:HD12	1:A:113:ARG:H	14	0.16
(1,702)	1:A:112:LEU:HD13	1:A:113:ARG:H	14	0.16
(1,692)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:115:CYS:H	5	0.16
(1,692)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:115:CYS:H	5	0.16
(1,692)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:115:CYS:H	5	0.16
(1,685)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:97:SER:H	16	0.16
(1,685)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:97:SER:H	16	0.16
(1,685)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:97:SER:H	16	0.16
(1,682)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:13:ASN:HD21	1	0.16
(1,682)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:13:ASN:HD21	1	0.16
(1,682)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:13:ASN:HD21	1	0.16
(1,669)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:134:TYR:H	1	0.16
(1,669)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:134:TYR:H	1	0.16
(1,669)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:134:TYR:H	1	0.16
(1,669)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:134:TYR:H	4	0.16
(1,669)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:134:TYR:H	4	0.16
(1,669)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:134:TYR:H	4	0.16
(1,656)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD21	15	0.16
(1,656)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD22	15	0.16
(1,656)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD23	15	0.16
(1,656)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD21	17	0.16
(1,656)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD22	17	0.16
(1,656)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD23	17	0.16
(1,656)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD21	20	0.16
(1,656)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD22	20	0.16
(1,656)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD23	20	0.16
(1,654)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:138:LEU:H	9	0.16
(1,654)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:138:LEU:H	9	0.16
(1,654)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:138:LEU:H	9	0.16
(1,654)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:138:LEU:H	10	0.16
(1,654)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:138:LEU:H	10	0.16
(1,654)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:138:LEU:H	10	0.16
(1,649)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:124:VAL:H	8	0.16
(1,649)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:H	8	0.16
(1,649)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:H	8	0.16
(1,644)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD11	1	0.16
(1,644)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD12	1	0.16
(1,644)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD13	1	0.16



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,644)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD11	13	0.16
(1,644)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD12	13	0.16
(1,644)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD13	13	0.16
(1,630)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD21	10	0.16
(1,630)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD22	10	0.16
(1,630)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD23	10	0.16
(1,630)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD21	10	0.16
(1,630)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD22	10	0.16
(1,630)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD23	10	0.16
(1,630)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD21	10	0.16
(1,630)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD22	10	0.16
(1,630)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD23	10	0.16
(1,626)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:140:LEU:HD11	18	0.16
(1,626)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:140:LEU:HD12	18	0.16
(1,626)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:140:LEU:HD13	18	0.16
(1,626)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:140:LEU:HD11	18	0.16
(1,626)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:140:LEU:HD12	18	0.16
(1,626)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:140:LEU:HD13	18	0.16
(1,626)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:140:LEU:HD11	18	0.16
(1,626)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:140:LEU:HD12	18	0.16
(1,626)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:140:LEU:HD13	18	0.16
(1,625)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:140:LEU:HD11	3	0.16
(1,625)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:140:LEU:HD12	3	0.16
(1,625)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:140:LEU:HD13	3	0.16
(1,625)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:140:LEU:HD11	3	0.16
(1,625)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:140:LEU:HD12	3	0.16
(1,625)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:140:LEU:HD13	3	0.16
(1,625)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:140:LEU:HD11	3	0.16
(1,625)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:140:LEU:HD12	3	0.16
(1,625)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:140:LEU:HD13	3	0.16
(1,619)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:H	13	0.16
(1,619)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:H	13	0.16
(1,619)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:H	13	0.16
(1,612)	1:A:102:VAL:H	1:A:88:THR:H	16	0.16
(1,61)	1:A:54:SER:HG	1:A:55:LYS:H	17	0.16
(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG11	11	0.16
(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG12	11	0.16
(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG13	11	0.16
(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG11	18	0.16
(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG12	18	0.16
(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG13	18	0.16
(1,583)	1:A:90:VAL:H	1:A:102:VAL:HG21	10	0.16



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

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



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

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



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

(1,393)         1:A:12:LEU:HD23         1:A:46:VAL:HG12         20         0.16           (1,393)         1:A:12:LEU:HD23         1:A:46:VAL:HG13         20         0.16           (1,374)         1:A:132:GLU:H         1:A:134:TYR:H         12         0.16           (1,37)         1:A:9:ILE:HD11         1:A:13:ASN:HD21         1         0.16           (1,37)         1:A:9:ILE:HD12         1:A:13:ASN:HD21         1         0.16           (1,37)         1:A:67:ILE:HD13         1:A:13:ASN:HD21         1         0.16           (1,37)         1:A:67:ILE:HD13         1:A:13:ASN:HD21         1         0.16           (1,37)         1:A:67:ILE:HD13         1:A:13:ASN:HD21         1         0.16           (1,355)         1:A:67:PHE:H         1:A:114:TYR:H         1         0.16           (1,329)         1:A:79:LEU:H         1:A:89:GLU:H         1         0.16           (1,298)         1:A:14:ARG:H         1:A:17:TYR:H         12         0.16           (1,267)         1:A:19:VAL:HG21         1:A:24:GLY:H         2         0.16           (1,250)         1:A:19:VAL:HG22         1:A:25:THR:H         19         0.16           (1,250)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:25:THR:H         1	6 6 6 6 6 6 6 6 6
(1,374)         1:A:132:GLU:H         1:A:134:TYR:H         12         0.16           (1,37)         1:A:9:ILE:HD11         1:A:13:ASN:HD21         1         0.16           (1,37)         1:A:9:ILE:HD12         1:A:13:ASN:HD21         1         0.16           (1,37)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:13:ASN:HD21         1         0.16           (1,37)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:13:ASN:HD21         1         0.16           (1,37)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:13:ASN:HD21         1         0.16           (1,35)         1:A:67:PHE:H         1:A:13:ASN:HD21         1         0.16           (1,35)         1:A:67:PHE:H         1:A:14:TYR:H         1         0.16           (1,329)         1:A:79:LEU:H         1:A:14:TYR:H         1         0.16           (1,298)         1:A:14:ARG:H         1:A:17:TYR:H         12         0.16           (1,267)         1:A:19:VAL:HG21         1:A:25:THR:H         19         0.16           (1,250)         1:A:19:VAL:HG22         1:A:25:THR:H         19         0.16           (1,250)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:25:THR:H         19         0.16           (1,24)         1:A:129:LEU:HD11         1:A:134:TYR:H         1	6 6 6 6 6 6
(1,37)         1:A:9:ILE:HD11         1:A:13:ASN:HD21         1         0.16           (1,37)         1:A:9:ILE:HD12         1:A:13:ASN:HD21         1         0.16           (1,37)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:13:ASN:HD21         1         0.16           (1,37)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:13:ASN:HD21         1         0.16           (1,355)         1:A:67:PHE:H         1:A:114:TYR:H         1         0.16           (1,329)         1:A:79:LEU:H         1:A:89:GLU:H         1         0.16           (1,298)         1:A:14:ARG:H         1:A:17:TYR:H         12         0.16           (1,267)         1:A:21:GLN:H         1:A:24:GLY:H         2         0.16           (1,267)         1:A:19:VAL:HG21         1:A:25:THR:H         19         0.16           (1,250)         1:A:19:VAL:HG22         1:A:25:THR:H         19         0.16           (1,250)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:25:THR:H         19         0.16           (1,24)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:134:TYR:H         1         0.16           (1,24)         1:A:129:LEU:HD11         1:A:134:TYR:H         1         0.16           (1,24)         1:A:129:LEU:HD11         1:A:134:TYR:H         4	6 6 6 6 6 6
(1,37)         1:A:9:ILE:HD12         1:A:13:ASN:HD21         1         0.16           (1,37)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:13:ASN:HD21         1         0.16           (1,355)         1:A:67:PHE:H         1:A:114:TYR:H         1         0.16           (1,329)         1:A:79:LEU:H         1:A:89:GLU:H         1         0.16           (1,298)         1:A:14:ARG:H         1:A:17:TYR:H         12         0.16           (1,267)         1:A:21:GLN:H         1:A:24:GLY:H         2         0.16           (1,267)         1:A:19:VAL:HG21         1:A:25:THR:H         19         0.16           (1,250)         1:A:19:VAL:HG22         1:A:25:THR:H         19         0.16           (1,250)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:25:THR:H         19         0.16           (1,24)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:134:TYR:H         1         0.16           (1,24)         1:A:129:LEU:HD11         1:A:134:TYR:H         1         0.16           (1,24)         1:A:129:LEU:HD13         1:A:134:TYR:H         1         0.16           (1,24)         1:A:129:LEU:HD11         1:A:134:TYR:H         4         0.16           (1,24)         1:A:129:LEU:HD12         1:A:134:TYR:H         4	6 6 6 6
(1,37)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:13:ASN:HD21         1         0.16           (1,355)         1:A:67:PHE:H         1:A:114:TYR:H         1         0.16           (1,329)         1:A:79:LEU:H         1:A:89:GLU:H         1         0.16           (1,298)         1:A:14:ARG:H         1:A:17:TYR:H         12         0.16           (1,267)         1:A:21:GLN:H         1:A:24:GLY:H         2         0.16           (1,267)         1:A:19:VAL:HG21         1:A:25:THR:H         19         0.16           (1,250)         1:A:19:VAL:HG22         1:A:25:THR:H         19         0.16           (1,250)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:25:THR:H         19         0.16           (1,250)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:25:THR:H         19         0.16           (1,24)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:134:TYR:H         1         0.16           (1,24)         1:A:129:LEU:HD11         1:A:134:TYR:H         1         0.16           (1,24)         1:A:129:LEU:HD13         1:A:134:TYR:H         4         0.16           (1,24)         1:A:129:LEU:HD12         1:A:134:TYR:H         4         0.16           (1,24)         1:A:129:LEU:HD13         1:A:134:TYR:H         4	6 6 6 6
(1,355)         1:A:67:PHE:H         1:A:114:TYR:H         1         0.16           (1,329)         1:A:79:LEU:H         1:A:89:GLU:H         1         0.16           (1,298)         1:A:14:ARG:H         1:A:17:TYR:H         12         0.16           (1,267)         1:A:21:GLN:H         1:A:24:GLY:H         2         0.16           (1,267)         1:A:19:VAL:HG21         1:A:25:THR:H         19         0.16           (1,250)         1:A:19:VAL:HG22         1:A:25:THR:H         19         0.16           (1,250)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:25:THR:H         19         0.16           (1,24)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:34:TYR:H         1         0.16           (1,24)         1:A:129:LEU:HD11         1:A:134:TYR:H         1         0.16           (1,24)         1:A:129:LEU:HD13         1:A:134:TYR:H         1         0.16           (1,24)         1:A:129:LEU:HD11         1:A:134:TYR:H         4         0.16           (1,24)         1:A:129:LEU:HD12         1:A:134:TYR:H         4         0.16           (1,24)         1:A:129:LEU:HD13         1:A:134:TYR:H         4         0.16           (1,24)         1:A:14:LEU:HD21         1:A:138:LEU:HD11         17	i i i
(1,329)         1:A:79:LEU:H         1:A:89:GLU:H         1         0.16           (1,298)         1:A:14:ARG:H         1:A:17:TYR:H         12         0.16           (1,267)         1:A:21:GLN:H         1:A:24:GLY:H         2         0.16           (1,250)         1:A:19:VAL:HG21         1:A:25:THR:H         19         0.16           (1,250)         1:A:19:VAL:HG22         1:A:25:THR:H         19         0.16           (1,250)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:25:THR:H         19         0.16           (1,24)         1:A:19:LEU:HD11         1:A:134:TYR:H         1         0.16           (1,24)         1:A:129:LEU:HD12         1:A:134:TYR:H         1         0.16           (1,24)         1:A:129:LEU:HD13         1:A:134:TYR:H         4         0.16           (1,24)         1:A:129:LEU:HD12         1:A:134:TYR:H         4         0.16           (1,24)         1:A:129:LEU:HD12         1:A:134:TYR:H         4         0.16           (1,24)         1:A:129:LEU:HD13         1:A:134:TYR:H         4         0.16           (1,21)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:138:LEU:HD11         17         0.16	
(1,298)       1:A:14:ARG:H       1:A:17:TYR:H       12       0.16         (1,267)       1:A:21:GLN:H       1:A:24:GLY:H       2       0.16         (1,250)       1:A:19:VAL:HG21       1:A:25:THR:H       19       0.16         (1,250)       1:A:19:VAL:HG22       1:A:25:THR:H       19       0.16         (1,250)       1:A:19:VAL:HG23       1:A:25:THR:H       19       0.16         (1,24)       1:A:129:LEU:HD11       1:A:134:TYR:H       1       0.16         (1,24)       1:A:129:LEU:HD12       1:A:134:TYR:H       1       0.16         (1,24)       1:A:129:LEU:HD13       1:A:134:TYR:H       4       0.16         (1,24)       1:A:129:LEU:HD11       1:A:134:TYR:H       4       0.16         (1,24)       1:A:129:LEU:HD12       1:A:134:TYR:H       4       0.16         (1,24)       1:A:129:LEU:HD13       1:A:134:TYR:H       4       0.16         (1,24)       1:A:129:LEU:HD13       1:A:134:TYR:H       4       0.16         (1,24)       1:A:129:LEU:HD13       1:A:138:LEU:HD11       17       0.16	i i
(1,267)       1:A:21:GLN:H       1:A:24:GLY:H       2       0.16         (1,250)       1:A:19:VAL:HG21       1:A:25:THR:H       19       0.16         (1,250)       1:A:19:VAL:HG22       1:A:25:THR:H       19       0.16         (1,250)       1:A:19:VAL:HG23       1:A:25:THR:H       19       0.16         (1,24)       1:A:129:LEU:HD11       1:A:134:TYR:H       1       0.16         (1,24)       1:A:129:LEU:HD12       1:A:134:TYR:H       1       0.16         (1,24)       1:A:129:LEU:HD13       1:A:134:TYR:H       4       0.16         (1,24)       1:A:129:LEU:HD11       1:A:134:TYR:H       4       0.16         (1,24)       1:A:129:LEU:HD12       1:A:134:TYR:H       4       0.16         (1,24)       1:A:129:LEU:HD13       1:A:134:TYR:H       4       0.16         (1,24)       1:A:129:LEU:HD13       1:A:134:TYR:H       4       0.16         (1,21)       1:A:41:LEU:HD21       1:A:138:LEU:HD11       17       0.16	3
(1,250)       1:A:19:VAL:HG21       1:A:25:THR:H       19       0.16         (1,250)       1:A:19:VAL:HG22       1:A:25:THR:H       19       0.16         (1,250)       1:A:19:VAL:HG23       1:A:25:THR:H       19       0.16         (1,24)       1:A:129:LEU:HD11       1:A:134:TYR:H       1       0.16         (1,24)       1:A:129:LEU:HD12       1:A:134:TYR:H       1       0.16         (1,24)       1:A:129:LEU:HD13       1:A:134:TYR:H       4       0.16         (1,24)       1:A:129:LEU:HD11       1:A:134:TYR:H       4       0.16         (1,24)       1:A:129:LEU:HD12       1:A:134:TYR:H       4       0.16         (1,24)       1:A:129:LEU:HD13       1:A:134:TYR:H       4       0.16         (1,24)       1:A:129:LEU:HD13       1:A:134:TYR:H       4       0.16         (1,24)       1:A:129:LEU:HD13       1:A:134:TYR:H       4       0.16         (1,21)       1:A:41:LEU:HD21       1:A:138:LEU:HD11       17       0.16	
(1,250)       1:A:19:VAL:HG22       1:A:25:THR:H       19       0.16         (1,250)       1:A:19:VAL:HG23       1:A:25:THR:H       19       0.16         (1,24)       1:A:129:LEU:HD11       1:A:134:TYR:H       1       0.16         (1,24)       1:A:129:LEU:HD12       1:A:134:TYR:H       1       0.16         (1,24)       1:A:129:LEU:HD13       1:A:134:TYR:H       1       0.16         (1,24)       1:A:129:LEU:HD11       1:A:134:TYR:H       4       0.16         (1,24)       1:A:129:LEU:HD12       1:A:134:TYR:H       4       0.16         (1,24)       1:A:129:LEU:HD13       1:A:134:TYR:H       4       0.16         (1,24)       1:A:129:LEU:HD13       1:A:134:TYR:H       4       0.16         (1,24)       1:A:129:LEU:HD13       1:A:138:LEU:HD11       17       0.16	,
(1,250)       1:A:19:VAL:HG23       1:A:25:THR:H       19       0.16         (1,24)       1:A:129:LEU:HD11       1:A:134:TYR:H       1       0.16         (1,24)       1:A:129:LEU:HD12       1:A:134:TYR:H       1       0.16         (1,24)       1:A:129:LEU:HD13       1:A:134:TYR:H       1       0.16         (1,24)       1:A:129:LEU:HD11       1:A:134:TYR:H       4       0.16         (1,24)       1:A:129:LEU:HD12       1:A:134:TYR:H       4       0.16         (1,24)       1:A:129:LEU:HD13       1:A:134:TYR:H       4       0.16         (1,24)       1:A:129:LEU:HD13       1:A:134:TYR:H       4       0.16         (1,21)       1:A:41:LEU:HD21       1:A:138:LEU:HD11       17       0.16	)
(1,24)       1:A:129:LEU:HD11       1:A:134:TYR:H       1       0.16         (1,24)       1:A:129:LEU:HD12       1:A:134:TYR:H       1       0.16         (1,24)       1:A:129:LEU:HD13       1:A:134:TYR:H       1       0.16         (1,24)       1:A:129:LEU:HD11       1:A:134:TYR:H       4       0.16         (1,24)       1:A:129:LEU:HD12       1:A:134:TYR:H       4       0.16         (1,24)       1:A:129:LEU:HD13       1:A:134:TYR:H       4       0.16         (1,24)       1:A:129:LEU:HD13       1:A:134:TYR:H       4       0.16         (1,211)       1:A:41:LEU:HD21       1:A:138:LEU:HD11       17       0.16	3
(1,24)       1:A:129:LEU:HD12       1:A:134:TYR:H       1       0.16         (1,24)       1:A:129:LEU:HD13       1:A:134:TYR:H       1       0.16         (1,24)       1:A:129:LEU:HD11       1:A:134:TYR:H       4       0.16         (1,24)       1:A:129:LEU:HD12       1:A:134:TYR:H       4       0.16         (1,24)       1:A:129:LEU:HD13       1:A:134:TYR:H       4       0.16         (1,24)       1:A:129:LEU:HD13       1:A:134:TYR:H       4       0.16         (1,211)       1:A:41:LEU:HD21       1:A:138:LEU:HD11       17       0.16	3
(1,24)       1:A:129:LEU:HD13       1:A:134:TYR:H       1       0.16         (1,24)       1:A:129:LEU:HD11       1:A:134:TYR:H       4       0.16         (1,24)       1:A:129:LEU:HD12       1:A:134:TYR:H       4       0.16         (1,24)       1:A:129:LEU:HD13       1:A:134:TYR:H       4       0.16         (1,24)       1:A:129:LEU:HD13       1:A:134:TYR:H       4       0.16         (1,211)       1:A:41:LEU:HD21       1:A:138:LEU:HD11       17       0.16	3
(1,24)       1:A:129:LEU:HD11       1:A:134:TYR:H       4       0.16         (1,24)       1:A:129:LEU:HD12       1:A:134:TYR:H       4       0.16         (1,24)       1:A:129:LEU:HD13       1:A:134:TYR:H       4       0.16         (1,24)       1:A:41:LEU:HD21       1:A:138:LEU:HD11       17       0.16	3
(1,24)       1:A:129:LEU:HD12       1:A:134:TYR:H       4       0.16         (1,24)       1:A:129:LEU:HD13       1:A:134:TYR:H       4       0.16         (1,21)       1:A:41:LEU:HD21       1:A:138:LEU:HD11       17       0.16	3
(1,24)       1:A:129:LEU:HD13       1:A:134:TYR:H       4       0.16         (1,211)       1:A:41:LEU:HD21       1:A:138:LEU:HD11       17       0.16	3
(1,211) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:138:LEU:HD11 17 0.16	3
	<del></del>
(1,211) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:138:LEU:HD12 17 0.16	3
	3
(1,211) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:138:LEU:HD13 17 0.16	3
(1,211) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD11 17 0.16	3
(1,211) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD12 17 0.16	3
(1,211) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD13 17 0.16	3
(1,211) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD11 17 0.16	3
(1,211) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD12 17 0.16	3
(1,211) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD13 17 0.16	3
(1,162) 1:A:92:SER:H 1:A:96:ASP:H 14 0.16	3
(1,1289) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 1 0.16	3
(1,1289) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD12 1 0.16	<del></del>
(1,1289) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 1 0.16	3
(1,1289) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 13 0.16	3
(1,1289) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD12 13 0.16	3
(1,1289) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 13 0.16	3
(1,1275) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD21 10 0.16	3
(1,1275) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD22 10 0.16	3
(1,1275) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD23 10 0.16	3
(1,1275) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:99:LEU:HD21 10 0.16	3
(1,1275) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:99:LEU:HD22 10 0.16	3
(1,1275) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:99:LEU:HD23 10 0.16	
(1,1275) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD21 10 0.16	3



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD22	10	0.16
	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD23	10	0.16
(1,1271)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:140:LEU:HD11	18	0.16
(1,1271)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:140:LEU:HD12	18	0.16
(1,1271)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:140:LEU:HD13	18	0.16
(1,1271)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:140:LEU:HD11	18	0.16
(1,1271)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:140:LEU:HD12	18	0.16
(1,1271)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:140:LEU:HD13	18	0.16
(1,1271)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:140:LEU:HD11	18	0.16
(1,1271)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:140:LEU:HD12	18	0.16
(1,1271)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:140:LEU:HD13	18	0.16
(1,1270)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:140:LEU:HD11	3	0.16
(1,1270)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:140:LEU:HD12	3	0.16
(1,1270)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:140:LEU:HD13	3	0.16
(1,1270)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:140:LEU:HD11	3	0.16
(1,1270)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:140:LEU:HD12	3	0.16
(1,1270)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:140:LEU:HD13	3	0.16
(1,1270)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:140:LEU:HD11	3	0.16
(1,1270)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:140:LEU:HD12	3	0.16
(1,1270)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:140:LEU:HD13	3	0.16
(1,1264)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:H	13	0.16
(1,1264)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:H	13	0.16
(1,1264)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:H	13	0.16
(1,1257)	1:A:102:VAL:H	1:A:88:THR:H	16	0.16
(1,1230)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG11	11	0.16
(1,1230)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG12	11	0.16
(1,1230)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG13	11	0.16
(1,1230)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG11	18	0.16
(1,1230)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG12	18	0.16
(1,1230)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG13	18	0.16
(1,1228)	1:A:90:VAL:H	1:A:102:VAL:HG21	10	0.16
(1,1228)	1:A:90:VAL:H	1:A:102:VAL:HG22	10	0.16
(1,1228)	1:A:90:VAL:H	1:A:102:VAL:HG23	10	0.16
(1,1195)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG21	13	0.16
(1,1195)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG22	13	0.16
(1,1195)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG23	13	0.16
(1,1187)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD21	8	0.16
(1,1187)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD22	8	0.16
(1,1187)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD23	8	0.16
(1,1157)	1:A:79:LEU:HD21	1:A:87:ARG:H	11	0.16
(1,1157)	1:A:79:LEU:HD22	1:A:87:ARG:H	11	0.16
(1,1157)	1:A:79:LEU:HD23	1:A:87:ARG:H	11	0.16



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1138)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:52:PHE:H	1	0.16
(1,1138)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:52:PHE:H	1	0.16
(1,1138)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:52:PHE:H	1	0.16
(1,1110)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG11	12	0.16
(1,1110)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG12	12	0.16
(1,1110)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG13	12	0.16
(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD21	15	0.16
(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD22	15	0.16
(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD23	15	0.16
(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD21	17	0.16
(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD22	17	0.16
(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD23	17	0.16
(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD21	20	0.16
(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD22	20	0.16
(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD23	20	0.16
(1,1099)	1:A:134:TYR:H	1:A:138:LEU:HD21	8	0.16
(1,1099)	1:A:134:TYR:H	1:A:138:LEU:HD22	8	0.16
(1,1099)	1:A:134:TYR:H	1:A:138:LEU:HD23	8	0.16
(1,1098)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG21	20	0.16
(1,1098)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG22	20	0.16
(1,1098)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG23	20	0.16
(1,1096)	1:A:75:VAL:HG11	1:A:91:ARG:H	12	0.16
(1,1096)	1:A:75:VAL:HG12	1:A:91:ARG:H	12	0.16
(1,1096)	1:A:75:VAL:HG13	1:A:91:ARG:H	12	0.16
(1,1096)	1:A:75:VAL:HG11	1:A:91:ARG:H	13	0.16
(1,1096)	1:A:75:VAL:HG12	1:A:91:ARG:H	13	0.16
(1,1096)	1:A:75:VAL:HG13	1:A:91:ARG:H	13	0.16
(1,1088)	1:A:90:VAL:HG21	1:A:101:HIS:H	15	0.16
(1,1088)	1:A:90:VAL:HG22	1:A:101:HIS:H	15	0.16
(1,1088)	1:A:90:VAL:HG23	1:A:101:HIS:H	15	0.16
(1,1076)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:103:PHE:H	20	0.16
(1,1076)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:103:PHE:H	20	0.16
(1,1076)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:103:PHE:H	20	0.16
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD11	17	0.16
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD12	17	0.16
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD13	17	0.16
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD11	17	0.16
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD12	17	0.16
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD13	17	0.16
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD11	17	0.16
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD12	17	0.16
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD13	17	0.16



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1052)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:46:VAL:HG21	11	0.16
(1,1052)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:46:VAL:HG22	11	0.16
(1,1052)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:46:VAL:HG23	11	0.16
(1,1052)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:46:VAL:HG21	11	0.16
(1,1052)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:46:VAL:HG22	11	0.16
(1,1052)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:46:VAL:HG23	11	0.16
(1,1052)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:46:VAL:HG21	11	0.16
(1,1052)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:46:VAL:HG22	11	0.16
(1,1052)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:46:VAL:HG23	11	0.16
(1,1038)	1:A:12:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HG11	3	0.16
(1,1038)	1:A:12:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HG12	3	0.16
(1,1038)	1:A:12:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HG13	3	0.16
(1,1038)	1:A:12:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HG11	3	0.16
(1,1038)	1:A:12:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HG12	3	0.16
(1,1038)	1:A:12:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HG13	3	0.16
(1,1038)	1:A:12:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HG11	3	0.16
(1,1038)	1:A:12:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HG12	3	0.16
(1,1038)	1:A:12:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HG13	3	0.16
(1,1038)	1:A:12:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HG11	20	0.16
(1,1038)	1:A:12:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HG12	20	0.16
(1,1038)	1:A:12:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HG13	20	0.16
(1,1038)	1:A:12:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HG11	20	0.16
(1,1038)	1:A:12:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HG12	20	0.16
(1,1038)	1:A:12:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HG13	20	0.16
(1,1038)	1:A:12:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HG11	20	0.16
(1,1038)	1:A:12:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HG12	20	0.16
(1,1038)	1:A:12:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HG13	20	0.16
(1,1019)	1:A:132:GLU:H	1:A:134:TYR:H	12	0.16
(1,1000)	1:A:67:PHE:H	1:A:114:TYR:H	1	0.16
(1,982)	1:A:76:GLU:H	1:A:91:ARG:H	6	0.15
(1,967)	1:A:54:SER:H	1:A:57:LYS:H	9	0.15
(1,954)	1:A:33:TYR:H	1:A:36:HIS:H	5	0.15
(1,953)	1:A:30:GLN:H	1:A:34:TRP:HE1	13	0.15
(1,928)	1:A:131:GLU:H	1:A:134:TYR:H	16	0.15
(1,912)	1:A:21:GLN:H	1:A:24:GLY:H	8	0.15
(1,911)	1:A:19:VAL:H	1:A:21:GLN:H	9	0.15
(1,911)	1:A:19:VAL:H	1:A:21:GLN:H	17	0.15
(1,904)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD11	1	0.15
(1,904)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD12	1	0.15
(1,904)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD13	1	0.15
(1,904)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD11	1	0.15
(1,904)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD12	1	0.15



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,904)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD13	1	0.15
(1,904)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD11	1	0.15
(1,904)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD12	1	0.15
(1,904)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD13	1	0.15
(1,904)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD11	18	0.15
(1,904)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD12	18	0.15
(1,904)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD13	18	0.15
(1,904)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD11	18	0.15
(1,904)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD12	18	0.15
(1,904)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD13	18	0.15
(1,904)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD11	18	0.15
(1,904)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD12	18	0.15
(1,904)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD13	18	0.15
(1,892)	1:A:121:LEU:HD11	1:A:122:ARG:H	4	0.15
(1,892)	1:A:121:LEU:HD12	1:A:122:ARG:H	4	0.15
(1,892)	1:A:121:LEU:HD13	1:A:122:ARG:H	4	0.15
(1,87)	1:A:31:ASN:H	1:A:34:TRP:HE1	7	0.15
(1,84)	1:A:10:LYS:H	1:A:12:LEU:H	12	0.15
(1,84)	1:A:10:LYS:H	1:A:12:LEU:H	19	0.15
(1,792)	1:A:130:LYS:H	1:A:134:TYR:H	8	0.15
(1,760)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:H	2	0.15
(1,732)	1:A:31:ASN:H	1:A:34:TRP:HE1	7	0.15
(1,729)	1:A:10:LYS:H	1:A:12:LEU:H	12	0.15
(1,729)	1:A:10:LYS:H	1:A:12:LEU:H	19	0.15
(1,713)	1:A:34:TRP:H	1:A:36:HIS:H	16	0.15
(1,702)	1:A:112:LEU:HD11	1:A:113:ARG:H	18	0.15
(1,702)	1:A:112:LEU:HD12	1:A:113:ARG:H	18	0.15
(1,702)	1:A:112:LEU:HD13	1:A:113:ARG:H	18	0.15
(1,698)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD21	6	0.15
(1,698)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD22	6	0.15
(1,698)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD23	6	0.15
(1,692)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:115:CYS:H	11	0.15
(1,692)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:115:CYS:H	11	0.15
(1,692)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:115:CYS:H	11	0.15
(1,68)	1:A:34:TRP:H	1:A:36:HIS:H	16	0.15
(1,679)	1:A:104:ASN:HD22	1:A:112:LEU:HD21	16	0.15
(1,679)	1:A:104:ASN:HD22	1:A:112:LEU:HD22	16	0.15
(1,679)	1:A:104:ASN:HD22	1:A:112:LEU:HD23	16	0.15
(1,677)	1:A:103:PHE:H	1:A:112:LEU:HD21	17	0.15
(1,677)	1:A:103:PHE:H	1:A:112:LEU:HD22	17	0.15
(1,677)	1:A:103:PHE:H	1:A:112:LEU:HD23	17	0.15
(1,671)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD11	5	0.15



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,671)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD12	5	0.15
(1,671)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD13	5	0.15
(1,671)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD11	13	0.15
(1,671)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD12	13	0.15
(1,671)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD13	13	0.15
(1,656)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD21	7	0.15
(1,656)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD22	7	0.15
(1,656)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD23	7	0.15
(1,626)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:140:LEU:HD11	15	0.15
(1,626)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:140:LEU:HD12	15	0.15
(1,626)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:140:LEU:HD13	15	0.15
(1,626)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:140:LEU:HD11	15	0.15
(1,626)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:140:LEU:HD12	15	0.15
(1,626)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:140:LEU:HD13	15	0.15
(1,626)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:140:LEU:HD11	15	0.15
(1,626)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:140:LEU:HD12	15	0.15
(1,626)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:140:LEU:HD13	15	0.15
(1,625)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:140:LEU:HD11	18	0.15
(1,625)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:140:LEU:HD12	18	0.15
(1,625)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:140:LEU:HD13	18	0.15
(1,625)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:140:LEU:HD11	18	0.15
(1,625)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:140:LEU:HD12	18	0.15
(1,625)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:140:LEU:HD13	18	0.15
(1,625)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:140:LEU:HD11	18	0.15
(1,625)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:140:LEU:HD12	18	0.15
(1,625)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:140:LEU:HD13	18	0.15
(1,619)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:H	6	0.15
(1,619)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:H	6	0.15
(1,619)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:H	6	0.15
(1,605)	1:A:54:SER:H	1:A:40:GLY:H	3	0.15
(1,572)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:141:PHE:H	12	0.15
(1,572)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:141:PHE:H	12	0.15
(1,572)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:141:PHE:H	12	0.15
(1,57)	1:A:112:LEU:HD11	1:A:113:ARG:H	18	0.15
(1,57)	1:A:112:LEU:HD12	1:A:113:ARG:H	18	0.15
(1,57)	1:A:112:LEU:HD13	1:A:113:ARG:H	18	0.15
(1,562)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD21	3	0.15
(1,562)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD22	3	0.15
(1,562)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD23	3	0.15
(1,562)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD21	12	0.15
(1,562)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD22	12	0.15
(1,562)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD23	12	0.15



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,550)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG21	6	0.15
(1,550)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG22	6	0.15
(1,550)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG23	6	0.15
(1,550)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG21	15	0.15
(1,550)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG22	15	0.15
(1,550)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG23	15	0.15
(1,549)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD21	7	0.15
(1,549)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD22	7	0.15
(1,549)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD23	7	0.15
(1,544)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:120:ALA:H	16	0.15
(1,544)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:120:ALA:H	16	0.15
(1,544)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:120:ALA:H	16	0.15
(1,536)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:102:VAL:H	17	0.15
(1,536)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:102:VAL:H	17	0.15
(1,536)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:102:VAL:H	17	0.15
(1,53)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD21	6	0.15
(1,53)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD22	6	0.15
(1,53)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD23	6	0.15
(1,526)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:98:HIS:H	7	0.15
(1,526)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:98:HIS:H	7	0.15
(1,526)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:98:HIS:H	7	0.15
(1,513)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:87:ARG:H	5	0.15
(1,513)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:87:ARG:H	5	0.15
(1,513)	1:A:79:LEU:HD13	1:A:87:ARG:H	5	0.15
(1,505)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:76:GLU:H	1	0.15
(1,505)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:76:GLU:H	1	0.15
(1,505)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:76:GLU:H	1	0.15
(1,493)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:52:PHE:H	18	0.15
(1,493)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:52:PHE:H	18	0.15
(1,493)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:52:PHE:H	18	0.15
(1,47)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:115:CYS:H	11	0.15
(1,47)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:115:CYS:H	11	0.15
(1,47)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:115:CYS:H	11	0.15
(1,469)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:24:GLY:H	14	0.15
(1,469)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:24:GLY:H	14	0.15
(1,469)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:24:GLY:H	14	0.15
(1,464)	1:A:16:GLN:H	1:A:46:VAL:HG11	6	0.15
(1,464)	1:A:16:GLN:H	1:A:46:VAL:HG12	6	0.15
(1,464)	1:A:16:GLN:H	1:A:46:VAL:HG13	6	0.15
(1,456)	1:A:9:ILE:H	1:A:12:LEU:HD21	7	0.15
(1,456)	1:A:9:ILE:H	1:A:12:LEU:HD22	7	0.15
(1,456)	1:A:9:ILE:H	1:A:12:LEU:HD23	7	0.15



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,451)	1:A:75:VAL:HG11	1:A:91:ARG:H	6	0.15
(1,451)	1:A:75:VAL:HG12	1:A:91:ARG:H	6	0.15
(1,451)	1:A:75:VAL:HG13	1:A:91:ARG:H	6	0.15
(1,451)	1:A:75:VAL:HG11	1:A:91:ARG:H	19	0.15
(1,451)	1:A:75:VAL:HG12	1:A:91:ARG:H	19	0.15
(1,451)	1:A:75:VAL:HG13	1:A:91:ARG:H	19	0.15
(1,445)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:113:ARG:H	13	0.15
(1,445)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:113:ARG:H	13	0.15
(1,445)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:113:ARG:H	13	0.15
(1,438)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:120:ALA:H	4	0.15
(1,438)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:120:ALA:H	4	0.15
(1,438)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:120:ALA:H	4	0.15
(1,431)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:103:PHE:H	1	0.15
(1,431)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:103:PHE:H	1	0.15
(1,431)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:103:PHE:H	1	0.15
(1,425)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:119:ALA:H	1	0.15
(1,425)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:119:ALA:H	1	0.15
(1,425)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:119:ALA:H	1	0.15
(1,375)	1:A:131:GLU:H	1:A:133:GLY:H	12	0.15
(1,375)	1:A:131:GLU:H	1:A:133:GLY:H	18	0.15
(1,34)	1:A:104:ASN:HD22	1:A:112:LEU:HD21	16	0.15
(1,34)	1:A:104:ASN:HD22	1:A:112:LEU:HD22	16	0.15
(1,34)	1:A:104:ASN:HD22	1:A:112:LEU:HD23	16	0.15
(1,337)	1:A:76:GLU:H	1:A:91:ARG:H	6	0.15
(1,322)	1:A:54:SER:H	1:A:57:LYS:H	9	0.15
(1,32)	1:A:103:PHE:H	1:A:112:LEU:HD21	17	0.15
(1,32)	1:A:103:PHE:H	1:A:112:LEU:HD22	17	0.15
(1,32)	1:A:103:PHE:H	1:A:112:LEU:HD23	17	0.15
(1,309)	1:A:33:TYR:H	1:A:36:HIS:H	5	0.15
(1,308)	1:A:30:GLN:H	1:A:34:TRP:HE1	13	0.15
(1,283)	1:A:131:GLU:H	1:A:134:TYR:H	16	0.15
(1,267)	1:A:21:GLN:H	1:A:24:GLY:H	8	0.15
(1,266)	1:A:19:VAL:H	1:A:21:GLN:H	9	0.15
(1,266)	1:A:19:VAL:H	1:A:21:GLN:H	17	0.15
(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD11	5	0.15
(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD12	5	0.15
(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD13	5	0.15
(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD11	13	0.15
(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD12	13	0.15
(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD13	13	0.15
(1,259)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD11	1	0.15
(1,259)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD12	1	0.15



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,259)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD13	1	0.15
(1,259)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD11	1	0.15
(1,259)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD12	1	0.15
(1,259)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD13	1	0.15
(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD11	1	0.15
(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD12	1	0.15
(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD13	1	0.15
(1,259)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD11	18	0.15
(1,259)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD12	18	0.15
(1,259)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD13	18	0.15
(1,259)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD11	18	0.15
(1,259)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD12	18	0.15
(1,259)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD13	18	0.15
(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD11	18	0.15
(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD12	18	0.15
(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD13	18	0.15
(1,247)	1:A:121:LEU:HD11	1:A:122:ARG:H	4	0.15
(1,247)	1:A:121:LEU:HD12	1:A:122:ARG:H	4	0.15
(1,247)	1:A:121:LEU:HD13	1:A:122:ARG:H	4	0.15
(1,147)	1:A:130:LYS:H	1:A:134:TYR:H	8	0.15
(1,1271)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:140:LEU:HD11	15	0.15
(1,1271)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:140:LEU:HD12	15	0.15
(1,1271)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:140:LEU:HD13	15	0.15
(1,1271)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:140:LEU:HD11	15	0.15
(1,1271)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:140:LEU:HD12	15	0.15
(1,1271)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:140:LEU:HD13	15	0.15
(1,1271)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:140:LEU:HD11	15	0.15
(1,1271)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:140:LEU:HD12	15	0.15
(1,1271)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:140:LEU:HD13	15	0.15
(1,1270)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:140:LEU:HD11	18	0.15
(1,1270)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:140:LEU:HD12	18	0.15
(1,1270)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:140:LEU:HD13	18	0.15
(1,1270)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:140:LEU:HD11	18	0.15
(1,1270)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:140:LEU:HD12	18	0.15
(1,1270)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:140:LEU:HD13	18	0.15
(1,1270)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:140:LEU:HD11	18	0.15
(1,1270)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:140:LEU:HD12	18	0.15
(1,1270)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:140:LEU:HD13	18	0.15
(1,1264)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:H	6	0.15
(1,1264)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:H	6	0.15
(1,1264)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:H	6	0.15
(1,1250)	1:A:54:SER:H	1:A:40:GLY:H	3	0.15



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1217)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:141:PHE:H	12	0.15
(1,1217)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:141:PHE:H	12	0.15
(1,1217)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:141:PHE:H	12	0.15
(1,1207)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD21	3	0.15
(1,1207)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD22	3	0.15
(1,1207)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD23	3	0.15
(1,1207)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD21	12	0.15
(1,1207)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD22	12	0.15
(1,1207)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD23	12	0.15
(1,1195)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG21	6	0.15
(1,1195)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG22	6	0.15
(1,1195)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG23	6	0.15
(1,1195)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG21	15	0.15
(1,1195)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG22	15	0.15
(1,1195)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG23	15	0.15
(1,1194)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD21	7	0.15
(1,1194)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD22	7	0.15
(1,1194)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD23	7	0.15
(1,1189)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:120:ALA:H	16	0.15
(1,1189)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:120:ALA:H	16	0.15
(1,1189)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:120:ALA:H	16	0.15
(1,1181)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:102:VAL:H	17	0.15
(1,1181)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:102:VAL:H	17	0.15
(1,1181)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:102:VAL:H	17	0.15
(1,1171)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:98:HIS:H	7	0.15
(1,1171)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:98:HIS:H	7	0.15
(1,1171)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:98:HIS:H	7	0.15
(1,1158)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:87:ARG:H	5	0.15
(1,1158)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:87:ARG:H	5	0.15
(1,1158)	1:A:79:LEU:HD13	1:A:87:ARG:H	5	0.15
(1,1150)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:76:GLU:H	1	0.15
(1,1150)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:76:GLU:H	1	0.15
(1,1150)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:76:GLU:H	1	0.15
(1,115)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:H	2	0.15
(1,1138)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:52:PHE:H	18	0.15
(1,1138)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:52:PHE:H	18	0.15
(1,1138)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:52:PHE:H	18	0.15
(1,1114)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:24:GLY:H	14	0.15
(1,1114)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:24:GLY:H	14	0.15
(1,1114)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:24:GLY:H	14	0.15
(1,1109)	1:A:16:GLN:H	1:A:46:VAL:HG11	6	0.15
(1,1109)	1:A:16:GLN:H	1:A:46:VAL:HG12	6	0.15



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1109)	1:A:16:GLN:H	1:A:46:VAL:HG13	6	0.15
(1,1101)	1:A:9:ILE:H	1:A:12:LEU:HD21	7	0.15
(1,1101)	1:A:9:ILE:H	1:A:12:LEU:HD22	7	0.15
(1,1101)	1:A:9:ILE:H	1:A:12:LEU:HD23	7	0.15
(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD21	7	0.15
(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD22	7	0.15
(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD23	7	0.15
(1,1096)	1:A:75:VAL:HG11	1:A:91:ARG:H	6	0.15
(1,1096)	1:A:75:VAL:HG12	1:A:91:ARG:H	6	0.15
(1,1096)	1:A:75:VAL:HG13	1:A:91:ARG:H	6	0.15
(1,1096)	1:A:75:VAL:HG11	1:A:91:ARG:H	19	0.15
(1,1096)	1:A:75:VAL:HG12	1:A:91:ARG:H	19	0.15
(1,1096)	1:A:75:VAL:HG13	1:A:91:ARG:H	19	0.15
(1,1090)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:113:ARG:H	13	0.15
(1,1090)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:113:ARG:H	13	0.15
(1,1090)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:113:ARG:H	13	0.15
(1,1083)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:120:ALA:H	4	0.15
(1,1083)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:120:ALA:H	4	0.15
(1,1083)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:120:ALA:H	4	0.15
(1,1076)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:103:PHE:H	1	0.15
(1,1076)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:103:PHE:H	1	0.15
(1,1076)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:103:PHE:H	1	0.15
(1,1070)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:119:ALA:H	1	0.15
(1,1070)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:119:ALA:H	1	0.15
(1,1070)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:119:ALA:H	1	0.15
(1,1020)	1:A:131:GLU:H	1:A:133:GLY:H	12	0.15
(1,1020)	1:A:131:GLU:H	1:A:133:GLY:H	18	0.15
(1,974)	1:A:79:LEU:H	1:A:89:GLU:H	14	0.14
(1,948)	1:A:18:GLU:H	1:A:20:THR:H	14	0.14
(1,944)	1:A:15:MET:H	1:A:18:GLU:H	11	0.14
(1,943)	1:A:14:ARG:H	1:A:17:TYR:H	8	0.14
(1,936)	1:A:8:LYS:H	1:A:11:SER:H	12	0.14
(1,928)	1:A:131:GLU:H	1:A:134:TYR:H	5	0.14
(1,928)	1:A:131:GLU:H	1:A:134:TYR:H	13	0.14
(1,926)	1:A:110:ASN:HD22	1:A:112:LEU:H	3	0.14
(1,912)	1:A:21:GLN:H	1:A:24:GLY:H	18	0.14
(1,911)	1:A:19:VAL:H	1:A:21:GLN:H	6	0.14
(1,911)	1:A:19:VAL:H	1:A:21:GLN:H	19	0.14
(1,904)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD11	14	0.14
(1,904)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD12	14	0.14
(1,904)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD13	14	0.14
(1,904)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD11	14	0.14



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,904)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD12	14	0.14
(1,904)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD13	14	0.14
(1,904)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD11	14	0.14
(1,904)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD12	14	0.14
(1,904)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD13	14	0.14
(1,901)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD11	8	0.14
(1,901)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD12	8	0.14
(1,901)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD13	8	0.14
(1,901)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD11	8	0.14
(1,901)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD12	8	0.14
(1,901)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD13	8	0.14
(1,901)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD11	8	0.14
(1,901)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD12	8	0.14
(1,901)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD13	8	0.14
(1,892)	1:A:121:LEU:HD11	1:A:122:ARG:H	7	0.14
(1,892)	1:A:121:LEU:HD12	1:A:122:ARG:H	7	0.14
(1,892)	1:A:121:LEU:HD13	1:A:122:ARG:H	7	0.14
(1,89)	1:A:55:LYS:H	1:A:57:LYS:H	9	0.14
(1,867)	1:A:71:ILE:HD11	1:A:140:LEU:HD21	9	0.14
(1,867)	1:A:71:ILE:HD11	1:A:140:LEU:HD22	9	0.14
(1,867)	1:A:71:ILE:HD11	1:A:140:LEU:HD23	9	0.14
(1,867)	1:A:71:ILE:HD12	1:A:140:LEU:HD21	9	0.14
(1,867)	1:A:71:ILE:HD12	1:A:140:LEU:HD22	9	0.14
(1,867)	1:A:71:ILE:HD12	1:A:140:LEU:HD23	9	0.14
(1,867)	1:A:71:ILE:HD13	1:A:140:LEU:HD21	9	0.14
(1,867)	1:A:71:ILE:HD13	1:A:140:LEU:HD22	9	0.14
(1,867)	1:A:71:ILE:HD13	1:A:140:LEU:HD23	9	0.14
(1,864)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:74:GLU:H	8	0.14
(1,864)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:74:GLU:H	8	0.14
(1,864)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:74:GLU:H	8	0.14
(1,84)	1:A:10:LYS:H	1:A:12:LEU:H	11	0.14
(1,837)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:H	8	0.14
(1,837)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:H	8	0.14
(1,837)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:H	8	0.14
(1,837)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:H	15	0.14
(1,837)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:H	15	0.14
(1,837)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:H	15	0.14
(1,837)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:H	17	0.14
(1,837)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:H	17	0.14
(1,837)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:H	17	0.14
(1,8)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:42:TYR:H	15	0.14
(1,8)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:42:TYR:H	15	0.14



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,8)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:42:TYR:H	15	0.14
(1,793)	1:A:44:ASP:H	1:A:122:ARG:H	6	0.14
(1,777)	1:A:16:GLN:H	1:A:19:VAL:H	18	0.14
(1,776)	1:A:17:TYR:H	1:A:19:VAL:H	10	0.14
(1,776)	1:A:17:TYR:H	1:A:19:VAL:H	16	0.14
(1,776)	1:A:17:TYR:H	1:A:19:VAL:H	20	0.14
(1,734)	1:A:55:LYS:H	1:A:57:LYS:H	9	0.14
(1,729)	1:A:10:LYS:H	1:A:12:LEU:H	11	0.14
(1,713)	1:A:34:TRP:H	1:A:36:HIS:H	5	0.14
(1,705)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD11	1	0.14
(1,705)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD12	1	0.14
(1,705)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD13	1	0.14
(1,705)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD11	16	0.14
(1,705)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD12	16	0.14
(1,705)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD13	16	0.14
(1,698)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD21	19	0.14
(1,698)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD22	19	0.14
(1,698)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD23	19	0.14
(1,690)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD11	7	0.14
(1,690)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD12	7	0.14
(1,690)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD13	7	0.14
(1,690)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD11	12	0.14
(1,690)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD12	12	0.14
(1,690)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD13	12	0.14
(1,68)	1:A:34:TRP:H	1:A:36:HIS:H	5	0.14
(1,670)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:123:PHE:H	10	0.14
(1,670)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:123:PHE:H	10	0.14
(1,670)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:123:PHE:H	10	0.14
(1,664)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:127:HIS:H	4	0.14
(1,664)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:127:HIS:H	4	0.14
(1,664)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:127:HIS:H	4	0.14
(1,659)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD21	18	0.14
(1,659)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD22	18	0.14
(1,659)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD23	18	0.14
(1,653)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:42:TYR:H	15	0.14
(1,653)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:42:TYR:H	15	0.14
(1,653)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:42:TYR:H	15	0.14
(1,612)	1:A:102:VAL:H	1:A:88:THR:H	17	0.14
(1,611)	1:A:100:GLY:H	1:A:90:VAL:H	14	0.14
(1,60)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD11	1	0.14
(1,60)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD12	1	0.14
(1,60)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD13	1	0.14



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

(1,60)	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,60) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD13 16 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG11 2 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG12 2 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 4 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG12 4 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 4 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 4 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 1 0 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 1 0 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 10 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 10 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 10 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 17 0.14 (1,574) 1:A:144:LEU:HD11 1:A:145:GLU:H 9 0.14 (1,574) 1:A:144:LEU:HD12 1:A:145:GLU:H 9 0.14 (1,574) 1:A:144:LEU:HD13 1:A:145:GLU:H 9 0.14 (1,571) 1:A:140:LEU:HD13 1:A:141:PHE:H 17 0.14 (1,571) 1:A:140:LEU:HD13 1:A:141:PHE:H 10 0.14 (1,575) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:H 11 0.14 (1,565) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:H 11 0.14 (1,565) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:H 11 0.14 (1,565) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:H 11 0.14 (1,566) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:138:LEU:H 10 0.14 (1,566) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD13 4 0.14 (1,569) 1:A:129:LEU:H 1:A:138:LEU:HD13 4 0.14 (1,549) 1:A:130:LYS:H 1:A:138:LEU:HD23 1 0.14 (1,549) 1:A:130:LYS:H 1:A	(1,60)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD11	16	0.14
(1,585)         1:A:74:GLU:H         1:A:75:VAL:HG11         2         0.14           (1,585)         1:A:74:GLU:H         1:A:75:VAL:HG12         2         0.14           (1,585)         1:A:74:GLU:H         1:A:75:VAL:HG13         2         0.14           (1,585)         1:A:74:GLU:H         1:A:75:VAL:HG11         4         0.14           (1,585)         1:A:74:GLU:H         1:A:75:VAL:HG13         4         0.14           (1,585)         1:A:74:GLU:H         1:A:75:VAL:HG13         4         0.14           (1,585)         1:A:74:GLU:H         1:A:75:VAL:HG13         10         0.14           (1,585)         1:A:74:GLU:H         1:A:75:VAL:HG13         10         0.14           (1,585)         1:A:74:GLU:H         1:A:75:VAL:HG11         17         0.14           (1,585)         1:A:74:GLU:H         1:A:75:VAL:HG13         10         0.14           (1,585)         1:A:74:GLU:H         1:A:75:VAL:HG11         17         0.14           (1,585)         1:A:74:GLU:H         1:A:75:VAL:HG12         17         0.14           (1,585)         1:A:74:GLU:H         1:A:75:VAL:HG13         17         0.14           (1,585)         1:A:74:GLU:H         1:A:75:VAL:HG13         17 </td <td>(1,60)</td> <td>1:A:135:GLU:H</td> <td>1:A:138:LEU:HD12</td> <td>16</td> <td>0.14</td>	(1,60)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD12	16	0.14
(1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG12 2 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 2 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG11 4 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG12 4 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 4 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG11 10 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG11 10 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG11 10 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG11 10 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 10 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 10 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG11 17 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG11 17 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG12 17 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 17 0.14 (1,574) 1:A:144:LEU:HD11 1:A:145:GLU:H 9 0.14 (1,574) 1:A:144:LEU:HD11 1:A:145:GLU:H 9 0.14 (1,574) 1:A:144:LEU:HD12 1:A:145:GLU:H 9 0.14 (1,571) 1:A:140:LEU:HD11 1:A:141:PHE:H 17 0.14 (1,571) 1:A:140:LEU:HD11 1:A:141:PHE:H 17 0.14 (1,571) 1:A:140:LEU:HD11 1:A:141:PHE:H 17 0.14 (1,571) 1:A:140:LEU:HD11 1:A:141:PHE:H 17 0.14 (1,571) 1:A:140:LEU:HD11 1:A:141:PHE:H 20 0.14 (1,571) 1:A:140:LEU:HD11 1:A:141:PHE:H 20 0.14 (1,571) 1:A:140:LEU:HD11 1:A:141:PHE:H 20 0.14 (1,571) 1:A:140:LEU:HD11 1:A:141:PHE:H 20 0.14 (1,555) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:138:LEU:H 11 0.14 (1,556) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:H 11 0.14 (1,558) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:H 11 0.14 (1,558) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:H 10 0.14 (1,558) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:138:LEU:H 10 0.14 (1,558) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:138:LEU:HD11 4 0.14 (1,556) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:138:LEU:HD11 4 0.14 (1,556) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:138:LEU:HD12 4 0.14 (1,556) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD11 4 0.14 (1,556) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD12 1 0.14 (1,549) 1:A:130:LYS:H 1:A:138:LEU:HD21 1 0.14 (1,549) 1:A:130:LYS:H 1:A:138:LEU:HD21 1 0.14 (1,550) 1:A:129:LEU:H 1:A:138:LEU:HD22 1 0.14 (1,550) 1:A:129:LEU:H 1:A:138:LEU:HD21 1 0.14 (1,550) 1:A:129:LEU:H 1:A:138:LEU:HD22 1 0.14 (1,550) 1:A:129:LEU:H 1:A:138:LEU:HD23 1 0.14 (1,550) 1:A:129:LEU:H 1:A:138:LEU:HD23 1 0.14	(1,60)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD13	16	0.14
(1,585)         1:A:74:GLU:H         1:A:75:VAL:HG13         2         0.14           (1,585)         1:A:74:GLU:H         1:A:75:VAL:HG11         4         0.14           (1,585)         1:A:74:GLU:H         1:A:75:VAL:HG12         4         0.14           (1,585)         1:A:74:GLU:H         1:A:75:VAL:HG13         4         0.14           (1,585)         1:A:74:GLU:H         1:A:75:VAL:HG11         10         0.14           (1,585)         1:A:74:GLU:H         1:A:75:VAL:HG12         10         0.14           (1,585)         1:A:74:GLU:H         1:A:75:VAL:HG13         10         0.14           (1,585)         1:A:74:GLU:H         1:A:75:VAL:HG12         17         0.14           (1,585)         1:A:74:GLU:H         1:A:75:VAL:HG12         17         0.14           (1,585)         1:A:74:GLU:H         1:A:75:VAL:HG12         17         0.14           (1,585)         1:A:74:GLU:H         1:A:75:VAL:HG13         17         0.14           (1,585)         1:A:74:GLU:H         1:A:75:VAL:HG13         17         0.14           (1,574)         1:A:144:LEU:HD12         1:A:145:GLU:H         9         0.14           (1,574)         1:A:144:LEU:HD13         1:A:141:PHE:H <td< td=""><td>(1,585)</td><td>1:A:74:GLU:H</td><td>1:A:75:VAL:HG11</td><td>2</td><td>0.14</td></td<>	(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG11	2	0.14
(1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG11 4 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG12 4 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 4 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 4 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG11 10 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG11 10 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG11 10 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 10 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 10 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG11 17 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG11 17 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG11 17 0.14 (1,585) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 17 0.14 (1,574) 1:A:144:LEU:HD11 1:A:145:GLU:H 9 0.14 (1,574) 1:A:144:LEU:HD12 1:A:145:GLU:H 9 0.14 (1,574) 1:A:144:LEU:HD13 1:A:145:GLU:H 9 0.14 (1,571) 1:A:140:LEU:HD11 1:A:141:PHE:H 17 0.14 (1,571) 1:A:140:LEU:HD12 1:A:141:PHE:H 17 0.14 (1,571) 1:A:140:LEU:HD13 1:A:141:PHE:H 17 0.14 (1,571) 1:A:140:LEU:HD13 1:A:141:PHE:H 17 0.14 (1,571) 1:A:140:LEU:HD13 1:A:141:PHE:H 17 0.14 (1,571) 1:A:140:LEU:HD11 1:A:141:PHE:H 20 0.14 (1,571) 1:A:140:LEU:HD13 1:A:141:PHE:H 10 0.14 (1,571) 1:A:140:LEU:HD13 1:A:141:PHE:H 10 0.14 (1,571) 1:A:140:LEU:HD13 1:A:141:PHE:H 20 0.14 (1,556) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:H 11 0.14 (1,556) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:H 11 0.14 (1,556) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:H 11 0.14 (1,558) 1:A:129:LEU:HD14 1:A:138:LEU:H 11 0.14 (1,556) 1:A:129:LEU:HD15 1:A:138:LEU:H 10 0.14 (1,556) 1:A:129:LEU:HD15 1:A:138:LEU:HD11 4 0.14 (1,556) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:HD11 4 0.14 (1,556) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD11 4 0.14 (1,556) 1:A:129:LEU:H 1:A:138:LEU:HD11 1 0.14 (1,556) 1:A:129:LEU:H 1:A:138:LEU:HD11 1 0.14 (1,556) 1:A:129:LEU:H 1:A:138:LEU:HD12 1 0.14 (1,559) 1:A:130:LYS:H 1:A:138:LEU:HD21 1 0.14 (1,559) 1:A:130:LYS:H 1:A:138:LEU:HD22 1 0.14 (1,530) 1:	(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG12	2	0.14
(1,585)         1:A:74:GLU:H         1:A:75:VAL:HG12         4         0.14           (1,585)         1:A:74:GLU:H         1:A:75:VAL:HG13         4         0.14           (1,585)         1:A:74:GLU:H         1:A:75:VAL:HG11         10         0.14           (1,585)         1:A:74:GLU:H         1:A:75:VAL:HG12         10         0.14           (1,585)         1:A:74:GLU:H         1:A:75:VAL:HG13         10         0.14           (1,585)         1:A:74:GLU:H         1:A:75:VAL:HG11         17         0.14           (1,585)         1:A:74:GLU:H         1:A:75:VAL:HG13         17         0.14           (1,585)         1:A:74:GLU:H         1:A:75:VAL:HG13         17         0.14           (1,585)         1:A:74:GLU:H         1:A:75:VAL:HG13         17         0.14           (1,574)         1:A:144:LEU:HD11         1:A:145:GLU:H         9         0.14           (1,574)         1:A:144:LEU:HD12         1:A:145:GLU:H         9         0.14           (1,574)         1:A:140:LEU:HD13         1:A:141:PHE:H         17         0.14           (1,571)         1:A:140:LEU:HD13         1:A:141:PHE:H         17         0.14           (1,571)         1:A:140:LEU:HD13         1:A:141:PHE:H	(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG13	2	0.14
(1,585)         1:A:74:GLU:H         1:A:75:VAL:HG13         4         0.14           (1,585)         1:A:74:GLU:H         1:A:75:VAL:HG11         10         0.14           (1,585)         1:A:74:GLU:H         1:A:75:VAL:HG12         10         0.14           (1,585)         1:A:74:GLU:H         1:A:75:VAL:HG13         10         0.14           (1,585)         1:A:74:GLU:H         1:A:75:VAL:HG11         17         0.14           (1,585)         1:A:74:GLU:H         1:A:75:VAL:HG12         17         0.14           (1,585)         1:A:74:GLU:H         1:A:75:VAL:HG13         17         0.14           (1,574)         1:A:144:LEU:HD11         1:A:145:GLU:H         9         0.14           (1,574)         1:A:144:LEU:HD13         1:A:141:PHE:H         17         0.14           (1,571)         1:A:140:LEU:HD13         1:A:141:PHE:H         17         0.14           (1,571)         1:A:140:LEU:HD14         1:A:141:PHE:H	(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG11	4	0.14
(1,585)         1:A:74:GLU:H         1:A:75:VAL:HG11         10         0.14           (1,585)         1:A:74:GLU:H         1:A:75:VAL:HG12         10         0.14           (1,585)         1:A:74:GLU:H         1:A:75:VAL:HG13         10         0.14           (1,585)         1:A:74:GLU:H         1:A:75:VAL:HG11         17         0.14           (1,585)         1:A:74:GLU:H         1:A:75:VAL:HG12         17         0.14           (1,585)         1:A:74:GLU:H         1:A:75:VAL:HG13         17         0.14           (1,585)         1:A:74:GLU:H         1:A:75:VAL:HG13         17         0.14           (1,574)         1:A:144:LEU:HD11         1:A:145:GLU:H         9         0.14           (1,574)         1:A:144:LEU:HD12         1:A:145:GLU:H         9         0.14           (1,574)         1:A:144:LEU:HD13         1:A:145:GLU:H         9         0.14           (1,574)         1:A:140:LEU:HD13         1:A:141:PHE:H         17         0.14           (1,571)         1:A:140:LEU:HD13         1:A:141:PHE:H         17         0.14           (1,571)         1:A:140:LEU:HD13         1:A:141:PHE:H         10         0.14           (1,571)         1:A:140:LEU:HD13         1:A:141:PHE:H	(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG12	4	0.14
(1,585)         1:A:74:GLU:H         1:A:75:VAL:HG12         10         0.14           (1,585)         1:A:74:GLU:H         1:A:75:VAL:HG13         10         0.14           (1,585)         1:A:74:GLU:H         1:A:75:VAL:HG11         17         0.14           (1,585)         1:A:74:GLU:H         1:A:75:VAL:HG12         17         0.14           (1,585)         1:A:74:GLU:H         1:A:75:VAL:HG13         17         0.14           (1,574)         1:A:144:LEU:HD11         1:A:145:GLU:H         9         0.14           (1,574)         1:A:144:LEU:HD12         1:A:145:GLU:H         9         0.14           (1,574)         1:A:144:LEU:HD13         1:A:145:GLU:H         9         0.14           (1,574)         1:A:140:LEU:HD11         1:A:141:PHE:H         17         0.14           (1,574)         1:A:140:LEU:HD11         1:A:141:PHE:H         17         0.14           (1,571)         1:A:140:LEU:HD13         1:A:141:PHE:H         17         0.14           (1,571)         1:A:140:LEU:HD11         1:A:141:PHE:H         20         0.14           (1,571)         1:A:140:LEU:HD13         1:A:141:PHE:H         20         0.14           (1,571)         1:A:140:LEU:HD13         1:A:141:PHE:H<	(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG13	4	0.14
(1,585)         1:A:74:GLU:H         1:A:75:VAL:HG13         10         0.14           (1,585)         1:A:74:GLU:H         1:A:75:VAL:HG11         17         0.14           (1,585)         1:A:74:GLU:H         1:A:75:VAL:HG12         17         0.14           (1,585)         1:A:74:GLU:H         1:A:75:VAL:HG13         17         0.14           (1,574)         1:A:144:LEU:HD11         1:A:145:GLU:H         9         0.14           (1,574)         1:A:144:LEU:HD12         1:A:145:GLU:H         9         0.14           (1,574)         1:A:144:LEU:HD13         1:A:145:GLU:H         9         0.14           (1,574)         1:A:140:LEU:HD13         1:A:141:PHE:H         17         0.14           (1,574)         1:A:140:LEU:HD11         1:A:141:PHE:H         17         0.14           (1,571)         1:A:140:LEU:HD12         1:A:141:PHE:H         17         0.14           (1,571)         1:A:140:LEU:HD13         1:A:141:PHE:H         17         0.14           (1,571)         1:A:140:LEU:HD12         1:A:141:PHE:H         20         0.14           (1,571)         1:A:140:LEU:HD13         1:A:141:PHE:H         20         0.14           (1,571)         1:A:140:LEU:HD13         1:A:141:PHE:	(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG11	10	0.14
(1,585)         1:A:74:GLU:H         1:A:75:VAL:HG11         17         0.14           (1,585)         1:A:74:GLU:H         1:A:75:VAL:HG12         17         0.14           (1,585)         1:A:74:GLU:H         1:A:75:VAL:HG13         17         0.14           (1,574)         1:A:144:LEU:HD11         1:A:145:GLU:H         9         0.14           (1,574)         1:A:144:LEU:HD12         1:A:145:GLU:H         9         0.14           (1,574)         1:A:144:LEU:HD13         1:A:145:GLU:H         9         0.14           (1,574)         1:A:140:LEU:HD11         1:A:141:PHE:H         17         0.14           (1,574)         1:A:140:LEU:HD11         1:A:141:PHE:H         17         0.14           (1,571)         1:A:140:LEU:HD12         1:A:141:PHE:H         17         0.14           (1,571)         1:A:140:LEU:HD13         1:A:141:PHE:H         20         0.14           (1,571)         1:A:140:LEU:HD12         1:A:141:PHE:H         20         0.14           (1,571)         1:A:140:LEU:HD13         1:A:141:PHE:H         20         0.14           (1,571)         1:A:140:LEU:HD13         1:A:141:PHE:H         20         0.14           (1,565)         1:A:129:LEU:HD11         1:A:138:LE	(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG12	10	0.14
(1,585)         1:A:74:GLU:H         1:A:75:VAL:HG12         17         0.14           (1,585)         1:A:74:GLU:H         1:A:75:VAL:HG13         17         0.14           (1,574)         1:A:144:LEU:HD11         1:A:145:GLU:H         9         0.14           (1,574)         1:A:144:LEU:HD12         1:A:145:GLU:H         9         0.14           (1,574)         1:A:140:LEU:HD13         1:A:145:GLU:H         9         0.14           (1,574)         1:A:140:LEU:HD11         1:A:141:PHE:H         17         0.14           (1,571)         1:A:140:LEU:HD12         1:A:141:PHE:H         17         0.14           (1,571)         1:A:140:LEU:HD13         1:A:141:PHE:H         17         0.14           (1,571)         1:A:140:LEU:HD11         1:A:141:PHE:H         20         0.14           (1,571)         1:A:140:LEU:HD12         1:A:141:PHE:H         20         0.14           (1,571)         1:A:140:LEU:HD13         1:A:141:PHE:H         20         0.14           (1,571)         1:A:129:LEU:HD13         1:A:141:PHE:H         20         0.14           (1,565)         1:A:129:LEU:HD13         1:A:138:LEU:H         1         0.14           (1,565)         1:A:129:LEU:HD13         1:A:138:L	(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG13	10	0.14
(1,585)         1:A:74:GLU:H         1:A:75:VAL:HG13         17         0.14           (1,574)         1:A:144:LEU:HD11         1:A:145:GLU:H         9         0.14           (1,574)         1:A:144:LEU:HD12         1:A:145:GLU:H         9         0.14           (1,574)         1:A:144:LEU:HD13         1:A:145:GLU:H         9         0.14           (1,574)         1:A:140:LEU:HD11         1:A:141:PHE:H         17         0.14           (1,571)         1:A:140:LEU:HD12         1:A:141:PHE:H         17         0.14           (1,571)         1:A:140:LEU:HD13         1:A:141:PHE:H         17         0.14           (1,571)         1:A:140:LEU:HD11         1:A:141:PHE:H         20         0.14           (1,571)         1:A:140:LEU:HD12         1:A:141:PHE:H         20         0.14           (1,571)         1:A:140:LEU:HD13         1:A:141:PHE:H         20         0.14           (1,571)         1:A:140:LEU:HD13         1:A:141:PHE:H         20         0.14           (1,571)         1:A:129:LEU:HD13         1:A:138:LEU:H         10         0.14           (1,565)         1:A:129:LEU:HD11         1:A:138:LEU:H         11         0.14           (1,565)         1:A:129:LEU:HD21         1:A:13	(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG11	17	0.14
(1,574)         1:A:144:LEU:HD11         1:A:145:GLU:H         9         0.14           (1,574)         1:A:144:LEU:HD12         1:A:145:GLU:H         9         0.14           (1,574)         1:A:144:LEU:HD13         1:A:145:GLU:H         9         0.14           (1,571)         1:A:140:LEU:HD11         1:A:141:PHE:H         17         0.14           (1,571)         1:A:140:LEU:HD12         1:A:141:PHE:H         17         0.14           (1,571)         1:A:140:LEU:HD13         1:A:141:PHE:H         17         0.14           (1,571)         1:A:140:LEU:HD11         1:A:141:PHE:H         20         0.14           (1,571)         1:A:140:LEU:HD12         1:A:141:PHE:H         20         0.14           (1,571)         1:A:140:LEU:HD13         1:A:141:PHE:H         20         0.14           (1,571)         1:A:140:LEU:HD13         1:A:141:PHE:H         20         0.14           (1,565)         1:A:129:LEU:HD13         1:A:138:LEU:H         11         0.14           (1,565)         1:A:129:LEU:HD12         1:A:138:LEU:H         11         0.14           (1,565)         1:A:129:LEU:HD21         1:A:132:GLU:H         10         0.14           (1,558)         1:A:129:LEU:HD22         1:A:	(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG12	17	0.14
(1,574)         1:A:144:LEU:HD12         1:A:145:GLU:H         9         0.14           (1,574)         1:A:144:LEU:HD13         1:A:145:GLU:H         9         0.14           (1,571)         1:A:140:LEU:HD11         1:A:141:PHE:H         17         0.14           (1,571)         1:A:140:LEU:HD12         1:A:141:PHE:H         17         0.14           (1,571)         1:A:140:LEU:HD13         1:A:141:PHE:H         20         0.14           (1,571)         1:A:140:LEU:HD12         1:A:141:PHE:H         20         0.14           (1,571)         1:A:140:LEU:HD12         1:A:141:PHE:H         20         0.14           (1,571)         1:A:140:LEU:HD12         1:A:141:PHE:H         20         0.14           (1,571)         1:A:140:LEU:HD13         1:A:141:PHE:H         20         0.14           (1,571)         1:A:140:LEU:HD13         1:A:138:LEU:H         11         0.14           (1,565)         1:A:129:LEU:HD12         1:A:138:LEU:H         11         0.14           (1,565)         1:A:129:LEU:HD13         1:A:138:LEU:H         11         0.14           (1,558)         1:A:129:LEU:HD21         1:A:132:GLU:H         10         0.14           (1,558)         1:A:129:LEU:HD23         1:A	(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG13	17	0.14
(1,574)         1:A:144:LEU:HD13         1:A:145:GLU:H         9         0.14           (1,571)         1:A:140:LEU:HD11         1:A:141:PHE:H         17         0.14           (1,571)         1:A:140:LEU:HD12         1:A:141:PHE:H         17         0.14           (1,571)         1:A:140:LEU:HD13         1:A:141:PHE:H         17         0.14           (1,571)         1:A:140:LEU:HD11         1:A:141:PHE:H         20         0.14           (1,571)         1:A:140:LEU:HD12         1:A:141:PHE:H         20         0.14           (1,571)         1:A:140:LEU:HD13         1:A:141:PHE:H         20         0.14           (1,571)         1:A:140:LEU:HD13         1:A:141:PHE:H         20         0.14           (1,571)         1:A:140:LEU:HD13         1:A:141:PHE:H         20         0.14           (1,565)         1:A:129:LEU:HD11         1:A:138:LEU:H         11         0.14           (1,565)         1:A:129:LEU:HD13         1:A:138:LEU:H         11         0.14           (1,558)         1:A:129:LEU:HD21         1:A:132:GLU:H         10         0.14           (1,558)         1:A:129:LEU:HD23         1:A:132:GLU:H         10         0.14           (1,558)         1:A:129:LEU:H         1:A:1		1:A:144:LEU:HD11	1:A:145:GLU:H	9	0.14
(1,571)         1:A:140:LEU:HD11         1:A:141:PHE:H         17         0.14           (1,571)         1:A:140:LEU:HD12         1:A:141:PHE:H         17         0.14           (1,571)         1:A:140:LEU:HD13         1:A:141:PHE:H         17         0.14           (1,571)         1:A:140:LEU:HD11         1:A:141:PHE:H         20         0.14           (1,571)         1:A:140:LEU:HD12         1:A:141:PHE:H         20         0.14           (1,571)         1:A:140:LEU:HD13         1:A:141:PHE:H         20         0.14           (1,571)         1:A:140:LEU:HD13         1:A:141:PHE:H         20         0.14           (1,571)         1:A:140:LEU:HD13         1:A:138:LEU:H         11         0.14           (1,565)         1:A:129:LEU:HD12         1:A:138:LEU:H         11         0.14           (1,565)         1:A:129:LEU:HD13         1:A:138:LEU:H         11         0.14           (1,558)         1:A:129:LEU:HD21         1:A:132:GLU:H         10         0.14           (1,558)         1:A:129:LEU:HD22         1:A:138:LEU:HD11         4         0.14           (1,556)         1:A:129:LEU:H         1:A:138:LEU:HD12         4         0.14           (1,556)         1:A:130:LYS:H         1:A	(1,574)	1:A:144:LEU:HD12	1:A:145:GLU:H	9	0.14
(1,571)         1:A:140:LEU:HD12         1:A:141:PHE:H         17         0.14           (1,571)         1:A:140:LEU:HD13         1:A:141:PHE:H         17         0.14           (1,571)         1:A:140:LEU:HD11         1:A:141:PHE:H         20         0.14           (1,571)         1:A:140:LEU:HD12         1:A:141:PHE:H         20         0.14           (1,571)         1:A:140:LEU:HD13         1:A:141:PHE:H         20         0.14           (1,571)         1:A:140:LEU:HD13         1:A:141:PHE:H         20         0.14           (1,565)         1:A:129:LEU:HD11         1:A:138:LEU:H         11         0.14           (1,565)         1:A:129:LEU:HD12         1:A:138:LEU:H         11         0.14           (1,565)         1:A:129:LEU:HD13         1:A:138:LEU:H         11         0.14           (1,558)         1:A:129:LEU:HD21         1:A:132:GLU:H         10         0.14           (1,558)         1:A:129:LEU:HD22         1:A:132:GLU:H         10         0.14           (1,558)         1:A:129:LEU:HD23         1:A:138:LEU:HD11         4         0.14           (1,556)         1:A:129:LEU:H         1:A:138:LEU:HD12         4         0.14           (1,556)         1:A:130:LYS:H         1:A	· · /	1:A:144:LEU:HD13	1:A:145:GLU:H	9	0.14
(1,571)         1:A:140:LEU:HD13         1:A:141:PHE:H         17         0.14           (1,571)         1:A:140:LEU:HD11         1:A:141:PHE:H         20         0.14           (1,571)         1:A:140:LEU:HD12         1:A:141:PHE:H         20         0.14           (1,571)         1:A:140:LEU:HD13         1:A:141:PHE:H         20         0.14           (1,571)         1:A:140:LEU:HD13         1:A:141:PHE:H         20         0.14           (1,565)         1:A:129:LEU:HD11         1:A:138:LEU:H         11         0.14           (1,565)         1:A:129:LEU:HD12         1:A:138:LEU:H         11         0.14           (1,565)         1:A:129:LEU:HD13         1:A:138:LEU:H         11         0.14           (1,558)         1:A:129:LEU:HD21         1:A:132:GLU:H         10         0.14           (1,558)         1:A:129:LEU:HD22         1:A:132:GLU:H         10         0.14           (1,558)         1:A:129:LEU:HD23         1:A:138:LEU:HD11         4         0.14           (1,556)         1:A:129:LEU:H         1:A:138:LEU:HD12         4         0.14           (1,556)         1:A:129:LEU:H         1:A:138:LEU:HD13         4         0.14           (1,556)         1:A:130:LYS:H         1:A:	(1,571)	1:A:140:LEU:HD11	1:A:141:PHE:H	17	0.14
(1,571)         1:A:140:LEU:HD13         1:A:141:PHE:H         17         0.14           (1,571)         1:A:140:LEU:HD11         1:A:141:PHE:H         20         0.14           (1,571)         1:A:140:LEU:HD12         1:A:141:PHE:H         20         0.14           (1,571)         1:A:140:LEU:HD13         1:A:141:PHE:H         20         0.14           (1,571)         1:A:140:LEU:HD13         1:A:141:PHE:H         20         0.14           (1,565)         1:A:129:LEU:HD11         1:A:138:LEU:H         11         0.14           (1,565)         1:A:129:LEU:HD12         1:A:138:LEU:H         11         0.14           (1,565)         1:A:129:LEU:HD13         1:A:138:LEU:H         11         0.14           (1,558)         1:A:129:LEU:HD21         1:A:132:GLU:H         10         0.14           (1,558)         1:A:129:LEU:HD23         1:A:132:GLU:H         10         0.14           (1,558)         1:A:129:LEU:HD23         1:A:138:LEU:HD11         4         0.14           (1,556)         1:A:129:LEU:H         1:A:138:LEU:HD12         4         0.14           (1,556)         1:A:129:LEU:H         1:A:138:LEU:HD13         4         0.14           (1,549)         1:A:130:LYS:H         1:A:	(1,571)	1:A:140:LEU:HD12	1:A:141:PHE:H	17	0.14
(1,571)         1:A:140:LEU:HD11         1:A:141:PHE:H         20         0.14           (1,571)         1:A:140:LEU:HD12         1:A:141:PHE:H         20         0.14           (1,571)         1:A:140:LEU:HD13         1:A:141:PHE:H         20         0.14           (1,571)         1:A:140:LEU:HD13         1:A:141:PHE:H         20         0.14           (1,571)         1:A:140:LEU:HD13         1:A:138:LEU:H         11         0.14           (1,565)         1:A:129:LEU:HD12         1:A:138:LEU:H         11         0.14           (1,565)         1:A:129:LEU:HD13         1:A:132:GLU:H         10         0.14           (1,558)         1:A:129:LEU:HD21         1:A:132:GLU:H         10         0.14           (1,558)         1:A:129:LEU:HD23         1:A:132:GLU:H         10         0.14           (1,558)         1:A:129:LEU:HD23         1:A:138:LEU:HD11         4         0.14           (1,556)         1:A:129:LEU:H         1:A:138:LEU:HD12         4         0.14           (1,556)         1:A:130:LYS:H         1:A:138:LEU:HD21         1         0.14           (1,549)         1:A:130:LYS:H         1:A:138:LEU:HD22         1         0.14           (1,549)         1:A:130:LYS:H         1:A:1	(1,571)	1:A:140:LEU:HD13	1:A:141:PHE:H	17	0.14
(1,571)         1:A:140:LEU:HD13         1:A:141:PHE:H         20         0.14           (1,565)         1:A:129:LEU:HD11         1:A:138:LEU:H         11         0.14           (1,565)         1:A:129:LEU:HD12         1:A:138:LEU:H         11         0.14           (1,565)         1:A:129:LEU:HD13         1:A:138:LEU:H         11         0.14           (1,558)         1:A:129:LEU:HD21         1:A:132:GLU:H         10         0.14           (1,558)         1:A:129:LEU:HD22         1:A:132:GLU:H         10         0.14           (1,558)         1:A:129:LEU:HD23         1:A:132:GLU:H         10         0.14           (1,558)         1:A:129:LEU:HD23         1:A:138:LEU:HD11         4         0.14           (1,556)         1:A:129:LEU:H         1:A:138:LEU:HD12         4         0.14           (1,556)         1:A:129:LEU:H         1:A:138:LEU:HD13         4         0.14           (1,549)         1:A:130:LYS:H         1:A:138:LEU:HD21         1         0.14           (1,549)         1:A:130:LYS:H         1:A:138:LEU:HD22         1         0.14           (1,53)         1:A:129:LEU:H         1:A:138:LEU:HD21         19         0.14           (1,53)         1:A:129:LEU:H         1:A:138:	(1,571)	1:A:140:LEU:HD11	1:A:141:PHE:H	20	0.14
(1,565)         1:A:129:LEU:HD11         1:A:138:LEU:H         11         0.14           (1,565)         1:A:129:LEU:HD12         1:A:138:LEU:H         11         0.14           (1,565)         1:A:129:LEU:HD13         1:A:138:LEU:H         11         0.14           (1,558)         1:A:129:LEU:HD21         1:A:132:GLU:H         10         0.14           (1,558)         1:A:129:LEU:HD22         1:A:132:GLU:H         10         0.14           (1,558)         1:A:129:LEU:HD23         1:A:132:GLU:H         10         0.14           (1,556)         1:A:129:LEU:H         1:A:138:LEU:HD11         4         0.14           (1,556)         1:A:129:LEU:H         1:A:138:LEU:HD12         4         0.14           (1,556)         1:A:129:LEU:H         1:A:138:LEU:HD13         4         0.14           (1,549)         1:A:130:LYS:H         1:A:138:LEU:HD21         1         0.14           (1,549)         1:A:130:LYS:H         1:A:138:LEU:HD23         1         0.14           (1,53)         1:A:129:LEU:H         1:A:138:LEU:HD21         19         0.14           (1,53)         1:A:129:LEU:H         1:A:138:LEU:HD22         19         0.14           (1,53)         1:A:129:LEU:H         1:A:138:LEU:	(1,571)	1:A:140:LEU:HD12	1:A:141:PHE:H	20	0.14
(1,565)         1:A:129:LEU:HD12         1:A:138:LEU:H         11         0.14           (1,565)         1:A:129:LEU:HD13         1:A:138:LEU:H         11         0.14           (1,558)         1:A:129:LEU:HD21         1:A:132:GLU:H         10         0.14           (1,558)         1:A:129:LEU:HD22         1:A:132:GLU:H         10         0.14           (1,558)         1:A:129:LEU:HD23         1:A:132:GLU:H         10         0.14           (1,556)         1:A:129:LEU:H         1:A:138:LEU:HD11         4         0.14           (1,556)         1:A:129:LEU:H         1:A:138:LEU:HD12         4         0.14           (1,556)         1:A:130:LYS:H         1:A:138:LEU:HD21         1         0.14           (1,549)         1:A:130:LYS:H         1:A:138:LEU:HD22         1         0.14           (1,549)         1:A:130:LYS:H         1:A:138:LEU:HD23         1         0.14           (1,53)         1:A:129:LEU:H         1:A:138:LEU:HD21         19         0.14           (1,53)         1:A:129:LEU:H         1:A:138:LEU:HD22         19         0.14           (1,53)         1:A:129:LEU:H         1:A:138:LEU:HD23         19         0.14	(1,571)	1:A:140:LEU:HD13	1:A:141:PHE:H	20	0.14
(1,565)         1:A:129:LEU:HD13         1:A:138:LEU:H         11         0.14           (1,558)         1:A:129:LEU:HD21         1:A:132:GLU:H         10         0.14           (1,558)         1:A:129:LEU:HD22         1:A:132:GLU:H         10         0.14           (1,558)         1:A:129:LEU:HD23         1:A:132:GLU:H         10         0.14           (1,556)         1:A:129:LEU:H         1:A:138:LEU:HD11         4         0.14           (1,556)         1:A:129:LEU:H         1:A:138:LEU:HD12         4         0.14           (1,556)         1:A:129:LEU:H         1:A:138:LEU:HD13         4         0.14           (1,549)         1:A:130:LYS:H         1:A:138:LEU:HD21         1         0.14           (1,549)         1:A:130:LYS:H         1:A:138:LEU:HD22         1         0.14           (1,549)         1:A:130:LYS:H         1:A:138:LEU:HD23         1         0.14           (1,53)         1:A:129:LEU:H         1:A:138:LEU:HD21         19         0.14           (1,53)         1:A:129:LEU:H         1:A:138:LEU:HD22         19         0.14           (1,53)         1:A:129:LEU:H         1:A:138:LEU:HD23         19         0.14	(1,565)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:H	11	0.14
(1,558)       1:A:129:LEU:HD21       1:A:132:GLU:H       10       0.14         (1,558)       1:A:129:LEU:HD22       1:A:132:GLU:H       10       0.14         (1,558)       1:A:129:LEU:HD23       1:A:132:GLU:H       10       0.14         (1,556)       1:A:129:LEU:H       1:A:138:LEU:HD11       4       0.14         (1,556)       1:A:129:LEU:H       1:A:138:LEU:HD12       4       0.14         (1,556)       1:A:129:LEU:H       1:A:138:LEU:HD13       4       0.14         (1,549)       1:A:130:LYS:H       1:A:138:LEU:HD21       1       0.14         (1,549)       1:A:130:LYS:H       1:A:138:LEU:HD22       1       0.14         (1,549)       1:A:130:LYS:H       1:A:138:LEU:HD23       1       0.14         (1,53)       1:A:129:LEU:H       1:A:138:LEU:HD21       19       0.14         (1,53)       1:A:129:LEU:H       1:A:138:LEU:HD22       19       0.14         (1,53)       1:A:129:LEU:H       1:A:138:LEU:HD23       19       0.14         (1,53)       1:A:129:LEU:H       1:A:138:LEU:HD23       19       0.14	(1,565)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:H	11	0.14
(1,558)       1:A:129:LEU:HD22       1:A:132:GLU:H       10       0.14         (1,558)       1:A:129:LEU:HD23       1:A:132:GLU:H       10       0.14         (1,556)       1:A:129:LEU:H       1:A:138:LEU:HD11       4       0.14         (1,556)       1:A:129:LEU:H       1:A:138:LEU:HD12       4       0.14         (1,556)       1:A:129:LEU:H       1:A:138:LEU:HD13       4       0.14         (1,549)       1:A:130:LYS:H       1:A:138:LEU:HD21       1       0.14         (1,549)       1:A:130:LYS:H       1:A:138:LEU:HD22       1       0.14         (1,549)       1:A:130:LYS:H       1:A:138:LEU:HD23       1       0.14         (1,53)       1:A:129:LEU:H       1:A:138:LEU:HD21       19       0.14         (1,53)       1:A:129:LEU:H       1:A:138:LEU:HD22       19       0.14         (1,53)       1:A:129:LEU:H       1:A:138:LEU:HD23       19       0.14         (1,53)       1:A:129:LEU:H       1:A:138:LEU:HD23       19       0.14	(1,565)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:H	11	0.14
(1,558)       1:A:129:LEU:HD23       1:A:132:GLU:H       10       0.14         (1,556)       1:A:129:LEU:H       1:A:138:LEU:HD11       4       0.14         (1,556)       1:A:129:LEU:H       1:A:138:LEU:HD12       4       0.14         (1,556)       1:A:129:LEU:H       1:A:138:LEU:HD13       4       0.14         (1,549)       1:A:130:LYS:H       1:A:138:LEU:HD21       1       0.14         (1,549)       1:A:130:LYS:H       1:A:138:LEU:HD22       1       0.14         (1,549)       1:A:130:LYS:H       1:A:138:LEU:HD23       1       0.14         (1,53)       1:A:129:LEU:H       1:A:138:LEU:HD21       19       0.14         (1,53)       1:A:129:LEU:H       1:A:138:LEU:HD22       19       0.14         (1,53)       1:A:129:LEU:H       1:A:138:LEU:HD23       19       0.14	(1,558)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:132:GLU:H	10	0.14
(1,556)       1:A:129:LEU:H       1:A:138:LEU:HD11       4       0.14         (1,556)       1:A:129:LEU:H       1:A:138:LEU:HD12       4       0.14         (1,556)       1:A:129:LEU:H       1:A:138:LEU:HD13       4       0.14         (1,549)       1:A:130:LYS:H       1:A:138:LEU:HD21       1       0.14         (1,549)       1:A:130:LYS:H       1:A:138:LEU:HD22       1       0.14         (1,549)       1:A:130:LYS:H       1:A:138:LEU:HD23       1       0.14         (1,53)       1:A:129:LEU:H       1:A:138:LEU:HD21       19       0.14         (1,53)       1:A:129:LEU:H       1:A:138:LEU:HD22       19       0.14         (1,53)       1:A:129:LEU:H       1:A:138:LEU:HD23       19       0.14	(1,558)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:132:GLU:H	10	0.14
(1,556)       1:A:129:LEU:H       1:A:138:LEU:HD12       4       0.14         (1,556)       1:A:129:LEU:H       1:A:138:LEU:HD13       4       0.14         (1,549)       1:A:130:LYS:H       1:A:138:LEU:HD21       1       0.14         (1,549)       1:A:130:LYS:H       1:A:138:LEU:HD22       1       0.14         (1,549)       1:A:130:LYS:H       1:A:138:LEU:HD23       1       0.14         (1,53)       1:A:129:LEU:H       1:A:138:LEU:HD21       19       0.14         (1,53)       1:A:129:LEU:H       1:A:138:LEU:HD22       19       0.14         (1,53)       1:A:129:LEU:H       1:A:138:LEU:HD23       19       0.14	(1,558)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:132:GLU:H	10	0.14
(1,556)       1:A:129:LEU:H       1:A:138:LEU:HD13       4       0.14         (1,549)       1:A:130:LYS:H       1:A:138:LEU:HD21       1       0.14         (1,549)       1:A:130:LYS:H       1:A:138:LEU:HD22       1       0.14         (1,549)       1:A:130:LYS:H       1:A:138:LEU:HD23       1       0.14         (1,53)       1:A:129:LEU:H       1:A:138:LEU:HD21       19       0.14         (1,53)       1:A:129:LEU:H       1:A:138:LEU:HD22       19       0.14         (1,53)       1:A:129:LEU:H       1:A:138:LEU:HD23       19       0.14         (1,53)       1:A:129:LEU:H       1:A:138:LEU:HD23       19       0.14	(1,556)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD11	4	0.14
(1,556)       1:A:129:LEU:H       1:A:138:LEU:HD13       4       0.14         (1,549)       1:A:130:LYS:H       1:A:138:LEU:HD21       1       0.14         (1,549)       1:A:130:LYS:H       1:A:138:LEU:HD22       1       0.14         (1,549)       1:A:130:LYS:H       1:A:138:LEU:HD23       1       0.14         (1,53)       1:A:129:LEU:H       1:A:138:LEU:HD21       19       0.14         (1,53)       1:A:129:LEU:H       1:A:138:LEU:HD22       19       0.14         (1,53)       1:A:129:LEU:H       1:A:138:LEU:HD23       19       0.14	(1,556)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD12	4	0.14
(1,549)       1:A:130:LYS:H       1:A:138:LEU:HD21       1       0.14         (1,549)       1:A:130:LYS:H       1:A:138:LEU:HD22       1       0.14         (1,549)       1:A:130:LYS:H       1:A:138:LEU:HD23       1       0.14         (1,53)       1:A:129:LEU:H       1:A:138:LEU:HD21       19       0.14         (1,53)       1:A:129:LEU:H       1:A:138:LEU:HD22       19       0.14         (1,53)       1:A:129:LEU:H       1:A:138:LEU:HD23       19       0.14         (1,53)       1:A:129:LEU:H       1:A:138:LEU:HD23       19       0.14		1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD13	4	0.14
(1,549)       1:A:130:LYS:H       1:A:138:LEU:HD22       1       0.14         (1,549)       1:A:130:LYS:H       1:A:138:LEU:HD23       1       0.14         (1,53)       1:A:129:LEU:H       1:A:138:LEU:HD21       19       0.14         (1,53)       1:A:129:LEU:H       1:A:138:LEU:HD22       19       0.14         (1,53)       1:A:129:LEU:H       1:A:138:LEU:HD23       19       0.14         (1,53)       1:A:129:LEU:H       1:A:138:LEU:HD23       19       0.14		1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD21	1	0.14
(1,549)       1:A:130:LYS:H       1:A:138:LEU:HD23       1       0.14         (1,53)       1:A:129:LEU:H       1:A:138:LEU:HD21       19       0.14         (1,53)       1:A:129:LEU:H       1:A:138:LEU:HD22       19       0.14         (1,53)       1:A:129:LEU:H       1:A:138:LEU:HD23       19       0.14         (1,53)       1:A:129:LEU:H       1:A:138:LEU:HD23       19       0.14		1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD22	1	0.14
(1,53)       1:A:129:LEU:H       1:A:138:LEU:HD21       19       0.14         (1,53)       1:A:129:LEU:H       1:A:138:LEU:HD22       19       0.14         (1,53)       1:A:129:LEU:H       1:A:138:LEU:HD23       19       0.14		1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD23	1	0.14
(1,53)       1:A:129:LEU:H       1:A:138:LEU:HD22       19       0.14         (1,53)       1:A:129:LEU:H       1:A:138:LEU:HD23       19       0.14		1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD21	19	0.14
(1,53) 1:A:129:LEU:H 1:A:138:LEU:HD23 19 0.14		1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD22	19	0.14
		1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD23	19	0.14
(1,020)   1.A.40. VAL.IIG21   1.A.90.III0.II   II   0.14	(1,526)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:98:HIS:H	11	0.14
(1,526) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:98:HIS:H 11 0.14	· · /	1:A:46:VAL:HG22	1:A:98:HIS:H	11	0.14
(1,526) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:98:HIS:H 11 0.14		1:A:46:VAL:HG23	1:A:98:HIS:H	11	0.14



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,505)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:76:GLU:H	19	0.14
(1,505)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:76:GLU:H	19	0.14
(1,505)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:76:GLU:H	19	0.14
(1,503)	1:A:76:GLU:H	1:A:99:LEU:HD21	4	0.14
(1,503)	1:A:76:GLU:H	1:A:99:LEU:HD22	4	0.14
(1,503)	1:A:76:GLU:H	1:A:99:LEU:HD23	4	0.14
(1,493)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:52:PHE:H	13	0.14
(1,493)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:52:PHE:H	13	0.14
(1,493)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:52:PHE:H	13	0.14
(1,488)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:51:LEU:H	2	0.14
(1,488)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:51:LEU:H	2	0.14
(1,488)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:51:LEU:H	2	0.14
(1,473)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD11	19	0.14
(1,473)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD12	19	0.14
(1,473)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD13	19	0.14
(1,469)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:24:GLY:H	3	0.14
(1,469)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:24:GLY:H	3	0.14
(1,469)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:24:GLY:H	3	0.14
(1,469)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:24:GLY:H	4	0.14
(1,469)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:24:GLY:H	4	0.14
(1,469)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:24:GLY:H	4	0.14
(1,468)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:23:ASN:H	3	0.14
(1,468)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:23:ASN:H	3	0.14
(1,468)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:23:ASN:H	3	0.14
(1,468)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:23:ASN:H	6	0.14
(1,468)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:23:ASN:H	6	0.14
(1,468)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:23:ASN:H	6	0.14
(1,464)	1:A:16:GLN:H	1:A:46:VAL:HG11	12	0.14
(1,464)	1:A:16:GLN:H	1:A:46:VAL:HG12	12	0.14
(1,464)	1:A:16:GLN:H	1:A:46:VAL:HG13	12	0.14
(1,462)	1:A:45:ILE:HD11	1:A:46:VAL:H	11	0.14
(1,462)	1:A:45:ILE:HD12	1:A:46:VAL:H	11	0.14
(1,462)	1:A:45:ILE:HD13	1:A:46:VAL:H	11	0.14
(1,454)	1:A:134:TYR:H	1:A:138:LEU:HD21	5	0.14
(1,454)	1:A:134:TYR:H	1:A:138:LEU:HD22	5	0.14
(1,454)	1:A:134:TYR:H	1:A:138:LEU:HD23	5	0.14
(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD11	7	0.14
(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD12	7	0.14
(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD13	7	0.14
(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD11	12	0.14
(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD12	12	0.14
(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD13	12	0.14



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,442)	1:A:71:ILE:H	1:A:75:VAL:HG11	10	0.14
(1,442)	1:A:71:ILE:H	1:A:75:VAL:HG12	10	0.14
(1,442)	1:A:71:ILE:H	1:A:75:VAL:HG13	10	0.14
(1,440)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:100:GLY:H	4	0.14
(1,440)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:100:GLY:H	4	0.14
(1,440)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:100:GLY:H	4	0.14
(1,440)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:100:GLY:H	5	0.14
(1,440)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:100:GLY:H	5	0.14
(1,440)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:100:GLY:H	5	0.14
(1,438)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:120:ALA:H	14	0.14
(1,438)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:120:ALA:H	14	0.14
(1,438)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:120:ALA:H	14	0.14
(1,438)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:120:ALA:H	16	0.14
(1,438)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:120:ALA:H	16	0.14
(1,438)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:120:ALA:H	16	0.14
(1,430)	1:A:46:VAL:HG11	1:A:47:SER:H	17	0.14
(1,430)	1:A:46:VAL:HG12	1:A:47:SER:H	17	0.14
(1,430)	1:A:46:VAL:HG13	1:A:47:SER:H	17	0.14
(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD21	4	0.14
(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD22	4	0.14
(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD23	4	0.14
(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD21	20	0.14
(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD22	20	0.14
(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD23	20	0.14
(1,416)	1:A:86:ILE:H	1:A:86:ILE:HD11	4	0.14
(1,416)	1:A:86:ILE:H	1:A:86:ILE:HD12	4	0.14
(1,416)	1:A:86:ILE:H	1:A:86:ILE:HD13	4	0.14
(1,416)	1:A:86:ILE:H	1:A:86:ILE:HD11	9	0.14
(1,416)	1:A:86:ILE:H	1:A:86:ILE:HD12	9	0.14
(1,416)	1:A:86:ILE:H	1:A:86:ILE:HD13	9	0.14
(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD21	17	0.14
(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD22	17	0.14
(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD23	17	0.14
(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD21	17	0.14
(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD22	17	0.14
(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD23	17	0.14
(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD21	17	0.14
(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD22	17	0.14
(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD23	17	0.14
(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD11	7	0.14
(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD12	7	0.14
(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD13	7	0.14



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

(1,408)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:138:LEU:HD12         7         0.14           (1,408)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:138:LEU:HD13         7         0.14           (1,408)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:138:LEU:HD13         7         0.14           (1,408)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:138:LEU:HD12         7         0.14           (1,408)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:138:LEU:HD13         7         0.14           (1,366)         1:A:41:LEU:H         1:A:126:LYS:H         7         0.14           (1,366)         1:A:41:LEU:H         1:A:26:LYS:H         7         0.14           (1,366)         1:A:41:LEU:H         1:A:26:LYS:H         9         0.14           (1,366)         1:A:41:LEU:H         1:A:26:LYS:H         9         0.14           (1,366)         1:A:41:LEU:H         1:A:26:LYS:H         9         0.14           (1,330)         1:A:15:MET:H         1:A:20:LTH:H         1:A:20:LH:H         1         0.14           (1,299)         1:A:15:MET:H         1:A:18:CU:H         11         0.14           (1,291)         1:A:8:LYS:H         1:A:11:SER:H         12         0.14           (1,281)         1:A:11:LEU:H         1:A:11:LEU:H	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,408)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:138:LEU:HD13         7         0.14           (1,408)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:138:LEU:HD11         7         0.14           (1,408)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:138:LEU:HD12         7         0.14           (1,408)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:138:LEU:HD13         7         0.14           (1,366)         1:A:41:LEU:H         1:A:126:LYS:H         7         0.14           (1,366)         1:A:79:LEU:H         1:A:26:LYS:H         9         0.14           (1,329)         1:A:79:LEU:H         1:A:20:THR:H         14         0.14           (1,239)         1:A:15:MET:H         1:A:20:THR:H         14         0.14           (1,299)         1:A:15:MET:H         1:A:18:GLU:H         11         0.14           (1,298)         1:A:14:ARG:H         1:A:18:GLU:H         11         0.14           (1,291)         1:A:8:LYS:H         1:A:11:SER:H         12         0.14           (1,283)         1:A:131:GLU:H         1:A:13:4:TYR:H         3         0.14           (1,283)         1:A:131:GLU:H         1:A:132:LEU:H         3         0.14           (1,281)         1:A:10:ASN:HD22         1:A:15:LEU:H         3	(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD11	7	0.14
(1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD11 7 0.14 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD12 7 0.14 (1,408) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:138:LEU:HD13 7 0.14 (1,366) 1:A:41:LEU:H 1:A:126:LYS:H 7 0.14 (1,366) 1:A:41:LEU:H 1:A:126:LYS:H 9 0.14 (1,366) 1:A:41:LEU:H 1:A:126:LYS:H 9 0.14 (1,329) 1:A:79:LEU:H 1:A:20:THR:H 14 0.14 (1,303) 1:A:18:GLU:H 1:A:20:THR:H 14 0.14 (1,299) 1:A:15:MET:H 1:A:18:GLU:H 11 0.14 (1,298) 1:A:15:MET:H 1:A:18:GLU:H 11 0.14 (1,298) 1:A:14:ARG:H 1:A:17:TYR:H 8 0.14 (1,298) 1:A:131:GLU:H 1:A:134:TYR:H 5 0.14 (1,283) 1:A:131:GLU:H 1:A:134:TYR:H 13 0.14 (1,283) 1:A:131:GLU:H 1:A:134:TYR:H 13 0.14 (1,283) 1:A:131:GLU:H 1:A:134:TYR:H 13 0.14 (1,267) 1:A:21:GLN:H 1:A:24:GLY:H 18 0.14 (1,266) 1:A:19:VAL:H 1:A:21:GLN:H 19 0.14 (1,266) 1:A:19:VAL:H 1:A:21:GLN:H 19 0.14 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD11 14 0.14 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD11 14 0.14 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD11 14 0.14 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD11 14 0.14 (1,250) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD12 18 0.14 (1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD12 18 0.14 (1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD11 18 0.14 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD11 18 0.14 (1,256) 1:A:46:VAL	(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD12	7	0.14
(1,408)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:138:LEU:HD13         7         0.14           (1,408)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:138:LEU:HD13         7         0.14           (1,366)         1:A:41:LEU:H         1:A:126:LYS:H         7         0.14           (1,366)         1:A:41:LEU:H         1:A:126:LYS:H         9         0.14           (1,329)         1:A:79:LEU:H         1:A:20:THR:H         14         0.14           (1,303)         1:A:18:GLU:H         1:A:20:THR:H         14         0.14           (1,299)         1:A:15:MET:H         1:A:18:GU:H         11         0.14           (1,298)         1:A:14:ARG:H         1:A:17:TYR:H         8         0.14           (1,298)         1:A:13:GU:H         1:A:13:TYR:H         8         0.14           (1,283)         1:A:13:GU:H         1:A:13:TYR:H         5         0.14           (1,283)         1:A:13:GLU:H         1:A:13:TYR:H         3         0.14           (1,281)         1:A:10:ASN:HD22         1:A:11:LEU:H         3         0.14           (1,281)         1:A:19:VAL:H         1:A:21:GLN:H         18         0.14           (1,266)         1:A:19:VAL:H         1:A:21:GLN:H         19         0.14	(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD13	7	0.14
(1,408)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:138:LEU:HD13         7         0.14           (1,366)         1:A:41:LEU:H         1:A:126:LYS:H         7         0.14           (1,366)         1:A:41:LEU:H         1:A:126:LYS:H         7         0.14           (1,366)         1:A:41:LEU:H         1:A:126:LYS:H         9         0.14           (1,303)         1:A:79:LEU:H         1:A:89:GLU:H         14         0.14           (1,299)         1:A:15:MET:H         1:A:20:THR:H         14         0.14           (1,298)         1:A:14:ARG:H         1:A:17:TYR:H         8         0.14           (1,291)         1:A:8:LYS:H         1:A:11:SER:H         12         0.14           (1,281)         1:A:131:GLU:H         1:A:131:TYR:H         5         0.14           (1,283)         1:A:131:GLU:H         1:A:131:LEU:H         3         0.14           (1,283)         1:A:13:GLO:H         1:A:14:14:TYR:H         13         0.14           (1,281)         1:A:13:GLO:H         1:A:14:14:TYR:H         13         0.14           (1,281)         1:A:13:GLO:H         1:A:14:14:TYR:H         13         0.14           (1,281)         1:A:13:THLE:HD12         1         0.14	(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD11	7	0.14
(1,366)         1:A:41:LEU:H         1:A:126:LYS:H         7         0.14           (1,366)         1:A:41:LEU:H         1:A:126:LYS:H         9         0.14           (1,329)         1:A:79:LEU:H         1:A:89:GLU:H         14         0.14           (1,329)         1:A:79:LEU:H         1:A:89:GLU:H         14         0.14           (1,299)         1:A:15:MET:H         1:A:18:GLU:H         11         0.14           (1,299)         1:A:14:ARG:H         1:A:17:TYR:H         8         0.14           (1,291)         1:A:8:LYS:H         1:A:11:SER:H         12         0.14           (1,283)         1:A:131:GLU:H         1:A:134:TYR:H         5         0.14           (1,283)         1:A:131:GLU:H         1:A:132:CU:H         3         0.14           (1,281)         1:A:110:ASN:HD22         1:A:112:LEU:H         3         0.14           (1,287)         1:A:21:GLN:H         18         0.14           (1,266)         1:A:19:VAL:H         1:A:21:GLN:H         18         0.14           (1,259)         1:A:51:LEU:HD21         1:A:71:ILE:HD11         14         0.14           (1,259)         1:A:51:LEU:HD22         1:A:71:ILE:HD13         14         0.14	(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD12	7	0.14
(1,366) 1:A:41:LEU:H 1:A:126:LYS:H 9 0.14 (1,329) 1:A:79:LEU:H 1:A:89:GLU:H 14 0.14 (1,303) 1:A:18:GLU:H 1:A:20:THR:H 14 0.14 (1,299) 1:A:15:MET:H 1:A:18:GLU:H 11 0.14 (1,299) 1:A:15:MET:H 1:A:18:GLU:H 11 0.14 (1,299) 1:A:14:ARG:H 1:A:17:TYR:H 8 0.14 (1,291) 1:A:8:LYS:H 1:A:11:SER:H 12 0.14 (1,293) 1:A:131:GLU:H 1:A:134:TYR:H 5 0.14 (1,283) 1:A:131:GLU:H 1:A:134:TYR:H 5 0.14 (1,283) 1:A:131:GLU:H 1:A:134:TYR:H 13 0.14 (1,281) 1:A:110:ASN:HD22 1:A:112:LEU:H 3 0.14 (1,266) 1:A:21:GLN:H 1:A:24:GLY:H 18 0.14 (1,266) 1:A:19:VAL:H 1:A:21:GLN:H 6 0.14 (1,266) 1:A:19:VAL:H 1:A:21:GLN:H 19 0.14 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD11 14 0.14 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD12 14 0.14 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD13 14 0.14 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD11 14 0.14 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD11 14 0.14 (1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD12 14 0.14 (1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD13 14 0.14 (1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD13 8 0.14 (1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD13 8 0.14 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD13 8 0.14 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD11 8 0.14 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD13 8 0.14 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:	(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD13	7	0.14
(1,329) 1:A:79:LEU:H 1:A:89:GLU:H 14 0.14 (1,303) 1:A:18:GLU:H 1:A:20:THR:H 14 0.14 (1,299) 1:A:15:MET:H 1:A:18:GLU:H 11 0.14 (1,298) 1:A:14:ARG:H 1:A:17:TYR:H 8 0.14 (1,291) 1:A:8:LYS:H 1:A:11:SER:H 12 0.14 (1,283) 1:A:31:GLU:H 1:A:134:TYR:H 5 0.14 (1,283) 1:A:31:GLU:H 1:A:134:TYR:H 5 0.14 (1,283) 1:A:31:GLU:H 1:A:134:TYR:H 13 0.14 (1,283) 1:A:131:GLU:H 1:A:134:TYR:H 13 0.14 (1,283) 1:A:10:ASN:HD22 1:A:11:ELEU:H 3 0.14 (1,266) 1:A:10:ASN:HD22 1:A:112:LEU:H 3 0.14 (1,267) 1:A:21:GLN:H 1:A:24:GLY:H 18 0.14 (1,266) 1:A:19:VAL:H 1:A:21:GLN:H 6 0.14 (1,266) 1:A:19:VAL:H 1:A:21:GLN:H 19 0.14 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD11 14 0.14 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD12 14 0.14 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD12 14 0.14 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD13 14 0.14 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD11 14 0.14 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD11 14 0.14 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD12 14 0.14 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 14 0.14 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD11 14 0.14 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 14 0.14 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD11 14 0.14 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD11 14 0.14 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD11 14 0.14 (1,259) 1:A:61:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD11 14 0.14 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD11 14 0.14 (1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD13 8 0.14 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD13 8 0.14 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD11 8 0.14 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD13 8 0.14 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD13 8 0.14 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD11 8 0.14 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD13 8 0.14 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD13 8 0.14 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23	(1,366)	1:A:41:LEU:H	1:A:126:LYS:H	7	0.14
(1,303) 1:A:18:GLU:H 1:A:20:THR:H 14 0.14 (1,299) 1:A:15:MET:H 1:A:18:GLU:H 11 0.14 (1,298) 1:A:14:ARG:H 1:A:17:TYR:H 8 0.14 (1,291) 1:A:8:LYS:H 1:A:11:SER:H 12 0.14 (1,283) 1:A:131:GLU:H 1:A:134:TYR:H 5 0.14 (1,283) 1:A:131:GLU:H 1:A:134:TYR:H 5 0.14 (1,283) 1:A:131:GLU:H 1:A:134:TYR:H 13 0.14 (1,281) 1:A:110:ASN:HD22 1:A:112:LEU:H 3 0.14 (1,281) 1:A:110:ASN:HD22 1:A:112:LEU:H 3 0.14 (1,266) 1:A:19:VAL:H 1:A:24:GLV:H 18 0.14 (1,266) 1:A:19:VAL:H 1:A:21:GLN:H 6 0.14 (1,266) 1:A:19:VAL:H 1:A:21:GLN:H 19 0.14 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD11 14 0.14 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD12 14 0.14 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD13 14 0.14 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD11 14 0.14 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD11 14 0.14 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD11 14 0.14 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD11 14 0.14 (1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD11 8 0.14 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD11 8 0.14 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD11 8 0.14 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD11 8 0.14 (1,256) 1:A:46:V	(1,366)	1:A:41:LEU:H	1:A:126:LYS:H	9	0.14
(1,299) 1:A:15:MET:H 1:A:18:GLU:H 11 0.14 (1,298) 1:A:14:ARG:H 1:A:17:TYR:H 8 0.14 (1,291) 1:A:8:LYS:H 1:A:11:SER:H 12 0.14 (1,283) 1:A:131:GLU:H 1:A:134:TYR:H 5 0.14 (1,283) 1:A:131:GLU:H 1:A:134:TYR:H 13 0.14 (1,281) 1:A:110:ASN:HD22 1:A:112:LEU:H 3 0.14 (1,266) 1:A:19:VAL:H 1:A:24:GLN:H 6 0.14 (1,266) 1:A:19:VAL:H 1:A:21:GLN:H 19 0.14 (1,259) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD11 14 0.14 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD12 14 0.14 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD11 14 0.14 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD11 14 0.14 (1,259) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:HD12 14 0.14 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD11 14 0.14 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 14 0.14 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD11 14 0.14 (1,259) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 14 0.14 (1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD13 8 0.14 (1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD13 8 0.14 (1,256) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD13 8 0.14 (1,256) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD13 8 0.14 (1,256) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 8 0.	(1,329)	1:A:79:LEU:H	1:A:89:GLU:H	14	0.14
(1,298)         1:A:14:ARG:H         1:A:17:TYR:H         8         0.14           (1,291)         1:A:8:LYS:H         1:A:11:SER:H         12         0.14           (1,283)         1:A:131:GLU:H         1:A:134:TYR:H         5         0.14           (1,283)         1:A:131:GLU:H         1:A:134:TYR:H         13         0.14           (1,281)         1:A:110:ASN:HD22         1:A:112:LEU:H         3         0.14           (1,286)         1:A:21:GLN:H         18         0.14           (1,266)         1:A:19:VAL:H         1:A:21:GLN:H         19         0.14           (1,266)         1:A:19:VAL:H         1:A:71:ILE:HD11         14         0.14           (1,259)         1:A:51:LEU:HD21         1:A:71:ILE:HD11         14         0.14           (1,259)         1:A:51:LEU:HD22         1:A:71:ILE:HD13         14         0.14           (1,259)         1:A:51:LEU:HD23         1:A:71:ILE:HD13         14         0.14	(1,303)	1:A:18:GLU:H	1:A:20:THR:H	14	0.14
(1,291)         1:A:8:LYS:H         1:A:11:SER:H         12         0.14           (1,283)         1:A:131:GLU:H         1:A:134:TYR:H         5         0.14           (1,283)         1:A:131:GLU:H         1:A:134:TYR:H         13         0.14           (1,281)         1:A:110:ASN:HD22         1:A:112:LEU:H         3         0.14           (1,267)         1:A:21:GLN:H         1:A:24:GLY:H         18         0.14           (1,266)         1:A:19:VAL:H         1:A:21:GLN:H         6         0.14           (1,266)         1:A:19:VAL:H         1:A:21:GLN:H         19         0.14           (1,266)         1:A:51:LEU:HD21         1:A:71:ILE:HD11         14         0.14           (1,259)         1:A:51:LEU:HD21         1:A:71:ILE:HD12         14         0.14           (1,259)         1:A:51:LEU:HD21         1:A:71:ILE:HD13         14         0.14           (1,259)         1:A:51:LEU:HD22         1:A:71:ILE:HD11         14         0.14           (1,259)         1:A:51:LEU:HD22         1:A:71:ILE:HD12         14         0.14           (1,259)         1:A:51:LEU:HD23         1:A:71:ILE:HD13         14         0.14           (1,259)         1:A:51:LEU:HD23         1:A:71:ILE:HD11	(1,299)	1:A:15:MET:H	1:A:18:GLU:H	11	0.14
(1,283)         1:A:131:GLU:H         1:A:134:TYR:H         5         0.14           (1,283)         1:A:131:GLU:H         1:A:134:TYR:H         13         0.14           (1,281)         1:A:110:ASN:HD22         1:A:112:LEU:H         3         0.14           (1,267)         1:A:21:GLN:H         1:A:24:GLY:H         18         0.14           (1,266)         1:A:19:VAL:H         1:A:21:GLN:H         6         0.14           (1,266)         1:A:51:LEU:HD21         1:A:71:ILE:HD11         14         0.14           (1,259)         1:A:51:LEU:HD21         1:A:71:ILE:HD12         14         0.14           (1,259)         1:A:51:LEU:HD21         1:A:71:ILE:HD13         14         0.14           (1,259)         1:A:51:LEU:HD22         1:A:71:ILE:HD13         14         0.14           (1,259)         1:A:51:LEU:HD22         1:A:71:ILE:HD12         14         0.14           (1,259)         1:A:51:LEU:HD23         1:A:71:ILE:HD12         14         0.14           (1,259)         1:A:51:LEU:HD23         1:A:71:ILE:HD11         14         0.14           (1,259)         1:A:51:LEU:HD23         1:A:71:ILE:HD13         14         0.14           (1,259)         1:A:51:LEU:HD23         1:A:71:ILE:HD	(1,298)	1:A:14:ARG:H	1:A:17:TYR:H	8	0.14
(1,283)         1:A:131:GLU:H         1:A:134:TYR:H         13         0.14           (1,281)         1:A:110:ASN:HD22         1:A:112:LEU:H         3         0.14           (1,267)         1:A:21:GLN:H         1:A:21:GLN:H         18         0.14           (1,266)         1:A:19:VAL:H         1:A:21:GLN:H         6         0.14           (1,266)         1:A:19:VAL:H         1:A:21:GLN:H         19         0.14           (1,259)         1:A:51:LEU:HD21         1:A:71:ILE:HD11         14         0.14           (1,259)         1:A:51:LEU:HD21         1:A:71:ILE:HD12         14         0.14           (1,259)         1:A:51:LEU:HD21         1:A:71:ILE:HD13         14         0.14           (1,259)         1:A:51:LEU:HD22         1:A:71:ILE:HD11         14         0.14           (1,259)         1:A:51:LEU:HD22         1:A:71:ILE:HD12         14         0.14           (1,259)         1:A:51:LEU:HD22         1:A:71:ILE:HD13         14         0.14           (1,259)         1:A:51:LEU:HD23         1:A:71:ILE:HD11         14         0.14           (1,259)         1:A:51:LEU:HD23         1:A:71:ILE:HD13         14         0.14           (1,259)         1:A:51:LEU:HD23         1:A:71:ILE:HD1	(1,291)	1:A:8:LYS:H	1:A:11:SER:H	12	0.14
(1,283)         1:A:131:GLU:H         1:A:134:TYR:H         13         0.14           (1,281)         1:A:110:ASN:HD22         1:A:112:LEU:H         3         0.14           (1,267)         1:A:21:GLN:H         1:A:21:GLY:H         18         0.14           (1,266)         1:A:19:VAL:H         1:A:21:GLN:H         6         0.14           (1,266)         1:A:19:VAL:H         1:A:21:GLN:H         19         0.14           (1,259)         1:A:51:LEU:HD21         1:A:71:ILE:HD11         14         0.14           (1,259)         1:A:51:LEU:HD21         1:A:71:ILE:HD12         14         0.14           (1,259)         1:A:51:LEU:HD21         1:A:71:ILE:HD13         14         0.14           (1,259)         1:A:51:LEU:HD22         1:A:71:ILE:HD12         14         0.14           (1,259)         1:A:51:LEU:HD22         1:A:71:ILE:HD12         14         0.14           (1,259)         1:A:51:LEU:HD22         1:A:71:ILE:HD13         14         0.14           (1,259)         1:A:51:LEU:HD23         1:A:71:ILE:HD11         14         0.14           (1,259)         1:A:51:LEU:HD23         1:A:71:ILE:HD11         14         0.14           (1,259)         1:A:51:LEU:HD23         1:A:71:ILE:HD1	(1,283)	1:A:131:GLU:H	1:A:134:TYR:H	5	0.14
(1,267)         1:A:21:GLN:H         1:A:24:GLY:H         18         0.14           (1,266)         1:A:19:VAL:H         1:A:21:GLN:H         6         0.14           (1,266)         1:A:19:VAL:H         1:A:21:GLN:H         19         0.14           (1,259)         1:A:51:LEU:HD21         1:A:71:ILE:HD11         14         0.14           (1,259)         1:A:51:LEU:HD21         1:A:71:ILE:HD12         14         0.14           (1,259)         1:A:51:LEU:HD21         1:A:71:ILE:HD13         14         0.14           (1,259)         1:A:51:LEU:HD22         1:A:71:ILE:HD11         14         0.14           (1,259)         1:A:51:LEU:HD22         1:A:71:ILE:HD12         14         0.14           (1,259)         1:A:51:LEU:HD23         1:A:71:ILE:HD13         14         0.14           (1,259)         1:A:51:LEU:HD23         1:A:71:ILE:HD11         14         0.14           (1,259)         1:A:51:LEU:HD23         1:A:71:ILE:HD11         14         0.14           (1,259)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:71:ILE:HD12         14         0.14           (1,259)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:51:LEU:HD13         8         0.14           (1,256)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:51:LE	(1,283)	1:A:131:GLU:H	1:A:134:TYR:H	13	0.14
(1,266)         1:A:19:VAL:H         1:A:21:GLN:H         6         0.14           (1,266)         1:A:19:VAL:H         1:A:21:GLN:H         19         0.14           (1,259)         1:A:51:LEU:HD21         1:A:71:ILE:HD11         14         0.14           (1,259)         1:A:51:LEU:HD21         1:A:71:ILE:HD12         14         0.14           (1,259)         1:A:51:LEU:HD21         1:A:71:ILE:HD13         14         0.14           (1,259)         1:A:51:LEU:HD22         1:A:71:ILE:HD11         14         0.14           (1,259)         1:A:51:LEU:HD22         1:A:71:ILE:HD12         14         0.14           (1,259)         1:A:51:LEU:HD22         1:A:71:ILE:HD13         14         0.14           (1,259)         1:A:51:LEU:HD23         1:A:71:ILE:HD13         14         0.14           (1,259)         1:A:51:LEU:HD23         1:A:71:ILE:HD11         14         0.14           (1,259)         1:A:51:LEU:HD23         1:A:71:ILE:HD12         14         0.14           (1,259)         1:A:60:LEU:HD23         1:A:71:ILE:HD11         8         0.14           (1,256)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:51:LEU:HD13         8         0.14           (1,256)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:	(1,281)	1:A:110:ASN:HD22	1:A:112:LEU:H	3	0.14
(1,266)         1:A:19:VAL:H         1:A:21:GLN:H         19         0.14           (1,259)         1:A:51:LEU:HD21         1:A:71:ILE:HD11         14         0.14           (1,259)         1:A:51:LEU:HD21         1:A:71:ILE:HD12         14         0.14           (1,259)         1:A:51:LEU:HD21         1:A:71:ILE:HD13         14         0.14           (1,259)         1:A:51:LEU:HD22         1:A:71:ILE:HD11         14         0.14           (1,259)         1:A:51:LEU:HD22         1:A:71:ILE:HD12         14         0.14           (1,259)         1:A:51:LEU:HD23         1:A:71:ILE:HD13         14         0.14           (1,259)         1:A:51:LEU:HD23         1:A:71:ILE:HD11         14         0.14           (1,259)         1:A:51:LEU:HD23         1:A:71:ILE:HD12         14         0.14           (1,259)         1:A:51:LEU:HD23         1:A:71:ILE:HD13         14         0.14           (1,259)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:51:LEU:HD13         14         0.14           (1,256)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:51:LEU:HD11         8         0.14           (1,256)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:51:LEU:HD13         8         0.14           (1,256)         1:A:46:VAL:HG23         <	(1,267)	1:A:21:GLN:H	1:A:24:GLY:H	18	0.14
(1,259)         1:A:51:LEU:HD21         1:A:71:ILE:HD11         14         0.14           (1,259)         1:A:51:LEU:HD21         1:A:71:ILE:HD12         14         0.14           (1,259)         1:A:51:LEU:HD21         1:A:71:ILE:HD13         14         0.14           (1,259)         1:A:51:LEU:HD22         1:A:71:ILE:HD11         14         0.14           (1,259)         1:A:51:LEU:HD22         1:A:71:ILE:HD12         14         0.14           (1,259)         1:A:51:LEU:HD23         1:A:71:ILE:HD13         14         0.14           (1,259)         1:A:51:LEU:HD23         1:A:71:ILE:HD11         14         0.14           (1,259)         1:A:51:LEU:HD23         1:A:71:ILE:HD12         14         0.14           (1,259)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:71:ILE:HD13         14         0.14           (1,259)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:51:LEU:HD11         8         0.14           (1,256)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:51:LEU:HD11         8         0.14           (1,256)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:51:LEU:HD11         8         0.14           (1,256)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:51:LEU:HD11         8         0.14           (1,256)         1:A:46:VAL:HG23	(1,266)	1:A:19:VAL:H	1:A:21:GLN:H	6	0.14
(1,259)         1:A:51:LEU:HD21         1:A:71:ILE:HD12         14         0.14           (1,259)         1:A:51:LEU:HD21         1:A:71:ILE:HD13         14         0.14           (1,259)         1:A:51:LEU:HD22         1:A:71:ILE:HD11         14         0.14           (1,259)         1:A:51:LEU:HD22         1:A:71:ILE:HD12         14         0.14           (1,259)         1:A:51:LEU:HD22         1:A:71:ILE:HD13         14         0.14           (1,259)         1:A:51:LEU:HD23         1:A:71:ILE:HD11         14         0.14           (1,259)         1:A:51:LEU:HD23         1:A:71:ILE:HD12         14         0.14           (1,259)         1:A:51:LEU:HD23         1:A:71:ILE:HD13         14         0.14           (1,259)         1:A:51:LEU:HD23         1:A:71:ILE:HD13         14         0.14           (1,256)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:51:LEU:HD11         8         0.14           (1,256)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:51:LEU:HD13         8         0.14           (1,256)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:51:LEU:HD11         8         0.14           (1,256)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD13         8         0.14           (1,256)         1:A:46:VAL:HG23	(1,266)	1:A:19:VAL:H	1:A:21:GLN:H	19	0.14
(1,259)         1:A:51:LEU:HD21         1:A:71:ILE:HD13         14         0.14           (1,259)         1:A:51:LEU:HD22         1:A:71:ILE:HD11         14         0.14           (1,259)         1:A:51:LEU:HD22         1:A:71:ILE:HD12         14         0.14           (1,259)         1:A:51:LEU:HD22         1:A:71:ILE:HD13         14         0.14           (1,259)         1:A:51:LEU:HD23         1:A:71:ILE:HD11         14         0.14           (1,259)         1:A:51:LEU:HD23         1:A:71:ILE:HD12         14         0.14           (1,259)         1:A:51:LEU:HD23         1:A:71:ILE:HD13         14         0.14           (1,259)         1:A:51:LEU:HD23         1:A:71:ILE:HD13         14         0.14           (1,256)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:51:LEU:HD11         8         0.14           (1,256)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:51:LEU:HD13         8         0.14           (1,256)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:51:LEU:HD11         8         0.14           (1,256)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:51:LEU:HD13         8         0.14           (1,256)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD13         8         0.14           (1,256)         1:A:46:VAL:HG23	(1,259)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD11	14	0.14
(1,259)         1:A:51:LEU:HD22         1:A:71:ILE:HD11         14         0.14           (1,259)         1:A:51:LEU:HD22         1:A:71:ILE:HD12         14         0.14           (1,259)         1:A:51:LEU:HD22         1:A:71:ILE:HD13         14         0.14           (1,259)         1:A:51:LEU:HD23         1:A:71:ILE:HD11         14         0.14           (1,259)         1:A:51:LEU:HD23         1:A:71:ILE:HD12         14         0.14           (1,259)         1:A:51:LEU:HD23         1:A:71:ILE:HD13         14         0.14           (1,259)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:51:LEU:HD13         8         0.14           (1,256)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:51:LEU:HD12         8         0.14           (1,256)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:51:LEU:HD13         8         0.14           (1,256)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:51:LEU:HD11         8         0.14           (1,256)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:51:LEU:HD13         8         0.14           (1,256)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD11         8         0.14           (1,256)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD11         8         0.14           (1,256)         1:A:46:VAL:HG23	(1,259)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD12	14	0.14
(1,259)         1:A:51:LEU:HD22         1:A:71:ILE:HD12         14         0.14           (1,259)         1:A:51:LEU:HD22         1:A:71:ILE:HD13         14         0.14           (1,259)         1:A:51:LEU:HD23         1:A:71:ILE:HD11         14         0.14           (1,259)         1:A:51:LEU:HD23         1:A:71:ILE:HD12         14         0.14           (1,259)         1:A:51:LEU:HD23         1:A:71:ILE:HD13         14         0.14           (1,256)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:51:LEU:HD11         8         0.14           (1,256)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:51:LEU:HD12         8         0.14           (1,256)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:51:LEU:HD13         8         0.14           (1,256)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:51:LEU:HD11         8         0.14           (1,256)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:51:LEU:HD13         8         0.14           (1,256)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD11         8         0.14           (1,256)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD11         8         0.14           (1,256)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD13         8         0.14           (1,256)         1:A:46:VAL:HG23         <	(1,259)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD13	14	0.14
(1,259)       1:A:51:LEU:HD22       1:A:71:ILE:HD13       14       0.14         (1,259)       1:A:51:LEU:HD23       1:A:71:ILE:HD11       14       0.14         (1,259)       1:A:51:LEU:HD23       1:A:71:ILE:HD12       14       0.14         (1,259)       1:A:51:LEU:HD23       1:A:71:ILE:HD13       14       0.14         (1,259)       1:A:46:VAL:HG21       1:A:51:LEU:HD11       8       0.14         (1,256)       1:A:46:VAL:HG21       1:A:51:LEU:HD12       8       0.14         (1,256)       1:A:46:VAL:HG21       1:A:51:LEU:HD13       8       0.14         (1,256)       1:A:46:VAL:HG22       1:A:51:LEU:HD11       8       0.14         (1,256)       1:A:46:VAL:HG22       1:A:51:LEU:HD12       8       0.14         (1,256)       1:A:46:VAL:HG22       1:A:51:LEU:HD13       8       0.14         (1,256)       1:A:46:VAL:HG23       1:A:51:LEU:HD11       8       0.14         (1,256)       1:A:46:VAL:HG23       1:A:51:LEU:HD12       8       0.14         (1,256)       1:A:46:VAL:HG23       1:A:51:LEU:HD13       8       0.14         (1,256)       1:A:46:VAL:HG23       1:A:51:LEU:HD13       8       0.14         (1,256)       1:A:43:VAL:HG2	(1,259)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD11	14	0.14
(1,259)       1:A:51:LEU:HD23       1:A:71:ILE:HD11       14       0.14         (1,259)       1:A:51:LEU:HD23       1:A:71:ILE:HD12       14       0.14         (1,259)       1:A:51:LEU:HD23       1:A:71:ILE:HD13       14       0.14         (1,256)       1:A:46:VAL:HG21       1:A:51:LEU:HD11       8       0.14         (1,256)       1:A:46:VAL:HG21       1:A:51:LEU:HD12       8       0.14         (1,256)       1:A:46:VAL:HG21       1:A:51:LEU:HD13       8       0.14         (1,256)       1:A:46:VAL:HG22       1:A:51:LEU:HD11       8       0.14         (1,256)       1:A:46:VAL:HG22       1:A:51:LEU:HD12       8       0.14         (1,256)       1:A:46:VAL:HG22       1:A:51:LEU:HD13       8       0.14         (1,256)       1:A:46:VAL:HG23       1:A:51:LEU:HD11       8       0.14         (1,256)       1:A:46:VAL:HG23       1:A:51:LEU:HD12       8       0.14         (1,256)       1:A:46:VAL:HG23       1:A:51:LEU:HD13       8       0.14         (1,256)       1:A:46:VAL:HG23       1:A:51:LEU:HD13       8       0.14         (1,256)       1:A:43:VAL:HG21       1:A:123:PHE:H       10       0.14         (1,25)       1:A:43:VAL:HG22 </td <td>(1,259)</td> <td>1:A:51:LEU:HD22</td> <td>1:A:71:ILE:HD12</td> <td>14</td> <td>0.14</td>	(1,259)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD12	14	0.14
(1,259)         1:A:51:LEU:HD23         1:A:71:ILE:HD12         14         0.14           (1,259)         1:A:51:LEU:HD23         1:A:71:ILE:HD13         14         0.14           (1,256)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:51:LEU:HD11         8         0.14           (1,256)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:51:LEU:HD12         8         0.14           (1,256)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:51:LEU:HD13         8         0.14           (1,256)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:51:LEU:HD11         8         0.14           (1,256)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:51:LEU:HD12         8         0.14           (1,256)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD13         8         0.14           (1,256)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD11         8         0.14           (1,256)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD12         8         0.14           (1,256)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD13         8         0.14           (1,256)         1:A:43:VAL:HG23         1:A:123:PHE:H         10         0.14           (1,25)         1:A:43:VAL:HG22         1:A:123:PHE:H         10         0.14           (1,25)         1:A:43:VAL:HG23         1:A:	(1,259)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD13	14	0.14
(1,259)       1:A:51:LEU:HD23       1:A:71:ILE:HD13       14       0.14         (1,256)       1:A:46:VAL:HG21       1:A:51:LEU:HD11       8       0.14         (1,256)       1:A:46:VAL:HG21       1:A:51:LEU:HD12       8       0.14         (1,256)       1:A:46:VAL:HG21       1:A:51:LEU:HD13       8       0.14         (1,256)       1:A:46:VAL:HG22       1:A:51:LEU:HD11       8       0.14         (1,256)       1:A:46:VAL:HG22       1:A:51:LEU:HD12       8       0.14         (1,256)       1:A:46:VAL:HG23       1:A:51:LEU:HD13       8       0.14         (1,256)       1:A:46:VAL:HG23       1:A:51:LEU:HD12       8       0.14         (1,256)       1:A:46:VAL:HG23       1:A:51:LEU:HD12       8       0.14         (1,256)       1:A:46:VAL:HG23       1:A:51:LEU:HD13       8       0.14         (1,256)       1:A:43:VAL:HG23       1:A:123:PHE:H       10       0.14         (1,25)       1:A:43:VAL:HG21       1:A:123:PHE:H       10       0.14         (1,25)       1:A:43:VAL:HG23       1:A:123:PHE:H       10       0.14         (1,247)       1:A:121:LEU:HD11       1:A:122:ARG:H       7       0.14	(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD11	14	0.14
(1,256)       1:A:46:VAL:HG21       1:A:51:LEU:HD11       8       0.14         (1,256)       1:A:46:VAL:HG21       1:A:51:LEU:HD12       8       0.14         (1,256)       1:A:46:VAL:HG21       1:A:51:LEU:HD13       8       0.14         (1,256)       1:A:46:VAL:HG22       1:A:51:LEU:HD11       8       0.14         (1,256)       1:A:46:VAL:HG22       1:A:51:LEU:HD12       8       0.14         (1,256)       1:A:46:VAL:HG23       1:A:51:LEU:HD13       8       0.14         (1,256)       1:A:46:VAL:HG23       1:A:51:LEU:HD11       8       0.14         (1,256)       1:A:46:VAL:HG23       1:A:51:LEU:HD12       8       0.14         (1,256)       1:A:46:VAL:HG23       1:A:51:LEU:HD13       8       0.14         (1,256)       1:A:43:VAL:HG23       1:A:123:PHE:H       10       0.14         (1,25)       1:A:43:VAL:HG21       1:A:123:PHE:H       10       0.14         (1,25)       1:A:43:VAL:HG23       1:A:123:PHE:H       10       0.14         (1,247)       1:A:121:LEU:HD11       1:A:122:ARG:H       7       0.14	(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD12	14	0.14
(1,256)       1:A:46:VAL:HG21       1:A:51:LEU:HD12       8       0.14         (1,256)       1:A:46:VAL:HG21       1:A:51:LEU:HD13       8       0.14         (1,256)       1:A:46:VAL:HG22       1:A:51:LEU:HD11       8       0.14         (1,256)       1:A:46:VAL:HG22       1:A:51:LEU:HD12       8       0.14         (1,256)       1:A:46:VAL:HG23       1:A:51:LEU:HD13       8       0.14         (1,256)       1:A:46:VAL:HG23       1:A:51:LEU:HD11       8       0.14         (1,256)       1:A:46:VAL:HG23       1:A:51:LEU:HD13       8       0.14         (1,256)       1:A:46:VAL:HG23       1:A:51:LEU:HD13       8       0.14         (1,25)       1:A:43:VAL:HG21       1:A:123:PHE:H       10       0.14         (1,25)       1:A:43:VAL:HG22       1:A:123:PHE:H       10       0.14         (1,25)       1:A:43:VAL:HG23       1:A:123:PHE:H       10       0.14         (1,247)       1:A:121:LEU:HD11       1:A:122:ARG:H       7       0.14	(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD13	14	0.14
(1,256)       1:A:46:VAL:HG21       1:A:51:LEU:HD13       8       0.14         (1,256)       1:A:46:VAL:HG22       1:A:51:LEU:HD11       8       0.14         (1,256)       1:A:46:VAL:HG22       1:A:51:LEU:HD12       8       0.14         (1,256)       1:A:46:VAL:HG22       1:A:51:LEU:HD13       8       0.14         (1,256)       1:A:46:VAL:HG23       1:A:51:LEU:HD11       8       0.14         (1,256)       1:A:46:VAL:HG23       1:A:51:LEU:HD12       8       0.14         (1,256)       1:A:46:VAL:HG23       1:A:51:LEU:HD13       8       0.14         (1,256)       1:A:43:VAL:HG23       1:A:123:PHE:H       10       0.14         (1,25)       1:A:43:VAL:HG21       1:A:123:PHE:H       10       0.14         (1,25)       1:A:43:VAL:HG23       1:A:123:PHE:H       10       0.14         (1,247)       1:A:121:LEU:HD11       1:A:122:ARG:H       7       0.14	(1,256)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD11	8	0.14
(1,256)       1:A:46:VAL:HG22       1:A:51:LEU:HD11       8       0.14         (1,256)       1:A:46:VAL:HG22       1:A:51:LEU:HD12       8       0.14         (1,256)       1:A:46:VAL:HG22       1:A:51:LEU:HD13       8       0.14         (1,256)       1:A:46:VAL:HG23       1:A:51:LEU:HD11       8       0.14         (1,256)       1:A:46:VAL:HG23       1:A:51:LEU:HD12       8       0.14         (1,256)       1:A:46:VAL:HG23       1:A:51:LEU:HD13       8       0.14         (1,25)       1:A:43:VAL:HG21       1:A:123:PHE:H       10       0.14         (1,25)       1:A:43:VAL:HG22       1:A:123:PHE:H       10       0.14         (1,25)       1:A:43:VAL:HG23       1:A:123:PHE:H       10       0.14         (1,247)       1:A:121:LEU:HD11       1:A:122:ARG:H       7       0.14	(1,256)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD12	8	0.14
(1,256)       1:A:46:VAL:HG22       1:A:51:LEU:HD12       8       0.14         (1,256)       1:A:46:VAL:HG22       1:A:51:LEU:HD13       8       0.14         (1,256)       1:A:46:VAL:HG23       1:A:51:LEU:HD11       8       0.14         (1,256)       1:A:46:VAL:HG23       1:A:51:LEU:HD12       8       0.14         (1,256)       1:A:46:VAL:HG23       1:A:51:LEU:HD13       8       0.14         (1,25)       1:A:43:VAL:HG21       1:A:123:PHE:H       10       0.14         (1,25)       1:A:43:VAL:HG22       1:A:123:PHE:H       10       0.14         (1,25)       1:A:43:VAL:HG23       1:A:123:PHE:H       10       0.14         (1,247)       1:A:121:LEU:HD11       1:A:122:ARG:H       7       0.14	(1,256)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD13	8	0.14
(1,256)       1:A:46:VAL:HG22       1:A:51:LEU:HD13       8       0.14         (1,256)       1:A:46:VAL:HG23       1:A:51:LEU:HD11       8       0.14         (1,256)       1:A:46:VAL:HG23       1:A:51:LEU:HD12       8       0.14         (1,256)       1:A:46:VAL:HG23       1:A:51:LEU:HD13       8       0.14         (1,25)       1:A:43:VAL:HG21       1:A:123:PHE:H       10       0.14         (1,25)       1:A:43:VAL:HG22       1:A:123:PHE:H       10       0.14         (1,25)       1:A:43:VAL:HG23       1:A:123:PHE:H       10       0.14         (1,247)       1:A:121:LEU:HD11       1:A:122:ARG:H       7       0.14	(1,256)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD11	8	0.14
(1,256)       1:A:46:VAL:HG23       1:A:51:LEU:HD11       8       0.14         (1,256)       1:A:46:VAL:HG23       1:A:51:LEU:HD12       8       0.14         (1,256)       1:A:46:VAL:HG23       1:A:51:LEU:HD13       8       0.14         (1,25)       1:A:43:VAL:HG21       1:A:123:PHE:H       10       0.14         (1,25)       1:A:43:VAL:HG22       1:A:123:PHE:H       10       0.14         (1,25)       1:A:43:VAL:HG23       1:A:123:PHE:H       10       0.14         (1,247)       1:A:121:LEU:HD11       1:A:122:ARG:H       7       0.14		1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD12	8	0.14
(1,256)       1:A:46:VAL:HG23       1:A:51:LEU:HD11       8       0.14         (1,256)       1:A:46:VAL:HG23       1:A:51:LEU:HD12       8       0.14         (1,256)       1:A:46:VAL:HG23       1:A:51:LEU:HD13       8       0.14         (1,25)       1:A:43:VAL:HG21       1:A:123:PHE:H       10       0.14         (1,25)       1:A:43:VAL:HG22       1:A:123:PHE:H       10       0.14         (1,25)       1:A:43:VAL:HG23       1:A:123:PHE:H       10       0.14         (1,247)       1:A:121:LEU:HD11       1:A:122:ARG:H       7       0.14	(1,256)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD13	8	0.14
(1,256)       1:A:46:VAL:HG23       1:A:51:LEU:HD12       8       0.14         (1,256)       1:A:46:VAL:HG23       1:A:51:LEU:HD13       8       0.14         (1,25)       1:A:43:VAL:HG21       1:A:123:PHE:H       10       0.14         (1,25)       1:A:43:VAL:HG22       1:A:123:PHE:H       10       0.14         (1,25)       1:A:43:VAL:HG23       1:A:123:PHE:H       10       0.14         (1,247)       1:A:121:LEU:HD11       1:A:122:ARG:H       7       0.14		1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD11	8	0.14
(1,256)       1:A:46:VAL:HG23       1:A:51:LEU:HD13       8       0.14         (1,25)       1:A:43:VAL:HG21       1:A:123:PHE:H       10       0.14         (1,25)       1:A:43:VAL:HG22       1:A:123:PHE:H       10       0.14         (1,25)       1:A:43:VAL:HG23       1:A:123:PHE:H       10       0.14         (1,247)       1:A:121:LEU:HD11       1:A:122:ARG:H       7       0.14	(1,256)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD12	8	0.14
(1,25)       1:A:43:VAL:HG21       1:A:123:PHE:H       10       0.14         (1,25)       1:A:43:VAL:HG22       1:A:123:PHE:H       10       0.14         (1,25)       1:A:43:VAL:HG23       1:A:123:PHE:H       10       0.14         (1,247)       1:A:121:LEU:HD11       1:A:122:ARG:H       7       0.14		1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD13	8	0.14
(1,25)       1:A:43:VAL:HG22       1:A:123:PHE:H       10       0.14         (1,25)       1:A:43:VAL:HG23       1:A:123:PHE:H       10       0.14         (1,247)       1:A:121:LEU:HD11       1:A:122:ARG:H       7       0.14		1:A:43:VAL:HG21	1:A:123:PHE:H	10	0.14
(1,25)       1:A:43:VAL:HG23       1:A:123:PHE:H       10       0.14         (1,247)       1:A:121:LEU:HD11       1:A:122:ARG:H       7       0.14		1:A:43:VAL:HG22	1:A:123:PHE:H	10	0.14
(1,247) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 7 0.14		1:A:43:VAL:HG23	1:A:123:PHE:H	10	0.14
	/	1:A:121:LEU:HD11	1:A:122:ARG:H	7	0.14
	· · /	1:A:121:LEU:HD12	1:A:122:ARG:H	7	0.14



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

(1,247)         1:A:121:LEU:HD13         1:A:122:ARG:H         7         0.14           (1,222)         1:A:71:ILE:HD11         1:A:140:LEU:HD21         9         0.14           (1,222)         1:A:71:ILE:HD11         1:A:140:LEU:HD22         9         0.14           (1,222)         1:A:71:ILE:HD11         1:A:140:LEU:HD23         9         0.14           (1,222)         1:A:71:ILE:HD12         1:A:140:LEU:HD21         9         0.14           (1,222)         1:A:71:ILE:HD12         1:A:140:LEU:HD23         9         0.14           (1,222)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD21         9         0.14           (1,222)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD22         9         0.14           (1,222)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD23         9         0.14           (1,229)         1:A:15:LEU:HD21	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,222)         1:A:71:ILE:HD11         1:A:140:LEU:HD22         9         0.14           (1,222)         1:A:71:ILE:HD11         1:A:140:LEU:HD23         9         0.14           (1,222)         1:A:71:ILE:HD12         1:A:140:LEU:HD21         9         0.14           (1,222)         1:A:71:ILE:HD12         1:A:140:LEU:HD22         9         0.14           (1,222)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD23         9         0.14           (1,222)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD21         9         0.14           (1,222)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD22         9         0.14           (1,222)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD22         9         0.14           (1,222)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD22         9         0.14           (1,222)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD23         9         0.14           (1,222)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD23         9         0.14           (1,229)         1:A:51:LEU:HD21         1:A:74:GLU:H         8         0.14           (1,219)         1:A:51:LEU:HD22         1:A:74:GLU:H         8         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG11         <	(1,247)	1:A:121:LEU:HD13	1:A:122:ARG:H	7	0.14
(1,222)         1:A:71:ILE:HD11         1:A:140:LEU:HD23         9         0.14           (1,222)         1:A:71:ILE:HD12         1:A:140:LEU:HD21         9         0.14           (1,222)         1:A:71:ILE:HD12         1:A:140:LEU:HD22         9         0.14           (1,222)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD23         9         0.14           (1,222)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD21         9         0.14           (1,222)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD22         9         0.14           (1,222)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD23         9         0.14           (1,221)         1:A:51:LEU:HD23         1:A:74:GLU:H         8         0.14           (1,219)         1:A:15:LEU:HD22         1:A:74:GLU:H         8         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG11         <	(1,222)	1:A:71:ILE:HD11	1:A:140:LEU:HD21	9	0.14
(1,222)         1:A:71:ILE:HD12         1:A:140:LEU:HD21         9         0.14           (1,222)         1:A:71:ILE:HD12         1:A:140:LEU:HD22         9         0.14           (1,222)         1:A:71:ILE:HD12         1:A:140:LEU:HD23         9         0.14           (1,222)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD21         9         0.14           (1,222)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD22         9         0.14           (1,222)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:74:GLU:H         8         0.14           (1,219)         1:A:51:LEU:HD21         1:A:74:GLU:H         8         0.14           (1,219)         1:A:51:LEU:HD22         1:A:74:GLU:H         8         0.14           (1,219)         1:A:51:LEU:HD23         1:A:74:GLU:H         8         0.14           (1,219)         1:A:15:VAL:HG11         1:A:17:ASN:H         8         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG11         1:A:117:ASN:H         8         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG11         1:A:117:ASN:H         8         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         15         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H <td>(1,222)</td> <td>1:A:71:ILE:HD11</td> <td>1:A:140:LEU:HD22</td> <td>9</td> <td>0.14</td>	(1,222)	1:A:71:ILE:HD11	1:A:140:LEU:HD22	9	0.14
(1,222)         1:A:71:ILE:HD12         1:A:140:LEU:HD22         9         0.14           (1,222)         1:A:71:ILE:HD12         1:A:140:LEU:HD23         9         0.14           (1,222)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD21         9         0.14           (1,222)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD22         9         0.14           (1,222)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD23         9         0.14           (1,219)         1:A:51:LEU:HD21         1:A:74:GLU:H         8         0.14           (1,219)         1:A:51:LEU:HD22         1:A:74:GLU:H         8         0.14           (1,219)         1:A:51:LEU:HD23         1:A:74:GLU:H         8         0.14           (1,219)         1:A:51:LEU:HD23         1:A:74:GLU:H         8         0.14           (1,219)         1:A:15:VAL:HG12         1:A:17:ASN:H         8         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG12         1:A:17:ASN:H         8         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG11         1:A:117:ASN:H         15         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         15         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H <td>(1,222)</td> <td>1:A:71:ILE:HD11</td> <td>1:A:140:LEU:HD23</td> <td>9</td> <td>0.14</td>	(1,222)	1:A:71:ILE:HD11	1:A:140:LEU:HD23	9	0.14
(1,222)         1:A:71:ILE:HD12         1:A:140:LEU:HD23         9         0.14           (1,222)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD21         9         0.14           (1,222)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD22         9         0.14           (1,222)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD23         9         0.14           (1,219)         1:A:51:LEU:HD21         1:A:74:GLU:H         8         0.14           (1,219)         1:A:51:LEU:HD22         1:A:74:GLU:H         8         0.14           (1,219)         1:A:51:LEU:HD23         1:A:74:GLU:H         8         0.14           (1,219)         1:A:19:VAL:HG11         1:A:17:ASN:H         8         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG12         1:A:117:ASN:H         8         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         8         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG12         1:A:117:ASN:H         15         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         15         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         17         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H <td>(1,222)</td> <td>1:A:71:ILE:HD12</td> <td>1:A:140:LEU:HD21</td> <td>9</td> <td>0.14</td>	(1,222)	1:A:71:ILE:HD12	1:A:140:LEU:HD21	9	0.14
(1,222)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD21         9         0.14           (1,222)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD22         9         0.14           (1,222)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD23         9         0.14           (1,219)         1:A:51:LEU:HD21         1:A:74:GLU:H         8         0.14           (1,219)         1:A:51:LEU:HD22         1:A:74:GLU:H         8         0.14           (1,219)         1:A:51:LEU:HD23         1:A:74:GLU:H         8         0.14           (1,219)         1:A:19:VAL:HG11         1:A:117:ASN:H         8         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG12         1:A:117:ASN:H         8         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         8         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG12         1:A:117:ASN:H         15         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         15         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         15         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         17         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H	(1,222)	1:A:71:ILE:HD12	1:A:140:LEU:HD22	9	0.14
(1,222)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD22         9         0.14           (1,222)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD23         9         0.14           (1,219)         1:A:51:LEU:HD21         1:A:74:GLU:H         8         0.14           (1,219)         1:A:51:LEU:HD22         1:A:74:GLU:H         8         0.14           (1,219)         1:A:51:LEU:HD23         1:A:74:GLU:H         8         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG11         1:A:117:ASN:H         8         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG12         1:A:117:ASN:H         8         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         8         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG11         1:A:117:ASN:H         15         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG12         1:A:117:ASN:H         15         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         15         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG11         1:A:117:ASN:H         17         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         17         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H	(1,222)	1:A:71:ILE:HD12	1:A:140:LEU:HD23	9	0.14
(1,222)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD23         9         0.14           (1,219)         1:A:51:LEU:HD21         1:A:74:GLU:H         8         0.14           (1,219)         1:A:51:LEU:HD22         1:A:74:GLU:H         8         0.14           (1,219)         1:A:51:LEU:HD23         1:A:74:GLU:H         8         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG11         1:A:117:ASN:H         8         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG12         1:A:117:ASN:H         8         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         8         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG11         1:A:117:ASN:H         15         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG12         1:A:117:ASN:H         15         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         15         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG11         1:A:117:ASN:H         17         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG11         1:A:117:ASN:H         17         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         17         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H	(1,222)	1:A:71:ILE:HD13	1:A:140:LEU:HD21	9	0.14
(1,219)         1:A:51:LEU:HD21         1:A:74:GLU:H         8         0.14           (1,219)         1:A:51:LEU:HD22         1:A:74:GLU:H         8         0.14           (1,219)         1:A:51:LEU:HD23         1:A:74:GLU:H         8         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG11         1:A:117:ASN:H         8         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG12         1:A:117:ASN:H         8         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         8         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG11         1:A:117:ASN:H         15         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG12         1:A:117:ASN:H         15         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         15         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG11         1:A:117:ASN:H         17         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG12         1:A:117:ASN:H         17         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         17         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         17         0.14           (1,19)         1:A:124:VAL:HG13         1:A:127:HIS:H	(1,222)	1:A:71:ILE:HD13	1:A:140:LEU:HD22	9	0.14
(1,219)         1:A:51:LEU:HD22         1:A:74:GLU:H         8         0.14           (1,219)         1:A:51:LEU:HD23         1:A:74:GLU:H         8         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG11         1:A:117:ASN:H         8         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG12         1:A:117:ASN:H         8         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         8         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG11         1:A:117:ASN:H         15         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG12         1:A:117:ASN:H         15         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         15         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         15         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG12         1:A:117:ASN:H         17         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         17         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         17         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         17         0.14           (1,19)         1:A:124:VAL:HG13         1:A:127:HIS:H	(1,222)	1:A:71:ILE:HD13	1:A:140:LEU:HD23	9	0.14
(1,219)         1:A:51:LEU:HD23         1:A:74:GLU:H         8         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG11         1:A:117:ASN:H         8         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG12         1:A:117:ASN:H         8         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         8         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG11         1:A:117:ASN:H         15         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG12         1:A:117:ASN:H         15         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         15         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG11         1:A:117:ASN:H         17         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG12         1:A:117:ASN:H         17         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         17         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         17         0.14           (1,193)         1:A:124:VAL:HG13         1:A:127:HIS:H         4         0.14           (1,19)         1:A:124:VAL:HG13         1:A:127:HIS:H         4         0.14           (1,148)         1:A:44:ASP:H         1:A:129:LEU:HD21	(1,219)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:74:GLU:H	8	0.14
(1,192)         1:A:19:VAL:HG11         1:A:117:ASN:H         8         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG12         1:A:117:ASN:H         8         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         8         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG11         1:A:117:ASN:H         15         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG12         1:A:117:ASN:H         15         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         15         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG11         1:A:117:ASN:H         17         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG12         1:A:117:ASN:H         17         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         17         0.14           (1,193)         1:A:124:VAL:HG13         1:A:127:HIS:H         4         0.14           (1,194)         1:A:124:VAL:HG13         1:A:127:HIS:H <td>(1,219)</td> <td>1:A:51:LEU:HD22</td> <td>1:A:74:GLU:H</td> <td>8</td> <td>0.14</td>	(1,219)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:74:GLU:H	8	0.14
(1,192)         1:A:19:VAL:HG12         1:A:117:ASN:H         8         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         8         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG11         1:A:117:ASN:H         15         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG12         1:A:117:ASN:H         15         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         15         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG11         1:A:117:ASN:H         17         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG12         1:A:117:ASN:H         17         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         17         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         17         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:127:HIS:H         4         0.14           (1,192)         1:A:124:VAL:HG13         1:A:127:HIS:H         4         0.14           (1,19)         1:A:124:VAL:HG13         1:A:127:HIS:H         4         0.14           (1,19)         1:A:124:VAL:HG13         1:A:127:HIS:H         4         0.14           (1,148)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD21	(1,219)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:74:GLU:H	8	0.14
(1,192)         1:A:19:VAL:HG12         1:A:117:ASN:H         8         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         8         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG11         1:A:117:ASN:H         15         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG12         1:A:117:ASN:H         15         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         17         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG11         1:A:117:ASN:H         17         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG12         1:A:117:ASN:H         17         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         17         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:127:HIS:H         4         0.14           (1,192)         1:A:124:VAL:HG13         1:A:127:HIS:H         4         0.14           (1,19)         1:A:124:VAL:HG12         1:A:127:HIS:H         4         0.14           (1,19)         1:A:124:VAL:HG13         1:A:127:HIS:H         4         0.14           (1,148)         1:A:44:ASP:H         1:A:122:ARG:H         6         0.14           (1,144)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD22	(1,192)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:H	8	0.14
(1,192)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         8         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG11         1:A:117:ASN:H         15         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG12         1:A:117:ASN:H         15         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         15         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG11         1:A:117:ASN:H         17         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG12         1:A:117:ASN:H         17         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         17         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:127:HIS:H         4         0.14           (1,192)         1:A:124:VAL:HG11         1:A:127:HIS:H         4         0.14           (1,19)         1:A:124:VAL:HG12         1:A:127:HIS:H         4         0.14           (1,19)         1:A:124:VAL:HG13         1:A:127:HIS:H         4         0.14           (1,148)         1:A:44:ASP:H         1:A:122:ARG:H         6         0.14           (1,144)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD21         18         0.14           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:VAL:H	(1,192)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:H	8	0.14
(1,192)         1:A:19:VAL:HG12         1:A:117:ASN:H         15         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         15         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG11         1:A:117:ASN:H         17         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG12         1:A:117:ASN:H         17         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         17         0.14           (1,192)         1:A:124:VAL:HG11         1:A:127:HIS:H         4         0.14           (1,19)         1:A:124:VAL:HG12         1:A:127:HIS:H         4         0.14           (1,19)         1:A:124:VAL:HG13         1:A:127:HIS:H         4         0.14           (1,19)         1:A:124:VAL:HG13         1:A:127:HIS:H         4         0.14           (1,19)         1:A:124:VAL:HG13         1:A:127:HIS:H         4         0.14           (1,14)         1:A:124:VAL:HG13         1:A:122:ARG:H         6         0.14           (1,148)         1:A:44:ASP:H         1:A:129:LEU:HD21         18         0.14           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD22         18         0.14           (1,14)         1:A:16:GLN:H         1:A:19:VAL:H		1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:H	8	0.14
(1,192)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         15         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG11         1:A:117:ASN:H         17         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG12         1:A:117:ASN:H         17         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         17         0.14           (1,192)         1:A:124:VAL:HG11         1:A:127:HIS:H         4         0.14           (1,19)         1:A:124:VAL:HG12         1:A:127:HIS:H         4         0.14           (1,19)         1:A:124:VAL:HG13         1:A:127:HIS:H         4         0.14           (1,19)         1:A:124:VAL:HG13         1:A:127:HIS:H         4         0.14           (1,19)         1:A:124:VAL:HG13         1:A:127:HIS:H         4         0.14           (1,148)         1:A:124:VAL:HG13         1:A:122:HIS:H         6         0.14           (1,148)         1:A:44:ASP:H         1:A:122:ARG:H         6         0.14           (1,149)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD21         18         0.14           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD22         18         0.14           (1,14)         1:A:16:GLN:H         1:A:19:VAL:H	(1,192)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:H	15	0.14
(1,192)         1:A:19:VAL:HG11         1:A:117:ASN:H         17         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG12         1:A:117:ASN:H         17         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         17         0.14           (1,19)         1:A:124:VAL:HG11         1:A:127:HIS:H         4         0.14           (1,19)         1:A:124:VAL:HG12         1:A:127:HIS:H         4         0.14           (1,19)         1:A:124:VAL:HG13         1:A:127:HIS:H         4         0.14           (1,19)         1:A:124:VAL:HG13         1:A:127:HIS:H         4         0.14           (1,19)         1:A:124:VAL:HG13         1:A:127:HIS:H         4         0.14           (1,14)         1:A:14:A3         1:A:122:ARG:H         6         0.14           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD21         18         0.14           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD22         18         0.14           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:19:VAL:H         18         0.14           (1,132)         1:A:16:GLN:H         1:A:19:VAL:H         18         0.14           (1,131)         1:A:17:TYR:H         1:A:19:VAL:H         16	(1,192)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:H	15	0.14
(1,192)         1:A:19:VAL:HG12         1:A:117:ASN:H         17         0.14           (1,192)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         17         0.14           (1,19)         1:A:124:VAL:HG11         1:A:127:HIS:H         4         0.14           (1,19)         1:A:124:VAL:HG12         1:A:127:HIS:H         4         0.14           (1,19)         1:A:124:VAL:HG13         1:A:127:HIS:H         4         0.14           (1,19)         1:A:124:VAL:HG13         1:A:127:HIS:H         4         0.14           (1,14)         1:A:124:VAL:HG13         1:A:127:HIS:H         6         0.14           (1,148)         1:A:44:ASP:H         1:A:122:ARG:H         6         0.14           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD21         18         0.14           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD22         18         0.14           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:19:VAL:H         18         0.14           (1,132)         1:A:16:GLN:H         1:A:19:VAL:H         10         0.14           (1,131)         1:A:17:TYR:H         1:A:19:VAL:H         16         0.14           (1,131)         1:A:17:TYR:H         1:A:19:VAL:H         20	(1,192)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:H	15	0.14
(1,192)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         17         0.14           (1,19)         1:A:124:VAL:HG11         1:A:127:HIS:H         4         0.14           (1,19)         1:A:124:VAL:HG12         1:A:127:HIS:H         4         0.14           (1,19)         1:A:124:VAL:HG13         1:A:127:HIS:H         4         0.14           (1,19)         1:A:124:VAL:HG13         1:A:127:HIS:H         4         0.14           (1,148)         1:A:44:ASP:H         1:A:122:ARG:H         6         0.14           (1,144)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD21         18         0.14           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD22         18         0.14           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD23         18         0.14           (1,132)         1:A:16:GLN:H         1:A:19:VAL:H         18         0.14           (1,131)         1:A:17:TYR:H         1:A:19:VAL:H         16         0.14           (1,131)         1:A:17:TYR:H         1:A:19:VAL:H         16         0.14           (1,1257)         1:A:102:VAL:H         1:A:88:THR:H         17         0.14	(1,192)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:H	17	0.14
(1,19)       1:A:124:VAL:HG11       1:A:127:HIS:H       4       0.14         (1,19)       1:A:124:VAL:HG12       1:A:127:HIS:H       4       0.14         (1,19)       1:A:124:VAL:HG13       1:A:127:HIS:H       4       0.14         (1,148)       1:A:44:ASP:H       1:A:122:ARG:H       6       0.14         (1,14)       1:A:127:HIS:H       1:A:129:LEU:HD21       18       0.14         (1,14)       1:A:127:HIS:H       1:A:129:LEU:HD22       18       0.14         (1,14)       1:A:127:HIS:H       1:A:129:LEU:HD23       18       0.14         (1,132)       1:A:16:GLN:H       1:A:19:VAL:H       18       0.14         (1,131)       1:A:17:TYR:H       1:A:19:VAL:H       10       0.14         (1,131)       1:A:17:TYR:H       1:A:19:VAL:H       16       0.14         (1,131)       1:A:17:TYR:H       1:A:19:VAL:H       20       0.14         (1,1257)       1:A:102:VAL:H       1:A:88:THR:H       17       0.14	(1,192)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:H	17	0.14
(1,19)         1:A:124:VAL:HG12         1:A:127:HIS:H         4         0.14           (1,19)         1:A:124:VAL:HG13         1:A:127:HIS:H         4         0.14           (1,148)         1:A:44:ASP:H         1:A:122:ARG:H         6         0.14           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD21         18         0.14           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD22         18         0.14           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD23         18         0.14           (1,132)         1:A:16:GLN:H         1:A:19:VAL:H         18         0.14           (1,131)         1:A:17:TYR:H         1:A:19:VAL:H         10         0.14           (1,131)         1:A:17:TYR:H         1:A:19:VAL:H         16         0.14           (1,131)         1:A:17:TYR:H         1:A:19:VAL:H         20         0.14           (1,135)         1:A:102:VAL:H         1:A:88:THR:H         17         0.14	(1,192)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:H	17	0.14
(1,19)         1:A:124:VAL:HG13         1:A:127:HIS:H         4         0.14           (1,148)         1:A:44:ASP:H         1:A:122:ARG:H         6         0.14           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD21         18         0.14           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD22         18         0.14           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD23         18         0.14           (1,132)         1:A:16:GLN:H         1:A:19:VAL:H         18         0.14           (1,131)         1:A:17:TYR:H         1:A:19:VAL:H         10         0.14           (1,131)         1:A:17:TYR:H         1:A:19:VAL:H         16         0.14           (1,131)         1:A:17:TYR:H         1:A:19:VAL:H         20         0.14           (1,1257)         1:A:102:VAL:H         1:A:88:THR:H         17         0.14	(1,19)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:127:HIS:H	4	0.14
(1,148)       1:A:44:ASP:H       1:A:122:ARG:H       6       0.14         (1,14)       1:A:127:HIS:H       1:A:129:LEU:HD21       18       0.14         (1,14)       1:A:127:HIS:H       1:A:129:LEU:HD22       18       0.14         (1,14)       1:A:127:HIS:H       1:A:129:LEU:HD23       18       0.14         (1,132)       1:A:16:GLN:H       1:A:19:VAL:H       18       0.14         (1,131)       1:A:17:TYR:H       1:A:19:VAL:H       10       0.14         (1,131)       1:A:17:TYR:H       1:A:19:VAL:H       16       0.14         (1,131)       1:A:17:TYR:H       1:A:19:VAL:H       20       0.14         (1,1257)       1:A:102:VAL:H       1:A:88:THR:H       17       0.14	(1,19)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:127:HIS:H	4	0.14
(1,14)       1:A:127:HIS:H       1:A:129:LEU:HD21       18       0.14         (1,14)       1:A:127:HIS:H       1:A:129:LEU:HD22       18       0.14         (1,14)       1:A:127:HIS:H       1:A:129:LEU:HD23       18       0.14         (1,132)       1:A:16:GLN:H       1:A:19:VAL:H       18       0.14         (1,131)       1:A:17:TYR:H       1:A:19:VAL:H       10       0.14         (1,131)       1:A:17:TYR:H       1:A:19:VAL:H       16       0.14         (1,131)       1:A:17:TYR:H       1:A:19:VAL:H       20       0.14         (1,1257)       1:A:102:VAL:H       1:A:88:THR:H       17       0.14	(1,19)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:127:HIS:H	4	0.14
(1,14)       1:A:127:HIS:H       1:A:129:LEU:HD22       18       0.14         (1,14)       1:A:127:HIS:H       1:A:129:LEU:HD23       18       0.14         (1,132)       1:A:16:GLN:H       1:A:19:VAL:H       18       0.14         (1,131)       1:A:17:TYR:H       1:A:19:VAL:H       10       0.14         (1,131)       1:A:17:TYR:H       1:A:19:VAL:H       16       0.14         (1,131)       1:A:17:TYR:H       1:A:19:VAL:H       20       0.14         (1,1257)       1:A:102:VAL:H       1:A:88:THR:H       17       0.14	(1,148)	1:A:44:ASP:H	1:A:122:ARG:H	6	0.14
(1,14)       1:A:127:HIS:H       1:A:129:LEU:HD23       18       0.14         (1,132)       1:A:16:GLN:H       1:A:19:VAL:H       18       0.14         (1,131)       1:A:17:TYR:H       1:A:19:VAL:H       10       0.14         (1,131)       1:A:17:TYR:H       1:A:19:VAL:H       16       0.14         (1,131)       1:A:17:TYR:H       1:A:19:VAL:H       20       0.14         (1,1257)       1:A:102:VAL:H       1:A:88:THR:H       17       0.14	(1,14)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD21	18	0.14
(1,132)       1:A:16:GLN:H       1:A:19:VAL:H       18       0.14         (1,131)       1:A:17:TYR:H       1:A:19:VAL:H       10       0.14         (1,131)       1:A:17:TYR:H       1:A:19:VAL:H       16       0.14         (1,131)       1:A:17:TYR:H       1:A:19:VAL:H       20       0.14         (1,131)       1:A:102:VAL:H       1:A:88:THR:H       17       0.14	(1,14)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD22	18	0.14
(1,131)       1:A:17:TYR:H       1:A:19:VAL:H       10       0.14         (1,131)       1:A:17:TYR:H       1:A:19:VAL:H       16       0.14         (1,131)       1:A:17:TYR:H       1:A:19:VAL:H       20       0.14         (1,1257)       1:A:102:VAL:H       1:A:88:THR:H       17       0.14	(1,14)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD23	18	0.14
(1,131)       1:A:17:TYR:H       1:A:19:VAL:H       16       0.14         (1,131)       1:A:17:TYR:H       1:A:19:VAL:H       20       0.14         (1,1257)       1:A:102:VAL:H       1:A:88:THR:H       17       0.14	(1,132)	1:A:16:GLN:H	1:A:19:VAL:H	18	0.14
(1,131)       1:A:17:TYR:H       1:A:19:VAL:H       20       0.14         (1,1257)       1:A:102:VAL:H       1:A:88:THR:H       17       0.14	(1,131)	1:A:17:TYR:H	1:A:19:VAL:H	10	0.14
(1,1257) 1:A:102:VAL:H 1:A:88:THR:H 17 0.14	(1,131)	1:A:17:TYR:H	1:A:19:VAL:H	16	0.14
	(1,131)	1:A:17:TYR:H	1:A:19:VAL:H	20	0.14
(1.1956) 1.A.100.CIV.H 1.A.00.VAL.H 1.4	(1,1257)	1:A:102:VAL:H	1:A:88:THR:H	17	0.14
(1,1250)  1:A:100:GLY:fi   1:A:90:VAL:fi   14   0.14	(1,1256)	1:A:100:GLY:H	1:A:90:VAL:H	14	0.14
(1,1230) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG11 2 0.14	(1,1230)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG11	2	0.14
(1,1230) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG12 2 0.14	(1,1230)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG12	2	0.14
(1,1230) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 2 0.14		1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG13	2	0.14
(1,1230) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG11 4 0.14	(1,1230)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG11	4	0.14
(1,1230) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG12 4 0.14	(1,1230)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG12	4	0.14
(1,1230) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG13 4 0.14	(1,1230)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG13	4	0.14
(1,1230) 1:A:74:GLU:H 1:A:75:VAL:HG11 10 0.14	(1,1230)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG11	10	0.14



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1230)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG12	10	0.14
(1,1230)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG13	10	0.14
(1,1230)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG11	17	0.14
(1,1230)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG12	17	0.14
(1,1230)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG13	17	0.14
(1,1219)	1:A:144:LEU:HD11	1:A:145:GLU:H	9	0.14
(1,1219)	1:A:144:LEU:HD12	1:A:145:GLU:H	9	0.14
(1,1219)	1:A:144:LEU:HD13	1:A:145:GLU:H	9	0.14
(1,1216)	1:A:140:LEU:HD11	1:A:141:PHE:H	17	0.14
(1,1216)	1:A:140:LEU:HD12	1:A:141:PHE:H	17	0.14
(1,1216)	1:A:140:LEU:HD13	1:A:141:PHE:H	17	0.14
(1,1216)	1:A:140:LEU:HD11	1:A:141:PHE:H	20	0.14
(1,1216)	1:A:140:LEU:HD12	1:A:141:PHE:H	20	0.14
(1,1216)	1:A:140:LEU:HD13	1:A:141:PHE:H	20	0.14
(1,1210)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:H	11	0.14
(1,1210)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:H	11	0.14
(1,1210)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:H	11	0.14
(1,1203)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:132:GLU:H	10	0.14
(1,1203)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:132:GLU:H	10	0.14
(1,1203)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:132:GLU:H	10	0.14
(1,1201)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD11	4	0.14
(1,1201)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD12	4	0.14
(1,1201)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD13	4	0.14
(1,1194)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD21	1	0.14
(1,1194)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD22	1	0.14
(1,1194)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD23	1	0.14
(1,1171)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:98:HIS:H	11	0.14
(1,1171)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:98:HIS:H	11	0.14
(1,1171)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:98:HIS:H	11	0.14
(1,1150)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:76:GLU:H	19	0.14
(1,1150)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:76:GLU:H	19	0.14
(1,1150)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:76:GLU:H	19	0.14
(1,1148)	1:A:76:GLU:H	1:A:99:LEU:HD21	4	0.14
(1,1148)	1:A:76:GLU:H	1:A:99:LEU:HD22	4	0.14
(1,1148)	1:A:76:GLU:H	1:A:99:LEU:HD23	4	0.14
(1,1138)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:52:PHE:H	13	0.14
(1,1138)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:52:PHE:H	13	0.14
(1,1138)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:52:PHE:H	13	0.14
(1,1133)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:51:LEU:H	2	0.14
(1,1133)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:51:LEU:H	2	0.14
(1,1133)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:51:LEU:H	2	0.14
(1,1118)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD11	19	0.14



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1118)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD12	19	0.14
(1,1118)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD13	19	0.14
(1,1114)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:24:GLY:H	3	0.14
(1,1114)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:24:GLY:H	3	0.14
(1,1114)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:24:GLY:H	3	0.14
(1,1114)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:24:GLY:H	4	0.14
(1,1114)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:24:GLY:H	4	0.14
(1,1114)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:24:GLY:H	4	0.14
(1,1113)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:23:ASN:H	3	0.14
(1,1113)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:23:ASN:H	3	0.14
(1,1113)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:23:ASN:H	3	0.14
(1,1113)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:23:ASN:H	6	0.14
(1,1113)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:23:ASN:H	6	0.14
(1,1113)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:23:ASN:H	6	0.14
(1,1109)	1:A:16:GLN:H	1:A:46:VAL:HG11	12	0.14
(1,1109)	1:A:16:GLN:H	1:A:46:VAL:HG12	12	0.14
(1,1109)	1:A:16:GLN:H	1:A:46:VAL:HG13	12	0.14
(1,1107)	1:A:45:ILE:HD11	1:A:46:VAL:H	11	0.14
(1,1107)	1:A:45:ILE:HD12	1:A:46:VAL:H	11	0.14
(1,1107)	1:A:45:ILE:HD13	1:A:46:VAL:H	11	0.14
(1,1099)	1:A:134:TYR:H	1:A:138:LEU:HD21	5	0.14
(1,1099)	1:A:134:TYR:H	1:A:138:LEU:HD22	5	0.14
(1,1099)	1:A:134:TYR:H	1:A:138:LEU:HD23	5	0.14
(1,1087)	1:A:71:ILE:H	1:A:75:VAL:HG11	10	0.14
(1,1087)	1:A:71:ILE:H	1:A:75:VAL:HG12	10	0.14
(1,1087)	1:A:71:ILE:H	1:A:75:VAL:HG13	10	0.14
(1,1085)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:100:GLY:H	4	0.14
(1,1085)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:100:GLY:H	4	0.14
(1,1085)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:100:GLY:H	4	0.14
(1,1085)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:100:GLY:H	5	0.14
(1,1085)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:100:GLY:H	5	0.14
(1,1085)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:100:GLY:H	5	0.14
(1,1083)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:120:ALA:H	14	0.14
(1,1083)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:120:ALA:H	14	0.14
(1,1083)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:120:ALA:H	14	0.14
(1,1083)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:120:ALA:H	16	0.14
(1,1083)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:120:ALA:H	16	0.14
(1,1083)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:120:ALA:H	16	0.14
(1,1075)	1:A:46:VAL:HG11	1:A:47:SER:H	17	0.14
(1,1075)	1:A:46:VAL:HG12	1:A:47:SER:H	17	0.14
(1,1075)	1:A:46:VAL:HG13	1:A:47:SER:H	17	0.14
(1,1064)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD21	4	0.14



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

(1,1064) (1,1064)	1. A . 100. A T A . I I			Violation (Å)
(1,1064)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD22	4	0.14
1 \ /	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD23	4	0.14
(1,1064)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD21	20	0.14
(1,1064)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD22	20	0.14
(1,1064)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD23	20	0.14
(1,1061)	1:A:86:ILE:H	1:A:86:ILE:HD11	4	0.14
(1,1061)	1:A:86:ILE:H	1:A:86:ILE:HD12	4	0.14
(1,1061)	1:A:86:ILE:H	1:A:86:ILE:HD13	4	0.14
(1,1061)	1:A:86:ILE:H	1:A:86:ILE:HD11	9	0.14
(1,1061)	1:A:86:ILE:H	1:A:86:ILE:HD12	9	0.14
(1,1061)	1:A:86:ILE:H	1:A:86:ILE:HD13	9	0.14
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD21	17	0.14
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD22	17	0.14
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD23	17	0.14
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD21	17	0.14
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD22	17	0.14
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD23	17	0.14
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD21	17	0.14
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD22	17	0.14
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD23	17	0.14
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD11	7	0.14
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD12	7	0.14
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD13	7	0.14
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD11	7	0.14
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD12	7	0.14
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD13	7	0.14
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD11	7	0.14
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD12	7	0.14
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD13	7	0.14
(1,1011)	1:A:41:LEU:H	1:A:126:LYS:H	7	0.14
(1,1011)	1:A:41:LEU:H	1:A:126:LYS:H	9	0.14
(1,992)	1:A:103:PHE:H	1:A:114:TYR:H	9	0.13
(1,990)	1:A:103:PHE:H	1:A:105:ASP:H	5	0.13
(1,952)	1:A:32:GLU:H	1:A:34:TRP:H	1	0.13
(1,948)	1:A:18:GLU:H	1:A:20:THR:H	16	0.13
(1,935)	1:A:10:LYS:H	1:A:13:ASN:H	13	0.13
(1,911)	1:A:19:VAL:H	1:A:21:GLN:H	7	0.13
(1,911)	1:A:19:VAL:H	1:A:21:GLN:H	14	0.13
(1,911)	1:A:19:VAL:H	1:A:21:GLN:H	16	0.13
(1,892)	1:A:121:LEU:HD11	1:A:122:ARG:H	18	0.13
(1,892)	1:A:121:LEU:HD12	1:A:122:ARG:H	18	0.13
(1,892)	1:A:121:LEU:HD13	1:A:122:ARG:H	18	0.13



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,880)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:13:ASN:HD21	7	0.13
(1,880)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:13:ASN:HD21	7	0.13
(1,880)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:13:ASN:HD21	7	0.13
(1,867)	1:A:71:ILE:HD11	1:A:140:LEU:HD21	18	0.13
(1,867)	1:A:71:ILE:HD11	1:A:140:LEU:HD22	18	0.13
(1,867)	1:A:71:ILE:HD11	1:A:140:LEU:HD23	18	0.13
(1,867)	1:A:71:ILE:HD12	1:A:140:LEU:HD21	18	0.13
(1,867)	1:A:71:ILE:HD12	1:A:140:LEU:HD22	18	0.13
(1,867)	1:A:71:ILE:HD12	1:A:140:LEU:HD23	18	0.13
(1,867)	1:A:71:ILE:HD13	1:A:140:LEU:HD21	18	0.13
(1,867)	1:A:71:ILE:HD13	1:A:140:LEU:HD22	18	0.13
(1,867)	1:A:71:ILE:HD13	1:A:140:LEU:HD23	18	0.13
(1,864)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:74:GLU:H	18	0.13
(1,864)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:74:GLU:H	18	0.13
(1,864)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:74:GLU:H	18	0.13
(1,84)	1:A:10:LYS:H	1:A:12:LEU:H	4	0.13
(1,837)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:H	9	0.13
(1,837)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:H	9	0.13
(1,837)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:H	9	0.13
(1,837)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:H	16	0.13
(1,837)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:H	16	0.13
(1,837)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:H	16	0.13
(1,817)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:20:THR:H	2	0.13
(1,817)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:20:THR:H	2	0.13
(1,817)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:20:THR:H	2	0.13
(1,807)	1:A:92:SER:H	1:A:96:ASP:H	16	0.13
(1,805)	1:A:54:SER:H	1:A:56:ASP:H	18	0.13
(1,8)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:42:TYR:H	9	0.13
(1,8)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:42:TYR:H	9	0.13
(1,8)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:42:TYR:H	9	0.13
(1,8)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:42:TYR:H	17	0.13
(1,8)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:42:TYR:H	17	0.13
(1,8)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:42:TYR:H	17	0.13
(1,792)	1:A:130:LYS:H	1:A:134:TYR:H	9	0.13
(1,792)	1:A:130:LYS:H	1:A:134:TYR:H	15	0.13
(1,78)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:H	15	0.13
(1,776)	1:A:17:TYR:H	1:A:19:VAL:H	4	0.13
(1,776)	1:A:17:TYR:H	1:A:19:VAL:H	6	0.13
(1,776)	1:A:17:TYR:H	1:A:19:VAL:H	18	0.13
(1,772)	1:A:21:GLN:H	1:A:23:ASN:H	10	0.13
(1,769)	1:A:5:LYS:H	1:A:7:GLU:H	15	0.13
(1,764)	1:A:88:THR:H	1:A:102:VAL:H	2	0.13



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

(1,729) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 4 0.13 (1,723) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:H 15 0.13 (1,712) 1:A:117:ASN:H 1:A:117:ASN:HD22 18 0.13 (1,705) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD11 20 0.13 (1,705) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD12 20 0.13 (1,705) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD12 20 0.13 (1,702) 1:A:112:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD13 20 0.13 (1,702) 1:A:112:LEU:HD11 1:A:138:LEU:HD13 20 0.13 (1,702) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H 13 0.13 (1,702) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:13:ARG:H 13 0.13 (1,698) 1:A:129:LEU:H 1:A:138:LEU:HD21 3 0.13 (1,698) 1:A:129:LEU:H 1:A:138:LEU:HD22 3 0.13 (1,698) 1:A:129:LEU:H 1:A:138:LEU:HD22 3 0.13 (1,698) 1:A:129:LEU:H 1:A:138:LEU:HD23 3 0.13 (1,692) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:15:CYS:H 7 0.13 (1,692) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:15:CYS:H 7 0.13 (1,692) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:15:CYS:H 7 0.13 (1,692) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:15:CYS:H 8 0.13 (1,692) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:15:CYS:H 8 0.13 (1,692) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:15:CYS:H 8 0.13 (1,692) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:15:CYS:H 8 0.13 (1,692) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:15:CYS:H 8 0.13 (1,685) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:15:CYS:H 8 0.13 (1,685) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:13:SCER:H 17 0.13 (1,685) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:97:SER:H 17 0.13 (1,685) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:97:SER:H 17 0.13 (1,682) 1:A:9:ILE:HD11 1:A:13:ASN:HD21 8 0.13 (1,682) 1:A:9:ILE:HD11 1:A:13:ASN:HD21 8 0.13 (1,682) 1:A:9:ILE:HD11 1:A:13:ASN:HD21 8 0.13 (1,671) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD11 1 0.13 (1,669) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:13:4*TYR:H 3 0.13 (1,669) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:13:4*TYR:H 3 0.13 (1,669) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:13:4*TYR:H 12 0.13 (1,669) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:13:4*TYR:H 12 0.13 (1,669) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:13:4*TYR:H 12 0.13 (1,669) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:13:4*TYR:H 20 0.13 (1,669) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:13:4*TYR:H 20 0.13	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,712) 1:A:117:ASN:H 1:A:117:ASN:HD22 18 0.13 (1,705) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD11 20 0.13 (1,705) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD12 20 0.13 (1,705) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD13 20 0.13 (1,705) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD13 20 0.13 (1,702) 1:A:112:LEU:HD11 1:A:113:ARG:H 13 0.13 (1,702) 1:A:112:LEU:HD12 1:A:113:ARG:H 13 0.13 (1,702) 1:A:112:LEU:HD12 1:A:113:ARG:H 13 0.13 (1,702) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:13:ARG:H 13 0.13 (1,698) 1:A:129:LEU:H 1:A:138:LEU:HD21 3 0.13 (1,698) 1:A:129:LEU:H 1:A:138:LEU:HD21 3 0.13 (1,698) 1:A:129:LEU:H 1:A:138:LEU:HD22 3 0.13 (1,698) 1:A:129:LEU:H 1:A:138:LEU:HD23 3 0.13 (1,692) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:15:CYS:H 7 0.13 (1,692) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:115:CYS:H 8 0.13 (1,692) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:115:CYS:H 8 0.13 (1,692) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:115:CYS:H 8 0.13 (1,692) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:115:CYS:H 8 0.13 (1,685) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:97:SER:H 17 0.13 (1,685) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:97:SER:H 17 0.13 (1,685) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:97:SER:H 17 0.13 (1,685) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:97:SER:H 17 0.13 (1,682) 1:A:9:ILE:HD11 1:A:13:ASN:HD21 8 0.13 (1,671) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD11 1 0.13 (1,671) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD12 1 0.13 (1,671) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD11 1 0.13 (1,669) 1:A:129:LEU:HD11 1 1:A:134:TYR:H 3 0.13 (1,669) 1:A:129:LEU:HD11 1 1:	(1,729)	1:A:10:LYS:H	1:A:12:LEU:H	4	0.13
(1,705) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD11 20 0.13 (1,705) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD12 20 0.13 (1,702) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD13 20 0.13 (1,702) 1:A:112:LEU:HD11 1:A:13:ARG:H 13 0.13 (1,702) 1:A:112:LEU:HD11 1:A:13:ARG:H 13 0.13 (1,702) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H 13 0.13 (1,602) 1:A:129:LEU:H 1:A:138:LEU:HD21 3 0.13 (1,698) 1:A:129:LEU:H 1:A:138:LEU:HD21 3 0.13 (1,698) 1:A:129:LEU:H 1:A:138:LEU:HD22 3 0.13 (1,698) 1:A:129:LEU:H 1:A:138:LEU:HD22 3 0.13 (1,698) 1:A:129:LEU:H 1:A:138:LEU:HD23 3 0.13 (1,699) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:115:CYS:H 7 0.13 (1,692) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:115:CYS:H 7 0.13 (1,692) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:115:CYS:H 7 0.13 (1,692) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:115:CYS:H 8 0.13 (1,692) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:115:CYS:H 8 0.13 (1,692) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:115:CYS:H 8 0.13 (1,692) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:115:CYS:H 8 0.13 (1,692) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:115:CYS:H 8 0.13 (1,692) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:115:CYS:H 8 0.13 (1,692) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:115:CYS:H 8 0.13 (1,685) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:97:SER:H 17 0.13 (1,685) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:97:SER:H 17 0.13 (1,685) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:97:SER:H 17 0.13 (1,685) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:13:ASN:HD21 8 0.13 (1,682) 1:A:9:ILE:HD11 1:A:13:ASN:HD21 8 0.13 (1,671) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD11 1 0.13 (1,669) 1:A:129:LEU:HD11 1 1:A:134:TYR:H 3 0.13 (1,669) 1:A:129:LEU:HD11 1 1	(1,723)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:H	15	0.13
(1,705) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD12 20 0.13 (1,705) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD13 20 0.13 (1,702) 1:A:112:LEU:HD11 1:A:13:ARG:H 13 0.13 (1,702) 1:A:112:LEU:HD12 1:A:113:ARG:H 13 0.13 (1,702) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H 13 0.13 (1,702) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H 13 0.13 (1,698) 1:A:129:LEU:H 1:A:138:LEU:HD21 3 0.13 (1,698) 1:A:129:LEU:H 1:A:138:LEU:HD22 3 0.13 (1,698) 1:A:129:LEU:H 1:A:138:LEU:HD22 3 0.13 (1,698) 1:A:129:LEU:H 1:A:138:LEU:HD23 3 0.13 (1,699) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:115:CYS:H 7 0.13 (1,692) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:115:CYS:H 7 0.13 (1,692) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:115:CYS:H 7 0.13 (1,692) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:115:CYS:H 8 0.13 (1,692) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:115:CYS:H 8 0.13 (1,692) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:115:CYS:H 8 0.13 (1,692) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:115:CYS:H 8 0.13 (1,692) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:115:CYS:H 8 0.13 (1,685) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:97:SER:H 17 0.13 (1,682) 1:A:9:ILE:HD11 1:A:13:ASN:HD21 8 0.13 (1,682) 1:A:9:ILE:HD12 1:A:13:ASN:HD21 8 0.13 (1,682) 1:A:9:ILE:HD11 1:A:13:ASN:HD21 8 0.13 (1,682) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:13:ASN:HD21 8 0.13 (1,671) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD11 1 0.13 (1,669) 1:A:129:LEU:HD11 1 1:A:134:TYR:H 3 0.13 (1,669) 1:A:129:LEU:HD11 1 1:A:134:TYR:H 3 0.13 (1,669) 1:A:129:LEU:HD11 1 1:A:134:TYR:H 12 0.13 (1,669) 1:A:129:LEU:HD11 1 1:A:134:TYR:H 12 0.13 (1,669) 1:A:129:LEU	(1,712)	1:A:117:ASN:H	1:A:117:ASN:HD22	18	0.13
(1,705) 1:A:135:GLU:H 1:A:138:LEU:HD13 20 0.13 (1,702) 1:A:112:LEU:HD11 1:A:113:ARG:H 13 0.13 (1,702) 1:A:112:LEU:HD12 1:A:113:ARG:H 13 0.13 (1,702) 1:A:112:LEU:HD12 1:A:113:ARG:H 13 0.13 (1,698) 1:A:129:LEU:H 1:A:138:LEU:HD21 3 0.13 (1,698) 1:A:129:LEU:H 1:A:138:LEU:HD22 3 0.13 (1,698) 1:A:129:LEU:H 1:A:138:LEU:HD23 3 0.13 (1,698) 1:A:129:LEU:H 1:A:138:LEU:HD23 3 0.13 (1,692) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:115:CYS:H 7 0.13 (1,692) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:115:CYS:H 7 0.13 (1,692) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:115:CYS:H 7 0.13 (1,692) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:115:CYS:H 8 0.13 (1,692) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:115:CYS:H 8 0.13 (1,692) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:115:CYS:H 8 0.13 (1,692) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:115:CYS:H 8 0.13 (1,692) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:115:CYS:H 8 0.13 (1,685) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:97:SER:H 17 0.13 (1,685) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:97:SER:H 17 0.13 (1,685) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:97:SER:H 17 0.13 (1,685) 1:A:9:ILE:HD11 1:A:13:ASN:HD21 8 0.13 (1,682) 1:A:9:ILE:HD11 1:A:13:ASN:HD21 8 0.13 (1,682) 1:A:9:ILE:HD12 1:A:13:ASN:HD21 8 0.13 (1,682) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:13:ASN:HD21 8 0.13 (1,671) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD11 1 0.13 (1,671) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD13 1 0.13 (1,671) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD13 1 0.13 (1,671) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD11 1 1 0.13 (1,671) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD13 1 0.13 (1,671) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD11 1 1 0.13 (1,671) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD11 1 1 0.13 (1,669) 1:A:129:LEU:HD11 1 1:A:134:TYR:H 3 0.13 (1,669) 1:A:129:LEU:HD11 1 1:A:134:TYR:H 3 0.13 (1,669) 1:	(1,705)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD11	20	0.13
(1,702) 1:A:112:LEU:HD11 1:A:113:ARG:H 13 0.13 (1,702) 1:A:112:LEU:HD12 1:A:113:ARG:H 13 0.13 (1,702) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H 13 0.13 (1,608) 1:A:129:LEU:H 1:A:138:LEU:HD12 3 0.13 (1,698) 1:A:129:LEU:H 1:A:138:LEU:HD12 3 0.13 (1,698) 1:A:129:LEU:H 1:A:138:LEU:HD12 3 0.13 (1,698) 1:A:129:LEU:H 1:A:138:LEU:HD22 3 0.13 (1,698) 1:A:129:LEU:H 1:A:138:LEU:HD23 3 0.13 (1,692) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:115:CYS:H 7 0.13 (1,692) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:115:CYS:H 7 0.13 (1,692) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:115:CYS:H 7 0.13 (1,692) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:115:CYS:H 8 0.13 (1,692) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:115:CYS:H 8 0.13 (1,692) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:115:CYS:H 8 0.13 (1,692) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:115:CYS:H 8 0.13 (1,692) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:115:CYS:H 8 0.13 (1,685) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:97:SER:H 17 0.13 (1,682) 1:A:9:ILE:HD11 1:A:13:ASN:HD21 8 0.13 (1,682) 1:A:9:ILE:HD11 1:A:13:ASN:HD21 8 0.13 (1,682) 1:A:9:ILE:HD11 1:A:13:ASN:HD21 8 0.13 (1,682) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:13:ASN:HD21 8 0.13 (1,671) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD11 1 0.13 (1,671) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD11 1 0.13 (1,671) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD11 1 0.13 (1,671) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD11 8 0.13 (1,671) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD11 8 0.13 (1,671) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD11 1 9 0.13 (1,671) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD11 1 1 0.13 (1,669) 1:A:129:LEU:HD11 1 1:A:134:TYR:H 3 0.13 (1,669) 1:A:129:LEU:HD11 1 1:A:134:TYR:H 3 0.13 (	(1,705)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD12	20	0.13
(1,702) 1:A:112:LEU:HD12 1:A:113:ARG:H 13 0.13 (1,702) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H 13 0.13 (1,698) 1:A:129:LEU:H 1:A:138:LEU:HD21 3 0.13 (1,698) 1:A:129:LEU:H 1:A:138:LEU:HD22 3 0.13 (1,698) 1:A:129:LEU:H 1:A:138:LEU:HD22 3 0.13 (1,698) 1:A:129:LEU:H 1:A:138:LEU:HD22 3 0.13 (1,698) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:138:LEU:HD23 3 0.13 (1,692) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:115:CYS:H 7 0.13 (1,692) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:115:CYS:H 7 0.13 (1,692) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:115:CYS:H 7 0.13 (1,692) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:115:CYS:H 8 0.13 (1,692) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:115:CYS:H 8 0.13 (1,692) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:115:CYS:H 8 0.13 (1,692) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:115:CYS:H 8 0.13 (1,692) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:115:CYS:H 8 0.13 (1,685) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:97:SER:H 17 0.13 (1,685) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:97:SER:H 17 0.13 (1,685) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:97:SER:H 17 0.13 (1,685) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:97:SER:H 17 0.13 (1,682) 1:A:9:ILE:HD11 1:A:13:ASN:HD21 8 0.13 (1,682) 1:A:9:ILE:HD12 1:A:13:ASN:HD21 8 0.13 (1,671) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD11 1 0.13 (1,671) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD11 1 0.13 (1,671) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD11 1 0.13 (1,671) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD11 8 0.13 (1,671) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD11 8 0.13 (1,671) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD11 1 0.13 (1,669) 1:A:129:LEU:HD11 1 1:A:134:TYR:H 3 0.13 (1,669) 1:A:129:LEU:HD11 1 1:A:134:TYR:H 3 0.13 (1,669) 1:A:129:LEU:HD11 1 1:A:134:TYR:H 3 0.13 (1,669) 1:A:129:LEU:HD11 1 1:A:134:TYR:H 12 0.13 (1,669) 1:A:	(1,705)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD13	20	0.13
(1,702) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H 13 0.13 (1,698) 1:A:129:LEU:H 1:A:138:LEU:HD21 3 0.13 (1,698) 1:A:129:LEU:H 1:A:138:LEU:HD22 3 0.13 (1,698) 1:A:29:LEU:H 1:A:138:LEU:HD22 3 0.13 (1,698) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:138:LEU:HD23 3 0.13 (1,692) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:115:CYS:H 7 0.13 (1,692) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:115:CYS:H 7 0.13 (1,692) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:115:CYS:H 7 0.13 (1,692) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:115:CYS:H 8 0.13 (1,692) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:115:CYS:H 8 0.13 (1,692) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:115:CYS:H 8 0.13 (1,692) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:115:CYS:H 8 0.13 (1,692) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:115:CYS:H 8 0.13 (1,685) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:97:SER:H 17 0.13 (1,685) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:97:SER:H 17 0.13 (1,685) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:97:SER:H 17 0.13 (1,685) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:97:SER:H 17 0.13 (1,682) 1:A:9:ILE:HD11 1:A:13:ASN:HD21 8 0.13 (1,682) 1:A:9:ILE:HD12 1:A:13:ASN:HD21 8 0.13 (1,682) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:13:ASN:HD21 8 0.13 (1,682) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:13:ASN:HD21 8 0.13 (1,671) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD11 1 0.13 (1,671) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD11 1 0.13 (1,671) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD12 1 0.13 (1,671) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD11 8 0.13 (1,671) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD11 8 0.13 (1,671) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD11 8 0.13 (1,671) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD11 1 0.13 (1,669) 1:A:129:LEU:HD11 1 1:A:134:TYR:H 3 0.13 (1,669) 1:A:129:LEU:HD11 1 1:A	(1,702)	1:A:112:LEU:HD11	1:A:113:ARG:H	13	0.13
(1,698)         1:A:129:LEU:H         1:A:138:LEU:HD21         3         0.13           (1,698)         1:A:129:LEU:H         1:A:138:LEU:HD22         3         0.13           (1,698)         1:A:129:LEU:H         1:A:138:LEU:HD23         3         0.13           (1,698)         1:A:190:VAL:HG11         1:A:15:CYS:H         7         0.13           (1,692)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:115:CYS:H         7         0.13           (1,692)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:115:CYS:H         8         0.13           (1,692)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:115:CYS:H         8         0.13           (1,692)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:115:CYS:H         8         0.13           (1,692)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:115:CYS:H         8         0.13           (1,692)         1:A:40:VAL:HG12         1:A:97:SER:H         17         0.13           (1,685)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:97:SER:H         17         0.13           (1,685)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:97:SER:H         17         0.13           (1,685)         1:A:49:ILE:HD11         1:A:13:ASN:HD21         8         0.13           (1,682)         1:A:91:LE:HD13         1:A:313:ASN:HD21	(1,702)	1:A:112:LEU:HD12	1:A:113:ARG:H	13	0.13
(1,698)         1:A:129:LEU:H         1:A:138:LEU:HD22         3         0.13           (1,698)         1:A:129:LEU:H         1:A:138:LEU:HD23         3         0.13           (1,692)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:115:CYS:H         7         0.13           (1,692)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:115:CYS:H         7         0.13           (1,692)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:115:CYS:H         8         0.13           (1,692)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:115:CYS:H         8         0.13           (1,692)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:115:CYS:H         8         0.13           (1,692)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:115:CYS:H         8         0.13           (1,692)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:115:CYS:H         8         0.13           (1,692)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:97:SER:H         17         0.13           (1,685)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:97:SER:H         17         0.13           (1,685)         1:A:49:ILE:HD11         1:A:13:ASN:HD21         8         0.13           (1,682)         1:A:9:ILE:HD12         1:A:13:ASN:HD21         8         0.13           (1,682)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:129:ILE:HD11	(1,702)	1:A:112:LEU:HD13	1:A:113:ARG:H	13	0.13
(1,698)         1:A:129:LEU:H         1:A:138:LEU:HD23         3         0.13           (1,692)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:115:CYS:H         7         0.13           (1,692)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:115:CYS:H         7         0.13           (1,692)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:115:CYS:H         7         0.13           (1,692)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:115:CYS:H         8         0.13           (1,692)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:115:CYS:H         8         0.13           (1,692)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:15:CYS:H         8         0.13           (1,682)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:97:SER:H         17         0.13           (1,685)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:97:SER:H         17         0.13           (1,685)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:97:SER:H         17         0.13           (1,685)         1:A:49:ILE:HD11         1:A:13:ASN:HD21         8         0.13           (1,682)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:13:ASN:HD21         8         0.13           (1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD11         1         0.13           (1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD13	(1,698)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD21	3	0.13
(1,692)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:115:CYS:H         7         0.13           (1,692)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:115:CYS:H         7         0.13           (1,692)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:115:CYS:H         7         0.13           (1,692)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:115:CYS:H         8         0.13           (1,692)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:115:CYS:H         8         0.13           (1,692)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:115:CYS:H         8         0.13           (1,685)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:97:SER:H         17         0.13           (1,685)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:97:SER:H         17         0.13           (1,685)         1:A:4:6:VAL:HG23         1:A:97:SER:H         17         0.13           (1,682)         1:A:9:ILE:HD11         1:A:13:ASN:HD21         8         0.13           (1,682)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:13:13:ASN:HD21	(1,698)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD22	3	0.13
(1,692)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:115:CYS:H         7         0.13           (1,692)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:115:CYS:H         7         0.13           (1,692)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:115:CYS:H         8         0.13           (1,692)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:115:CYS:H         8         0.13           (1,692)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:15:CYS:H         8         0.13           (1,692)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:15:CYS:H         8         0.13           (1,692)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:115:CYS:H         8         0.13           (1,692)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:115:CYS:H         8         0.13           (1,685)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:97:SER:H         17         0.13           (1,685)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:97:SER:H         17         0.13           (1,685)         1:A:4:6:VAL:HG23         1:A:97:SER:H         17         0.13           (1,685)         1:A:4:1:HD12         1:A:13:ASN:HD21         8         0.13           (1,682)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:13:ASN:HD21         8         0.13           (1,671)         1:A:12:12:ELYS:H         1:A:12:12:LE:HD11	(1,698)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD23	3	0.13
(1,692)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:115:CYS:H         7         0.13           (1,692)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:115:CYS:H         8         0.13           (1,692)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:115:CYS:H         8         0.13           (1,692)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:115:CYS:H         8         0.13           (1,685)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:97:SER:H         17         0.13           (1,685)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:97:SER:H         17         0.13           (1,685)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:97:SER:H         17         0.13           (1,685)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:97:SER:H         17         0.13           (1,682)         1:A:9:ILE:HD11         1:A:13:ASN:HD21         8         0.13           (1,682)         1:A:9:ILE:HD12         1:A:13:ASN:HD21         8         0.13           (1,682)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:129:ILE:HD11         1         0.13           (1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:ILE:HD11         1         0.13           (1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:ILE:HD13         1         0.13           (1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:ILE:HD11	(1,692)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:115:CYS:H	7	0.13
(1,692)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:115:CYS:H         7         0.13           (1,692)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:115:CYS:H         8         0.13           (1,692)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:115:CYS:H         8         0.13           (1,692)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:115:CYS:H         8         0.13           (1,685)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:97:SER:H         17         0.13           (1,685)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:97:SER:H         17         0.13           (1,685)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:97:SER:H         17         0.13           (1,685)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:97:SER:H         17         0.13           (1,682)         1:A:9:LE:HD11         1:A:13:ASN:HD21         8         0.13           (1,682)         1:A:9:LE:HD12         1:A:13:ASN:HD21         8         0.13           (1,682)         1:A:9:LE:HD13         1:A:129:LEU:HD11         1         0.13           (1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD11         1         0.13           (1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD13         1         0.13           (1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD11	(1,692)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:115:CYS:H	7	0.13
(1,692)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:115:CYS:H         8         0.13           (1,692)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:115:CYS:H         8         0.13           (1,685)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:97:SER:H         17         0.13           (1,685)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:97:SER:H         17         0.13           (1,685)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:97:SER:H         17         0.13           (1,682)         1:A:9:ILE:HD11         1:A:13:ASN:HD21         8         0.13           (1,682)         1:A:9:ILE:HD12         1:A:13:ASN:HD21         8         0.13           (1,682)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:13:ASN:HD21         8         0.13           (1,682)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:129:ILEU:HD11         1         0.13           (1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD12         1         0.13           (1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD11         8         0.13           (1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD11         8         0.13           (1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD12         8         0.13           (1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD11 <td>(1,692)</td> <td>1:A:90:VAL:HG13</td> <td>1:A:115:CYS:H</td> <td>7</td> <td>0.13</td>	(1,692)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:115:CYS:H	7	0.13
(1,692)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:115:CYS:H         8         0.13           (1,685)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:97:SER:H         17         0.13           (1,685)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:97:SER:H         17         0.13           (1,685)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:97:SER:H         17         0.13           (1,682)         1:A:9:ILE:HD11         1:A:13:ASN:HD21         8         0.13           (1,682)         1:A:9:ILE:HD12         1:A:13:ASN:HD21         8         0.13           (1,682)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:13:ASN:HD21         8         0.13           (1,682)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:13:ASN:HD21         8         0.13           (1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD11         1         0.13           (1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD13         1         0.13           (1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD11         8         0.13           (1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD11         8         0.13           (1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD12         8         0.13           (1,671)         1:A:129:LEU:HD13         1:A:129:LEU:HD13 </td <td>(1,692)</td> <td>1:A:90:VAL:HG11</td> <td>1:A:115:CYS:H</td> <td>8</td> <td>0.13</td>	(1,692)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:115:CYS:H	8	0.13
(1,685)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:97:SER:H         17         0.13           (1,685)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:97:SER:H         17         0.13           (1,685)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:97:SER:H         17         0.13           (1,682)         1:A:9:ILE:HD11         1:A:13:ASN:HD21         8         0.13           (1,682)         1:A:9:ILE:HD12         1:A:13:ASN:HD21         8         0.13           (1,682)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:13:ASN:HD21         8         0.13           (1,682)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:13:ASN:HD21         8         0.13           (1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD11         1         0.13           (1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD12         1         0.13           (1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD13         1         0.13           (1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD12         8         0.13           (1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD13         8         0.13           (1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD11         19         0.13           (1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD12 <td>(1,692)</td> <td>1:A:90:VAL:HG12</td> <td>1:A:115:CYS:H</td> <td>8</td> <td>0.13</td>	(1,692)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:115:CYS:H	8	0.13
(1,685)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:97:SER:H         17         0.13           (1,685)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:97:SER:H         17         0.13           (1,682)         1:A:9:ILE:HD11         1:A:13:ASN:HD21         8         0.13           (1,682)         1:A:9:ILE:HD12         1:A:13:ASN:HD21         8         0.13           (1,682)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:13:ASN:HD21         8         0.13           (1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD11         1         0.13           (1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD12         1         0.13           (1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD13         1         0.13           (1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD12         8         0.13           (1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD13         8         0.13           (1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD13         8         0.13           (1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD11         19         0.13           (1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD11         19         0.13           (1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD12<	(1,692)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:115:CYS:H	8	0.13
(1,685)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:97:SER:H         17         0.13           (1,682)         1:A:9:ILE:HD11         1:A:13:ASN:HD21         8         0.13           (1,682)         1:A:9:ILE:HD12         1:A:13:ASN:HD21         8         0.13           (1,682)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:13:ASN:HD21         8         0.13           (1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD11         1         0.13           (1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD12         1         0.13           (1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD13         1         0.13           (1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD11         8         0.13           (1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD12         8         0.13           (1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD13         8         0.13           (1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD11         19         0.13           (1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD11         19         0.13           (1,671)         1:A:129:LEU:HD11         1:A:129:LEU:HD13         19         0.13           (1,671)         1:A:117:ASN:H         1:A:129:LEU:	(1,685)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:97:SER:H	17	0.13
(1,682)         1:A:9:ILE:HD11         1:A:13:ASN:HD21         8         0.13           (1,682)         1:A:9:ILE:HD12         1:A:13:ASN:HD21         8         0.13           (1,682)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:13:ASN:HD21         8         0.13           (1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD11         1         0.13           (1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD12         1         0.13           (1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD13         1         0.13           (1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD12         8         0.13           (1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD12         8         0.13           (1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD13         8         0.13           (1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD11         19         0.13           (1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD12         19         0.13           (1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD12         19         0.13           (1,667)         1:A:117:ASN:H         1:A:117:ASN:HD22         18         0.13           (1,669)         1:A:129:LEU:HD11         1:A:134:TY	(1,685)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:97:SER:H	17	0.13
(1,682)         1:A:9:ILE:HD12         1:A:13:ASN:HD21         8         0.13           (1,682)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:13:ASN:HD21         8         0.13           (1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD11         1         0.13           (1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD12         1         0.13           (1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD13         1         0.13           (1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD11         8         0.13           (1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD12         8         0.13           (1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD13         8         0.13           (1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD11         19         0.13           (1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD12         19         0.13           (1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD13         19         0.13           (1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD13         19         0.13           (1,669)         1:A:129:LEU:HD11         1:A:134:TYR:H         3         0.13           (1,669)         1:A:129:LEU:HD13         1:A:134:TY	(1,685)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:97:SER:H	17	0.13
(1,682)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:13:ASN:HD21         8         0.13           (1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD11         1         0.13           (1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD12         1         0.13           (1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD13         1         0.13           (1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD11         8         0.13           (1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD12         8         0.13           (1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD11         19         0.13           (1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD11         19         0.13           (1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD12         19         0.13           (1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD13         19         0.13           (1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD13         19         0.13           (1,671)         1:A:129:LEU:HD11         1:A:134:TYR:H         3         0.13           (1,669)         1:A:129:LEU:HD11         1:A:134:TYR:H         3         0.13           (1,669)         1:A:129:LEU:HD11         1:A:134:T	(1,682)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:13:ASN:HD21	8	0.13
(1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD11         1         0.13           (1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD12         1         0.13           (1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD13         1         0.13           (1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD11         8         0.13           (1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD12         8         0.13           (1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD11         19         0.13           (1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD12         19         0.13           (1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD12         19         0.13           (1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD13         19         0.13           (1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:117:ASN:HD22         18         0.13           (1,669)         1:A:117:ASN:H         1:A:134:TYR:H         3         0.13           (1,669)         1:A:129:LEU:HD11         1:A:134:TYR:H         3         0.13           (1,669)         1:A:129:LEU:HD11         1:A:134:TYR:H         12         0.13           (1,669)         1:A:129:LEU:HD12         1:A:134:TYR	(1,682)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:13:ASN:HD21	8	0.13
(1,671)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD12       1       0.13         (1,671)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD13       1       0.13         (1,671)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD11       8       0.13         (1,671)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD12       8       0.13         (1,671)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD13       8       0.13         (1,671)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD11       19       0.13         (1,671)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD12       19       0.13         (1,671)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD13       19       0.13         (1,671)       1:A:117:ASN:H       1:A:129:LEU:HD13       19       0.13         (1,671)       1:A:117:ASN:H       1:A:117:ASN:HD22       18       0.13         (1,669)       1:A:117:ASN:H       1:A:117:ASN:HD22       18       0.13         (1,669)       1:A:129:LEU:HD11       1:A:134:TYR:H       3       0.13         (1,669)       1:A:129:LEU:HD13       1:A:134:TYR:H       12       0.13         (1,669)       1:A:129:LEU:HD13       1:A:134:TYR:H       12       0.13         (1,669)       1:A:129:LEU:HD13	(1,682)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:13:ASN:HD21	8	0.13
(1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD13         1         0.13           (1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD11         8         0.13           (1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD12         8         0.13           (1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD13         8         0.13           (1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD11         19         0.13           (1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD12         19         0.13           (1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD13         19         0.13           (1,671)         1:A:117:ASN:H         1:A:117:ASN:HD22         18         0.13           (1,669)         1:A:117:ASN:H         1:A:117:ASN:HD22         18         0.13           (1,669)         1:A:129:LEU:HD11         1:A:134:TYR:H         3         0.13           (1,669)         1:A:129:LEU:HD13         1:A:134:TYR:H         12         0.13           (1,669)         1:A:129:LEU:HD13         1:A:134:TYR:H         12         0.13           (1,669)         1:A:129:LEU:HD13         1:A:134:TYR:H         12         0.13           (1,669)         1:A:129:LEU:HD13         1:A:13	(1,671)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD11	1	0.13
(1,671)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD11       8       0.13         (1,671)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD12       8       0.13         (1,671)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD13       8       0.13         (1,671)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD11       19       0.13         (1,671)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD12       19       0.13         (1,671)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD13       19       0.13         (1,67)       1:A:117:ASN:H       1:A:129:LEU:HD13       19       0.13         (1,669)       1:A:129:LEU:HD11       1:A:134:TYR:H       3       0.13         (1,669)       1:A:129:LEU:HD12       1:A:134:TYR:H       3       0.13         (1,669)       1:A:129:LEU:HD11       1:A:134:TYR:H       12       0.13         (1,669)       1:A:129:LEU:HD12       1:A:134:TYR:H       12       0.13         (1,669)       1:A:129:LEU:HD13       1:A:134:TYR:H       12       0.13         (1,669)       1:A:129:LEU:HD13       1:A:134:TYR:H       12       0.13         (1,669)       1:A:129:LEU:HD11       1:A:134:TYR:H       20       0.13	(1,671)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD12	1	0.13
(1,671)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD12       8       0.13         (1,671)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD13       8       0.13         (1,671)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD11       19       0.13         (1,671)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD12       19       0.13         (1,671)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD13       19       0.13         (1,67)       1:A:117:ASN:H       1:A:117:ASN:HD22       18       0.13         (1,669)       1:A:129:LEU:HD11       1:A:134:TYR:H       3       0.13         (1,669)       1:A:129:LEU:HD12       1:A:134:TYR:H       3       0.13         (1,669)       1:A:129:LEU:HD13       1:A:134:TYR:H       12       0.13         (1,669)       1:A:129:LEU:HD12       1:A:134:TYR:H       12       0.13         (1,669)       1:A:129:LEU:HD13       1:A:134:TYR:H       12       0.13         (1,669)       1:A:129:LEU:HD13       1:A:134:TYR:H       12       0.13         (1,669)       1:A:129:LEU:HD11       1:A:134:TYR:H       20       0.13	(1,671)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD13	1	0.13
(1,671)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD13       8       0.13         (1,671)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD11       19       0.13         (1,671)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD12       19       0.13         (1,671)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD13       19       0.13         (1,67)       1:A:117:ASN:H       1:A:117:ASN:HD22       18       0.13         (1,669)       1:A:129:LEU:HD11       1:A:134:TYR:H       3       0.13         (1,669)       1:A:129:LEU:HD12       1:A:134:TYR:H       3       0.13         (1,669)       1:A:129:LEU:HD13       1:A:134:TYR:H       12       0.13         (1,669)       1:A:129:LEU:HD12       1:A:134:TYR:H       12       0.13         (1,669)       1:A:129:LEU:HD13       1:A:134:TYR:H       12       0.13         (1,669)       1:A:129:LEU:HD13       1:A:134:TYR:H       12       0.13         (1,669)       1:A:129:LEU:HD13       1:A:134:TYR:H       20       0.13	(1,671)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD11	8	0.13
(1,671)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD11       19       0.13         (1,671)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD12       19       0.13         (1,671)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD13       19       0.13         (1,67)       1:A:117:ASN:H       1:A:117:ASN:HD22       18       0.13         (1,669)       1:A:129:LEU:HD11       1:A:134:TYR:H       3       0.13         (1,669)       1:A:129:LEU:HD12       1:A:134:TYR:H       3       0.13         (1,669)       1:A:129:LEU:HD13       1:A:134:TYR:H       12       0.13         (1,669)       1:A:129:LEU:HD12       1:A:134:TYR:H       12       0.13         (1,669)       1:A:129:LEU:HD13       1:A:134:TYR:H       12       0.13         (1,669)       1:A:129:LEU:HD11       1:A:134:TYR:H       20       0.13	(1,671)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD12	8	0.13
(1,671)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD12       19       0.13         (1,671)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD13       19       0.13         (1,67)       1:A:117:ASN:H       1:A:117:ASN:HD22       18       0.13         (1,669)       1:A:129:LEU:HD11       1:A:134:TYR:H       3       0.13         (1,669)       1:A:129:LEU:HD12       1:A:134:TYR:H       3       0.13         (1,669)       1:A:129:LEU:HD13       1:A:134:TYR:H       12       0.13         (1,669)       1:A:129:LEU:HD12       1:A:134:TYR:H       12       0.13         (1,669)       1:A:129:LEU:HD13       1:A:134:TYR:H       12       0.13         (1,669)       1:A:129:LEU:HD13       1:A:134:TYR:H       12       0.13         (1,669)       1:A:129:LEU:HD11       1:A:134:TYR:H       20       0.13	(1,671)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD13	8	0.13
(1,671)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD13       19       0.13         (1,67)       1:A:117:ASN:H       1:A:117:ASN:HD22       18       0.13         (1,669)       1:A:129:LEU:HD11       1:A:134:TYR:H       3       0.13         (1,669)       1:A:129:LEU:HD12       1:A:134:TYR:H       3       0.13         (1,669)       1:A:129:LEU:HD13       1:A:134:TYR:H       3       0.13         (1,669)       1:A:129:LEU:HD11       1:A:134:TYR:H       12       0.13         (1,669)       1:A:129:LEU:HD12       1:A:134:TYR:H       12       0.13         (1,669)       1:A:129:LEU:HD13       1:A:134:TYR:H       12       0.13         (1,669)       1:A:129:LEU:HD11       1:A:134:TYR:H       20       0.13	(1,671)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD11	19	0.13
(1,671)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD13       19       0.13         (1,67)       1:A:117:ASN:H       1:A:117:ASN:HD22       18       0.13         (1,669)       1:A:129:LEU:HD11       1:A:134:TYR:H       3       0.13         (1,669)       1:A:129:LEU:HD12       1:A:134:TYR:H       3       0.13         (1,669)       1:A:129:LEU:HD13       1:A:134:TYR:H       12       0.13         (1,669)       1:A:129:LEU:HD12       1:A:134:TYR:H       12       0.13         (1,669)       1:A:129:LEU:HD13       1:A:134:TYR:H       12       0.13         (1,669)       1:A:129:LEU:HD11       1:A:134:TYR:H       20       0.13	/	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD12	19	0.13
(1,669)       1:A:129:LEU:HD11       1:A:134:TYR:H       3       0.13         (1,669)       1:A:129:LEU:HD12       1:A:134:TYR:H       3       0.13         (1,669)       1:A:129:LEU:HD13       1:A:134:TYR:H       3       0.13         (1,669)       1:A:129:LEU:HD11       1:A:134:TYR:H       12       0.13         (1,669)       1:A:129:LEU:HD12       1:A:134:TYR:H       12       0.13         (1,669)       1:A:129:LEU:HD13       1:A:134:TYR:H       12       0.13         (1,669)       1:A:129:LEU:HD11       1:A:134:TYR:H       20       0.13	, ,	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD13	19	0.13
(1,669)       1:A:129:LEU:HD11       1:A:134:TYR:H       3       0.13         (1,669)       1:A:129:LEU:HD12       1:A:134:TYR:H       3       0.13         (1,669)       1:A:129:LEU:HD13       1:A:134:TYR:H       3       0.13         (1,669)       1:A:129:LEU:HD11       1:A:134:TYR:H       12       0.13         (1,669)       1:A:129:LEU:HD12       1:A:134:TYR:H       12       0.13         (1,669)       1:A:129:LEU:HD13       1:A:134:TYR:H       12       0.13         (1,669)       1:A:129:LEU:HD11       1:A:134:TYR:H       20       0.13	/	1:A:117:ASN:H	1:A:117:ASN:HD22	18	0.13
(1,669)       1:A:129:LEU:HD13       1:A:134:TYR:H       3       0.13         (1,669)       1:A:129:LEU:HD11       1:A:134:TYR:H       12       0.13         (1,669)       1:A:129:LEU:HD12       1:A:134:TYR:H       12       0.13         (1,669)       1:A:129:LEU:HD13       1:A:134:TYR:H       12       0.13         (1,669)       1:A:129:LEU:HD11       1:A:134:TYR:H       20       0.13	· · /	1:A:129:LEU:HD11	1:A:134:TYR:H	3	0.13
(1,669)       1:A:129:LEU:HD13       1:A:134:TYR:H       3       0.13         (1,669)       1:A:129:LEU:HD11       1:A:134:TYR:H       12       0.13         (1,669)       1:A:129:LEU:HD12       1:A:134:TYR:H       12       0.13         (1,669)       1:A:129:LEU:HD13       1:A:134:TYR:H       12       0.13         (1,669)       1:A:129:LEU:HD11       1:A:134:TYR:H       20       0.13	(1,669)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:134:TYR:H	3	0.13
(1,669)       1:A:129:LEU:HD11       1:A:134:TYR:H       12       0.13         (1,669)       1:A:129:LEU:HD12       1:A:134:TYR:H       12       0.13         (1,669)       1:A:129:LEU:HD13       1:A:134:TYR:H       12       0.13         (1,669)       1:A:129:LEU:HD11       1:A:134:TYR:H       20       0.13	/	1:A:129:LEU:HD13	1:A:134:TYR:H	3	0.13
(1,669)       1:A:129:LEU:HD12       1:A:134:TYR:H       12       0.13         (1,669)       1:A:129:LEU:HD13       1:A:134:TYR:H       12       0.13         (1,669)       1:A:129:LEU:HD11       1:A:134:TYR:H       20       0.13	(1,669)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:134:TYR:H	12	0.13
(1,669) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:134:TYR:H 20 0.13		1:A:129:LEU:HD12	1:A:134:TYR:H	12	0.13
(1,669) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:134:TYR:H 20 0.13	(1,669)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:134:TYR:H	12	0.13
	,	1:A:129:LEU:HD11	1:A:134:TYR:H	20	0.13
	· · /		1:A:134:TYR:H		



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,669)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:134:TYR:H	20	0.13
(1,662)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD21	2	0.13
(1,662)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD22	2	0.13
(1,662)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD23	2	0.13
(1,659)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD21	12	0.13
(1,659)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD22	12	0.13
(1,659)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD23	12	0.13
(1,658)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:131:GLU:H	8	0.13
(1,658)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:131:GLU:H	8	0.13
(1,658)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:131:GLU:H	8	0.13
(1,656)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD21	5	0.13
(1,656)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD22	5	0.13
(1,656)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD23	5	0.13
(1,653)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:42:TYR:H	9	0.13
(1,653)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:42:TYR:H	9	0.13
(1,653)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:42:TYR:H	9	0.13
(1,653)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:42:TYR:H	17	0.13
(1,653)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:42:TYR:H	17	0.13
(1,653)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:42:TYR:H	17	0.13
(1,649)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:124:VAL:H	1	0.13
(1,649)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:H	1	0.13
(1,649)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:H	1	0.13
(1,649)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:124:VAL:H	5	0.13
(1,649)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:H	5	0.13
(1,649)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:H	5	0.13
(1,630)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD21	4	0.13
(1,630)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD22	4	0.13
(1,630)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD23	4	0.13
(1,630)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD21	4	0.13
(1,630)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD22	4	0.13
(1,630)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD23	4	0.13
(1,630)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD21	4	0.13
(1,630)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD22	4	0.13
(1,630)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD23	4	0.13
(1,630)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD21	15	0.13
(1,630)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD22	15	0.13
(1,630)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD23	15	0.13
(1,630)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD21	15	0.13
(1,630)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD22	15	0.13
(1,630)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD23	15	0.13
(1,630)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD21	15	0.13
(1,630)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD22	15	0.13



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,630)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD23	15	0.13
(1,613)	1:A:115:CYS:H	1:A:101:HIS:H	17	0.13
(1,612)	1:A:102:VAL:H	1:A:88:THR:H	5	0.13
(1,611)	1:A:100:GLY:H	1:A:90:VAL:H	4	0.13
(1,603)	1:A:144:LEU:HD11	1:A:145:GLU:H	16	0.13
(1,603)	1:A:144:LEU:HD12	1:A:145:GLU:H	16	0.13
(1,603)	1:A:144:LEU:HD13	1:A:145:GLU:H	16	0.13
(1,60)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD11	20	0.13
(1,60)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD12	20	0.13
(1,60)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD13	20	0.13
(1,592)	1:A:22:ASN:H	1:A:22:ASN:HD21	4	0.13
(1,588)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:22:ASN:H	1	0.13
(1,588)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:22:ASN:H	1	0.13
(1,588)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:22:ASN:H	1	0.13
(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG11	8	0.13
(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG12	8	0.13
(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG13	8	0.13
(1,57)	1:A:112:LEU:HD11	1:A:113:ARG:H	13	0.13
(1,57)	1:A:112:LEU:HD12	1:A:113:ARG:H	13	0.13
(1,57)	1:A:112:LEU:HD13	1:A:113:ARG:H	13	0.13
(1,564)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:137:TYR:H	14	0.13
(1,564)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:137:TYR:H	14	0.13
(1,564)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:137:TYR:H	14	0.13
(1,560)	1:A:134:TYR:H	1:A:138:LEU:HD11	8	0.13
(1,560)	1:A:134:TYR:H	1:A:138:LEU:HD12	8	0.13
(1,560)	1:A:134:TYR:H	1:A:138:LEU:HD13	8	0.13
(1,550)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG21	1	0.13
(1,550)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG22	1	0.13
(1,550)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG23	1	0.13
(1,549)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD21	19	0.13
(1,549)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD22	19	0.13
(1,549)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD23	19	0.13
(1,544)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:120:ALA:H	1	0.13
(1,544)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:120:ALA:H	1	0.13
(1,544)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:120:ALA:H	1	0.13
(1,544)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:120:ALA:H	4	0.13
(1,544)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:120:ALA:H	4	0.13
(1,544)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:120:ALA:H	4	0.13
(1,544)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:120:ALA:H	15	0.13
(1,544)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:120:ALA:H	15	0.13
(1,544)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:120:ALA:H	15	0.13
(1,542)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD21	6	0.13



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,542)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD22	6	0.13
(1,542)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD23	6	0.13
(1,536)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:102:VAL:H	3	0.13
(1,536)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:102:VAL:H	3	0.13
(1,536)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:102:VAL:H	3	0.13
(1,53)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD21	3	0.13
(1,53)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD22	3	0.13
(1,53)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD23	3	0.13
(1,529)	1:A:99:LEU:H	1:A:116:ILE:HD11	7	0.13
(1,529)	1:A:99:LEU:H	1:A:116:ILE:HD12	7	0.13
(1,529)	1:A:99:LEU:H	1:A:116:ILE:HD13	7	0.13
(1,513)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:87:ARG:H	19	0.13
(1,513)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:87:ARG:H	19	0.13
(1,513)	1:A:79:LEU:HD13	1:A:87:ARG:H	19	0.13
(1,493)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:52:PHE:H	2	0.13
(1,493)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:52:PHE:H	2	0.13
(1,493)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:52:PHE:H	2	0.13
(1,488)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:51:LEU:H	15	0.13
(1,488)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:51:LEU:H	15	0.13
(1,488)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:51:LEU:H	15	0.13
(1,472)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:42:TYR:H	17	0.13
(1,472)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:42:TYR:H	17	0.13
(1,472)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:42:TYR:H	17	0.13
(1,47)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:115:CYS:H	7	0.13
(1,47)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:115:CYS:H	7	0.13
(1,47)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:115:CYS:H	7	0.13
(1,47)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:115:CYS:H	8	0.13
(1,47)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:115:CYS:H	8	0.13
(1,47)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:115:CYS:H	8	0.13
(1,458)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:10:LYS:H	11	0.13
(1,458)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:10:LYS:H	11	0.13
(1,458)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:10:LYS:H	11	0.13
(1,455)	1:A:8:LYS:H	1:A:9:ILE:HD11	18	0.13
(1,455)	1:A:8:LYS:H	1:A:9:ILE:HD12	18	0.13
(1,455)	1:A:8:LYS:H	1:A:9:ILE:HD13	18	0.13
(1,445)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:113:ARG:H	1	0.13
(1,445)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:113:ARG:H	1	0.13
(1,445)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:113:ARG:H	1	0.13
(1,445)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:113:ARG:H	10	0.13
(1,445)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:113:ARG:H	10	0.13
(1,445)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:113:ARG:H	10	0.13
(1,437)	1:A:46:VAL:HG11	1:A:48:GLY:H	7	0.13



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,437)	1:A:46:VAL:HG12	1:A:48:GLY:H	7	0.13
(1,437)	1:A:46:VAL:HG13	1:A:48:GLY:H	7	0.13
(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD21	17	0.13
(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD22	17	0.13
(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD23	17	0.13
(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD21	7	0.13
(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD22	7	0.13
(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD23	7	0.13
(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD21	7	0.13
(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD22	7	0.13
(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD23	7	0.13
(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD21	7	0.13
(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD22	7	0.13
(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD23	7	0.13
(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD21	9	0.13
(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD22	9	0.13
(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD23	9	0.13
(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD21	9	0.13
(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD22	9	0.13
(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD23	9	0.13
(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD21	9	0.13
(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD22	9	0.13
(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD23	9	0.13
(1,40)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:97:SER:H	17	0.13
(1,40)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:97:SER:H	17	0.13
(1,40)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:97:SER:H	17	0.13
(1,4)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:124:VAL:H	1	0.13
(1,4)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:H	1	0.13
(1,4)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:H	1	0.13
(1,4)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:124:VAL:H	5	0.13
(1,4)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:H	5	0.13
(1,4)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:H	5	0.13
(1,399)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:129:LEU:HD21	2	0.13
(1,399)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:129:LEU:HD22	2	0.13
(1,399)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:129:LEU:HD23	2	0.13
(1,399)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:129:LEU:HD21	2	0.13
(1,399)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:129:LEU:HD22	2	0.13
(1,399)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:129:LEU:HD23	2	0.13
(1,399)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:129:LEU:HD21	2	0.13
(1,399)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:129:LEU:HD22	2	0.13
(1,399)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:129:LEU:HD23	2	0.13
(1,375)	1:A:131:GLU:H	1:A:133:GLY:H	20	0.13



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,374)	1:A:132:GLU:H	1:A:134:TYR:H	18	0.13
(1,37)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:13:ASN:HD21	8	0.13
(1,37)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:13:ASN:HD21	8	0.13
(1,37)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:13:ASN:HD21	8	0.13
(1,366)	1:A:41:LEU:H	1:A:126:LYS:H	11	0.13
(1,361)	1:A:45:ILE:H	1:A:122:ARG:H	2	0.13
(1,347)	1:A:103:PHE:H	1:A:114:TYR:H	9	0.13
(1,345)	1:A:103:PHE:H	1:A:105:ASP:H	5	0.13
(1,307)	1:A:32:GLU:H	1:A:34:TRP:H	1	0.13
(1,303)	1:A:18:GLU:H	1:A:20:THR:H	16	0.13
(1,290)	1:A:10:LYS:H	1:A:13:ASN:H	13	0.13
(1,266)	1:A:19:VAL:H	1:A:21:GLN:H	7	0.13
(1,266)	1:A:19:VAL:H	1:A:21:GLN:H	14	0.13
(1,266)	1:A:19:VAL:H	1:A:21:GLN:H	16	0.13
(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD11	1	0.13
(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD12	1	0.13
(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD13	1	0.13
(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD11	8	0.13
(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD12	8	0.13
(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD13	8	0.13
(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD11	19	0.13
(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD12	19	0.13
(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD13	19	0.13
(1,247)	1:A:121:LEU:HD11	1:A:122:ARG:H	18	0.13
(1,247)	1:A:121:LEU:HD12	1:A:122:ARG:H	18	0.13
(1,247)	1:A:121:LEU:HD13	1:A:122:ARG:H	18	0.13
(1,24)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:134:TYR:H	3	0.13
(1,24)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:134:TYR:H	3	0.13
(1,24)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:134:TYR:H	3	0.13
(1,24)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:134:TYR:H	12	0.13
(1,24)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:134:TYR:H	12	0.13
(1,24)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:134:TYR:H	12	0.13
(1,24)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:134:TYR:H	20	0.13
(1,24)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:134:TYR:H	20	0.13
(1,24)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:134:TYR:H	20	0.13
(1,235)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:13:ASN:HD21	7	0.13
(1,235)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:13:ASN:HD21	7	0.13
(1,235)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:13:ASN:HD21	7	0.13
(1,222)	1:A:71:ILE:HD11	1:A:140:LEU:HD21	18	0.13
(1,222)	1:A:71:ILE:HD11	1:A:140:LEU:HD22	18	0.13
(1,222)	1:A:71:ILE:HD11	1:A:140:LEU:HD23	18	0.13
(1,222)	1:A:71:ILE:HD12	1:A:140:LEU:HD21	18	0.13



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

(1,222)         1:A:71:ILE:HD12         1:A:140:LEU:HD22         18         0.13           (1,222)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD21         18         0.13           (1,222)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD22         18         0.13           (1,222)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD22         18         0.13           (1,222)         1:A:71:ILE:HD13         1:A:140:LEU:HD23         18         0.13           (1,219)         1:A:51:LEU:HD21         1:A:74:GLU:H         18         0.13           (1,219)         1:A:51:LEU:HD22         1:A:74:GLU:H         18         0.13           (1,192)         1:A:19:VAL:HG11         1:A:17:ASN:H         9         0.13           (1,192)         1:A:19:VAL:HG12         1:A:117:ASN:H         9         0.13           (1,192)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         9         0.13           (1,192)         1:A:19:VAL:HG12         1:A:20:THR:H         2         0.13           (1,172)         1:A:19:VAL:HG21         1:A:20:THR:H         2         0.13           (1,172)         1:A:19:VAL:HG22         1:A:20:THR:H         2         0.13           (1,172)         1:A:19:VAL:HG22         1:A:20:THR:H	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
1,222	(1,222)	1:A:71:ILE:HD12	1:A:140:LEU:HD22	18	0.13
(1,222) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD22 18 0.13 (1,222) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD23 18 0.13 (1,219) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:74:GLU:H 18 0.13 (1,219) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:74:GLU:H 18 0.13 (1,219) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:74:GLU:H 18 0.13 (1,219) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:74:GLU:H 18 0.13 (1,192) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 9 0.13 (1,192) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:117:ASN:H 9 0.13 (1,192) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:117:ASN:H 9 0.13 (1,192) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:117:ASN:H 9 0.13 (1,192) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:117:ASN:H 9 0.13 (1,192) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 16 0.13 (1,192) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 16 0.13 (1,192) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:117:ASN:H 16 0.13 (1,192) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:117:ASN:H 16 0.13 (1,192) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:20:THR:H 2 0.13 (1,172) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:20:THR:H 2 0.13 (1,172) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:20:THR:H 2 0.13 (1,172) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:20:THR:H 2 0.13 (1,172) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:20:THR:H 2 0.13 (1,171) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 2 0.13 (1,171) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 2 0.13 (1,171) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 2 0.13 (1,171) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 2 0.13 (1,162) 1:A:92:SER:H 1:A:96:ASP:H 16 0.13 (1,147) 1:A:130:LYS:H 1:A:134:TYR:H 9 0.13 (1,147) 1:A:130:LYS:H 1:A:134:TYR:H 15 0.13 (1,147) 1:A:130:LYS:H 1:A:134:TYR:H 15 0.13 (1,141) 1:A:17:TYR:H 1:A:19:VAL:H 18 0.13 (1,141) 1:A:17:TYR:H 1:A:19:LEU:HD21 12 0.13 (1,141) 1:A:17:TYR:H 1:A:19:LEU:HD22 12 0.13 (1,141) 1:A:17:TYR:H 1:A:19:LEU:HD21 12 0.13 (1,141) 1:A:17:TYR:H 1:A:19:VAL:H 18 0.13 (1,131) 1:A:17:TYR:H 1:A:19:LEU:HD22 12 0.13 (1,131) 1:A:17:TYR:H 1:A:19:VAL:H 18 0.13 (1,137) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD22 4 0.13 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD22 4 0.13 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD22 4 0.	(1,222)	1:A:71:ILE:HD12	1:A:140:LEU:HD23	18	0.13
(1,222) 1:A:71:ILE:HD13 1:A:140:LEU:HD23 18 0.13 (1,219) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:74:GLU:H 18 0.13 (1,219) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:74:GLU:H 18 0.13 (1,219) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:74:GLU:H 18 0.13 (1,219) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:74:GLU:H 18 0.13 (1,192) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 9 0.13 (1,192) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:117:ASN:H 9 0.13 (1,192) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 9 0.13 (1,192) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:117:ASN:H 9 0.13 (1,192) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 16 0.13 (1,192) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 16 0.13 (1,192) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:117:ASN:H 16 0.13 (1,192) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:117:ASN:H 16 0.13 (1,192) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:117:ASN:H 16 0.13 (1,172) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:20:THR:H 2 0.13 (1,172) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:20:THR:H 2 0.13 (1,172) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:20:THR:H 2 0.13 (1,172) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:20:THR:H 2 0.13 (1,171) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 2 0.13 (1,171) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 2 0.13 (1,171) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 2 0.13 (1,171) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 2 0.13 (1,162) 1:A:92:SER:H 1:A:19:LEU:HD23 2 0.13 (1,162) 1:A:92:SER:H 1:A:142:LEU:HD23 2 0.13 (1,141) 1:A:130:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 1 0.13 (1,144) 1:A:130:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 1 0.13 (1,144) 1:A:130:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 1 0.13 (1,144) 1:A:130:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 1 0.13 (1,144) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD22 1 0.13 (1,144) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD23 1 0.13 (1,144) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD24 1 0.13 (1,141) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD24 1 0.13 (1,141) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD24 1 0.13 (1,141) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD24 1 0.13 (1,131) 1:A:17:TYR:H 1:A:19:VAL:H 6 0.13 (1,131) 1:A:17:TYR:H 1:A:19:VAL:H 8 0.13 (1,131) 1:A:17:TYR:H 1:A:19:VAL:H 18 0.13 (1,131) 1:A:17:TYR:H 1:A:19:VAL:H 8 0.13 (1,131) 1:A:17:TYR:H 1:A:19:VAL:H 18 0.13 (1,131) 1:A:17:TYR:H 1:A:19:VAL:H 8 0.13 (1,131) 1:A:17:TYR:H 1:A:19:VAL:H 18 0.13 (1,137) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD22 4 0.13 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU	(1,222)	1:A:71:ILE:HD13	1:A:140:LEU:HD21	18	0.13
(1,219) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:74:GLU:H 18 0.13 (1,219) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:74:GLU:H 18 0.13 (1,219) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:74:GLU:H 18 0.13 (1,219) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 9 0.13 (1,192) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 9 0.13 (1,192) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:117:ASN:H 9 0.13 (1,192) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:117:ASN:H 9 0.13 (1,192) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 16 0.13 (1,192) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 16 0.13 (1,192) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:117:ASN:H 16 0.13 (1,192) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:117:ASN:H 16 0.13 (1,192) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:117:ASN:H 16 0.13 (1,172) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:20:THR:H 2 0.13 (1,172) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:20:THR:H 2 0.13 (1,177) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 2 0.13 (1,177) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 2 0.13 (1,177) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 2 0.13 (1,177) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 2 0.13 (1,160) 1:A:39:SER:H 1:A:36:ASP:H 16 0.13 (1,160) 1:A:34:SER:H 1:A:56:ASP:H 18 0.13 (1,147) 1:A:130:LYS:H 1:A:134:TYR:H 9 0.13 (1,147) 1:A:130:LYS:H 1:A:134:TYR:H 9 0.13 (1,147) 1:A:130:LYS:H 1:A:134:TYR:H 9 0.13 (1,147) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD21 12 0.13 (1,141) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD22 12 0.13 (1,141) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD22 12 0.13 (1,141) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD21 12 0.13 (1,141) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD22 12 0.13 (1,141) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD22 14 0.13 (1,131) 1:A:17:TYR:H 1:A:19:VAL:H 8 0.13 (1,137) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:19:VAL:H 18 0.13 (1,127:5) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD22 4 0.13 (1,127:5) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD22 4 0.13 (1,127:5) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD22 4 0.13 (1,127:5) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:99:LEU:HD22 4 0.13 (1,127:5) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:99:LEU:HD22 4 0.13 (1,127:5) 1:A:90:VAL:HG12	(1,222)	1:A:71:ILE:HD13	1:A:140:LEU:HD22	18	0.13
(1,219) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:74:GLU:H 18 0.13 (1,219) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:74:GLU:H 18 0.13 (1,192) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 9 0.13 (1,192) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:117:ASN:H 9 0.13 (1,192) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:117:ASN:H 9 0.13 (1,192) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:117:ASN:H 16 0.13 (1,192) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 16 0.13 (1,192) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:117:ASN:H 16 0.13 (1,192) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:117:ASN:H 16 0.13 (1,192) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:117:ASN:H 16 0.13 (1,192) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:20:THR:H 2 0.13 (1,172) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:20:THR:H 2 0.13 (1,172) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:20:THR:H 2 0.13 (1,172) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:20:THR:H 2 0.13 (1,172) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:20:THR:H 2 0.13 (1,171) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 2 0.13 (1,171) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 2 0.13 (1,171) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 2 0.13 (1,171) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 2 0.13 (1,162) 1:A:92:SER:H 1:A:96:ASP:H 16 0.13 (1,160) 1:A:54:SER:H 1:A:134:TYR:H 9 0.13 (1,147) 1:A:130:LYS:H 1:A:134:TYR:H 9 0.13 (1,147) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD21 12 0.13 (1,147) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD21 12 0.13 (1,141) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD21 14 0.13 (1,131) 1:A:17:TYR:H 1:A:19:VAL:H 6 0.13 (1,131) 1:A:17:TYR:H 1:A:19:VAL:H 8 0.13 (1,131) 1:A:17:TYR:H 1:A:19:VAL:H 18 0.13 (1,137) 1:A:19:LEU:HD22 1:A:131:GLU:H 8 0.13 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD22 4 0.13 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD22 4 0.13 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG12 1	(1,222)	1:A:71:ILE:HD13	1:A:140:LEU:HD23	18	0.13
(1,219)         1:A:51:LEU:HD23         1:A:74:GLU:H         18         0.13           (1,192)         1:A:19:VAL:HG11         1:A:117:ASN:H         9         0.13           (1,192)         1:A:19:VAL:HG12         1:A:117:ASN:H         9         0.13           (1,192)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         9         0.13           (1,192)         1:A:19:VAL:HG11         1:A:117:ASN:H         16         0.13           (1,192)         1:A:19:VAL:HG12         1:A:117:ASN:H         16         0.13           (1,192)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         16         0.13           (1,172)         1:A:19:VAL:HG21         1:A:20:THR:H         2         0.13           (1,172)         1:A:19:VAL:HG22         1:A:20:THR:H         2         0.13           (1,172)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:20:THR:H         2         0.13           (1,177)         1:A:126:LYS:H         1:A:129:LEU:HD21         2         0.13           (1,177)         1:A:126:LYS:H         1:A:129:LEU:HD22         2         0.13           (1,160)         1:A:26:LYS:H         1:A:129:LEU:HD23         2         0.13           (1,147)         1:A:130:LYS:H         1:A:134:TYR:H         <	(1,219)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:74:GLU:H	18	0.13
(1,192) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 9 0.13 (1,192) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:117:ASN:H 9 0.13 (1,192) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:117:ASN:H 9 0.13 (1,192) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 16 0.13 (1,192) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:117:ASN:H 16 0.13 (1,192) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:117:ASN:H 16 0.13 (1,192) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:20:THR:H 2 0.13 (1,172) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:20:THR:H 2 0.13 (1,172) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:20:THR:H 2 0.13 (1,172) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:20:THR:H 2 0.13 (1,171) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 2 0.13 (1,171) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 2 0.13 (1,171) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 2 0.13 (1,171) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 2 0.13 (1,172) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:20:THR:H 2 0.13 (1,174) 1:A:130:LYS:H 1:A:130:LYS:H 1:A:130:LYS:H 10.13 (1,147) 1:A:130:LYS:H 1:A:134:TYR:H 9 0.13 (1,147) 1:A:130:LYS:H 1:A:134:TYR:H 9 0.13 (1,147) 1:A:130:LYS:H 1:A:134:TYR:H 15 0.13 (1,144) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD21 12 0.13 (1,144) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD22 12 0.13 (1,144) 1:A:17:TYR:H 1:A:129:LEU:HD21 12 0.13 (1,141) 1:A:17:TYR:H 1:A:19:VAL:H 4 0.13 (1,131) 1:A:17:TYR:H 1:A:19:VAL:H 8 0.13 (1,131) 1:A:17:TYR:H 1:A:19:VAL:H 8 0.13 (1,131) 1:A:17:TYR:H 1:A:19:VAL:H 8 0.13 (1,131) 1:A:17:TYR:H 1:A:19:VAL:H 8 0.13 (1,131) 1:A:17:TYR:H 1:A:13:GLU:H 8 0.13 (1,131) 1:A:17:TYR:H 1:A:13:GLU:H 8 0.13 (1,131) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:131:GLU:H 8 0.13 (1,131) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:131:GLU:H 8 0.13 (1,131) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:131:GLU:H 8 0.13 (1,131) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:131:GLU:H 8 0.13 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD22 4 0.13 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD22 4 0.13 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:99:LEU:HD22 4 0.13 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD22 4 0.13	(1,219)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:74:GLU:H	18	0.13
(1,192) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:117:ASN:H 9 0.13 (1,192) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:117:ASN:H 9 0.13 (1,192) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 16 0.13 (1,192) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:117:ASN:H 16 0.13 (1,192) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:117:ASN:H 16 0.13 (1,172) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:117:ASN:H 16 0.13 (1,172) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:20:THR:H 2 0.13 (1,172) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:20:THR:H 2 0.13 (1,172) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:20:THR:H 2 0.13 (1,172) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:20:THR:H 2 0.13 (1,171) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 2 0.13 (1,171) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 2 0.13 (1,171) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 2 0.13 (1,171) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 2 0.13 (1,171) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 2 0.13 (1,160) 1:A:54:SER:H 1:A:96:ASP:H 16 0.13 (1,140) 1:A:54:SER:H 1:A:34:TYR:H 9 0.13 (1,147) 1:A:130:LYS:H 1:A:134:TYR:H 9 0.13 (1,144) 1:A:130:LYS:H 1:A:134:TYR:H 15 0.13 (1,144) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD21 12 0.13 (1,144) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD22 12 0.13 (1,141) 1:A:17:TYR:H 1:A:129:LEU:HD22 12 0.13 (1,131) 1:A:17:TYR:H 1:A:19:VAL:H 4 0.13 (1,131) 1:A:17:TYR:H 1:A:19:VAL:H 4 0.13 (1,131) 1:A:17:TYR:H 1:A:19:VAL:H 8 0.13 (1,131) 1:A:17:TYR:H 1:A:19:VAL:H 8 0.13 (1,131) 1:A:17:TYR:H 1:A:19:VAL:H 8 0.13 (1,131) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:131:GLU:H 8 0.13 (1,131) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:131:GLU:H 8 0.13 (1,131) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:131:GLU:H 8 0.13 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD22 4 0.13 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD22 4 0.13 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD22 4 0.13 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:99:LEU:HD22 4 0.13 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD22 4 0.13	(1,219)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:74:GLU:H	18	0.13
(1,192) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:117:ASN:H 9 0.13 (1,192) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 16 0.13 (1,192) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:117:ASN:H 16 0.13 (1,192) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:117:ASN:H 16 0.13 (1,172) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:20:THR:H 2 0.13 (1,172) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:20:THR:H 2 0.13 (1,172) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:20:THR:H 2 0.13 (1,171) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 2 0.13 (1,171) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 2 0.13 (1,171) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 2 0.13 (1,171) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 2 0.13 (1,162) 1:A:92:SER:H 1:A:96:ASP:H 16 0.13 (1,160) 1:A:54:SER:H 1:A:56:ASP:H 18 0.13 (1,147) 1:A:130:LYS:H 1:A:134:TYR:H 9 0.13 (1,147) 1:A:130:LYS:H 1:A:134:TYR:H 15 0.13 (1,147) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD21 12 0.13 (1,141) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD22 12 0.13 (1,142) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD23 12 0.13 (1,131) 1:A:17:TYR:H 1:A:19:VAL:H 4 0.13 (1,131) 1:A:17:TYR:H 1:A:19:VAL:H 4 0.13 (1,131) 1:A:17:TYR:H 1:A:19:VAL:H 4 0.13 (1,131) 1:A:17:TYR:H 1:A:19:VAL:H 4 0.13 (1,131) 1:A:17:TYR:H 1:A:19:VAL:H 8 0.13 (1,131) 1:A:17:TYR:H 1:A:19:VAL:H 8 0.13 (1,131) 1:A:17:TYR:H 1:A:19:VAL:H 18 0.13 (1,131) 1:A:17:TYR:H 1:A:19:VAL:H 8 0.13 (1,131) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:131:GLU:H 8 0.13 (1,131) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:131:GLU:H 8 0.13 (1,131) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:131:GLU:H 8 0.13 (1,131) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD21 4 0.13 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD22 4 0.13 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD22 4 0.13 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:99:LEU:HD22 4 0.13 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:99:LEU:HD23 4 0.13 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:99:LEU:HD22 4 0.13 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:99:LEU:HD22 4 0.13 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:99:LEU:HD22 4 0.13 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD22 4 0.13 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD22 4 0.13 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD22 4 0.13 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD22 4 0.13	(1,192)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:H	9	0.13
(1,192) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:117:ASN:H 16 0.13 (1,192) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:117:ASN:H 16 0.13 (1,192) 1:A:19:VAL:HG13 1:A:117:ASN:H 16 0.13 (1,172) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:20:THR:H 2 0.13 (1,172) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:20:THR:H 2 0.13 (1,172) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:20:THR:H 2 0.13 (1,172) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:20:THR:H 2 0.13 (1,17) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 2 0.13 (1,17) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 2 0.13 (1,17) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 2 0.13 (1,17) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 2 0.13 (1,17) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 2 0.13 (1,162) 1:A:92:SER:H 1:A:96:ASP:H 16 0.13 (1,160) 1:A:54:SER:H 1:A:56:ASP:H 18 0.13 (1,147) 1:A:130:LYS:H 1:A:134:TYR:H 9 0.13 (1,147) 1:A:130:LYS:H 1:A:134:TYR:H 9 0.13 (1,147) 1:A:130:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 12 0.13 (1,141) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD21 12 0.13 (1,141) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD22 12 0.13 (1,141) 1:A:17:TYR:H 1:A:129:LEU:HD23 12 0.13 (1,131) 1:A:17:TYR:H 1:A:19:VAL:H 4 0.13 (1,131) 1:A:17:TYR:H 1:A:19:VAL:H 4 0.13 (1,131) 1:A:17:TYR:H 1:A:19:VAL:H 4 0.13 (1,131) 1:A:17:TYR:H 1:A:19:VAL:H 8 0.13 (1,131) 1:A:17:TYR:H 1:A:19:VAL:H 8 0.13 (1,131) 1:A:17:TYR:H 1:A:19:VAL:H 8 0.13 (1,131) 1:A:19:LEU:HD22 1:A:131:GLU:H 8 0.13 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD22 4 0.13 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD22 4 0.13 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:99:LEU:HD22 4 0.13 (1,1275) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD22 4	(1,192)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:H	9	0.13
(1,192)         1:A:19:VAL:HG12         1:A:117:ASN:H         16         0.13           (1,192)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         16         0.13           (1,172)         1:A:19:VAL:HG21         1:A:20:THR:H         2         0.13           (1,172)         1:A:19:VAL:HG22         1:A:20:THR:H         2         0.13           (1,172)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:20:THR:H         2         0.13           (1,172)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:20:THR:H         2         0.13           (1,17)         1:A:126:LYS:H         1:A:129:LEU:HD21         2         0.13           (1,17)         1:A:126:LYS:H         1:A:129:LEU:HD22         2         0.13           (1,17)         1:A:126:LYS:H         1:A:129:LEU:HD23         2         0.13           (1,17)         1:A:126:LYS:H         1:A:129:LEU:HD23         2         0.13           (1,160)         1:A:54:SER:H         1:A:66:ASP:H         16         0.13           (1,147)         1:A:130:LYS:H         1:A:134:TYR:H         9         0.13           (1,147)         1:A:130:LYS:H         1:A:134:TYR:H         15         0.13           (1,141)         1:A:127:THIS:H         1:A:129:LEU:HD22         12<	(1,192)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:H	9	0.13
(1,192)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         16         0.13           (1,172)         1:A:19:VAL:HG21         1:A:20:THR:H         2         0.13           (1,172)         1:A:19:VAL:HG22         1:A:20:THR:H         2         0.13           (1,172)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:20:THR:H         2         0.13           (1,17)         1:A:126:LYS:H         1:A:129:LEU:HD21         2         0.13           (1,17)         1:A:126:LYS:H         1:A:129:LEU:HD22         2         0.13           (1,17)         1:A:126:LYS:H         1:A:129:LEU:HD23         2         0.13           (1,17)         1:A:126:LYS:H         1:A:129:LEU:HD23         2         0.13           (1,162)         1:A:99:SER:H         1:A:49:6:ASP:H         16         0.13           (1,160)         1:A:54:SER:H         1:A:56:ASP:H         18         0.13           (1,147)         1:A:130:LYS:H         1:A:134:TYR:H         9         0.13           (1,147)         1:A:130:LYS:H         1:A:134:TYR:H         15         0.13           (1,147)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD21         12         0.13           (1,141)         1:A:127:THIS:H         1:A:129:LEU:HD23         12	(1,192)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:H	16	0.13
(1,172)         1:A:19:VAL:HG21         1:A:20:THR:H         2         0.13           (1,172)         1:A:19:VAL:HG22         1:A:20:THR:H         2         0.13           (1,172)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:20:THR:H         2         0.13           (1,17)         1:A:126:LYS:H         1:A:129:LEU:HD21         2         0.13           (1,17)         1:A:126:LYS:H         1:A:129:LEU:HD22         2         0.13           (1,17)         1:A:126:LYS:H         1:A:129:LEU:HD23         2         0.13           (1,17)         1:A:126:LYS:H         1:A:129:LEU:HD23         2         0.13           (1,162)         1:A:29:SER:H         1:A:29:LEU:HD23         2         0.13           (1,160)         1:A:54:SER:H         1:A:56:ASP:H         18         0.13           (1,147)         1:A:130:LYS:H         1:A:134:TYR:H         9         0.13           (1,147)         1:A:130:LYS:H         1:A:134:TYR:H         15         0.13           (1,147)         1:A:130:LYS:H         1:A:129:LEU:HD21         12         0.13           (1,141)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD23         12         0.13           (1,141)         1:A:17:TYR:H         1:A:19:VAL:H         4	(1,192)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:H	16	0.13
(1,172)         1:A:19:VAL:HG22         1:A:20:THR:H         2         0.13           (1,172)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:20:THR:H         2         0.13           (1,17)         1:A:126:LYS:H         1:A:129:LEU:HD21         2         0.13           (1,17)         1:A:126:LYS:H         1:A:129:LEU:HD22         2         0.13           (1,17)         1:A:126:LYS:H         1:A:129:LEU:HD23         2         0.13           (1,162)         1:A:92:SER:H         1:A:96:ASP:H         16         0.13           (1,160)         1:A:54:SER:H         1:A:134:TYR:H         9         0.13           (1,147)         1:A:130:LYS:H         1:A:134:TYR:H         9         0.13           (1,147)         1:A:130:LYS:H         1:A:134:TYR:H         15         0.13           (1,147)         1:A:130:LYS:H         1:A:1329:LEU:HD21         12         0.13           (1,147)         1:A:130:LYS:H         1:A:129:LEU:HD21         12         0.13           (1,141)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD22         12         0.13           (1,14)         1:A:17:TYR:H         1:A:19:VAL:H         4         0.13           (1,131)         1:A:17:TYR:H         1:A:19:VAL:H         8	(1,192)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:H	16	0.13
(1,172)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:20:THR:H         2         0.13           (1,17)         1:A:126:LYS:H         1:A:129:LEU:HD21         2         0.13           (1,17)         1:A:126:LYS:H         1:A:129:LEU:HD22         2         0.13           (1,17)         1:A:126:LYS:H         1:A:129:LEU:HD23         2         0.13           (1,162)         1:A:92:SER:H         1:A:96:ASP:H         16         0.13           (1,160)         1:A:54:SER:H         1:A:56:ASP:H         18         0.13           (1,147)         1:A:130:LYS:H         1:A:134:TYR:H         9         0.13           (1,147)         1:A:130:LYS:H         1:A:134:TYR:H         9         0.13           (1,147)         1:A:130:LYS:H         1:A:134:TYR:H         15         0.13           (1,147)         1:A:130:LYS:H         1:A:129:LEU:HD21         12         0.13           (1,141)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD22         12         0.13           (1,141)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD23         12         0.13           (1,131)         1:A:17:TYR:H         1:A:19:VAL:H         4         0.13           (1,131)         1:A:17:TYR:H         1:A:131:GLU:H         8	(1,172)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:20:THR:H	2	0.13
(1,17)         1:A:126:LYS:H         1:A:129:LEU:HD21         2         0.13           (1,17)         1:A:126:LYS:H         1:A:129:LEU:HD22         2         0.13           (1,17)         1:A:126:LYS:H         1:A:129:LEU:HD23         2         0.13           (1,162)         1:A:92:SER:H         1:A:96:ASP:H         16         0.13           (1,160)         1:A:54:SER:H         1:A:56:ASP:H         18         0.13           (1,147)         1:A:130:LYS:H         1:A:134:TYR:H         9         0.13           (1,147)         1:A:130:LYS:H         1:A:134:TYR:H         15         0.13           (1,147)         1:A:130:LYS:H         1:A:129:LEU:HD21         12         0.13           (1,141)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD21         12         0.13           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD23         12         0.13           (1,141)         1:A:17:TYR:H         1:A:19:VAL:H         4         0.13           (1,131)         1:A:17:TYR:H         1:A:19:VAL:H         6         0.13           (1,131)         1:A:17:TYR:H         1:A:19:VAL:H         8         0.13           (1,131)         1:A:129:LEU:HD21         1:A:131:GLU:H         8	(1,172)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:20:THR:H	2	0.13
(1,17)         1:A:126:LYS:H         1:A:129:LEU:HD22         2         0.13           (1,17)         1:A:126:LYS:H         1:A:129:LEU:HD23         2         0.13           (1,162)         1:A:92:SER:H         1:A:96:ASP:H         16         0.13           (1,160)         1:A:54:SER:H         1:A:56:ASP:H         18         0.13           (1,147)         1:A:130:LYS:H         1:A:134:TYR:H         9         0.13           (1,147)         1:A:130:LYS:H         1:A:134:TYR:H         15         0.13           (1,147)         1:A:130:LYS:H         1:A:134:TYR:H         15         0.13           (1,147)         1:A:130:LYS:H         1:A:134:TYR:H         15         0.13           (1,141)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD21         12         0.13           (1,141)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD23         12         0.13           (1,131)         1:A:17:TYR:H         1:A:19:VAL:H         4         0.13           (1,131)         1:A:17:TYR:H         1:A:19:VAL:H         8         0.13           (1,131)         1:A:129:LEU:HD21         1:A:131:GLU:H         8         0.13           (1,133)         1:A:129:LEU:HD22         1:A:131:GLU:H         8	(1,172)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:20:THR:H	2	0.13
(1,17)         1:A:126:LYS:H         1:A:129:LEU:HD23         2         0.13           (1,162)         1:A:92:SER:H         1:A:96:ASP:H         16         0.13           (1,160)         1:A:54:SER:H         1:A:56:ASP:H         18         0.13           (1,147)         1:A:130:LYS:H         1:A:134:TYR:H         9         0.13           (1,147)         1:A:130:LYS:H         1:A:134:TYR:H         15         0.13           (1,147)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD21         12         0.13           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD22         12         0.13           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD23         12         0.13           (1,131)         1:A:17:TYR:H         1:A:19:VAL:H         4         0.13           (1,131)         1:A:17:TYR:H         1:A:19:VAL:H         18         0.13           (1,131)         1:A:17:TYR:H         1:A:19:VAL:H         18         0.13           (1,131)         1:A:17:TYR:H         1:A:131:GLU:H         8         0.13           (1,133)         1:A:129:LEU:HD21         1:A:131:GLU:H         8         0.13           (1,13)         1:A:129:LEU:HD23         1:A:131:GLU:H         8	(1,17)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD21	2	0.13
(1,162)         1:A:92:SER:H         1:A:96:ASP:H         16         0.13           (1,160)         1:A:54:SER:H         1:A:56:ASP:H         18         0.13           (1,147)         1:A:130:LYS:H         1:A:134:TYR:H         9         0.13           (1,147)         1:A:130:LYS:H         1:A:134:TYR:H         15         0.13           (1,144)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD21         12         0.13           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD22         12         0.13           (1,14)         1:A:17:TYR:H         1:A:19:VAL:H         4         0.13           (1,131)         1:A:17:TYR:H         1:A:19:VAL:H         6         0.13           (1,131)         1:A:17:TYR:H         1:A:19:VAL:H         8         0.13           (1,131)         1:A:17:TYR:H         1:A:19:VAL:H         8         0.13           (1,131)         1:A:17:TYR:H         1:A:131:GLU:H         8         0.13           (1,13)         1:A:129:LEU:HD21         1:A:131:GLU:H         8         0.13           (1,13)         1:A:129:LEU:HD23         1:A:131:GLU:H         8         0.13           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD21         4         0	(1,17)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD22	2	0.13
(1,160)         1:A:54:SER:H         1:A:56:ASP:H         18         0.13           (1,147)         1:A:130:LYS:H         1:A:134:TYR:H         9         0.13           (1,147)         1:A:130:LYS:H         1:A:134:TYR:H         15         0.13           (1,147)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD21         12         0.13           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD22         12         0.13           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD23         12         0.13           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:19:VAL:H         4         0.13           (1,131)         1:A:17:TYR:H         1:A:19:VAL:H         4         0.13           (1,131)         1:A:17:TYR:H         1:A:19:VAL:H         18         0.13           (1,131)         1:A:17:TYR:H         1:A:19:VAL:H         8         0.13           (1,13)         1:A:129:LEU:HD21         1:A:131:GLU:H         8         0.13           (1,13)         1:A:129:LEU:HD22         1:A:131:GLU:H         8         0.13           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD21         4         0.13           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD22         4	(1,17)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD23	2	0.13
(1,147)         1:A:130:LYS:H         1:A:134:TYR:H         9         0.13           (1,147)         1:A:130:LYS:H         1:A:134:TYR:H         15         0.13           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD21         12         0.13           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD22         12         0.13           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD23         12         0.13           (1,131)         1:A:17:TYR:H         1:A:19:VAL:H         4         0.13           (1,131)         1:A:17:TYR:H         1:A:19:VAL:H         6         0.13           (1,131)         1:A:17:TYR:H         1:A:19:VAL:H         18         0.13           (1,131)         1:A:17:TYR:H         1:A:19:VAL:H         8         0.13           (1,13)         1:A:129:LEU:HD21         1:A:131:GLU:H         8         0.13           (1,13)         1:A:129:LEU:HD22         1:A:131:GLU:H         8         0.13           (1,13)         1:A:199:LEU:HD23         1:A:131:GLU:H         8         0.13           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD21         4         0.13           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD22         4	(1,162)	1:A:92:SER:H	1:A:96:ASP:H	16	0.13
(1,147)         1:A:130:LYS:H         1:A:134:TYR:H         15         0.13           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD21         12         0.13           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD22         12         0.13           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD23         12         0.13           (1,131)         1:A:17:TYR:H         1:A:19:VAL:H         4         0.13           (1,131)         1:A:17:TYR:H         1:A:19:VAL:H         6         0.13           (1,131)         1:A:17:TYR:H         1:A:19:VAL:H         18         0.13           (1,131)         1:A:129:LEU:HD21         1:A:131:GLU:H         8         0.13           (1,13)         1:A:129:LEU:HD22         1:A:131:GLU:H         8         0.13           (1,13)         1:A:129:LEU:HD23         1:A:131:GLU:H         8         0.13           (1,13)         1:A:199:LEU:HD23         1:A:199:LEU:HD21         4         0.13           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD22         4         0.13           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD22         4         0.13           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD23	(1,160)	1:A:54:SER:H	1:A:56:ASP:H	18	0.13
(1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD21         12         0.13           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD22         12         0.13           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD23         12         0.13           (1,131)         1:A:17:TYR:H         1:A:19:VAL:H         4         0.13           (1,131)         1:A:17:TYR:H         1:A:19:VAL:H         6         0.13           (1,131)         1:A:17:TYR:H         1:A:19:VAL:H         18         0.13           (1,13)         1:A:17:TYR:H         1:A:19:VAL:H         8         0.13           (1,13)         1:A:129:LEU:HD21         1:A:131:GLU:H         8         0.13           (1,13)         1:A:129:LEU:HD22         1:A:131:GLU:H         8         0.13           (1,13)         1:A:199:LEU:HD23         1:A:131:GLU:H         8         0.13           (1,13)         1:A:199:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD21         4         0.13           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD22         4         0.13           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD21         4         0.13           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD23 <td< td=""><td>(1,147)</td><td>1:A:130:LYS:H</td><td>1:A:134:TYR:H</td><td>9</td><td>0.13</td></td<>	(1,147)	1:A:130:LYS:H	1:A:134:TYR:H	9	0.13
(1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD22         12         0.13           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD23         12         0.13           (1,131)         1:A:17:TYR:H         1:A:19:VAL:H         4         0.13           (1,131)         1:A:17:TYR:H         1:A:19:VAL:H         6         0.13           (1,131)         1:A:17:TYR:H         1:A:19:VAL:H         18         0.13           (1,131)         1:A:129:LEU:HD21         1:A:131:GLU:H         8         0.13           (1,13)         1:A:129:LEU:HD22         1:A:131:GLU:H         8         0.13           (1,13)         1:A:129:LEU:HD23         1:A:131:GLU:H         8         0.13           (1,13)         1:A:129:LEU:HD23         1:A:99:LEU:HD21         4         0.13           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD22         4         0.13           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD21         4         0.13           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD22         4         0.13           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD21         4         0.13           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD22	(1,147)	1:A:130:LYS:H	1:A:134:TYR:H	15	0.13
(1,14)       1:A:127:HIS:H       1:A:129:LEU:HD23       12       0.13         (1,131)       1:A:17:TYR:H       1:A:19:VAL:H       4       0.13         (1,131)       1:A:17:TYR:H       1:A:19:VAL:H       6       0.13         (1,131)       1:A:17:TYR:H       1:A:19:VAL:H       18       0.13         (1,13)       1:A:129:LEU:HD21       1:A:131:GLU:H       8       0.13         (1,13)       1:A:129:LEU:HD22       1:A:131:GLU:H       8       0.13         (1,13)       1:A:129:LEU:HD23       1:A:131:GLU:H       8       0.13         (1,13)       1:A:199:LEU:HD23       1:A:131:GLU:H       8       0.13         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG11       1:A:99:LEU:HD21       4       0.13         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG11       1:A:99:LEU:HD23       4       0.13         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG12       1:A:99:LEU:HD21       4       0.13         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG12       1:A:99:LEU:HD23       4       0.13         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD21       4       0.13         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD22       4       0.13         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99	(1,14)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD21	12	0.13
(1,131)         1:A:17:TYR:H         1:A:19:VAL:H         4         0.13           (1,131)         1:A:17:TYR:H         1:A:19:VAL:H         6         0.13           (1,131)         1:A:17:TYR:H         1:A:19:VAL:H         18         0.13           (1,13)         1:A:129:LEU:HD21         1:A:131:GLU:H         8         0.13           (1,13)         1:A:129:LEU:HD22         1:A:131:GLU:H         8         0.13           (1,13)         1:A:129:LEU:HD23         1:A:131:GLU:H         8         0.13           (1,13)         1:A:199:LEU:HD23         1:A:131:GLU:H         8         0.13           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD21         4         0.13           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD23         4         0.13           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD22         4         0.13           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD23         4         0.13           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD21         4         0.13           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD22         4         0.13	(1,14)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD22	12	0.13
(1,131)         1:A:17:TYR:H         1:A:19:VAL:H         6         0.13           (1,131)         1:A:17:TYR:H         1:A:19:VAL:H         18         0.13           (1,13)         1:A:129:LEU:HD21         1:A:131:GLU:H         8         0.13           (1,13)         1:A:129:LEU:HD22         1:A:131:GLU:H         8         0.13           (1,13)         1:A:129:LEU:HD23         1:A:131:GLU:H         8         0.13           (1,13)         1:A:129:LEU:HD23         1:A:131:GLU:H         8         0.13           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD21         4         0.13           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD23         4         0.13           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD22         4         0.13           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD23         4         0.13           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD21         4         0.13           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD22         4         0.13           (1,1275)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD22         4         0.13	(1,14)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD23	12	0.13
(1,131)       1:A:17:TYR:H       1:A:19:VAL:H       18       0.13         (1,13)       1:A:129:LEU:HD21       1:A:131:GLU:H       8       0.13         (1,13)       1:A:129:LEU:HD22       1:A:131:GLU:H       8       0.13         (1,13)       1:A:129:LEU:HD23       1:A:131:GLU:H       8       0.13         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG11       1:A:99:LEU:HD21       4       0.13         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG11       1:A:99:LEU:HD22       4       0.13         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG12       1:A:99:LEU:HD21       4       0.13         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG12       1:A:99:LEU:HD22       4       0.13         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG12       1:A:99:LEU:HD23       4       0.13         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD21       4       0.13         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD22       4       0.13         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD22       4       0.13         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD22       4       0.13	(1,131)	1:A:17:TYR:H	1:A:19:VAL:H	4	0.13
(1,13)       1:A:129:LEU:HD21       1:A:131:GLU:H       8       0.13         (1,13)       1:A:129:LEU:HD22       1:A:131:GLU:H       8       0.13         (1,13)       1:A:129:LEU:HD23       1:A:131:GLU:H       8       0.13         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG11       1:A:99:LEU:HD21       4       0.13         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG11       1:A:99:LEU:HD22       4       0.13         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG12       1:A:99:LEU:HD23       4       0.13         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG12       1:A:99:LEU:HD22       4       0.13         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG12       1:A:99:LEU:HD23       4       0.13         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD21       4       0.13         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD21       4       0.13         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD22       4       0.13	(1,131)	1:A:17:TYR:H	1:A:19:VAL:H	6	0.13
(1,13)       1:A:129:LEU:HD22       1:A:131:GLU:H       8       0.13         (1,13)       1:A:129:LEU:HD23       1:A:131:GLU:H       8       0.13         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG11       1:A:99:LEU:HD21       4       0.13         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG11       1:A:99:LEU:HD22       4       0.13         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG11       1:A:99:LEU:HD23       4       0.13         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG12       1:A:99:LEU:HD21       4       0.13         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG12       1:A:99:LEU:HD23       4       0.13         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD21       4       0.13         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD21       4       0.13         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD22       4       0.13	(1,131)	1:A:17:TYR:H	1:A:19:VAL:H	18	0.13
(1,13)       1:A:129:LEU:HD23       1:A:131:GLU:H       8       0.13         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG11       1:A:99:LEU:HD21       4       0.13         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG11       1:A:99:LEU:HD22       4       0.13         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG11       1:A:99:LEU:HD23       4       0.13         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG12       1:A:99:LEU:HD21       4       0.13         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG12       1:A:99:LEU:HD22       4       0.13         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD21       4       0.13         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD21       4       0.13         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD22       4       0.13	(1,13)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:131:GLU:H	8	0.13
(1,1275)       1:A:90:VAL:HG11       1:A:99:LEU:HD21       4       0.13         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG11       1:A:99:LEU:HD22       4       0.13         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG11       1:A:99:LEU:HD23       4       0.13         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG12       1:A:99:LEU:HD21       4       0.13         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG12       1:A:99:LEU:HD22       4       0.13         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG12       1:A:99:LEU:HD23       4       0.13         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD21       4       0.13         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD22       4       0.13	(1,13)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:131:GLU:H	8	0.13
(1,1275)       1:A:90:VAL:HG11       1:A:99:LEU:HD22       4       0.13         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG11       1:A:99:LEU:HD23       4       0.13         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG12       1:A:99:LEU:HD21       4       0.13         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG12       1:A:99:LEU:HD22       4       0.13         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG12       1:A:99:LEU:HD23       4       0.13         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD21       4       0.13         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD22       4       0.13	(1,13)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:131:GLU:H	8	0.13
(1,1275)       1:A:90:VAL:HG11       1:A:99:LEU:HD22       4       0.13         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG11       1:A:99:LEU:HD23       4       0.13         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG12       1:A:99:LEU:HD21       4       0.13         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG12       1:A:99:LEU:HD22       4       0.13         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG12       1:A:99:LEU:HD23       4       0.13         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD21       4       0.13         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD22       4       0.13	(1,1275)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD21	4	0.13
(1,1275)       1:A:90:VAL:HG12       1:A:99:LEU:HD21       4       0.13         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG12       1:A:99:LEU:HD22       4       0.13         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG12       1:A:99:LEU:HD23       4       0.13         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD21       4       0.13         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD22       4       0.13         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD22       4       0.13		1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD22	4	0.13
(1,1275)       1:A:90:VAL:HG12       1:A:99:LEU:HD22       4       0.13         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG12       1:A:99:LEU:HD23       4       0.13         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD21       4       0.13         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD22       4       0.13	(1,1275)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD23	4	0.13
(1,1275)       1:A:90:VAL:HG12       1:A:99:LEU:HD22       4       0.13         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG12       1:A:99:LEU:HD23       4       0.13         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD21       4       0.13         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD22       4       0.13	(1,1275)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD21	4	0.13
(1,1275)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD21       4       0.13         (1,1275)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD22       4       0.13		1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD22	4	0.13
(1,1275) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD22 4 0.13	(1,1275)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD23	4	0.13
	(1,1275)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD21	4	0.13
	(1,1275)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD22	4	0.13
( , ,	(1,1275)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD23	4	0.13



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD21	15	0.13
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD22	15	0.13
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD23	15	0.13
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD21	15	0.13
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD22	15	0.13
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD23	15	0.13
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD21	15	0.13
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD22	15	0.13
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD23	15	0.13
(1,127)	1:A:21:GLN:H	1:A:23:ASN:H	10	0.13
(1,1258)	1:A:115:CYS:H	1:A:101:HIS:H	17	0.13
(1,1257)	1:A:102:VAL:H	1:A:88:THR:H	5	0.13
(1,1256)	1:A:100:GLY:H	1:A:90:VAL:H	4	0.13
(1,1248)	1:A:144:LEU:HD11	1:A:145:GLU:H	16	0.13
(1,1248)	1:A:144:LEU:HD12	1:A:145:GLU:H	16	0.13
(1,1248)	1:A:144:LEU:HD13	1:A:145:GLU:H	16	0.13
(1,124)	1:A:5:LYS:H	1:A:7:GLU:H	15	0.13
(1,1237)	1:A:22:ASN:H	1:A:22:ASN:HD21	4	0.13
(1,1233)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:22:ASN:H	1	0.13
(1,1233)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:22:ASN:H	1	0.13
(1,1233)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:22:ASN:H	1	0.13
(1,1230)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG11	8	0.13
(1,1230)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG12	8	0.13
(1,1230)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG13	8	0.13
(1,1209)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:137:TYR:H	14	0.13
(1,1209)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:137:TYR:H	14	0.13
(1,1209)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:137:TYR:H	14	0.13
(1,1205)	1:A:134:TYR:H	1:A:138:LEU:HD11	8	0.13
(1,1205)	1:A:134:TYR:H	1:A:138:LEU:HD12	8	0.13
(1,1205)	1:A:134:TYR:H	1:A:138:LEU:HD13	8	0.13
(1,1195)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG21	1	0.13
(1,1195)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG22	1	0.13
(1,1195)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG23	1	0.13
(1,1194)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD21	19	0.13
(1,1194)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD22	19	0.13
(1,1194)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD23	19	0.13
(1,119)	1:A:88:THR:H	1:A:102:VAL:H	2	0.13
(1,1189)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:120:ALA:H	1	0.13
(1,1189)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:120:ALA:H	1	0.13
(1,1189)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:120:ALA:H	1	0.13
(1,1189)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:120:ALA:H	4	0.13
(1,1189)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:120:ALA:H	4	0.13



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1189)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:120:ALA:H	4	0.13
(1,1189)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:120:ALA:H	15	0.13
(1,1189)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:120:ALA:H	15	0.13
(1,1189)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:120:ALA:H	15	0.13
(1,1187)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD21	6	0.13
(1,1187)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD22	6	0.13
(1,1187)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD23	6	0.13
(1,1181)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:102:VAL:H	3	0.13
(1,1181)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:102:VAL:H	3	0.13
(1,1181)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:102:VAL:H	3	0.13
(1,1174)	1:A:99:LEU:H	1:A:116:ILE:HD11	7	0.13
(1,1174)	1:A:99:LEU:H	1:A:116:ILE:HD12	7	0.13
(1,1174)	1:A:99:LEU:H	1:A:116:ILE:HD13	7	0.13
(1,1158)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:87:ARG:H	19	0.13
(1,1158)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:87:ARG:H	19	0.13
(1,1158)	1:A:79:LEU:HD13	1:A:87:ARG:H	19	0.13
(1,1138)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:52:PHE:H	2	0.13
(1,1138)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:52:PHE:H	2	0.13
(1,1138)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:52:PHE:H	2	0.13
(1,1133)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:51:LEU:H	15	0.13
(1,1133)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:51:LEU:H	15	0.13
(1,1133)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:51:LEU:H	15	0.13
(1,1117)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:42:TYR:H	17	0.13
(1,1117)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:42:TYR:H	17	0.13
(1,1117)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:42:TYR:H	17	0.13
(1,1103)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:10:LYS:H	11	0.13
(1,1103)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:10:LYS:H	11	0.13
(1,1103)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:10:LYS:H	11	0.13
(1,1100)	1:A:8:LYS:H	1:A:9:ILE:HD11	18	0.13
(1,1100)	1:A:8:LYS:H	1:A:9:ILE:HD12	18	0.13
(1,1100)	1:A:8:LYS:H	1:A:9:ILE:HD13	18	0.13
(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD21	5	0.13
(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD22	5	0.13
(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD23	5	0.13
(1,1090)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:113:ARG:H	1	0.13
(1,1090)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:113:ARG:H	1	0.13
(1,1090)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:113:ARG:H	1	0.13
(1,1090)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:113:ARG:H	10	0.13
(1,1090)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:113:ARG:H	10	0.13
(1,1090)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:113:ARG:H	10	0.13
(1,1082)	1:A:46:VAL:HG11	1:A:48:GLY:H	7	0.13
(1,1082)	1:A:46:VAL:HG12	1:A:48:GLY:H	7	0.13



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1082)	1:A:46:VAL:HG13	1:A:48:GLY:H	7	0.13
	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD21	17	0.13
(1,1064)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD22	17	0.13
(1,1064)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD23	17	0.13
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD21	7	0.13
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD22	7	0.13
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD23	7	0.13
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD21	7	0.13
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD22	7	0.13
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD23	7	0.13
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD21	7	0.13
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD22	7	0.13
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD23	7	0.13
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD21	9	0.13
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD22	9	0.13
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD23	9	0.13
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD21	9	0.13
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD22	9	0.13
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD23	9	0.13
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD21	9	0.13
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD22	9	0.13
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD23	9	0.13
(1,1044)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:129:LEU:HD21	2	0.13
(1,1044)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:129:LEU:HD22	2	0.13
(1,1044)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:129:LEU:HD23	2	0.13
(1,1044)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:129:LEU:HD21	2	0.13
(1,1044)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:129:LEU:HD22	2	0.13
(1,1044)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:129:LEU:HD23	2	0.13
(1,1044)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:129:LEU:HD21	2	0.13
(1,1044)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:129:LEU:HD22	2	0.13
(1,1044)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:129:LEU:HD23	2	0.13
(1,1020)	1:A:131:GLU:H	1:A:133:GLY:H	20	0.13
(1,1019)	1:A:132:GLU:H	1:A:134:TYR:H	18	0.13
(1,1011)	1:A:41:LEU:H	1:A:126:LYS:H	11	0.13
(1,1006)	1:A:45:ILE:H	1:A:122:ARG:H	2	0.13
(1,984)	1:A:92:SER:H	1:A:98:HIS:H	2	0.12
(1,982)	1:A:76:GLU:H	1:A:91:ARG:H	8	0.12
(1,981)	1:A:90:VAL:H	1:A:101:HIS:H	10	0.12
(1,974)	1:A:79:LEU:H	1:A:89:GLU:H	5	0.12
(1,974)	1:A:79:LEU:H	1:A:89:GLU:H	18	0.12
(1,974)	1:A:79:LEU:H	1:A:89:GLU:H	19	0.12
(1,957)	1:A:41:LEU:H	1:A:124:VAL:H	14	0.12



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,944)	1:A:15:MET:H	1:A:18:GLU:H	13	0.12
(1,943)	1:A:14:ARG:H	1:A:17:TYR:H	9	0.12
(1,943)	1:A:14:ARG:H	1:A:17:TYR:H	20	0.12
(1,930)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:H	17	0.12
(1,912)	1:A:21:GLN:H	1:A:24:GLY:H	7	0.12
(1,911)	1:A:19:VAL:H	1:A:21:GLN:H	13	0.12
(1,893)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD11	2	0.12
(1,893)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD12	2	0.12
(1,893)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD13	2	0.12
(1,892)	1:A:121:LEU:HD11	1:A:122:ARG:H	8	0.12
(1,892)	1:A:121:LEU:HD12	1:A:122:ARG:H	8	0.12
(1,892)	1:A:121:LEU:HD13	1:A:122:ARG:H	8	0.12
(1,892)	1:A:121:LEU:HD11	1:A:122:ARG:H	9	0.12
(1,892)	1:A:121:LEU:HD12	1:A:122:ARG:H	9	0.12
(1,892)	1:A:121:LEU:HD13	1:A:122:ARG:H	9	0.12
(1,870)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:71:ILE:HD11	10	0.12
(1,870)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:71:ILE:HD12	10	0.12
(1,870)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:71:ILE:HD13	10	0.12
(1,870)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:71:ILE:HD11	10	0.12
(1,870)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:71:ILE:HD12	10	0.12
(1,870)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:71:ILE:HD13	10	0.12
(1,870)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:71:ILE:HD11	10	0.12
(1,870)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:71:ILE:HD12	10	0.12
(1,870)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:71:ILE:HD13	10	0.12
(1,870)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:71:ILE:HD11	14	0.12
(1,870)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:71:ILE:HD12	14	0.12
(1,870)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:71:ILE:HD13	14	0.12
(1,870)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:71:ILE:HD11	14	0.12
(1,870)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:71:ILE:HD12	14	0.12
(1,870)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:71:ILE:HD13	14	0.12
(1,870)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:71:ILE:HD11	14	0.12
(1,870)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:71:ILE:HD12	14	0.12
(1,870)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:71:ILE:HD13	14	0.12
(1,864)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:74:GLU:H	6	0.12
(1,864)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:74:GLU:H	6	0.12
(1,864)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:74:GLU:H	6	0.12
(1,845)	1:A:75:VAL:HG11	1:A:102:VAL:HG21	5	0.12
(1,845)	1:A:75:VAL:HG11	1:A:102:VAL:HG22	5	0.12
(1,845)	1:A:75:VAL:HG11	1:A:102:VAL:HG23	5	0.12
(1,845)	1:A:75:VAL:HG12	1:A:102:VAL:HG21	5	0.12
(1,845)	1:A:75:VAL:HG12	1:A:102:VAL:HG22	5	0.12
(1,845)	1:A:75:VAL:HG12	1:A:102:VAL:HG23	5	0.12



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

(1,845)         1:A:75:VAL:HG13         1:A:102:VAL:HG21         5         0.12           (1,845)         1:A:75:VAL:HG13         1:A:102:VAL:HG22         5         0.12           (1,845)         1:A:75:VAL:HG13         1:A:102:VAL:HG23         5         0.12           (1,845)         1:A:75:VAL:HG13         1:A:12:LEU:H         15         0.12           (1,846)         1:A:19:VAL:HG11         1:A:117:ASN:H         18         0.12           (1,837)         1:A:19:VAL:HG12         1:A:117:ASN:H         18         0.12           (1,837)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         20         0.12           (1,837)         1:A:19:VAL:HG11         1:A:117:ASN:H         20         0.12           (1,837)         1:A:19:VAL:HG12         1:A:117:ASN:H         20         0.12           (1,837)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         20         0.12           (1,833)         1:A:9:IE:H         1:A:12:LEU:H <th>ı (Å)</th>	ı (Å)
(1,845)         1:A:75:VAL:HG13         1:A:102:VAL:HG23         5         0.12           (1,84)         1:A:10:LYS:H         1:A:12:LEU:H         15         0.12           (1,837)         1:A:19:VAL:HG11         1:A:117:ASN:H         18         0.12           (1,837)         1:A:19:VAL:HG12         1:A:117:ASN:H         18         0.12           (1,837)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         20         0.12           (1,837)         1:A:19:VAL:HG11         1:A:117:ASN:H         20         0.12           (1,837)         1:A:19:VAL:HG12         1:A:117:ASN:H         20         0.12           (1,837)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         20         0.12           (1,837)         1:A:49:ILE:H         1:A:12:LEU:H	
(1,84)         1:A:10:LYS:H         1:A:12:LEU:H         15         0.12           (1,837)         1:A:19:VAL:HG11         1:A:117:ASN:H         18         0.12           (1,837)         1:A:19:VAL:HG12         1:A:117:ASN:H         18         0.12           (1,837)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         20         0.12           (1,837)         1:A:19:VAL:HG12         1:A:117:ASN:H         20         0.12           (1,837)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         20         0.12           (1,837)         1:A:49:ILE:H         1:A:12:LEU:H         17         0.12           (1,83)         1:A:49:ILE:H         1:A:40:CEU:H         19         0.12           (1,807)         1:A:49:SER:H         1:A:49:GASP:H         19         0.12           (1,8)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:42:TYR:H         16         0.12           (1,8)         1:A:44:ASP:H         1:A:12:LEU:H         16	
(1,837)         1:A:19:VAL:HG11         1:A:117:ASN:H         18         0.12           (1,837)         1:A:19:VAL:HG12         1:A:117:ASN:H         18         0.12           (1,837)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         18         0.12           (1,837)         1:A:19:VAL:HG11         1:A:117:ASN:H         20         0.12           (1,837)         1:A:19:VAL:HG12         1:A:117:ASN:H         20         0.12           (1,837)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         20         0.12           (1,83)         1:A:9:ILE:H         1:A:12:LEU:H         17         0.12           (1,80)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:42:TYR:H         16         0.12           (1,8)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:42:TYR:H         16         0.12           (1,793)         1:A:44:ASP:H         1:A:12:ZEARG:H         11         0.12           (1,799)         1:A:13:0:LYS:H         1:A:13:ZEU:H <td< td=""><td></td></td<>	
(1,837)         1:A:19:VAL:HG12         1:A:117:ASN:H         18         0.12           (1,837)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         18         0.12           (1,837)         1:A:19:VAL:HG11         1:A:117:ASN:H         20         0.12           (1,837)         1:A:19:VAL:HG12         1:A:117:ASN:H         20         0.12           (1,837)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         20         0.12           (1,837)         1:A:9:ILE:H         1:A:117:ASN:H         20         0.12           (1,83)         1:A:9:ILE:H         1:A:117:ASN:H         20         0.12           (1,83)         1:A:9:ILE:H         1:A:12:LEU:H         17         0.12           (1,83)         1:A:92:SER:H         1:A:96:ASP:H         19         0.12           (1,807)         1:A:49:SER:H         1:A:42:TYR:H         16         0.12           (1,8)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:42:TYR:H         16         0.12           (1,8)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:42:TYR:H         16         0.12           (1,793)         1:A:44:ASP:H         1:A:122:ARG:H         11         0.12           (1,791)         1:A:13:10:LYS:H         1:A:132:GLU:H         2 <t< td=""><td></td></t<>	
(1,837)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         18         0.12           (1,837)         1:A:19:VAL:HG11         1:A:117:ASN:H         20         0.12           (1,837)         1:A:19:VAL:HG12         1:A:117:ASN:H         20         0.12           (1,837)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         20         0.12           (1,837)         1:A:9:ILE:H         1:A:12:LEU:H         17         0.12           (1,83)         1:A:9:ILE:H         1:A:12:LEU:H         20         0.12           (1,83)         1:A:9:ILE:H         1:A:96:ASP:H         19         0.12           (1,807)         1:A:92:SER:H         1:A:96:ASP:H         19         0.12           (1,807)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:42:TYR:H         16         0.12           (1,8)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:42:TYR:H         16         0.12           (1,8)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:42:TYR:H         16         0.12           (1,793)         1:A:44:ASP:H         1:A:12:A:12:AG:H         1         0.12           (1,799)         1:A:10:LYS:H         1:A:13:CLEU:H         2         0.12           (1,728)         1:A:9:ILE:H         1:A:12:LEU:H         17         0.	
(1,837)         1:A:19:VAL:HG11         1:A:117:ASN:H         20         0.12           (1,837)         1:A:19:VAL:HG12         1:A:117:ASN:H         20         0.12           (1,837)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         20         0.12           (1,83)         1:A:9:ILE:H         1:A:12:LEU:H         17         0.12           (1,83)         1:A:9:ILE:H         1:A:12:LEU:H         20         0.12           (1,807)         1:A:9:ISER:H         1:A:96:ASP:H         19         0.12           (1,807)         1:A:92:SER:H         1:A:96:ASP:H         19         0.12           (1,8)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:42:TYR:H         16         0.12           (1,8)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:42:TYR:H         16         0.12           (1,8)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:42:TYR:H         16         0.12           (1,793)         1:A:44:ASP:H         1:A:12:2:ARG:H         11         0.12           (1,791)         1:A:130:LYS:H         1:A:13:2:GLU:H         2         0.12           (1,729)         1:A:10:LYS:H         1:A:12:LEU:H         17         0.12           (1,728)         1:A:9:ILE:H         1:A:12:LEU:H         17         0.12 </td <td></td>	
(1,837)         1:A:19:VAL:HG12         1:A:117:ASN:H         20         0.12           (1,837)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         20         0.12           (1,83)         1:A:9:ILE:H         1:A:12:LEU:H         17         0.12           (1,83)         1:A:9:ILE:H         1:A:12:LEU:H         20         0.12           (1,807)         1:A:92:SER:H         1:A:96:ASP:H         19         0.12           (1,807)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:42:TYR:H         16         0.12           (1,8)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:42:TYR:H         16         0.12           (1,8)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:42:TYR:H         16         0.12           (1,8)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:42:TYR:H         16         0.12           (1,793)         1:A:44:ASP:H         1:A:12:2:ARG:H         11         0.12           (1,791)         1:A:130:LYS:H         1:A:132:GLU:H         2         0.12           (1,729)         1:A:10:LYS:H         1:A:12:LEU:H         15         0.12           (1,728)         1:A:9:ILE:H         1:A:12:LEU:H         17         0.12           (1,702)         1:A:112:LEU:HD11         1:A:113:ARG:H         15         0.1	
(1,837)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:117:ASN:H         20         0.12           (1,83)         1:A:9:ILE:H         1:A:12:LEU:H         17         0.12           (1,83)         1:A:9:ILE:H         1:A:12:LEU:H         20         0.12           (1,807)         1:A:92:SER:H         1:A:96:ASP:H         19         0.12           (1,807)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:42:TYR:H         16         0.12           (1,8)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:42:TYR:H         16         0.12           (1,8)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:42:TYR:H         16         0.12           (1,793)         1:A:44:ASP:H         1:A:12:ARG:H         11         0.12           (1,791)         1:A:130:LYS:H         1:A:132:GLU:H         2         0.12           (1,729)         1:A:10:LYS:H         1:A:12:LEU:H         15         0.12           (1,728)         1:A:9:ILE:H         1:A:12:LEU:H         17         0.12           (1,702)         1:A:112:LEU:HD11         1:A:113:ARG:H         15         0.12           (1,702)         1:A:112:LEU:HD12         1:A:113:ARG:H         15         0.12	
(1,83)         1:A:9:ILE:H         1:A:12:LEU:H         17         0.12           (1,83)         1:A:9:ILE:H         1:A:12:LEU:H         20         0.12           (1,807)         1:A:92:SER:H         1:A:96:ASP:H         19         0.12           (1,8)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:42:TYR:H         16         0.12           (1,8)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:42:TYR:H         16         0.12           (1,8)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:42:TYR:H         16         0.12           (1,793)         1:A:44:ASP:H         1:A:12:ARG:H         11         0.12           (1,791)         1:A:130:LYS:H         1:A:132:GLU:H         2         0.12           (1,729)         1:A:10:LYS:H         1:A:12:LEU:H         15         0.12           (1,728)         1:A:9:ILE:H         1:A:12:LEU:H         17         0.12           (1,702)         1:A:112:LEU:HD11         1:A:113:ARG:H         15         0.12           (1,702)         1:A:112:LEU:HD12         1:A:113:ARG:H         15         0.12	
(1,83)         1:A:9:ILE:H         1:A:12:LEU:H         20         0.12           (1,807)         1:A:92:SER:H         1:A:96:ASP:H         19         0.12           (1,8)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:42:TYR:H         16         0.12           (1,8)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:42:TYR:H         16         0.12           (1,8)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:42:TYR:H         16         0.12           (1,793)         1:A:44:ASP:H         1:A:122:ARG:H         11         0.12           (1,791)         1:A:130:LYS:H         1:A:132:GLU:H         2         0.12           (1,729)         1:A:10:LYS:H         1:A:12:LEU:H         15         0.12           (1,728)         1:A:9:ILE:H         1:A:12:LEU:H         17         0.12           (1,702)         1:A:112:LEU:HD11         1:A:113:ARG:H         15         0.12           (1,702)         1:A:112:LEU:HD12         1:A:113:ARG:H         15         0.12	
(1,807)       1:A:92:SER:H       1:A:96:ASP:H       19       0.12         (1,8)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:42:TYR:H       16       0.12         (1,8)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:42:TYR:H       16       0.12         (1,8)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:42:TYR:H       16       0.12         (1,793)       1:A:44:ASP:H       1:A:122:ARG:H       11       0.12         (1,791)       1:A:130:LYS:H       1:A:132:GLU:H       2       0.12         (1,729)       1:A:10:LYS:H       1:A:12:LEU:H       15       0.12         (1,728)       1:A:9:ILE:H       1:A:12:LEU:H       17       0.12         (1,702)       1:A:112:LEU:HD11       1:A:113:ARG:H       15       0.12         (1,702)       1:A:112:LEU:HD12       1:A:113:ARG:H       15       0.12	
(1,8)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:42:TYR:H       16       0.12         (1,8)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:42:TYR:H       16       0.12         (1,8)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:42:TYR:H       16       0.12         (1,793)       1:A:44:ASP:H       1:A:122:ARG:H       11       0.12         (1,791)       1:A:130:LYS:H       1:A:132:GLU:H       2       0.12         (1,729)       1:A:10:LYS:H       1:A:12:LEU:H       15       0.12         (1,728)       1:A:9:ILE:H       1:A:12:LEU:H       17       0.12         (1,702)       1:A:112:LEU:HD11       1:A:113:ARG:H       15       0.12         (1,702)       1:A:112:LEU:HD12       1:A:113:ARG:H       15       0.12	
(1,8)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:42:TYR:H       16       0.12         (1,8)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:42:TYR:H       16       0.12         (1,793)       1:A:44:ASP:H       1:A:122:ARG:H       11       0.12         (1,791)       1:A:130:LYS:H       1:A:132:GLU:H       2       0.12         (1,729)       1:A:10:LYS:H       1:A:12:LEU:H       15       0.12         (1,728)       1:A:9:ILE:H       1:A:12:LEU:H       17       0.12         (1,702)       1:A:112:LEU:HD11       1:A:113:ARG:H       15       0.12         (1,702)       1:A:112:LEU:HD12       1:A:113:ARG:H       15       0.12	
(1,8)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:42:TYR:H       16       0.12         (1,793)       1:A:44:ASP:H       1:A:122:ARG:H       11       0.12         (1,791)       1:A:130:LYS:H       1:A:132:GLU:H       2       0.12         (1,729)       1:A:10:LYS:H       1:A:12:LEU:H       15       0.12         (1,728)       1:A:9:ILE:H       1:A:12:LEU:H       17       0.12         (1,728)       1:A:9:ILE:H       1:A:12:LEU:H       20       0.12         (1,702)       1:A:112:LEU:HD11       1:A:113:ARG:H       15       0.12         (1,702)       1:A:112:LEU:HD12       1:A:113:ARG:H       15       0.12	
(1,8)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:42:TYR:H       16       0.12         (1,793)       1:A:44:ASP:H       1:A:122:ARG:H       11       0.12         (1,791)       1:A:130:LYS:H       1:A:132:GLU:H       2       0.12         (1,729)       1:A:10:LYS:H       1:A:12:LEU:H       15       0.12         (1,728)       1:A:9:ILE:H       1:A:12:LEU:H       17       0.12         (1,728)       1:A:9:ILE:H       1:A:12:LEU:H       20       0.12         (1,702)       1:A:112:LEU:HD11       1:A:113:ARG:H       15       0.12         (1,702)       1:A:112:LEU:HD12       1:A:113:ARG:H       15       0.12	
(1,791)       1:A:130:LYS:H       1:A:132:GLU:H       2       0.12         (1,729)       1:A:10:LYS:H       1:A:12:LEU:H       15       0.12         (1,728)       1:A:9:ILE:H       1:A:12:LEU:H       17       0.12         (1,728)       1:A:9:ILE:H       1:A:12:LEU:H       20       0.12         (1,702)       1:A:112:LEU:HD11       1:A:113:ARG:H       15       0.12         (1,702)       1:A:112:LEU:HD12       1:A:113:ARG:H       15       0.12	
(1,791)       1:A:130:LYS:H       1:A:132:GLU:H       2       0.12         (1,729)       1:A:10:LYS:H       1:A:12:LEU:H       15       0.12         (1,728)       1:A:9:ILE:H       1:A:12:LEU:H       17       0.12         (1,728)       1:A:9:ILE:H       1:A:12:LEU:H       20       0.12         (1,702)       1:A:112:LEU:HD11       1:A:113:ARG:H       15       0.12         (1,702)       1:A:112:LEU:HD12       1:A:113:ARG:H       15       0.12	
(1,728)       1:A:9:ILE:H       1:A:12:LEU:H       17       0.12         (1,728)       1:A:9:ILE:H       1:A:12:LEU:H       20       0.12         (1,702)       1:A:112:LEU:HD11       1:A:113:ARG:H       15       0.12         (1,702)       1:A:112:LEU:HD12       1:A:113:ARG:H       15       0.12	
(1,728)       1:A:9:ILE:H       1:A:12:LEU:H       20       0.12         (1,702)       1:A:112:LEU:HD11       1:A:113:ARG:H       15       0.12         (1,702)       1:A:112:LEU:HD12       1:A:113:ARG:H       15       0.12	
(1,702)       1:A:112:LEU:HD11       1:A:113:ARG:H       15       0.12         (1,702)       1:A:112:LEU:HD12       1:A:113:ARG:H       15       0.12	
(1,702) 1:A:112:LEU:HD12 1:A:113:ARG:H 15 0.12	
( ) /	
(1.702) 1·A·112·LEU·HD13 1·A·113·ARC·H 15 0.19	
(1,102) $(1.11.112.112.112.112.112.112.112.112.11$	
(1,698) 1:A:129:LEU:H 1:A:138:LEU:HD21 4 0.12	
(1,698) 1:A:129:LEU:H 1:A:138:LEU:HD22 4 0.12	
(1,698) 1:A:129:LEU:H 1:A:138:LEU:HD23 4 0.12	
(1,690) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD11 3 0.12	
(1,690) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD12 3 0.12	
(1,690) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD13 3 0.12	
(1,671) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD11 2 0.12	
(1,671) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD12 2 0.12	
(1,671) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD13 2 0.12	
(1,671) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD11 17 0.12	
(1,671) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD12 17 0.12	
(1,671) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD13 17 0.12	
(1,671) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD11 20 0.12	
(1,671) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD12 20 0.12	
(1,671) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD13 20 0.12	
(1,664) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:127:HIS:H 1 0.12	
(1,664) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:127:HIS:H 1 0.12	
(1,664) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:127:HIS:H 1 0.12	



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,664)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:127:HIS:H	10	0.12
(1,664)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:127:HIS:H	10	0.12
(1,664)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:127:HIS:H	10	0.12
(1,658)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:131:GLU:H	16	0.12
(1,658)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:131:GLU:H	16	0.12
(1,658)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:131:GLU:H	16	0.12
(1,653)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:42:TYR:H	16	0.12
(1,653)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:42:TYR:H	16	0.12
(1,653)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:42:TYR:H	16	0.12
(1,647)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:114:TYR:H	1	0.12
(1,647)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:114:TYR:H	1	0.12
(1,647)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:114:TYR:H	1	0.12
(1,630)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD21	8	0.12
(1,630)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD22	8	0.12
(1,630)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD23	8	0.12
(1,630)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD21	8	0.12
(1,630)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD22	8	0.12
(1,630)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD23	8	0.12
(1,630)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD21	8	0.12
(1,630)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD22	8	0.12
(1,630)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD23	8	0.12
(1,619)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:H	8	0.12
(1,619)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:H	8	0.12
(1,619)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:H	8	0.12
(1,619)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:H	15	0.12
(1,619)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:H	15	0.12
(1,619)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:H	15	0.12
(1,619)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:H	17	0.12
(1,619)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:H	17	0.12
(1,619)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:H	17	0.12
(1,612)	1:A:102:VAL:H	1:A:88:THR:H	13	0.12
(1,577)	1:A:111:GLY:H	1:A:112:LEU:HD21	16	0.12
(1,577)	1:A:111:GLY:H	1:A:112:LEU:HD22	16	0.12
(1,577)	1:A:111:GLY:H	1:A:112:LEU:HD23	16	0.12
(1,57)	1:A:112:LEU:HD11	1:A:113:ARG:H	15	0.12
(1,57)	1:A:112:LEU:HD12	1:A:113:ARG:H	15	0.12
(1,57)	1:A:112:LEU:HD13	1:A:113:ARG:H	15	0.12
(1,562)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD21	4	0.12
(1,562)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD22	4	0.12
(1,562)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD23	4	0.12
(1,559)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:132:GLU:H	11	0.12
	1:A:124:VAL:HG12	1:A:132:GLU:H		



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,559)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:132:GLU:H	11	0.12
(1,555)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD11	8	0.12
(1,555)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD12	8	0.12
(1,555)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD13	8	0.12
(1,551)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD11	8	0.12
(1,551)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD12	8	0.12
(1,551)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD13	8	0.12
(1,548)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD11	15	0.12
(1,548)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD12	15	0.12
(1,548)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD13	15	0.12
(1,536)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:102:VAL:H	9	0.12
(1,536)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:102:VAL:H	9	0.12
(1,536)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:102:VAL:H	9	0.12
(1,53)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD21	4	0.12
(1,53)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD22	4	0.12
(1,53)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD23	4	0.12
(1,518)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD11	11	0.12
(1,518)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD12	11	0.12
(1,518)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD13	11	0.12
(1,505)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:76:GLU:H	4	0.12
(1,505)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:76:GLU:H	4	0.12
(1,505)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:76:GLU:H	4	0.12
(1,483)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:49:LYS:H	10	0.12
(1,483)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:49:LYS:H	10	0.12
(1,483)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:49:LYS:H	10	0.12
(1,483)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:49:LYS:H	14	0.12
(1,483)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:49:LYS:H	14	0.12
(1,483)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:49:LYS:H	14	0.12
(1,472)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:42:TYR:H	2	0.12
(1,472)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:42:TYR:H	2	0.12
(1,472)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:42:TYR:H	2	0.12
(1,469)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:24:GLY:H	16	0.12
(1,469)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:24:GLY:H	16	0.12
(1,469)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:24:GLY:H	16	0.12
(1,465)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG11	6	0.12
(1,465)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG12	6	0.12
(1,465)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG13	6	0.12
(1,462)	1:A:45:ILE:HD11	1:A:46:VAL:H	5	0.12
(1,462)	1:A:45:ILE:HD12	1:A:46:VAL:H	5	0.12
(1,462)	1:A:45:ILE:HD13	1:A:46:VAL:H	5	0.12
(1,455)	1:A:8:LYS:H	1:A:9:ILE:HD11	3	0.12
(1,455)	1:A:8:LYS:H	1:A:9:ILE:HD12	3	0.12



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,455)	1:A:8:LYS:H	1:A:9:ILE:HD13	3	0.12
(1,453)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG21	9	0.12
(1,453)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG22	9	0.12
(1,453)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG23	9	0.12
(1,451)	1:A:75:VAL:HG11	1:A:91:ARG:H	10	0.12
(1,451)	1:A:75:VAL:HG12	1:A:91:ARG:H	10	0.12
(1,451)	1:A:75:VAL:HG13	1:A:91:ARG:H	10	0.12
(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD11	3	0.12
(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD12	3	0.12
(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD13	3	0.12
(1,435)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:26:GLU:H	20	0.12
(1,435)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:26:GLU:H	20	0.12
(1,435)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:26:GLU:H	20	0.12
(1,431)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:103:PHE:H	2	0.12
(1,431)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:103:PHE:H	2	0.12
(1,431)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:103:PHE:H	2	0.12
(1,407)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:46:VAL:HG21	3	0.12
(1,407)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:46:VAL:HG22	3	0.12
(1,407)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:46:VAL:HG23	3	0.12
(1,407)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:46:VAL:HG21	3	0.12
(1,407)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:46:VAL:HG22	3	0.12
(1,407)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:46:VAL:HG23	3	0.12
(1,407)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:46:VAL:HG21	3	0.12
(1,407)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:46:VAL:HG22	3	0.12
(1,407)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:46:VAL:HG23	3	0.12
(1,407)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:46:VAL:HG21	13	0.12
(1,407)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:46:VAL:HG22	13	0.12
(1,407)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:46:VAL:HG23	13	0.12
(1,407)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:46:VAL:HG21	13	0.12
(1,407)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:46:VAL:HG22	13	0.12
(1,407)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:46:VAL:HG23	13	0.12
(1,407)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:46:VAL:HG21	13	0.12
(1,407)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:46:VAL:HG22	13	0.12
(1,407)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:46:VAL:HG23	13	0.12
(1,393)	1:A:12:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HG11	13	0.12
(1,393)	1:A:12:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HG12	13	0.12
(1,393)	1:A:12:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HG13	13	0.12
(1,393)	1:A:12:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HG11	13	0.12
(1,393)	1:A:12:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HG12	13	0.12
(1,393)	1:A:12:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HG13	13	0.12
(1,393)	1:A:12:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HG11	13	0.12
(1,393)	1:A:12:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HG12	13	0.12



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

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



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,225)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:71:ILE:HD11	14	0.12
(1,225)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:71:ILE:HD12	14	0.12
(1,225)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:71:ILE:HD13	14	0.12
(1,225)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:71:ILE:HD11	14	0.12
(1,225)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:71:ILE:HD12	14	0.12
(1,225)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:71:ILE:HD13	14	0.12
(1,225)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:71:ILE:HD11	14	0.12
(1,225)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:71:ILE:HD12	14	0.12
(1,225)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:71:ILE:HD13	14	0.12
(1,219)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:74:GLU:H	6	0.12
(1,219)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:74:GLU:H	6	0.12
(1,219)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:74:GLU:H	6	0.12
(1,200)	1:A:75:VAL:HG11	1:A:102:VAL:HG21	5	0.12
(1,200)	1:A:75:VAL:HG11	1:A:102:VAL:HG22	5	0.12
(1,200)	1:A:75:VAL:HG11	1:A:102:VAL:HG23	5	0.12
(1,200)	1:A:75:VAL:HG12	1:A:102:VAL:HG21	5	0.12
(1,200)	1:A:75:VAL:HG12	1:A:102:VAL:HG22	5	0.12
(1,200)	1:A:75:VAL:HG12	1:A:102:VAL:HG23	5	0.12
(1,200)	1:A:75:VAL:HG13	1:A:102:VAL:HG21	5	0.12
(1,200)	1:A:75:VAL:HG13	1:A:102:VAL:HG22	5	0.12
(1,200)	1:A:75:VAL:HG13	1:A:102:VAL:HG23	5	0.12
(1,2)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:114:TYR:H	1	0.12
(1,2)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:114:TYR:H	1	0.12
(1,2)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:114:TYR:H	1	0.12
(1,192)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:H	18	0.12
(1,192)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:H	18	0.12
(1,192)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:H	18	0.12
(1,192)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:H	20	0.12
(1,192)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:H	20	0.12
(1,192)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:H	20	0.12
(1,19)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:127:HIS:H	1	0.12
(1,19)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:127:HIS:H	1	0.12
(1,19)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:127:HIS:H	1	0.12
(1,19)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:127:HIS:H	10	0.12
(1,19)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:127:HIS:H	10	0.12
(1,19)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:127:HIS:H	10	0.12
(1,162)	1:A:92:SER:H	1:A:96:ASP:H	19	0.12
(1,148)	1:A:44:ASP:H	1:A:122:ARG:H	11	0.12
(1,146)	1:A:130:LYS:H	1:A:132:GLU:H	2	0.12
(1,13)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:131:GLU:H	16	0.12
(1,13)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:131:GLU:H	16	0.12
(1,13)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:131:GLU:H	16	0.12



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD21	8	0.12
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD22	8	0.12
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD23	8	0.12
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD21	8	0.12
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD22	8	0.12
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD23	8	0.12
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD21	8	0.12
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD22	8	0.12
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD23	8	0.12
(1,1264)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:H	8	0.12
(1,1264)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:H	8	0.12
(1,1264)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:H	8	0.12
(1,1264)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:H	15	0.12
(1,1264)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:H	15	0.12
(1,1264)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:H	15	0.12
(1,1264)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:H	17	0.12
(1,1264)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:H	17	0.12
(1,1264)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:H	17	0.12
(1,1257)	1:A:102:VAL:H	1:A:88:THR:H	13	0.12
(1,1222)	1:A:111:GLY:H	1:A:112:LEU:HD21	16	0.12
(1,1222)	1:A:111:GLY:H	1:A:112:LEU:HD22	16	0.12
(1,1222)	1:A:111:GLY:H	1:A:112:LEU:HD23	16	0.12
(1,1207)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD21	4	0.12
(1,1207)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD22	4	0.12
(1,1207)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD23	4	0.12
(1,1204)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:132:GLU:H	11	0.12
(1,1204)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:132:GLU:H	11	0.12
(1,1204)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:132:GLU:H	11	0.12
(1,1200)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD11	8	0.12
(1,1200)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD12	8	0.12
(1,1200)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD13	8	0.12
(1,1196)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD11	8	0.12
(1,1196)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD12	8	0.12
(1,1196)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD13	8	0.12
(1,1193)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD11	15	0.12
(1,1193)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD12	15	0.12
(1,1193)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD13	15	0.12
(1,1181)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:102:VAL:H	9	0.12
(1,1181)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:102:VAL:H	9	0.12
(1,1181)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:102:VAL:H	9	0.12
(1,1163)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD11	11	0.12
(1,1163)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD12	11	0.12



Continued from previous page...

(1,1163)         1:A:115:CYS:H         1:A:16:ILE:HD13         11         0.12           (1,1150)         1:A:75:VAL:HG22         1:A:76:GLU:H         4         0.12           (1,1150)         1:A:75:VAL:HG22         1:A:76:GLU:H         4         0.12           (1,1150)         1:A:75:VAL:HG23         1:A:76:GLU:H         4         0.12           (1,1128)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:49:LYS:H         10         0.12           (1,1128)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:49:LYS:H         10         0.12           (1,1128)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:49:LYS:H         10         0.12           (1,1128)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:49:LYS:H         14         0.12           (1,1128)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:49:LYS:H         14         0.12           (1,1128)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:49:LYS:H         14         0.12           (1,1117)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:42:TYR:H         2         0.12           (1,1117)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:42:TYR:H         2         0.12           (1,1114)         1:A:49:VAL:HG21         1:A:42:GLY:H         16         0.12           (1,1114)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:42:GLY:H	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1150)   1:A:75:VAL:HG22   1:A:76:GLU:H   4   0.12   (1,1150)   1:A:75:VAL:HG23   1:A:76:GLU:H   4   0.12   (1,1128)   1:A:46:VAL:HG21   1:A:49:LYS:H   10   0.12   (1,1128)   1:A:46:VAL:HG21   1:A:49:LYS:H   10   0.12   (1,1128)   1:A:46:VAL:HG23   1:A:49:LYS:H   10   0.12   (1,1128)   1:A:46:VAL:HG23   1:A:49:LYS:H   14   0.12   (1,1128)   1:A:46:VAL:HG21   1:A:49:LYS:H   14   0.12   (1,1128)   1:A:46:VAL:HG22   1:A:49:LYS:H   14   0.12   (1,1128)   1:A:46:VAL:HG23   1:A:49:LYS:H   14   0.12   (1,1117)   1:A:41:LEU:HD23   1:A:42:TYR:H   2   0.12   (1,1117)   1:A:41:LEU:HD22   1:A:42:TYR:H   2   0.12   (1,1117)   1:A:41:LEU:HD23   1:A:42:TYR:H   2   0.12   (1,1117)   1:A:41:LEU:HD23   1:A:42:GLY:H   16   0.12   (1,1114)   1:A:19:VAL:HG22   1:A:24:GLY:H   16   0.12   (1,1110)   1:A:17:TYR:H   1:A:46:VAL:HG11   6   0.12   (1,1110)   1:A:17:TYR:H   1:A:46:VAL:HG11   6   0.12   (1,1110)   1:A:17:TYR:H   1:A:46:VAL:HG13   6   0.12   (1,1110)   1:A:45:ILE:HD11   1:A:46:VAL:H   5   0.12   (1,1107)   1:A:45:ILE:HD13   1:A:46:VAL:H   5   0.12   (1,1109)   1:A:8:LYS:H   1:A:9:ILE:HD11   3   0.12   (1,1098)   1:A:44:ASP:H   1:A:9:ILE:HD11   3   0.12   (1,1098)   1:A:44:ASP:H   1:A:9:ILE:HD12   3   0.12   (1,1098)   1:A:44:ASP:H   1:A:46:VAL:HG22   9   0.12   (1,1098)   1:A:44:ASP:H   1:A:46:VAL:HG21   9   0.12   (1,1098)   1:A:44:ASP:H   1:A:46:VAL:HG22   9   0.12   (1,1098)   1:A:44:ASP:H   1:A:46:VAL:HG21   9   0.12   (1,1098)   1:A:44:ASP:H   1:A:46:VAL:HG21   9   0.12   (1,1098)   1:A:44:ASP:H   1:A:46:VAL:HG21   1:A:26:GLU:H   20   0.12   (1,1096)   1:A:75:VAL:HG11   1:A:46:VAL:HG22   3   0.12   (1,1052)   1:A:12:LEU:HD11   1:A:46:VAL:HG21   3   0.12   (1,1052)   1:A:12:LEU:HD11   1:A:4	(1,1163)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD13	11	0.12
(1,1150)         1:A:75:VAL:HG23         1:A:76:GLU:H         4         0.12           (1,1128)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:49:LYS:H         10         0.12           (1,1128)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:49:LYS:H         10         0.12           (1,1128)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:49:LYS:H         14         0.12           (1,1128)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:49:LYS:H         14         0.12           (1,1128)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:49:LYS:H         14         0.12           (1,1128)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:49:LYS:H         14         0.12           (1,1117)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:42:TYR:H         2         0.12           (1,1117)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:42:TYR:H         2         0.12           (1,1114)         1:A:19:VAL:HG21         1:A:24:GLY:H         16         0.12           (1,1114)         1:A:19:VAL:HG22         1:A:24:GLY:H         16         0.12           (1,1114)         1:A:17:TYR:H         1:A:46:VAL:HG11         6         0.12           (1,1110)         1:A:17:TYR:H         1:A:46:VAL:HG12         6         0.12           (1,1107)         1:A:45:ILE:HD11         1:A:46:VAL:H	(1,1150)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:76:GLU:H	4	0.12
(1,1128)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:49:LYS:H         10         0.12           (1,1128)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:49:LYS:H         10         0.12           (1,1128)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:49:LYS:H         10         0.12           (1,1128)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:49:LYS:H         14         0.12           (1,1128)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:49:LYS:H         14         0.12           (1,1128)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:49:LYS:H         14         0.12           (1,1128)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:49:LYS:H         14         0.12           (1,1117)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:42:TYR:H         2         0.12           (1,1117)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:42:TYR:H         2         0.12           (1,1117)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:42:GLY:H         16         0.12           (1,1114)         1:A:19:VAL:HG22         1:A:24:GLY:H         16         0.12           (1,1114)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:24:GLY:H         16         0.12           (1,1110)         1:A:17:TYR:H         1:A:46:VAL:HG11         6         0.12           (1,1110)         1:A:17:TYR:H         1:A:46:VAL:HG13	(1,1150)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:76:GLU:H	4	0.12
(1,1128)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:49:LYS:H         10         0.12           (1,1128)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:49:LYS:H         10         0.12           (1,1128)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:49:LYS:H         14         0.12           (1,1128)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:49:LYS:H         14         0.12           (1,1128)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:49:LYS:H         14         0.12           (1,1117)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:42:TYR:H         2         0.12           (1,1117)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:42:TYR:H         2         0.12           (1,1117)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:42:TYR:H         2         0.12           (1,1117)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:42:GLY:H         16         0.12           (1,1114)         1:A:19:VAL:HG21         1:A:24:GLY:H         16         0.12           (1,1114)         1:A:19:VAL:HG22         1:A:24:GLY:H         16         0.12           (1,1110)         1:A:17:TYR:H         1:A:46:VAL:HG11         6         0.12           (1,1110)         1:A:17:TYR:H         1:A:46:VAL:HG12         6         0.12           (1,1107)         1:A:45:ILE:HD11         1:A:46:VAL:H	(1,1150)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:76:GLU:H	4	0.12
(1,1128)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:49:LYS:H         10         0.12           (1,1128)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:49:LYS:H         14         0.12           (1,1128)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:49:LYS:H         14         0.12           (1,1128)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:49:LYS:H         14         0.12           (1,1117)         1:A:44:LEU:HD21         1:A:42:TYR:H         2         0.12           (1,1117)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:42:TYR:H         2         0.12           (1,1117)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:42:TYR:H         2         0.12           (1,1114)         1:A:19:VAL:HG21         1:A:24:GLY:H         16         0.12           (1,1114)         1:A:19:VAL:HG22         1:A:24:GLY:H         16         0.12           (1,1110)         1:A:17:TYR:H         1:A:46:VAL:HG11         6         0.12           (1,1110)         1:A:17:TYR:H         1:A:46:VAL:HG12         6         0.12           (1,1107)         1:A:45:ILE:HD11         1:A:46:VAL:H         5         0.12           (1,1107)         1:A:45:ILE:HD13         1:A:46:VAL:H         5         0.12           (1,1107)         1:A:38:LYS:H         1:A:9:ILE:HD13	(1,1128)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:49:LYS:H	10	0.12
(1,1128)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:49:LYS:H         14         0.12           (1,1128)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:49:LYS:H         14         0.12           (1,1128)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:49:LYS:H         14         0.12           (1,1117)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:42:TYR:H         2         0.12           (1,1117)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:42:TYR:H         2         0.12           (1,1117)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:42:TYR:H         2         0.12           (1,1114)         1:A:19:VAL:HG21         1:A:24:GLY:H         16         0.12           (1,1114)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:24:GLY:H         16         0.12           (1,1114)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:24:GLY:H         16         0.12           (1,1110)         1:A:17:TYR:H         1:A:46:VAL:HG11         6         0.12           (1,1110)         1:A:17:TYR:H         1:A:46:VAL:HG13         6         0.12           (1,1107)         1:A:45:ILE:HD11         1:A:46:VAL:H         5         0.12           (1,1107)         1:A:45:ILE:HD12         1:A:46:VAL:H         5         0.12           (1,1100)         1:A:8:LYS:H         1:A:9:ILE:HD11	(1,1128)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:49:LYS:H	10	0.12
(1,1128)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:49:LYS:H         14         0.12           (1,1128)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:49:LYS:H         14         0.12           (1,1117)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:42:TYR:H         2         0.12           (1,1117)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:42:TYR:H         2         0.12           (1,1117)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:42:GLY:H         16         0.12           (1,1114)         1:A:19:VAL:HG21         1:A:24:GLY:H         16         0.12           (1,1114)         1:A:19:VAL:HG22         1:A:24:GLY:H         16         0.12           (1,1114)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:24:GLY:H         16         0.12           (1,1110)         1:A:17:TYR:H         1:A:46:VAL:HG11         6         0.12           (1,1110)         1:A:17:TYR:H         1:A:46:VAL:HG13         6         0.12           (1,1107)         1:A:45:LE:HD11         1:A:46:VAL:H         5         0.12           (1,1107)         1:A:45:ILE:HD13         1:A:46:VAL:H         5         0.12           (1,1107)         1:A:45:ILE:HD13         1:A:46:VAL:H         5         0.12           (1,1100)         1:A:8:IVS:H         1:A:9:ILE:HD11	(1,1128)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:49:LYS:H	10	0.12
(1,1128)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:49:LYS:H         14         0.12           (1,1117)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:42:TYR:H         2         0.12           (1,1117)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:42:TYR:H         2         0.12           (1,1117)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:42:TYR:H         2         0.12           (1,1114)         1:A:41:VAL:HG21         1:A:24:GLY:H         16         0.12           (1,1114)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:24:GLY:H         16         0.12           (1,1114)         1:A:419:VAL:HG23         1:A:24:GLY:H         16         0.12           (1,1110)         1:A:17:TYR:H         1:A:46:VAL:HG11         6         0.12           (1,1110)         1:A:17:TYR:H         1:A:46:VAL:HG13         6         0.12           (1,1107)         1:A:45:ILE:HD11         1:A:46:VAL:H         5         0.12           (1,1107)         1:A:45:ILE:HD12         1:A:46:VAL:H         5         0.12           (1,1107)         1:A:45:ILE:HD13         1:A:46:VAL:H         5         0.12           (1,1100)         1:A:8:LYS:H         1:A:9:ILE:HD11         3         0.12           (1,1100)         1:A:36:VAL:HG11         1:A:46:VAL:HG21	(1,1128)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:49:LYS:H	14	0.12
(1,1117)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:42:TYR:H         2         0.12           (1,1117)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:42:TYR:H         2         0.12           (1,1117)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:42:TYR:H         2         0.12           (1,1114)         1:A:19:VAL:HG21         1:A:24:GJY:H         16         0.12           (1,1114)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:24:GJY:H         16         0.12           (1,1110)         1:A:17:TYR:H         1:A:46:VAL:HG11         6         0.12           (1,1110)         1:A:17:TYR:H         1:A:46:VAL:HG12         6         0.12           (1,1107)         1:A:45:ILE:HD11         1:A:46:VAL:H         5         0.12           (1,1107)         1:A:45:ILE:HD12         1:A:46:VAL:H         5         0.12           (1,1107)         1:A:45:ILE:HD13         1:A:46:VAL:H         5         0.12           (1,1107)         1:A:45:ILE:HD13         1:A:46:VAL:H         5         0.12           (1,1100)         1:A:3:LYS:H         1:A:9:ILE:HD11         3         0.12           (1,1100)         1:A:3:LYS:H         1:A:9:ILE:HD13         3         0.12           (1,1098)         1:A:44:ASP:H         1:A:46:VAL:HG21 <th< td=""><td>(1,1128)</td><td>1:A:46:VAL:HG22</td><td>1:A:49:LYS:H</td><td>14</td><td>0.12</td></th<>	(1,1128)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:49:LYS:H	14	0.12
(1,1117)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:42:TYR:H         2         0.12           (1,1117)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:42:TYR:H         2         0.12           (1,1114)         1:A:19:VAL:HG21         1:A:24:GLY:H         16         0.12           (1,1114)         1:A:19:VAL:HG22         1:A:24:GLY:H         16         0.12           (1,1110)         1:A:17:TYR:H         1:A:46:VAL:HG11         6         0.12           (1,1110)         1:A:17:TYR:H         1:A:46:VAL:HG12         6         0.12           (1,1110)         1:A:47:TYR:H         1:A:46:VAL:HG13         6         0.12           (1,1107)         1:A:45:ILE:HD11         1:A:46:VAL:H         5         0.12           (1,1107)         1:A:45:ILE:HD12         1:A:46:VAL:H         5         0.12           (1,1107)         1:A:45:ILE:HD13         1:A:46:VAL:H         5         0.12           (1,1107)         1:A:45:ILE:HD13         1:A:46:VAL:H         5         0.12           (1,1100)         1:A:8:LYS:H         1:A:9:ILE:HD11         3         0.12           (1,1100)         1:A:8:EYS:H         1:A:9:ILE:HD13         3         0.12           (1,1098)         1:A:44:ASP:H         1:A:46:VAL:HG21 <th< td=""><td>(1,1128)</td><td>1:A:46:VAL:HG23</td><td>1:A:49:LYS:H</td><td>14</td><td>0.12</td></th<>	(1,1128)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:49:LYS:H	14	0.12
(1,1117)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:42:TYR:H         2         0.12           (1,1114)         1:A:19:VAL:HG21         1:A:24:GLY:H         16         0.12           (1,1114)         1:A:19:VAL:HG22         1:A:24:GLY:H         16         0.12           (1,1114)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:24:GLY:H         16         0.12           (1,1110)         1:A:17:TYR:H         1:A:46:VAL:HG11         6         0.12           (1,1110)         1:A:17:TYR:H         1:A:46:VAL:HG13         6         0.12           (1,1107)         1:A:45:ILE:HD11         1:A:46:VAL:H         5         0.12           (1,1107)         1:A:45:ILE:HD12         1:A:46:VAL:H         5         0.12           (1,1107)         1:A:45:ILE:HD13         1:A:46:VAL:H         5         0.12           (1,1100)         1:A:8:LYS:H         1:A:9:ILE:HD11         3         0.12           (1,1100)         1:A:8:LYS:H         1:A:9:ILE:HD13         3         0.12           (1,1000)         1:A:8:LYS:H         1:A:49:ILE:HD13         3         0.12           (1,1098)         1:A:44:ASP:H         1:A:46:VAL:HG21         9         0.12           (1,1098)         1:A:44:ASP:H         1:A:46:VAL:HG22 <td< td=""><td>(1,1117)</td><td>1:A:41:LEU:HD21</td><td>1:A:42:TYR:H</td><td>2</td><td>0.12</td></td<>	(1,1117)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:42:TYR:H	2	0.12
(1,1114)         1:A:19:VAL:HG21         1:A:24:GLY:H         16         0.12           (1,1114)         1:A:19:VAL:HG22         1:A:24:GLY:H         16         0.12           (1,1114)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:24:GLY:H         16         0.12           (1,1110)         1:A:17:TYR:H         1:A:46:VAL:HG11         6         0.12           (1,1110)         1:A:17:TYR:H         1:A:46:VAL:HG12         6         0.12           (1,1107)         1:A:45:ILE:HD11         1:A:46:VAL:H         5         0.12           (1,1107)         1:A:45:ILE:HD12         1:A:46:VAL:H         5         0.12           (1,1107)         1:A:45:ILE:HD12         1:A:46:VAL:H         5         0.12           (1,1107)         1:A:45:ILE:HD13         1:A:46:VAL:H         5         0.12           (1,1100)         1:A:45:ILE:HD13         1:A:46:VAL:H         5         0.12           (1,1100)         1:A:8:LYS:H         1:A:9:ILE:HD11         3         0.12           (1,1100)         1:A:8:LYS:H         1:A:49:ILE:HD13         3         0.12           (1,1100)         1:A:8:LYS:H         1:A:49:ILE:HD13         3         0.12           (1,1098)         1:A:44:ASP:H         1:A:46:VAL:HG21 <t< td=""><td>(1,1117)</td><td>1:A:41:LEU:HD22</td><td>1:A:42:TYR:H</td><td>2</td><td>0.12</td></t<>	(1,1117)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:42:TYR:H	2	0.12
(1,1114)         1:A:19:VAL:HG22         1:A:24:GLY:H         16         0.12           (1,1114)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:24:GLY:H         16         0.12           (1,1110)         1:A:17:TYR:H         1:A:46:VAL:HG11         6         0.12           (1,1110)         1:A:17:TYR:H         1:A:46:VAL:HG12         6         0.12           (1,1107)         1:A:45:ILE:HD11         1:A:46:VAL:H         5         0.12           (1,1107)         1:A:45:ILE:HD12         1:A:46:VAL:H         5         0.12           (1,1107)         1:A:45:ILE:HD13         1:A:46:VAL:H         5         0.12           (1,1107)         1:A:45:ILE:HD13         1:A:46:VAL:H         5         0.12           (1,1100)         1:A:45:ILE:HD13         1:A:46:VAL:H         5         0.12           (1,1100)         1:A:8:LYS:H         1:A:9:ILE:HD12         3         0.12           (1,1000)         1:A:8:LYS:H         1:A:9:ILE:HD13         3         0.12           (1,1098)         1:A:44:ASP:H         1:A:46:VAL:HG21         9         0.12           (1,1098)         1:A:44:ASP:H         1:A:46:VAL:HG22         9         0.12           (1,1098)         1:A:75:VAL:HG11         1:A:9:1A6:VAL:HG23	(1,1117)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:42:TYR:H	2	0.12
(1,1114)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:24:GLY:H         16         0.12           (1,1110)         1:A:17:TYR:H         1:A:46:VAL:HG11         6         0.12           (1,1110)         1:A:17:TYR:H         1:A:46:VAL:HG12         6         0.12           (1,1107)         1:A:45:ILE:HD11         1:A:46:VAL:H         5         0.12           (1,1107)         1:A:45:ILE:HD12         1:A:46:VAL:H         5         0.12           (1,1107)         1:A:45:ILE:HD13         1:A:46:VAL:H         5         0.12           (1,1100)         1:A:8:LYS:H         1:A:9:ILE:HD11         3         0.12           (1,1100)         1:A:8:LYS:H         1:A:9:ILE:HD12         3         0.12           (1,1100)         1:A:8:LYS:H         1:A:9:ILE:HD13         3         0.12           (1,1090)         1:A:8:LYS:H         1:A:9:ILE:HD13         3         0.12           (1,1098)         1:A:44:ASP:H         1:A:46:VAL:HG21         9         0.12           (1,1098)         1:A:44:ASP:H         1:A:46:VAL:HG22         9         0.12           (1,1098)         1:A:75:VAL:HG11         1:A:49:1ARG:H         10         0.12           (1,1096)         1:A:75:VAL:HG13         1:A:49:1ARG:H         1	(1,1114)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:24:GLY:H	16	0.12
(1,1110)         1:A:17:TYR:H         1:A:46:VAL:HG11         6         0.12           (1,1110)         1:A:17:TYR:H         1:A:46:VAL:HG12         6         0.12           (1,1110)         1:A:47:TYR:H         1:A:46:VAL:HG13         6         0.12           (1,1107)         1:A:45:ILE:HD11         1:A:46:VAL:H         5         0.12           (1,1107)         1:A:45:ILE:HD12         1:A:46:VAL:H         5         0.12           (1,1100)         1:A:45:ILE:HD13         1:A:46:VAL:H         5         0.12           (1,1100)         1:A:8:LYS:H         1:A:9:ILE:HD11         3         0.12           (1,1100)         1:A:8:LYS:H         1:A:9:ILE:HD12         3         0.12           (1,1090)         1:A:8:LYS:H         1:A:9:ILE:HD13         3         0.12           (1,1098)         1:A:44:ASP:H         1:A:49:ILE:HD13         3         0.12           (1,1098)         1:A:44:ASP:H         1:A:46:VAL:HG21         9         0.12           (1,1098)         1:A:44:ASP:H         1:A:46:VAL:HG22         9         0.12           (1,1096)         1:A:75:VAL:HG11         1:A:91:ARG:H         10         0.12           (1,1096)         1:A:75:VAL:HG13         1:A:491:ARG:H         1	(1,1114)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:24:GLY:H	16	0.12
(1,1110)         1:A:17:TYR:H         1:A:46:VAL:HG12         6         0.12           (1,1110)         1:A:17:TYR:H         1:A:46:VAL:HG13         6         0.12           (1,1107)         1:A:45:ILE:HD11         1:A:46:VAL:H         5         0.12           (1,1107)         1:A:45:ILE:HD12         1:A:46:VAL:H         5         0.12           (1,1107)         1:A:45:ILE:HD13         1:A:46:VAL:H         5         0.12           (1,1100)         1:A:45:ILE:HD13         3         0.12           (1,1100)         1:A:8:LYS:H         1:A:9:ILE:HD12         3         0.12           (1,1100)         1:A:8:LYS:H         1:A:9:ILE:HD13         3         0.12           (1,1100)         1:A:8:LYS:H         1:A:9:ILE:HD13         3         0.12           (1,1098)         1:A:44:ASP:H         1:A:46:VAL:HG21         9         0.12           (1,1098)         1:A:44:ASP:H         1:A:46:VAL:HG22         9         0.12           (1,1098)         1:A:44:ASP:H         1:A:46:VAL:HG23         9         0.12           (1,1096)         1:A:75:VAL:HG11         1:A:91:ARG:H         10         0.12           (1,1096)         1:A:75:VAL:HG13         1:A:91:ARG:H         10         0.12	(1,1114)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:24:GLY:H	16	0.12
(1,1110)         1:A:17:TYR:H         1:A:46:VAL:HG13         6         0.12           (1,1107)         1:A:45:ILE:HD11         1:A:46:VAL:H         5         0.12           (1,1107)         1:A:45:ILE:HD12         1:A:46:VAL:H         5         0.12           (1,1107)         1:A:45:ILE:HD13         1:A:46:VAL:H         5         0.12           (1,1100)         1:A:45:ILE:HD13         3         0.12           (1,1100)         1:A:8:LYS:H         1:A:9:ILE:HD12         3         0.12           (1,1100)         1:A:8:LYS:H         1:A:9:ILE:HD13         3         0.12           (1,1100)         1:A:44:ASP:H         1:A:9:ILE:HD13         3         0.12           (1,1098)         1:A:44:ASP:H         1:A:46:VAL:HG21         9         0.12           (1,1098)         1:A:44:ASP:H         1:A:46:VAL:HG22         9         0.12           (1,1098)         1:A:44:ASP:H         1:A:46:VAL:HG23         9         0.12           (1,1096)         1:A:75:VAL:HG11         1:A:91:ARG:H         10         0.12           (1,1096)         1:A:75:VAL:HG12         1:A:91:ARG:H         10         0.12           (1,1096)         1:A:19:VAL:HG21         1:A:26:GLU:H         20         0.12	(1,1110)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG11	6	0.12
(1,1107)         1:A:45:ILE:HD11         1:A:46:VAL:H         5         0.12           (1,1107)         1:A:45:ILE:HD12         1:A:46:VAL:H         5         0.12           (1,1107)         1:A:45:ILE:HD13         1:A:46:VAL:H         5         0.12           (1,1100)         1:A:45:ILE:HD13         1         0.12           (1,1100)         1:A:8:LYS:H         1:A:9:ILE:HD12         3         0.12           (1,1100)         1:A:8:LYS:H         1:A:9:ILE:HD13         3         0.12           (1,1098)         1:A:44:ASP:H         1:A:46:VAL:HG21         9         0.12           (1,1098)         1:A:44:ASP:H         1:A:46:VAL:HG22         9         0.12           (1,1098)         1:A:44:ASP:H         1:A:46:VAL:HG23         9         0.12           (1,1096)         1:A:75:VAL:HG11         1:A:91:ARG:H         10         0.12           (1,1096)         1:A:75:VAL:HG12         1:A:91:ARG:H         10         0.12           (1,1096)         1:A:75:VAL:HG13         1:A:91:ARG:H         10         0.12           (1,1096)         1:A:19:VAL:HG21         1:A:26:GLU:H         20         0.12           (1,1080)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:26:GLU:H         20         0.12 <td>(1,1110)</td> <td>1:A:17:TYR:H</td> <td>1:A:46:VAL:HG12</td> <td>6</td> <td>0.12</td>	(1,1110)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG12	6	0.12
(1,1107)         1:A:45:ILE:HD12         1:A:46:VAL:H         5         0.12           (1,1107)         1:A:45:ILE:HD13         1:A:46:VAL:H         5         0.12           (1,1100)         1:A:45:ILE:HD13         3         0.12           (1,1100)         1:A:8:LYS:H         1:A:9:ILE:HD12         3         0.12           (1,1100)         1:A:8:LYS:H         1:A:9:ILE:HD13         3         0.12           (1,1098)         1:A:44:ASP:H         1:A:46:VAL:HG21         9         0.12           (1,1098)         1:A:44:ASP:H         1:A:46:VAL:HG22         9         0.12           (1,1098)         1:A:44:ASP:H         1:A:46:VAL:HG23         9         0.12           (1,1096)         1:A:75:VAL:HG11         1:A:91:ARG:H         10         0.12           (1,1096)         1:A:75:VAL:HG12         1:A:91:ARG:H         10         0.12           (1,1096)         1:A:75:VAL:HG13         1:A:91:ARG:H         10         0.12           (1,1080)         1:A:19:VAL:HG21         1:A:26:GLU:H         20         0.12           (1,1080)         1:A:19:VAL:HG22         1:A:26:GLU:H         20         0.12           (1,1076)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:103:PHE:H         2         0.12<	(1,1110)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG13	6	0.12
(1,1107)         1:A:45:ILE:HD13         1:A:46:VAL:H         5         0.12           (1,1100)         1:A:8:LYS:H         1:A:9:ILE:HD11         3         0.12           (1,1100)         1:A:8:LYS:H         1:A:9:ILE:HD12         3         0.12           (1,1100)         1:A:48:LYS:H         1:A:9:ILE:HD13         3         0.12           (1,1098)         1:A:44:ASP:H         1:A:46:VAL:HG21         9         0.12           (1,1098)         1:A:44:ASP:H         1:A:46:VAL:HG22         9         0.12           (1,1098)         1:A:44:ASP:H         1:A:46:VAL:HG23         9         0.12           (1,1096)         1:A:75:VAL:HG11         1:A:91:ARG:H         10         0.12           (1,1096)         1:A:75:VAL:HG12         1:A:91:ARG:H         10         0.12           (1,1096)         1:A:75:VAL:HG13         1:A:91:ARG:H         10         0.12           (1,1096)         1:A:19:VAL:HG21         1:A:26:GLU:H         20         0.12           (1,1080)         1:A:19:VAL:HG22         1:A:26:GLU:H         20         0.12           (1,1076)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:103:PHE:H         2         0.12           (1,1076)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:103:PHE:H	(1,1107)	1:A:45:ILE:HD11	1:A:46:VAL:H	5	0.12
(1,1100)         1:A:8:LYS:H         1:A:9:ILE:HD11         3         0.12           (1,1100)         1:A:8:LYS:H         1:A:9:ILE:HD12         3         0.12           (1,1100)         1:A:8:LYS:H         1:A:9:ILE:HD13         3         0.12           (1,1098)         1:A:44:ASP:H         1:A:46:VAL:HG21         9         0.12           (1,1098)         1:A:44:ASP:H         1:A:46:VAL:HG22         9         0.12           (1,1098)         1:A:44:ASP:H         1:A:46:VAL:HG23         9         0.12           (1,1098)         1:A:75:VAL:HG11         1:A:91:ARG:H         10         0.12           (1,1096)         1:A:75:VAL:HG12         1:A:91:ARG:H         10         0.12           (1,1096)         1:A:75:VAL:HG13         1:A:91:ARG:H         10         0.12           (1,1096)         1:A:75:VAL:HG13         1:A:91:ARG:H         10         0.12           (1,1080)         1:A:19:VAL:HG21         1:A:26:GLU:H         20         0.12           (1,1080)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:26:GLU:H         20         0.12           (1,1076)         1:A:102:VAL:HG21         1:A:103:PHE:H         2         0.12           (1,1076)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:103:PHE:H	(1,1107)	1:A:45:ILE:HD12	1:A:46:VAL:H	5	0.12
(1,1100)         1:A:8:LYS:H         1:A:9:ILE:HD12         3         0.12           (1,1100)         1:A:8:LYS:H         1:A:9:ILE:HD13         3         0.12           (1,1098)         1:A:44:ASP:H         1:A:46:VAL:HG21         9         0.12           (1,1098)         1:A:44:ASP:H         1:A:46:VAL:HG22         9         0.12           (1,1098)         1:A:44:ASP:H         1:A:46:VAL:HG23         9         0.12           (1,1096)         1:A:75:VAL:HG11         1:A:91:ARG:H         10         0.12           (1,1096)         1:A:75:VAL:HG12         1:A:91:ARG:H         10         0.12           (1,1096)         1:A:75:VAL:HG13         1:A:91:ARG:H         10         0.12           (1,1096)         1:A:75:VAL:HG13         1:A:91:ARG:H         10         0.12           (1,1080)         1:A:19:VAL:HG21         1:A:26:GLU:H         20         0.12           (1,1080)         1:A:19:VAL:HG22         1:A:26:GLU:H         20         0.12           (1,1080)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:103:PHE:H         2         0.12           (1,1076)         1:A:102:VAL:HG21         1:A:103:PHE:H         2         0.12           (1,1076)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:103:PHE:H	(1,1107)	1:A:45:ILE:HD13	1:A:46:VAL:H	5	0.12
(1,1100)         1:A:8:LYS:H         1:A:9:ILE:HD13         3         0.12           (1,1098)         1:A:44:ASP:H         1:A:46:VAL:HG21         9         0.12           (1,1098)         1:A:44:ASP:H         1:A:46:VAL:HG22         9         0.12           (1,1098)         1:A:44:ASP:H         1:A:46:VAL:HG23         9         0.12           (1,1096)         1:A:75:VAL:HG11         1:A:91:ARG:H         10         0.12           (1,1096)         1:A:75:VAL:HG12         1:A:91:ARG:H         10         0.12           (1,1096)         1:A:75:VAL:HG13         1:A:91:ARG:H         10         0.12           (1,1096)         1:A:75:VAL:HG13         1:A:91:ARG:H         10         0.12           (1,1096)         1:A:19:VAL:HG21         1:A:26:GLU:H         20         0.12           (1,1080)         1:A:19:VAL:HG22         1:A:26:GLU:H         20         0.12           (1,1080)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:103:PHE:H         2         0.12           (1,1076)         1:A:102:VAL:HG21         1:A:103:PHE:H         2         0.12           (1,1076)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:103:PHE:H         2         0.12           (1,1052)         1:A:12:LEU:HD11         1:A:46:VAL:HG22 <td>(1,1100)</td> <td>1:A:8:LYS:H</td> <td>1:A:9:ILE:HD11</td> <td>3</td> <td>0.12</td>	(1,1100)	1:A:8:LYS:H	1:A:9:ILE:HD11	3	0.12
(1,1098)         1:A:44:ASP:H         1:A:46:VAL:HG21         9         0.12           (1,1098)         1:A:44:ASP:H         1:A:46:VAL:HG22         9         0.12           (1,1098)         1:A:44:ASP:H         1:A:46:VAL:HG23         9         0.12           (1,1096)         1:A:75:VAL:HG11         1:A:91:ARG:H         10         0.12           (1,1096)         1:A:75:VAL:HG12         1:A:91:ARG:H         10         0.12           (1,1096)         1:A:75:VAL:HG13         1:A:91:ARG:H         10         0.12           (1,1080)         1:A:19:VAL:HG21         1:A:26:GLU:H         20         0.12           (1,1080)         1:A:19:VAL:HG22         1:A:26:GLU:H         20         0.12           (1,1080)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:26:GLU:H         20         0.12           (1,1080)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:103:PHE:H         2         0.12           (1,1076)         1:A:102:VAL:HG21         1:A:103:PHE:H         2         0.12           (1,1076)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:103:PHE:H         2         0.12           (1,1052)         1:A:12:LEU:HD11         1:A:46:VAL:HG21         3         0.12           (1,1052)         1:A:12:LEU:HD11         1:A:46:VAL:HG	(1,1100)	1:A:8:LYS:H	1:A:9:ILE:HD12	3	0.12
(1,1098)         1:A:44:ASP:H         1:A:46:VAL:HG22         9         0.12           (1,1098)         1:A:44:ASP:H         1:A:46:VAL:HG23         9         0.12           (1,1096)         1:A:75:VAL:HG11         1:A:91:ARG:H         10         0.12           (1,1096)         1:A:75:VAL:HG12         1:A:91:ARG:H         10         0.12           (1,1096)         1:A:75:VAL:HG13         1:A:91:ARG:H         10         0.12           (1,1096)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:26:GLU:H         20         0.12           (1,1080)         1:A:19:VAL:HG21         1:A:26:GLU:H         20         0.12           (1,1080)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:26:GLU:H         20         0.12           (1,1080)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:26:GLU:H         20         0.12           (1,1076)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:103:PHE:H         2         0.12           (1,1076)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:103:PHE:H         2         0.12           (1,1052)         1:A:12:LEU:HD11         1:A:46:VAL:HG21         3         0.12           (1,1052)         1:A:12:LEU:HD11         1:A:46:VAL:HG23         3         0.12           (1,1052)         1:A:12:LEU:HD12         1:A:46:VAL	(1,1100)	1:A:8:LYS:H	1:A:9:ILE:HD13	3	0.12
(1,1098)         1:A:44:ASP:H         1:A:46:VAL:HG23         9         0.12           (1,1096)         1:A:75:VAL:HG11         1:A:91:ARG:H         10         0.12           (1,1096)         1:A:75:VAL:HG12         1:A:91:ARG:H         10         0.12           (1,1096)         1:A:75:VAL:HG13         1:A:91:ARG:H         10         0.12           (1,1080)         1:A:19:VAL:HG21         1:A:26:GLU:H         20         0.12           (1,1080)         1:A:19:VAL:HG22         1:A:26:GLU:H         20         0.12           (1,1080)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:26:GLU:H         20         0.12           (1,1076)         1:A:102:VAL:HG21         1:A:103:PHE:H         2         0.12           (1,1076)         1:A:102:VAL:HG22         1:A:103:PHE:H         2         0.12           (1,1076)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:103:PHE:H         2         0.12           (1,1052)         1:A:12:LEU:HD11         1:A:46:VAL:HG21         3         0.12           (1,1052)         1:A:12:LEU:HD11         1:A:46:VAL:HG23         3         0.12           (1,1052)         1:A:12:LEU:HD12         1:A:46:VAL:HG21         3         0.12	(1,1098)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG21	9	0.12
(1,1096)         1:A:75:VAL:HG11         1:A:91:ARG:H         10         0.12           (1,1096)         1:A:75:VAL:HG12         1:A:91:ARG:H         10         0.12           (1,1096)         1:A:75:VAL:HG13         1:A:91:ARG:H         10         0.12           (1,1080)         1:A:19:VAL:HG21         1:A:26:GLU:H         20         0.12           (1,1080)         1:A:19:VAL:HG22         1:A:26:GLU:H         20         0.12           (1,1080)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:26:GLU:H         20         0.12           (1,1076)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:103:PHE:H         2         0.12           (1,1076)         1:A:102:VAL:HG22         1:A:103:PHE:H         2         0.12           (1,1076)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:103:PHE:H         2         0.12           (1,1052)         1:A:12:LEU:HD11         1:A:46:VAL:HG21         3         0.12           (1,1052)         1:A:12:LEU:HD11         1:A:46:VAL:HG23         3         0.12           (1,1052)         1:A:12:LEU:HD12         1:A:46:VAL:HG21         3         0.12	(1,1098)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG22	9	0.12
(1,1096)       1:A:75:VAL:HG12       1:A:91:ARG:H       10       0.12         (1,1096)       1:A:75:VAL:HG13       1:A:91:ARG:H       10       0.12         (1,1080)       1:A:19:VAL:HG21       1:A:26:GLU:H       20       0.12         (1,1080)       1:A:19:VAL:HG22       1:A:26:GLU:H       20       0.12         (1,1080)       1:A:19:VAL:HG23       1:A:26:GLU:H       20       0.12         (1,1076)       1:A:102:VAL:HG21       1:A:103:PHE:H       2       0.12         (1,1076)       1:A:102:VAL:HG22       1:A:103:PHE:H       2       0.12         (1,1076)       1:A:102:VAL:HG23       1:A:103:PHE:H       2       0.12         (1,1052)       1:A:12:LEU:HD11       1:A:46:VAL:HG21       3       0.12         (1,1052)       1:A:12:LEU:HD11       1:A:46:VAL:HG23       3       0.12         (1,1052)       1:A:12:LEU:HD11       1:A:46:VAL:HG23       3       0.12         (1,1052)       1:A:12:LEU:HD12       1:A:46:VAL:HG21       3       0.12	(1,1098)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG23	9	0.12
(1,1096)       1:A:75:VAL:HG13       1:A:91:ARG:H       10       0.12         (1,1080)       1:A:19:VAL:HG21       1:A:26:GLU:H       20       0.12         (1,1080)       1:A:19:VAL:HG22       1:A:26:GLU:H       20       0.12         (1,1080)       1:A:19:VAL:HG23       1:A:26:GLU:H       20       0.12         (1,1076)       1:A:102:VAL:HG21       1:A:103:PHE:H       2       0.12         (1,1076)       1:A:102:VAL:HG22       1:A:103:PHE:H       2       0.12         (1,1076)       1:A:102:VAL:HG23       1:A:103:PHE:H       2       0.12         (1,1076)       1:A:12:LEU:HD11       1:A:46:VAL:HG21       3       0.12         (1,1052)       1:A:12:LEU:HD11       1:A:46:VAL:HG23       3       0.12         (1,1052)       1:A:12:LEU:HD11       1:A:46:VAL:HG23       3       0.12         (1,1052)       1:A:12:LEU:HD12       1:A:46:VAL:HG21       3       0.12	(1,1096)	1:A:75:VAL:HG11	1:A:91:ARG:H	10	0.12
(1,1080)       1:A:19:VAL:HG21       1:A:26:GLU:H       20       0.12         (1,1080)       1:A:19:VAL:HG22       1:A:26:GLU:H       20       0.12         (1,1080)       1:A:19:VAL:HG23       1:A:26:GLU:H       20       0.12         (1,1076)       1:A:102:VAL:HG21       1:A:103:PHE:H       2       0.12         (1,1076)       1:A:102:VAL:HG22       1:A:103:PHE:H       2       0.12         (1,1076)       1:A:102:VAL:HG23       1:A:103:PHE:H       2       0.12         (1,1052)       1:A:12:LEU:HD11       1:A:46:VAL:HG21       3       0.12         (1,1052)       1:A:12:LEU:HD11       1:A:46:VAL:HG23       3       0.12         (1,1052)       1:A:12:LEU:HD11       1:A:46:VAL:HG23       3       0.12         (1,1052)       1:A:12:LEU:HD12       1:A:46:VAL:HG21       3       0.12	(1,1096)	1:A:75:VAL:HG12	1:A:91:ARG:H	10	0.12
(1,1080)       1:A:19:VAL:HG22       1:A:26:GLU:H       20       0.12         (1,1080)       1:A:19:VAL:HG23       1:A:26:GLU:H       20       0.12         (1,1076)       1:A:102:VAL:HG21       1:A:103:PHE:H       2       0.12         (1,1076)       1:A:102:VAL:HG22       1:A:103:PHE:H       2       0.12         (1,1076)       1:A:102:VAL:HG23       1:A:103:PHE:H       2       0.12         (1,1052)       1:A:12:LEU:HD11       1:A:46:VAL:HG21       3       0.12         (1,1052)       1:A:12:LEU:HD11       1:A:46:VAL:HG23       3       0.12         (1,1052)       1:A:12:LEU:HD11       1:A:46:VAL:HG23       3       0.12         (1,1052)       1:A:12:LEU:HD12       1:A:46:VAL:HG21       3       0.12	(1,1096)	1:A:75:VAL:HG13	1:A:91:ARG:H	10	0.12
(1,1080)       1:A:19:VAL:HG23       1:A:26:GLU:H       20       0.12         (1,1076)       1:A:102:VAL:HG21       1:A:103:PHE:H       2       0.12         (1,1076)       1:A:102:VAL:HG22       1:A:103:PHE:H       2       0.12         (1,1076)       1:A:102:VAL:HG23       1:A:103:PHE:H       2       0.12         (1,1052)       1:A:12:LEU:HD11       1:A:46:VAL:HG21       3       0.12         (1,1052)       1:A:12:LEU:HD11       1:A:46:VAL:HG22       3       0.12         (1,1052)       1:A:12:LEU:HD11       1:A:46:VAL:HG23       3       0.12         (1,1052)       1:A:12:LEU:HD12       1:A:46:VAL:HG21       3       0.12	(1,1080)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:26:GLU:H	20	0.12
(1,1076)       1:A:102:VAL:HG21       1:A:103:PHE:H       2       0.12         (1,1076)       1:A:102:VAL:HG22       1:A:103:PHE:H       2       0.12         (1,1076)       1:A:102:VAL:HG23       1:A:103:PHE:H       2       0.12         (1,1052)       1:A:12:LEU:HD11       1:A:46:VAL:HG21       3       0.12         (1,1052)       1:A:12:LEU:HD11       1:A:46:VAL:HG22       3       0.12         (1,1052)       1:A:12:LEU:HD11       1:A:46:VAL:HG23       3       0.12         (1,1052)       1:A:12:LEU:HD12       1:A:46:VAL:HG21       3       0.12	(1,1080)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:26:GLU:H	20	0.12
(1,1076)       1:A:102:VAL:HG22       1:A:103:PHE:H       2       0.12         (1,1076)       1:A:102:VAL:HG23       1:A:103:PHE:H       2       0.12         (1,1052)       1:A:12:LEU:HD11       1:A:46:VAL:HG21       3       0.12         (1,1052)       1:A:12:LEU:HD11       1:A:46:VAL:HG22       3       0.12         (1,1052)       1:A:12:LEU:HD11       1:A:46:VAL:HG23       3       0.12         (1,1052)       1:A:12:LEU:HD12       1:A:46:VAL:HG21       3       0.12	(1,1080)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:26:GLU:H	20	0.12
(1,1076)       1:A:102:VAL:HG23       1:A:103:PHE:H       2       0.12         (1,1052)       1:A:12:LEU:HD11       1:A:46:VAL:HG21       3       0.12         (1,1052)       1:A:12:LEU:HD11       1:A:46:VAL:HG22       3       0.12         (1,1052)       1:A:12:LEU:HD11       1:A:46:VAL:HG23       3       0.12         (1,1052)       1:A:12:LEU:HD12       1:A:46:VAL:HG21       3       0.12	(1,1076)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:103:PHE:H	2	0.12
(1,1052)       1:A:12:LEU:HD11       1:A:46:VAL:HG21       3       0.12         (1,1052)       1:A:12:LEU:HD11       1:A:46:VAL:HG22       3       0.12         (1,1052)       1:A:12:LEU:HD11       1:A:46:VAL:HG23       3       0.12         (1,1052)       1:A:12:LEU:HD12       1:A:46:VAL:HG21       3       0.12         (1,1052)       1:A:12:LEU:HD12       1:A:46:VAL:HG21       3       0.12	(1,1076)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:103:PHE:H	2	0.12
(1,1052)       1:A:12:LEU:HD11       1:A:46:VAL:HG22       3       0.12         (1,1052)       1:A:12:LEU:HD11       1:A:46:VAL:HG23       3       0.12         (1,1052)       1:A:12:LEU:HD12       1:A:46:VAL:HG21       3       0.12	(1,1076)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:103:PHE:H	2	0.12
(1,1052)       1:A:12:LEU:HD11       1:A:46:VAL:HG23       3       0.12         (1,1052)       1:A:12:LEU:HD12       1:A:46:VAL:HG21       3       0.12	(1,1052)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:46:VAL:HG21	3	0.12
(1,1052) 1:A:12:LEU:HD12 1:A:46:VAL:HG21 3 0.12	(1,1052)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:46:VAL:HG22	3	0.12
	(1,1052)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:46:VAL:HG23	3	0.12
	(1,1052)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:46:VAL:HG21	3	0.12
	(1,1052)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:46:VAL:HG22	3	0.12



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1052)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:46:VAL:HG23	3	0.12
(1,1052)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:46:VAL:HG21	3	0.12
(1,1052)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:46:VAL:HG22	3	0.12
(1,1052)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:46:VAL:HG23	3	0.12
(1,1052)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:46:VAL:HG21	13	0.12
(1,1052)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:46:VAL:HG22	13	0.12
(1,1052)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:46:VAL:HG23	13	0.12
(1,1052)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:46:VAL:HG21	13	0.12
(1,1052)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:46:VAL:HG22	13	0.12
(1,1052)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:46:VAL:HG23	13	0.12
(1,1052)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:46:VAL:HG21	13	0.12
(1,1052)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:46:VAL:HG22	13	0.12
(1,1052)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:46:VAL:HG23	13	0.12
(1,1038)	1:A:12:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HG11	13	0.12
(1,1038)	1:A:12:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HG12	13	0.12
(1,1038)	1:A:12:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HG13	13	0.12
(1,1038)	1:A:12:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HG11	13	0.12
(1,1038)	1:A:12:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HG12	13	0.12
(1,1038)	1:A:12:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HG13	13	0.12
(1,1038)	1:A:12:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HG11	13	0.12
(1,1038)	1:A:12:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HG12	13	0.12
(1,1038)	1:A:12:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HG13	13	0.12
(1,1013)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:H	8	0.12
(1,99)	1:A:20:THR:H	1:A:23:ASN:H	1	0.11
(1,99)	1:A:20:THR:H	1:A:23:ASN:H	20	0.11
(1,974)	1:A:79:LEU:H	1:A:89:GLU:H	4	0.11
(1,974)	1:A:79:LEU:H	1:A:89:GLU:H	17	0.11
(1,974)	1:A:79:LEU:H	1:A:89:GLU:H	20	0.11
(1,948)	1:A:18:GLU:H	1:A:20:THR:H	19	0.11
(1,944)	1:A:15:MET:H	1:A:18:GLU:H	10	0.11
(1,944)	1:A:15:MET:H	1:A:18:GLU:H	16	0.11
(1,943)	1:A:14:ARG:H	1:A:17:TYR:H	13	0.11
(1,912)	1:A:21:GLN:H	1:A:24:GLY:H	16	0.11
(1,901)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD11	11	0.11
(1,901)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD12	11	0.11
(1,901)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD13	11	0.11
(1,901)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD11	11	0.11
(1,901)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD12	11	0.11
(1,901)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD13	11	0.11
(1,901)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD11	11	0.11
(1,901)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD12	11	0.11
(1,901)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD13	11	0.11



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,893)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD11	5	0.11
(1,893)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD12	5	0.11
(1,893)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD13	5	0.11
(1,893)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD11	6	0.11
(1,893)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD12	6	0.11
(1,893)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD13	6	0.11
(1,893)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD11	9	0.11
(1,893)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD12	9	0.11
(1,893)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD13	9	0.11
(1,893)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD11	10	0.11
(1,893)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD12	10	0.11
(1,893)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD13	10	0.11
(1,892)	1:A:121:LEU:HD11	1:A:122:ARG:H	5	0.11
(1,892)	1:A:121:LEU:HD12	1:A:122:ARG:H	5	0.11
(1,892)	1:A:121:LEU:HD13	1:A:122:ARG:H	5	0.11
(1,892)	1:A:121:LEU:HD11	1:A:122:ARG:H	12	0.11
(1,892)	1:A:121:LEU:HD12	1:A:122:ARG:H	12	0.11
(1,892)	1:A:121:LEU:HD13	1:A:122:ARG:H	12	0.11
(1,892)	1:A:121:LEU:HD11	1:A:122:ARG:H	19	0.11
(1,892)	1:A:121:LEU:HD12	1:A:122:ARG:H	19	0.11
(1,892)	1:A:121:LEU:HD13	1:A:122:ARG:H	19	0.11
(1,89)	1:A:55:LYS:H	1:A:57:LYS:H	17	0.11
(1,84)	1:A:10:LYS:H	1:A:12:LEU:H	2	0.11
(1,839)	1:A:42:TYR:H	1:A:43:VAL:HG11	2	0.11
(1,839)	1:A:42:TYR:H	1:A:43:VAL:HG12	2	0.11
(1,839)	1:A:42:TYR:H	1:A:43:VAL:HG13	2	0.11
(1,839)	1:A:42:TYR:H	1:A:43:VAL:HG11	11	0.11
(1,839)	1:A:42:TYR:H	1:A:43:VAL:HG12	11	0.11
(1,839)	1:A:42:TYR:H	1:A:43:VAL:HG13	11	0.11
(1,837)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:H	5	0.11
(1,837)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:H	5	0.11
(1,837)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:H	5	0.11
(1,837)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:H	14	0.11
(1,837)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:H	14	0.11
(1,837)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:H	14	0.11
(1,835)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:26:GLU:H	1	0.11
(1,835)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:26:GLU:H	1	0.11
(1,835)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:26:GLU:H	1	0.11
(1,821)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:45:ILE:HD11	9	0.11
(1,821)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:45:ILE:HD12	9	0.11
(1,821)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:45:ILE:HD13	9	0.11
(1,821)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:45:ILE:HD11	9	0.11



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,821)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:45:ILE:HD12	9	0.11
(1,821)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:45:ILE:HD13	9	0.11
(1,821)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:45:ILE:HD11	9	0.11
(1,821)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:45:ILE:HD12	9	0.11
(1,821)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:45:ILE:HD13	9	0.11
(1,821)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:45:ILE:HD11	13	0.11
(1,821)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:45:ILE:HD12	13	0.11
(1,821)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:45:ILE:HD13	13	0.11
(1,821)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:45:ILE:HD11	13	0.11
(1,821)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:45:ILE:HD12	13	0.11
(1,821)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:45:ILE:HD13	13	0.11
(1,821)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:45:ILE:HD11	13	0.11
(1,821)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:45:ILE:HD12	13	0.11
(1,821)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:45:ILE:HD13	13	0.11
(1,806)	1:A:133:GLY:H	1:A:135:GLU:H	7	0.11
(1,806)	1:A:133:GLY:H	1:A:135:GLU:H	19	0.11
(1,784)	1:A:46:VAL:H	1:A:48:GLY:H	7	0.11
(1,776)	1:A:17:TYR:H	1:A:19:VAL:H	14	0.11
(1,759)	1:A:29:PHE:H	1:A:31:ASN:H	18	0.11
(1,751)	1:A:105:ASP:H	1:A:113:ARG:H	17	0.11
(1,744)	1:A:20:THR:H	1:A:23:ASN:H	1	0.11
(1,744)	1:A:20:THR:H	1:A:23:ASN:H	20	0.11
(1,74)	1:A:30:GLN:H	1:A:31:ASN:H	11	0.11
(1,734)	1:A:55:LYS:H	1:A:57:LYS:H	17	0.11
(1,729)	1:A:10:LYS:H	1:A:12:LEU:H	2	0.11
(1,719)	1:A:30:GLN:H	1:A:31:ASN:H	11	0.11
(1,708)	1:A:54:SER:HG	1:A:57:LYS:H	10	0.11
(1,705)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD11	11	0.11
(1,705)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD12	11	0.11
(1,705)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD13	11	0.11
(1,704)	1:A:132:GLU:H	1:A:138:LEU:HD11	8	0.11
(1,704)	1:A:132:GLU:H	1:A:138:LEU:HD12	8	0.11
(1,704)	1:A:132:GLU:H	1:A:138:LEU:HD13	8	0.11
(1,702)	1:A:112:LEU:HD11	1:A:113:ARG:H	2	0.11
(1,702)	1:A:112:LEU:HD12	1:A:113:ARG:H	2	0.11
(1,702)	1:A:112:LEU:HD13	1:A:113:ARG:H	2	0.11
(1,697)	1:A:16:GLN:HE21	1:A:46:VAL:HG11	1	0.11
(1,697)	1:A:16:GLN:HE21	1:A:46:VAL:HG12	1	0.11
(1,697)	1:A:16:GLN:HE21	1:A:46:VAL:HG13	1	0.11
(1,694)	1:A:78:LYS:H	1:A:90:VAL:HG11	13	0.11
(1,694)	1:A:78:LYS:H	1:A:90:VAL:HG12	13	0.11
(1,694)	1:A:78:LYS:H	1:A:90:VAL:HG13	13	0.11



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,690)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD11	11	0.11
(1,690)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD12	11	0.11
(1,690)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD13	11	0.11
(1,690)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD11	16	0.11
(1,690)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD12	16	0.11
(1,690)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD13	16	0.11
(1,687)	1:A:15:MET:H	1:A:19:VAL:HG21	3	0.11
(1,687)	1:A:15:MET:H	1:A:19:VAL:HG22	3	0.11
(1,687)	1:A:15:MET:H	1:A:19:VAL:HG23	3	0.11
(1,686)	1:A:45:ILE:H	1:A:46:VAL:HG21	18	0.11
(1,686)	1:A:45:ILE:H	1:A:46:VAL:HG22	18	0.11
(1,686)	1:A:45:ILE:H	1:A:46:VAL:HG23	18	0.11
(1,676)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:49:LYS:H	2	0.11
(1,676)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:49:LYS:H	2	0.11
(1,676)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:49:LYS:H	2	0.11
(1,675)	1:A:106:GLY:H	1:A:112:LEU:HD21	8	0.11
(1,675)	1:A:106:GLY:H	1:A:112:LEU:HD22	8	0.11
(1,675)	1:A:106:GLY:H	1:A:112:LEU:HD23	8	0.11
(1,671)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD11	9	0.11
(1,671)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD12	9	0.11
(1,671)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD13	9	0.11
(1,667)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:137:TYR:H	11	0.11
(1,667)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:137:TYR:H	11	0.11
(1,667)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:137:TYR:H	11	0.11
(1,660)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG11	13	0.11
(1,660)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG12	13	0.11
(1,660)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG13	13	0.11
(1,660)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG11	16	0.11
(1,660)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG12	16	0.11
(1,660)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG13	16	0.11
(1,658)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:131:GLU:H	7	0.11
(1,658)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:131:GLU:H	7	0.11
(1,658)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:131:GLU:H	7	0.11
(1,658)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:131:GLU:H	20	0.11
(1,658)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:131:GLU:H	20	0.11
(1,658)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:131:GLU:H	20	0.11
(1,656)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD21	8	0.11
(1,656)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD22	8	0.11
(1,656)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD23	8	0.11
(1,656)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD21	16	0.11
(1,656)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD22	16	0.11
(1,656)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD23	16	0.11



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

(1,644)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD11         11         0.11           (1,644)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD12         11         0.11           (1,644)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD13         11         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD21         2         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD22         2         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD23         2         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD22         2         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD22         2         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD23         2         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD23         2         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD23         2         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD23         2         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD23         9         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:L	(Å)
(1,644)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD13         11         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD21         2         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD22         2         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD23         2         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD21         2         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD22         2         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD23         2         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD21         2         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD22         2         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD23         2         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD21         9         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD22         9         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD23         9         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:	
(1,630)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD21         2         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD22         2         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD23         2         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD21         2         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD22         2         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD23         2         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD21         2         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD22         2         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD23         2         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD21         9         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD22         9         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD23         9         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD22         9         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:	
(1,630)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD22         2         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD23         2         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD21         2         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD22         2         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD23         2         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD21         2         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD22         2         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD22         2         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD23         2         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD21         9         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD22         9         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD23         9         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD23         9         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:	
(1,630)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD23         2         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD21         2         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD22         2         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD23         2         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD21         2         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD22         2         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD23         2         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD23         2         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD22         9         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD23         9         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD23         9         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD21         9         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD23         9         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:	
(1,630)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD21         2         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD22         2         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD23         2         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD21         2         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD22         2         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD23         2         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD21         9         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD23         9         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD21         9         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD22         9         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD23         9         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD23         9         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD21         9         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG11         1:	
(1,630)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD22         2         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD23         2         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD21         2         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD22         2         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD23         2         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD21         9         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD22         9         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD23         9         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD21         9         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD23         9         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD23         9         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD23         9         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD22         9         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG11         1:	
(1,630)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD23         2         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD21         2         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD22         2         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD23         2         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD21         9         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD22         9         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD23         9         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD21         9         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD23         9         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD21         9         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD22         9         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD21         12         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD22         12         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG12	
(1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD21         2         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD22         2         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD23         2         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD21         9         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD22         9         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD23         9         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD21         9         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD23         9         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD23         9         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD23         9         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD23         9         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD23         9         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD21         12         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG12         1	
(1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD23         2         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD23         2         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD21         9         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD22         9         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD23         9         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD21         9         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD22         9         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD23         9         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD22         9         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD23         9         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD21         12         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD22         12         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD21         12         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG12 <td< td=""><td></td></td<>	
(1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD23         2         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD21         9         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD22         9         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD23         9         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD21         9         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD23         9         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD23         9         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD21         9         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD22         9         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD21         12         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD23         12         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD21         12         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD22         12         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13 <t< td=""><td></td></t<>	
(1,630)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD21         9         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD22         9         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD23         9         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD21         9         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD22         9         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD21         9         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD22         9         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD23         9         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD21         12         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD22         12         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD23         12         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD21         12         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD23         12         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         <	
(1,630)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD22         9         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD23         9         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD21         9         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD22         9         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD23         9         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD21         9         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD23         9         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD21         12         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD22         12         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD21         12         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD22         12         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD23         12         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD23         12         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13	
(1,630)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD23         9         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD21         9         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD22         9         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD23         9         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD21         9         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD22         9         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD23         9         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD21         12         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD23         12         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD21         12         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD23         12         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD23         12         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD23         12         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13	
(1,630)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD21         9         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD22         9         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD23         9         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD21         9         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD22         9         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD23         9         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD21         12         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:99:LEU:HD23         12         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD21         12         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:99:LEU:HD22         12         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD21         12         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD22         12         0.11           (1,630)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:99:LEU:HD22         12         0.11	
(1,630)       1:A:90:VAL:HG12       1:A:99:LEU:HD22       9       0.11         (1,630)       1:A:90:VAL:HG12       1:A:99:LEU:HD23       9       0.11         (1,630)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD21       9       0.11         (1,630)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD22       9       0.11         (1,630)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD23       9       0.11         (1,630)       1:A:90:VAL:HG11       1:A:99:LEU:HD21       12       0.11         (1,630)       1:A:90:VAL:HG11       1:A:99:LEU:HD22       12       0.11         (1,630)       1:A:90:VAL:HG12       1:A:99:LEU:HD21       12       0.11         (1,630)       1:A:90:VAL:HG12       1:A:99:LEU:HD22       12       0.11         (1,630)       1:A:90:VAL:HG12       1:A:99:LEU:HD23       12       0.11         (1,630)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD21       12       0.11         (1,630)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD22       12       0.11         (1,630)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD22       12       0.11	
(1,630)       1:A:90:VAL:HG12       1:A:99:LEU:HD23       9       0.11         (1,630)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD21       9       0.11         (1,630)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD22       9       0.11         (1,630)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD23       9       0.11         (1,630)       1:A:90:VAL:HG11       1:A:99:LEU:HD21       12       0.11         (1,630)       1:A:90:VAL:HG11       1:A:99:LEU:HD22       12       0.11         (1,630)       1:A:90:VAL:HG12       1:A:99:LEU:HD23       12       0.11         (1,630)       1:A:90:VAL:HG12       1:A:99:LEU:HD22       12       0.11         (1,630)       1:A:90:VAL:HG12       1:A:99:LEU:HD23       12       0.11         (1,630)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD21       12       0.11         (1,630)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD21       12       0.11         (1,630)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD22       12       0.11	
(1,630)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD21       9       0.11         (1,630)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD22       9       0.11         (1,630)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD23       9       0.11         (1,630)       1:A:90:VAL:HG11       1:A:99:LEU:HD21       12       0.11         (1,630)       1:A:90:VAL:HG11       1:A:99:LEU:HD22       12       0.11         (1,630)       1:A:90:VAL:HG12       1:A:99:LEU:HD23       12       0.11         (1,630)       1:A:90:VAL:HG12       1:A:99:LEU:HD22       12       0.11         (1,630)       1:A:90:VAL:HG12       1:A:99:LEU:HD23       12       0.11         (1,630)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD21       12       0.11         (1,630)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD21       12       0.11         (1,630)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD22       12       0.11	
(1,630)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD22       9       0.11         (1,630)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD23       9       0.11         (1,630)       1:A:90:VAL:HG11       1:A:99:LEU:HD21       12       0.11         (1,630)       1:A:90:VAL:HG11       1:A:99:LEU:HD22       12       0.11         (1,630)       1:A:90:VAL:HG11       1:A:99:LEU:HD23       12       0.11         (1,630)       1:A:90:VAL:HG12       1:A:99:LEU:HD21       12       0.11         (1,630)       1:A:90:VAL:HG12       1:A:99:LEU:HD22       12       0.11         (1,630)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD21       12       0.11         (1,630)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD21       12       0.11         (1,630)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD22       12       0.11	
(1,630)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD23       9       0.11         (1,630)       1:A:90:VAL:HG11       1:A:99:LEU:HD21       12       0.11         (1,630)       1:A:90:VAL:HG11       1:A:99:LEU:HD22       12       0.11         (1,630)       1:A:90:VAL:HG11       1:A:99:LEU:HD23       12       0.11         (1,630)       1:A:90:VAL:HG12       1:A:99:LEU:HD21       12       0.11         (1,630)       1:A:90:VAL:HG12       1:A:99:LEU:HD22       12       0.11         (1,630)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD21       12       0.11         (1,630)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD21       12       0.11         (1,630)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD22       12       0.11	
(1,630)       1:A:90:VAL:HG11       1:A:99:LEU:HD21       12       0.11         (1,630)       1:A:90:VAL:HG11       1:A:99:LEU:HD22       12       0.11         (1,630)       1:A:90:VAL:HG11       1:A:99:LEU:HD23       12       0.11         (1,630)       1:A:90:VAL:HG12       1:A:99:LEU:HD21       12       0.11         (1,630)       1:A:90:VAL:HG12       1:A:99:LEU:HD22       12       0.11         (1,630)       1:A:90:VAL:HG12       1:A:99:LEU:HD23       12       0.11         (1,630)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD21       12       0.11         (1,630)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD22       12       0.11	
(1,630)       1:A:90:VAL:HG11       1:A:99:LEU:HD22       12       0.11         (1,630)       1:A:90:VAL:HG11       1:A:99:LEU:HD23       12       0.11         (1,630)       1:A:90:VAL:HG12       1:A:99:LEU:HD21       12       0.11         (1,630)       1:A:90:VAL:HG12       1:A:99:LEU:HD22       12       0.11         (1,630)       1:A:90:VAL:HG12       1:A:99:LEU:HD23       12       0.11         (1,630)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD21       12       0.11         (1,630)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD22       12       0.11	
(1,630)       1:A:90:VAL:HG11       1:A:99:LEU:HD23       12       0.11         (1,630)       1:A:90:VAL:HG12       1:A:99:LEU:HD21       12       0.11         (1,630)       1:A:90:VAL:HG12       1:A:99:LEU:HD22       12       0.11         (1,630)       1:A:90:VAL:HG12       1:A:99:LEU:HD23       12       0.11         (1,630)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD21       12       0.11         (1,630)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD22       12       0.11	
(1,630)       1:A:90:VAL:HG12       1:A:99:LEU:HD21       12       0.11         (1,630)       1:A:90:VAL:HG12       1:A:99:LEU:HD22       12       0.11         (1,630)       1:A:90:VAL:HG12       1:A:99:LEU:HD23       12       0.11         (1,630)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD21       12       0.11         (1,630)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD22       12       0.11	
(1,630)       1:A:90:VAL:HG12       1:A:99:LEU:HD22       12       0.11         (1,630)       1:A:90:VAL:HG12       1:A:99:LEU:HD23       12       0.11         (1,630)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD21       12       0.11         (1,630)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD22       12       0.11	
(1,630)       1:A:90:VAL:HG12       1:A:99:LEU:HD23       12       0.11         (1,630)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD21       12       0.11         (1,630)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD22       12       0.11	
(1,630)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD21       12       0.11         (1,630)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:99:LEU:HD22       12       0.11	
(1,630) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD22 12 0.11	
( ' ' )	
(1,630) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD23 12 0.11	
(1,630) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD21 20 0.11	
(1,630) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD22 20 0.11	
(1,630) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:99:LEU:HD23 20 0.11	
(1,630) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:99:LEU:HD21 20 0.11	
(1,630) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:99:LEU:HD22 20 0.11	
(1,630) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:99:LEU:HD23 20 0.11	
(1,630) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD21 20 0.11	
(1,630) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD22 20 0.11	
(1,630) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:99:LEU:HD23 20 0.11	
(1,63) 1:A:54:SER:HG 1:A:57:LYS:H 10 0.11	
(1,623) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:71:ILE:HD11 20 0.11	
(1,623) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:71:ILE:HD12 20 0.11	



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,623)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:71:ILE:HD13	20	0.11
(1,623)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:71:ILE:HD11	20	0.11
(1,623)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:71:ILE:HD12	20	0.11
(1,623)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:71:ILE:HD13	20	0.11
(1,623)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:71:ILE:HD11	20	0.11
(1,623)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:71:ILE:HD12	20	0.11
(1,623)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:71:ILE:HD13	20	0.11
(1,619)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:H	9	0.11
(1,619)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:H	9	0.11
(1,619)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:H	9	0.11
(1,619)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:H	16	0.11
(1,619)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:H	16	0.11
(1,619)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:H	16	0.11
(1,600)	1:A:142:ASN:H	1:A:142:ASN:HD21	9	0.11
(1,60)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD11	11	0.11
(1,60)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD12	11	0.11
(1,60)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD13	11	0.11
(1,59)	1:A:132:GLU:H	1:A:138:LEU:HD11	8	0.11
(1,59)	1:A:132:GLU:H	1:A:138:LEU:HD12	8	0.11
(1,59)	1:A:132:GLU:H	1:A:138:LEU:HD13	8	0.11
(1,584)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD11	16	0.11
(1,584)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD12	16	0.11
(1,584)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD13	16	0.11
(1,581)	1:A:102:VAL:HG11	1:A:113:ARG:H	8	0.11
(1,581)	1:A:102:VAL:HG12	1:A:113:ARG:H	8	0.11
(1,581)	1:A:102:VAL:HG13	1:A:113:ARG:H	8	0.11
(1,57)	1:A:112:LEU:HD11	1:A:113:ARG:H	2	0.11
(1,57)	1:A:112:LEU:HD12	1:A:113:ARG:H	2	0.11
(1,57)	1:A:112:LEU:HD13	1:A:113:ARG:H	2	0.11
(1,564)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:137:TYR:H	19	0.11
(1,564)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:137:TYR:H	19	0.11
(1,564)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:137:TYR:H	19	0.11
(1,557)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:131:GLU:H	11	0.11
(1,557)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:131:GLU:H	11	0.11
(1,557)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:131:GLU:H	11	0.11
(1,555)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD11	19	0.11
(1,555)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD12	19	0.11
(1,555)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD13	19	0.11
(1,551)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD11	9	0.11
(1,551)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD12	9	0.11
(1,551)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD13	9	0.11
(1,542)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD21	4	0.11



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,542)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD22	4	0.11
(1,542)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD23	4	0.11
(1,536)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:102:VAL:H	14	0.11
(1,536)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:102:VAL:H	14	0.11
(1,536)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:102:VAL:H	14	0.11
(1,52)	1:A:16:GLN:HE21	1:A:46:VAL:HG11	1	0.11
(1,52)	1:A:16:GLN:HE21	1:A:46:VAL:HG12	1	0.11
(1,52)	1:A:16:GLN:HE21	1:A:46:VAL:HG13	1	0.11
(1,517)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:HG21	8	0.11
(1,517)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:HG22	8	0.11
(1,517)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:HG23	8	0.11
(1,517)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:HG21	11	0.11
(1,517)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:HG22	11	0.11
(1,517)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:HG23	11	0.11
(1,512)	1:A:79:LEU:HD21	1:A:87:ARG:H	16	0.11
(1,512)	1:A:79:LEU:HD22	1:A:87:ARG:H	16	0.11
(1,512)	1:A:79:LEU:HD23	1:A:87:ARG:H	16	0.11
(1,493)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:52:PHE:H	20	0.11
(1,493)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:52:PHE:H	20	0.11
(1,493)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:52:PHE:H	20	0.11
(1,490)	1:A:51:LEU:HD11	1:A:52:PHE:H	16	0.11
(1,490)	1:A:51:LEU:HD12	1:A:52:PHE:H	16	0.11
(1,490)	1:A:51:LEU:HD13	1:A:52:PHE:H	16	0.11
(1,49)	1:A:78:LYS:H	1:A:90:VAL:HG11	13	0.11
(1,49)	1:A:78:LYS:H	1:A:90:VAL:HG12	13	0.11
(1,49)	1:A:78:LYS:H	1:A:90:VAL:HG13	13	0.11
(1,488)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:51:LEU:H	17	0.11
(1,488)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:51:LEU:H	17	0.11
(1,488)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:51:LEU:H	17	0.11
(1,469)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:24:GLY:H	8	0.11
(1,469)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:24:GLY:H	8	0.11
(1,469)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:24:GLY:H	8	0.11
(1,468)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:23:ASN:H	12	0.11
(1,468)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:23:ASN:H	12	0.11
(1,468)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:23:ASN:H	12	0.11
(1,462)	1:A:45:ILE:HD11	1:A:46:VAL:H	19	0.11
(1,462)	1:A:45:ILE:HD12	1:A:46:VAL:H	19	0.11
(1,462)	1:A:45:ILE:HD13	1:A:46:VAL:H	19	0.11
(1,458)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:10:LYS:H	10	0.11
(1,458)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:10:LYS:H	10	0.11
(1,458)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:10:LYS:H	10	0.11
(1,458)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:10:LYS:H	15	0.11
	I	I		od on nort nago



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,458)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:10:LYS:H	15	0.11
(1,458)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:10:LYS:H	15	0.11
(1,453)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG21	1	0.11
(1,453)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG22	1	0.11
(1,453)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG23	1	0.11
(1,453)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG21	4	0.11
(1,453)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG22	4	0.11
(1,453)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG23	4	0.11
(1,453)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG21	5	0.11
(1,453)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG22	5	0.11
(1,453)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG23	5	0.11
(1,452)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG21	1	0.11
(1,452)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG22	1	0.11
(1,452)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG23	1	0.11
(1,451)	1:A:75:VAL:HG11	1:A:91:ARG:H	18	0.11
(1,451)	1:A:75:VAL:HG12	1:A:91:ARG:H	18	0.11
(1,451)	1:A:75:VAL:HG13	1:A:91:ARG:H	18	0.11
(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD11	11	0.11
(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD12	11	0.11
(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD13	11	0.11
(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD11	16	0.11
(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD12	16	0.11
(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD13	16	0.11
(1,443)	1:A:90:VAL:HG21	1:A:101:HIS:H	10	0.11
(1,443)	1:A:90:VAL:HG22	1:A:101:HIS:H	10	0.11
(1,443)	1:A:90:VAL:HG23	1:A:101:HIS:H	10	0.11
(1,438)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:120:ALA:H	6	0.11
(1,438)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:120:ALA:H	6	0.11
(1,438)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:120:ALA:H	6	0.11
(1,438)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:120:ALA:H	8	0.11
(1,438)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:120:ALA:H	8	0.11
(1,438)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:120:ALA:H	8	0.11
(1,435)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:26:GLU:H	16	0.11
(1,435)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:26:GLU:H	16	0.11
(1,435)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:26:GLU:H	16	0.11
(1,42)	1:A:15:MET:H	1:A:19:VAL:HG21	3	0.11
(1,42)	1:A:15:MET:H	1:A:19:VAL:HG22	3	0.11
(1,42)	1:A:15:MET:H	1:A:19:VAL:HG23	3	0.11
(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD21	10	0.11
(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD22	10	0.11
(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD23	10	0.11
(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD21	10	0.11



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD22	10	0.11
(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD23	10	0.11
(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD21	10	0.11
(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD22	10	0.11
(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD23	10	0.11
(1,41)	1:A:45:ILE:H	1:A:46:VAL:HG21	18	0.11
(1,41)	1:A:45:ILE:H	1:A:46:VAL:HG22	18	0.11
(1,41)	1:A:45:ILE:H	1:A:46:VAL:HG23	18	0.11
(1,407)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:46:VAL:HG21	1	0.11
(1,407)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:46:VAL:HG22	1	0.11
(1,407)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:46:VAL:HG23	1	0.11
(1,407)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:46:VAL:HG21	1	0.11
(1,407)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:46:VAL:HG22	1	0.11
(1,407)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:46:VAL:HG23	1	0.11
(1,407)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:46:VAL:HG21	1	0.11
(1,407)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:46:VAL:HG22	1	0.11
(1,407)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:46:VAL:HG23	1	0.11
(1,404)	1:A:102:VAL:HG11	1:A:112:LEU:HD21	4	0.11
(1,404)	1:A:102:VAL:HG11	1:A:112:LEU:HD22	4	0.11
(1,404)	1:A:102:VAL:HG11	1:A:112:LEU:HD23	4	0.11
(1,404)	1:A:102:VAL:HG12	1:A:112:LEU:HD21	4	0.11
(1,404)	1:A:102:VAL:HG12	1:A:112:LEU:HD22	4	0.11
(1,404)	1:A:102:VAL:HG12	1:A:112:LEU:HD23	4	0.11
(1,404)	1:A:102:VAL:HG13	1:A:112:LEU:HD21	4	0.11
(1,404)	1:A:102:VAL:HG13	1:A:112:LEU:HD22	4	0.11
(1,404)	1:A:102:VAL:HG13	1:A:112:LEU:HD23	4	0.11
(1,387)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:90:VAL:HG21	9	0.11
(1,387)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:90:VAL:HG22	9	0.11
(1,387)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:90:VAL:HG23	9	0.11
(1,387)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:90:VAL:HG21	9	0.11
(1,387)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:90:VAL:HG22	9	0.11
(1,387)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:90:VAL:HG23	9	0.11
(1,387)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG21	9	0.11
(1,387)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG22	9	0.11
(1,387)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG23	9	0.11
(1,375)	1:A:131:GLU:H	1:A:133:GLY:H	19	0.11
(1,374)	1:A:132:GLU:H	1:A:134:TYR:H	4	0.11
(1,374)	1:A:132:GLU:H	1:A:134:TYR:H	19	0.11
(1,329)	1:A:79:LEU:H	1:A:89:GLU:H	4	0.11
(1,329)	1:A:79:LEU:H	1:A:89:GLU:H	17	0.11
(1,329)	1:A:79:LEU:H	1:A:89:GLU:H	20	0.11
(1,31)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:49:LYS:H	2	0.11



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,31)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:49:LYS:H	2	0.11
(1,31)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:49:LYS:H	2	0.11
(1,303)	1:A:18:GLU:H	1:A:20:THR:H	19	0.11
(1,30)	1:A:106:GLY:H	1:A:112:LEU:HD21	8	0.11
(1,30)	1:A:106:GLY:H	1:A:112:LEU:HD22	8	0.11
(1,30)	1:A:106:GLY:H	1:A:112:LEU:HD23	8	0.11
(1,299)	1:A:15:MET:H	1:A:18:GLU:H	10	0.11
(1,299)	1:A:15:MET:H	1:A:18:GLU:H	16	0.11
(1,298)	1:A:14:ARG:H	1:A:17:TYR:H	13	0.11
(1,267)	1:A:21:GLN:H	1:A:24:GLY:H	16	0.11
(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD11	9	0.11
(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD12	9	0.11
(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD13	9	0.11
(1,256)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD11	11	0.11
(1,256)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD12	11	0.11
(1,256)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD13	11	0.11
(1,256)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD11	11	0.11
(1,256)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD12	11	0.11
(1,256)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD13	11	0.11
(1,256)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD11	11	0.11
(1,256)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD12	11	0.11
(1,256)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD13	11	0.11
(1,248)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD11	5	0.11
(1,248)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD12	5	0.11
(1,248)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD13	5	0.11
(1,248)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD11	6	0.11
(1,248)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD12	6	0.11
(1,248)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD13	6	0.11
(1,248)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD11	9	0.11
(1,248)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD12	9	0.11
(1,248)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD13	9	0.11
(1,248)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD11	10	0.11
(1,248)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD12	10	0.11
(1,248)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD13	10	0.11
(1,247)	1:A:121:LEU:HD11	1:A:122:ARG:H	5	0.11
(1,247)	1:A:121:LEU:HD12	1:A:122:ARG:H	5	0.11
(1,247)	1:A:121:LEU:HD13	1:A:122:ARG:H	5	0.11
(1,247)	1:A:121:LEU:HD11	1:A:122:ARG:H	12	0.11
(1,247)	1:A:121:LEU:HD12	1:A:122:ARG:H	12	0.11
(1,247)	1:A:121:LEU:HD13	1:A:122:ARG:H	12	0.11
(1,247)	1:A:121:LEU:HD11	1:A:122:ARG:H	19	0.11
(1,247)	1:A:121:LEU:HD12	1:A:122:ARG:H	19	0.11
(1,471)		1.71.122.71100.11		0.11



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,247)	1:A:121:LEU:HD13	1:A:122:ARG:H	19	0.11
(1,22)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:137:TYR:H	11	0.11
(1,22)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:137:TYR:H	11	0.11
(1,22)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:137:TYR:H	11	0.11
(1,194)	1:A:42:TYR:H	1:A:43:VAL:HG11	2	0.11
(1,194)	1:A:42:TYR:H	1:A:43:VAL:HG12	2	0.11
(1,194)	1:A:42:TYR:H	1:A:43:VAL:HG13	2	0.11
(1,194)	1:A:42:TYR:H	1:A:43:VAL:HG11	11	0.11
(1,194)	1:A:42:TYR:H	1:A:43:VAL:HG12	11	0.11
(1,194)	1:A:42:TYR:H	1:A:43:VAL:HG13	11	0.11
(1,192)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:H	5	0.11
(1,192)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:H	5	0.11
(1,192)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:H	5	0.11
(1,192)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:H	14	0.11
(1,192)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:H	14	0.11
(1,192)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:H	14	0.11
(1,190)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:26:GLU:H	1	0.11
(1,190)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:26:GLU:H	1	0.11
(1,190)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:26:GLU:H	1	0.11
(1,176)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:45:ILE:HD11	9	0.11
(1,176)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:45:ILE:HD12	9	0.11
(1,176)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:45:ILE:HD13	9	0.11
(1,176)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:45:ILE:HD11	9	0.11
(1,176)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:45:ILE:HD12	9	0.11
(1,176)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:45:ILE:HD13	9	0.11
(1,176)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:45:ILE:HD11	9	0.11
(1,176)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:45:ILE:HD12	9	0.11
(1,176)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:45:ILE:HD13	9	0.11
(1,176)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:45:ILE:HD11	13	0.11
(1,176)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:45:ILE:HD12	13	0.11
(1,176)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:45:ILE:HD13	13	0.11
(1,176)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:45:ILE:HD11	13	0.11
(1,176)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:45:ILE:HD12	13	0.11
(1,176)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:45:ILE:HD13	13	0.11
(1,176)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:45:ILE:HD11	13	0.11
(1,176)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:45:ILE:HD12	13	0.11
(1,176)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:45:ILE:HD13	13	0.11
(1,161)	1:A:133:GLY:H	1:A:135:GLU:H	7	0.11
(1,161)	1:A:133:GLY:H	1:A:135:GLU:H	19	0.11
(1,15)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG11	13	0.11
(1,15)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG12	13	0.11
(1,15)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG13	13	0.11



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,15)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG11	16	0.11
(1,15)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG12	16	0.11
(1,15)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG13	16	0.11
(1,139)	1:A:46:VAL:H	1:A:48:GLY:H	7	0.11
(1,131)	1:A:17:TYR:H	1:A:19:VAL:H	14	0.11
(1,13)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:131:GLU:H	7	0.11
(1,13)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:131:GLU:H	7	0.11
(1,13)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:131:GLU:H	7	0.11
(1,13)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:131:GLU:H	20	0.11
(1,13)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:131:GLU:H	20	0.11
(1,13)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:131:GLU:H	20	0.11
(1,1289)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD11	11	0.11
(1,1289)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD12	11	0.11
(1,1289)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD13	11	0.11
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD21	2	0.11
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD22	2	0.11
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD23	2	0.11
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD21	2	0.11
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD22	2	0.11
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD23	2	0.11
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD21	2	0.11
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD22	2	0.11
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD23	2	0.11
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD21	9	0.11
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD22	9	0.11
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD23	9	0.11
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD21	9	0.11
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD22	9	0.11
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD23	9	0.11
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD21	9	0.11
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD22	9	0.11
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD23	9	0.11
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD21	12	0.11
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD22	12	0.11
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD23	12	0.11
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD21	12	0.11
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD22	12	0.11
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD23	12	0.11
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD21	12	0.11
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD22	12	0.11
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD23	12	0.11
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD21	20	0.11



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD22	20	0.11
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD23	20	0.11
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD21	20	0.11
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD22	20	0.11
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD23	20	0.11
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD21	20	0.11
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD22	20	0.11
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD23	20	0.11
(1,1268)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:71:ILE:HD11	20	0.11
(1,1268)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:71:ILE:HD12	20	0.11
(1,1268)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:71:ILE:HD13	20	0.11
(1,1268)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:71:ILE:HD11	20	0.11
(1,1268)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:71:ILE:HD12	20	0.11
(1,1268)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:71:ILE:HD13	20	0.11
(1,1268)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:71:ILE:HD11	20	0.11
(1,1268)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:71:ILE:HD12	20	0.11
(1,1268)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:71:ILE:HD13	20	0.11
(1,1264)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:H	9	0.11
(1,1264)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:H	9	0.11
(1,1264)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:H	9	0.11
(1,1264)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:H	16	0.11
(1,1264)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:H	16	0.11
(1,1264)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:H	16	0.11
(1,1245)	1:A:142:ASN:H	1:A:142:ASN:HD21	9	0.11
(1,1229)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD11	16	0.11
(1,1229)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD12	16	0.11
(1,1229)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD13	16	0.11
(1,1226)	1:A:102:VAL:HG11	1:A:113:ARG:H	8	0.11
(1,1226)	1:A:102:VAL:HG12	1:A:113:ARG:H	8	0.11
(1,1226)	1:A:102:VAL:HG13	1:A:113:ARG:H	8	0.11
(1,1209)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:137:TYR:H	19	0.11
(1,1209)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:137:TYR:H	19	0.11
(1,1209)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:137:TYR:H	19	0.11
(1,1202)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:131:GLU:H	11	0.11
(1,1202)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:131:GLU:H	11	0.11
(1,1202)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:131:GLU:H	11	0.11
(1,1200)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD11	19	0.11
(1,1200)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD12	19	0.11
(1,1200)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD13	19	0.11
(1,1196)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD11	9	0.11
(1,1196)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD12	9	0.11
(1,1196)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD13	9	0.11



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1187)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD21	4	0.11
(1,1187)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD22	4	0.11
(1,1187)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD23	4	0.11
(1,1181)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:102:VAL:H	14	0.11
(1,1181)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:102:VAL:H	14	0.11
(1,1181)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:102:VAL:H	14	0.11
(1,1162)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:HG21	8	0.11
(1,1162)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:HG22	8	0.11
(1,1162)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:HG23	8	0.11
(1,1162)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:HG21	11	0.11
(1,1162)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:HG22	11	0.11
(1,1162)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:HG23	11	0.11
(1,1157)	1:A:79:LEU:HD21	1:A:87:ARG:H	16	0.11
(1,1157)	1:A:79:LEU:HD22	1:A:87:ARG:H	16	0.11
(1,1157)	1:A:79:LEU:HD23	1:A:87:ARG:H	16	0.11
(1,114)	1:A:29:PHE:H	1:A:31:ASN:H	18	0.11
(1,1138)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:52:PHE:H	20	0.11
(1,1138)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:52:PHE:H	20	0.11
(1,1138)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:52:PHE:H	20	0.11
(1,1135)	1:A:51:LEU:HD11	1:A:52:PHE:H	16	0.11
(1,1135)	1:A:51:LEU:HD12	1:A:52:PHE:H	16	0.11
(1,1135)	1:A:51:LEU:HD13	1:A:52:PHE:H	16	0.11
(1,1133)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:51:LEU:H	17	0.11
(1,1133)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:51:LEU:H	17	0.11
(1,1133)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:51:LEU:H	17	0.11
(1,1114)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:24:GLY:H	8	0.11
(1,1114)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:24:GLY:H	8	0.11
(1,1114)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:24:GLY:H	8	0.11
(1,1113)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:23:ASN:H	12	0.11
(1,1113)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:23:ASN:H	12	0.11
(1,1113)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:23:ASN:H	12	0.11
(1,1107)	1:A:45:ILE:HD11	1:A:46:VAL:H	19	0.11
(1,1107)	1:A:45:ILE:HD12	1:A:46:VAL:H	19	0.11
(1,1107)	1:A:45:ILE:HD13	1:A:46:VAL:H	19	0.11
(1,1103)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:10:LYS:H	10	0.11
(1,1103)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:10:LYS:H	10	0.11
(1,1103)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:10:LYS:H	10	0.11
(1,1103)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:10:LYS:H	15	0.11
(1,1103)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:10:LYS:H	15	0.11
(1,1103)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:10:LYS:H	15	0.11
(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD21	8	0.11
(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD22	8	0.11



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD23	8	0.11
(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD21	16	0.11
(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD22	16	0.11
(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD23	16	0.11
(1,1098)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG21	1	0.11
(1,1098)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG22	1	0.11
(1,1098)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG23	1	0.11
(1,1098)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG21	4	0.11
(1,1098)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG22	4	0.11
(1,1098)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG23	4	0.11
(1,1098)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG21	5	0.11
(1,1098)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG22	5	0.11
(1,1098)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG23	5	0.11
(1,1097)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG21	1	0.11
(1,1097)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG22	1	0.11
(1,1097)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG23	1	0.11
(1,1096)	1:A:75:VAL:HG11	1:A:91:ARG:H	18	0.11
(1,1096)	1:A:75:VAL:HG12	1:A:91:ARG:H	18	0.11
(1,1096)	1:A:75:VAL:HG13	1:A:91:ARG:H	18	0.11
(1,1088)	1:A:90:VAL:HG21	1:A:101:HIS:H	10	0.11
(1,1088)	1:A:90:VAL:HG22	1:A:101:HIS:H	10	0.11
(1,1088)	1:A:90:VAL:HG23	1:A:101:HIS:H	10	0.11
(1,1083)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:120:ALA:H	6	0.11
(1,1083)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:120:ALA:H	6	0.11
(1,1083)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:120:ALA:H	6	0.11
(1,1083)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:120:ALA:H	8	0.11
(1,1083)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:120:ALA:H	8	0.11
(1,1083)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:120:ALA:H	8	0.11
(1,1080)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:26:GLU:H	16	0.11
(1,1080)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:26:GLU:H	16	0.11
(1,1080)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:26:GLU:H	16	0.11
(1,106)	1:A:105:ASP:H	1:A:113:ARG:H	17	0.11
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD21	10	0.11
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD22	10	0.11
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD23	10	0.11
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD21	10	0.11
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD22	10	0.11
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD23	10	0.11
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD21	10	0.11
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD22	10	0.11
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD23	10	0.11
(1,1052)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:46:VAL:HG21	1	0.11



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

(1,1052)         1:A:12:LEU:HD11         1:A:46:VAL:HG22         1         0.11           (1,1052)         1:A:12:LEU:HD12         1:A:46:VAL:HG23         1         0.11           (1,1052)         1:A:12:LEU:HD12         1:A:46:VAL:HG21         1         0.11           (1,1052)         1:A:12:LEU:HD12         1:A:46:VAL:HG23         1         0.11           (1,1052)         1:A:12:LEU:HD13         1:A:46:VAL:HG21         1         0.11           (1,1052)         1:A:12:LEU:HD13         1:A:46:VAL:HG22         1         0.11           (1,1049)         1:A:102:VAL:HG11         1:A:112:LEU:HD21         4         0.11           (1,1049)         1:A:102:VAL:HG12         1:A:112:LEU:HD22         4         0.11           (1,1049)         1:A:102:VAL:HG13         1:A:112:LEU:HD21         4         0.11           (1,1049)         1:A:102:VAL:HG1	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1052)         1:A:12:LEU:HD12         1:A:46:VAL:HG21         1         0.11           (1,1052)         1:A:12:LEU:HD12         1:A:46:VAL:HG22         1         0.11           (1,1052)         1:A:12:LEU:HD12         1:A:46:VAL:HG23         1         0.11           (1,1052)         1:A:12:LEU:HD13         1:A:46:VAL:HG21         1         0.11           (1,1052)         1:A:12:LEU:HD13         1:A:46:VAL:HG23         1         0.11           (1,1052)         1:A:10:VAL:HG11         1:A:412:LEU:HD21         4         0.11           (1,1049)         1:A:102:VAL:HG11         1:A:112:LEU:HD22         4         0.11           (1,1049)         1:A:102:VAL:HG11         1:A:112:LEU:HD22         4         0.11           (1,1049)         1:A:102:VAL:HG12         1:A:112:LEU:HD22         4         0.11           (1,1049)         1:A:102:VAL:HG12         1:A:112:LEU:HD22         4         0.11           (1,1049)         1:A:102:VAL:HG13         1:A:112:LEU:HD23         4         0.11           (1,1049)         1:A:102:VAL:HG13         1:A:112:LEU:HD21         4         0.11           (1,1049)         1:A:102:VAL:HG13         1:A:112:LEU:HD23         4         0.11           (1,1032)         1:A:75	(1,1052)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:46:VAL:HG22	1	0.11
(1,1052)         1:A:12:LEU:HD12         1:A:46:VAL:HG22         1         0.11           (1,1052)         1:A:12:LEU:HD12         1:A:46:VAL:HG23         1         0.11           (1,1052)         1:A:12:LEU:HD13         1:A:46:VAL:HG21         1         0.11           (1,1052)         1:A:12:LEU:HD13         1:A:46:VAL:HG22         1         0.11           (1,1052)         1:A:10:LEU:HD13         1:A:46:VAL:HG23         1         0.11           (1,1052)         1:A:10:LEU:HD13         1:A:46:VAL:HG23         1         0.11           (1,1049)         1:A:102:VAL:HG11         1:A:112:LEU:HD21         4         0.11           (1,1049)         1:A:102:VAL:HG11         1:A:112:LEU:HD23         4         0.11           (1,1049)         1:A:102:VAL:HG12         1:A:112:LEU:HD23         4         0.11           (1,1049)         1:A:102:VAL:HG12         1:A:112:LEU:HD23         4         0.11           (1,1049)         1:A:102:VAL:HG13         1:A:112:LEU:HD23         4         0.11           (1,1049)         1:A:102:VAL:HG13         1:A:112:LEU:HD23         4         0.11           (1,1049)         1:A:102:VAL:HG13         1:A:112:LEU:HD23         4         0.11           (1,1049)         1:A:102	(1,1052)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:46:VAL:HG23	1	0.11
(1,1052)         1:A:12:LEU:HD12         1:A:46:VAL:HG23         1         0.11           (1,1052)         1:A:12:LEU:HD13         1:A:46:VAL:HG21         1         0.11           (1,1052)         1:A:12:LEU:HD13         1:A:46:VAL:HG22         1         0.11           (1,1052)         1:A:12:LEU:HD13         1:A:46:VAL:HG23         1         0.11           (1,1049)         1:A:102:VAL:HG11         1:A:112:LEU:HD21         4         0.11           (1,1049)         1:A:102:VAL:HG11         1:A:112:LEU:HD23         4         0.11           (1,1049)         1:A:102:VAL:HG12         1:A:112:LEU:HD21         4         0.11           (1,1049)         1:A:102:VAL:HG12         1:A:112:LEU:HD21         4         0.11           (1,1049)         1:A:102:VAL:HG13         1:A:112:LEU:HD22         4         0.11           (1,1049)         1:A:102:VAL:HG13         1:A:112:LEU:HD23         4         0.11           (1,1049)         1:A:102:VAL:HG13         1:A:112:LEU:HD22         4         0.11           (1,1049)         1:A:102:VAL:HG13         1:A:112:LEU:HD22         4         0.11           (1,1049)         1:A:102:VAL:HG13         1:A:112:LEU:HD23         4         0.11           (1,1032)         1:A	(1,1052)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:46:VAL:HG21	1	0.11
(1,1052)         1:A:12:LEU:HD13         1:A:46:VAL:HG21         1         0.11           (1,1052)         1:A:12:LEU:HD13         1:A:46:VAL:HG22         1         0.11           (1,1052)         1:A:10:VAL:HG11         1:A:46:VAL:HG23         1         0.11           (1,1049)         1:A:10:VAL:HG11         1:A:112:LEU:HD21         4         0.11           (1,1049)         1:A:102:VAL:HG11         1:A:112:LEU:HD23         4         0.11           (1,1049)         1:A:102:VAL:HG12         1:A:112:LEU:HD21         4         0.11           (1,1049)         1:A:102:VAL:HG12         1:A:112:LEU:HD22         4         0.11           (1,1049)         1:A:102:VAL:HG12         1:A:112:LEU:HD23         4         0.11           (1,1049)         1:A:102:VAL:HG13         1:A:112:LEU:HD23         4         0.11           (1,1049)         1:	(1,1052)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:46:VAL:HG22	1	0.11
(1,1052)         1:A:12:LEU:HD13         1:A:46:VAL:HG22         1         0.11           (1,1052)         1:A:12:LEU:HD13         1:A:46:VAL:HG23         1         0.11           (1,1049)         1:A:102:VAL:HG11         1:A:112:LEU:HD21         4         0.11           (1,1049)         1:A:102:VAL:HG11         1:A:112:LEU:HD22         4         0.11           (1,1049)         1:A:102:VAL:HG12         1:A:112:LEU:HD23         4         0.11           (1,1049)         1:A:102:VAL:HG12         1:A:112:LEU:HD21         4         0.11           (1,1049)         1:A:102:VAL:HG12         1:A:112:LEU:HD22         4         0.11           (1,1049)         1:A:102:VAL:HG13         1:A:112:LEU:HD23         4         0.11           (1,1042)         1:A:75:VAL:HG23         1:A:90:VAL:HG21         9         0.11           (1,1032)         1	(1,1052)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:46:VAL:HG23	1	0.11
(1,1052)         1:A:12:LEU:HD13         1:A:46:VAL:HG23         1         0.11           (1,1049)         1:A:102:VAL:HG11         1:A:112:LEU:HD21         4         0.11           (1,1049)         1:A:102:VAL:HG11         1:A:112:LEU:HD22         4         0.11           (1,1049)         1:A:102:VAL:HG12         1:A:112:LEU:HD23         4         0.11           (1,1049)         1:A:102:VAL:HG12         1:A:112:LEU:HD22         4         0.11           (1,1049)         1:A:102:VAL:HG12         1:A:112:LEU:HD23         4         0.11           (1,1049)         1:A:102:VAL:HG13         1:A:112:LEU:HD23         4         0.11           (1,1032)         <	(1,1052)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:46:VAL:HG21	1	0.11
(1,1049) 1:A:102:VAL:HG11 1:A:112:LEU:HD21 4 0.11 (1,1049) 1:A:102:VAL:HG11 1:A:112:LEU:HD22 4 0.11 (1,1049) 1:A:102:VAL:HG11 1:A:112:LEU:HD23 4 0.11 (1,1049) 1:A:102:VAL:HG12 1:A:112:LEU:HD21 4 0.11 (1,1049) 1:A:102:VAL:HG12 1:A:112:LEU:HD22 4 0.11 (1,1049) 1:A:102:VAL:HG12 1:A:112:LEU:HD22 4 0.11 (1,1049) 1:A:102:VAL:HG12 1:A:112:LEU:HD23 4 0.11 (1,1049) 1:A:102:VAL:HG13 1:A:112:LEU:HD23 4 0.11 (1,1049) 1:A:102:VAL:HG13 1:A:112:LEU:HD21 4 0.11 (1,1049) 1:A:102:VAL:HG13 1:A:112:LEU:HD22 4 0.11 (1,1049) 1:A:102:VAL:HG13 1:A:112:LEU:HD22 4 0.11 (1,1032) 1:A:75:VAL:HG13 1:A:112:LEU:HD23 4 0.11 (1,1032) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG21 9 0.11 (1,1032) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG21 9 0.11 (1,1032) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG22 9 0.11 (1,1032) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG23 9 0.11 (1,1032) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG23 9 0.11 (1,1032) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG23 9 0.11 (1,1032) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG21 9 0.11 (1,1032) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 9 0.11 (1,1032) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG23 9 0.11 (1,090) 1:A:131:GLU:H 1:A:134:TYR:H 4 0.11 (1,1019) 1:A:132:GLU:H 1:A:134:TYR:H 4 0.11 (1,1019) 1:A:132:GLU:H 1:A:134:TYR:H 4 0.11 (1,1019) 1:A:132:GLU:H 1:A:134:TYR:H 4 0.11 (1,907) 1:A:85:MET:H 1:A:86:LE:H 11 0.1 (1,907) 1:A:85:MET:H 1:A:89:GLU:H 5 0.1 (1,907) 1:A:26:GLU:H 1:A:64:TRP:HE1 2 0.1 (1,904) 1:A:66:GLU:H 1:A:64:TRP:HE1 3 0.1 (1,904) 1:A:66:GLU:H 1:A:64:TRP:HE1 9 0.1 (1,904) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD11 6 0.1 (1,904) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD11 6 0.1	(1,1052)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:46:VAL:HG22	1	0.11
(1,1049)         1:A:102:VAL:HG11         1:A:112:LEU:HD22         4         0.11           (1,1049)         1:A:102:VAL:HG11         1:A:112:LEU:HD23         4         0.11           (1,1049)         1:A:102:VAL:HG12         1:A:112:LEU:HD21         4         0.11           (1,1049)         1:A:102:VAL:HG12         1:A:112:LEU:HD23         4         0.11           (1,1049)         1:A:102:VAL:HG13         1:A:112:LEU:HD23         4         0.11           (1,1049)         1:A:102:VAL:HG13         1:A:112:LEU:HD21         4         0.11           (1,1049)         1:A:102:VAL:HG13         1:A:112:LEU:HD22         4         0.11           (1,1040)         1:A:102:VAL:HG13         1:A:112:LEU:HD22         4         0.11           (1,1040)         1:A:102:VAL:HG13         1:A:112:LEU:HD22         4         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG21         1:A:90:VAL:HG23         9         0.11           (1,1032)         <	(1,1052)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:46:VAL:HG23	1	0.11
(1,1049)         1:A:102:VAL:HG11         1:A:112:LEU:HD23         4         0.11           (1,1049)         1:A:102:VAL:HG12         1:A:112:LEU:HD21         4         0.11           (1,1049)         1:A:102:VAL:HG12         1:A:112:LEU:HD22         4         0.11           (1,1049)         1:A:102:VAL:HG13         1:A:112:LEU:HD23         4         0.11           (1,1049)         1:A:102:VAL:HG13         1:A:112:LEU:HD22         4         0.11           (1,1049)         1:A:102:VAL:HG13         1:A:112:LEU:HD22         4         0.11           (1,1049)         1:A:102:VAL:HG13         1:A:112:LEU:HD23         4         0.11           (1,1049)         1:A:102:VAL:HG13         1:A:112:LEU:HD22         4         0.11           (1,1049)         1:A:102:VAL:HG13         1:A:112:LEU:HD23         4         0.11           (1,1049)         1:A:102:VAL:HG13         1:A:112:LEU:HD22         4         0.11           (1,1049)         1:A:102:VAL:HG13         1:A:112:LEU:HD23         4         0.11           (1,1040)         1:A:75:VAL:HG21         1:A:90:VAL:HG22         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG21         1:A:90:VAL:HG23         9         0.11           (1,1032) <th< td=""><td>(1,1049)</td><td>1:A:102:VAL:HG11</td><td>1:A:112:LEU:HD21</td><td>4</td><td>0.11</td></th<>	(1,1049)	1:A:102:VAL:HG11	1:A:112:LEU:HD21	4	0.11
(1,1049)         1:A:102:VAL:HG12         1:A:112:LEU:HD21         4         0.11           (1,1049)         1:A:102:VAL:HG12         1:A:112:LEU:HD22         4         0.11           (1,1049)         1:A:102:VAL:HG12         1:A:112:LEU:HD23         4         0.11           (1,1049)         1:A:102:VAL:HG13         1:A:112:LEU:HD21         4         0.11           (1,1049)         1:A:102:VAL:HG13         1:A:112:LEU:HD22         4         0.11           (1,1049)         1:A:102:VAL:HG13         1:A:112:LEU:HD23         4         0.11           (1,1040)         1:A:102:VAL:HG21         1:A:00:VAL:HG21         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG21         1:A:90:VAL:HG23         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG22         1:A:90:VAL:HG23         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG23         1:A:90:VAL:HG23         9         0.11           (1,1032)         1:	(1,1049)	1:A:102:VAL:HG11	1:A:112:LEU:HD22	4	0.11
(1,1049)         1:A:102:VAL:HG12         1:A:112:LEU:HD22         4         0.11           (1,1049)         1:A:102:VAL:HG12         1:A:112:LEU:HD23         4         0.11           (1,1049)         1:A:102:VAL:HG13         1:A:112:LEU:HD21         4         0.11           (1,1049)         1:A:102:VAL:HG13         1:A:112:LEU:HD22         4         0.11           (1,1049)         1:A:102:VAL:HG13         1:A:112:LEU:HD23         4         0.11           (1,1049)         1:A:75:VAL:HG21         1:A:90:VAL:HG21         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG21         1:A:90:VAL:HG22         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG21         1:A:90:VAL:HG23         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG22         1:A:90:VAL:HG22         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG22         1:A:90:VAL:HG22         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG23         1:A:90:VAL:HG23         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG23         1:A:90:VAL:HG23         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG23         1:A:90:VAL:HG23         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:	(1,1049)	1:A:102:VAL:HG11	1:A:112:LEU:HD23	4	0.11
(1,1049)         1:A:102:VAL:HG12         1:A:112:LEU:HD23         4         0.11           (1,1049)         1:A:102:VAL:HG13         1:A:112:LEU:HD21         4         0.11           (1,1049)         1:A:102:VAL:HG13         1:A:112:LEU:HD22         4         0.11           (1,1049)         1:A:102:VAL:HG13         1:A:112:LEU:HD23         4         0.11           (1,1049)         1:A:75:VAL:HG21         1:A:90:VAL:HG21         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG21         1:A:90:VAL:HG22         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG21         1:A:90:VAL:HG23         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG22         1:A:90:VAL:HG22         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG22         1:A:90:VAL:HG22         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG22         1:A:90:VAL:HG23         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG23         1:A:90:VAL:HG23         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG23         1:A:90:VAL:HG23         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG23         1:A:90:VAL:HG23         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG	( ' /	1:A:102:VAL:HG12	1:A:112:LEU:HD21	4	0.11
(1,1049)         1:A:102:VAL:HG12         1:A:112:LEU:HD23         4         0.11           (1,1049)         1:A:102:VAL:HG13         1:A:112:LEU:HD21         4         0.11           (1,1049)         1:A:102:VAL:HG13         1:A:112:LEU:HD22         4         0.11           (1,1049)         1:A:102:VAL:HG13         1:A:112:LEU:HD23         4         0.11           (1,1049)         1:A:75:VAL:HG21         1:A:90:VAL:HG21         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG21         1:A:90:VAL:HG22         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG21         1:A:90:VAL:HG23         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG22         1:A:90:VAL:HG22         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG22         1:A:90:VAL:HG22         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG22         1:A:90:VAL:HG23         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG23         1:A:90:VAL:HG23         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG23         1:A:90:VAL:HG23         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG23         1:A:90:VAL:HG23         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG	(1,1049)	1:A:102:VAL:HG12	1:A:112:LEU:HD22	4	0.11
(1,1049)         1:A:102:VAL:HG13         1:A:112:LEU:HD21         4         0.11           (1,1049)         1:A:102:VAL:HG13         1:A:112:LEU:HD22         4         0.11           (1,1049)         1:A:102:VAL:HG13         1:A:112:LEU:HD23         4         0.11           (1,1049)         1:A:75:VAL:HG21         1:A:90:VAL:HG21         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG21         1:A:90:VAL:HG22         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG21         1:A:90:VAL:HG23         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG22         1:A:90:VAL:HG21         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG22         1:A:90:VAL:HG23         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG22         1:A:90:VAL:HG23         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG23         1:A:90:VAL:HG23         9         0.11           (1,1032)         1:A:76:VAL:HG23	( ' /	1:A:102:VAL:HG12	1:A:112:LEU:HD23	4	0.11
(1,1049)         1:A:102:VAL:HG13         1:A:112:LEU:HD22         4         0.11           (1,1049)         1:A:102:VAL:HG13         1:A:112:LEU:HD23         4         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG21         1:A:90:VAL:HG21         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG21         1:A:90:VAL:HG22         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG21         1:A:90:VAL:HG23         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG22         1:A:90:VAL:HG21         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG22         1:A:90:VAL:HG22         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG22         1:A:90:VAL:HG23         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG23         1:A:90:VAL:HG21         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG23         1:A:90:VAL:HG22         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG23         1:A:90:VAL:HG23         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG23         1:A:90:VAL:HG23         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG23         1:A:490:VAL:HG23         9         0.11           (1,1032)         1:A:131:GLU:H <td>( /</td> <td></td> <td>1:A:112:LEU:HD21</td> <td></td> <td>0.11</td>	( /		1:A:112:LEU:HD21		0.11
(1,1049)         1:A:102:VAL:HG13         1:A:112:LEU:HD23         4         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG21         1:A:90:VAL:HG21         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG21         1:A:90:VAL:HG22         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG21         1:A:90:VAL:HG23         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG22         1:A:90:VAL:HG21         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG22         1:A:90:VAL:HG22         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG23         1:A:90:VAL:HG23         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG23         1:A:90:VAL:HG21         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG23         1:A:90:VAL:HG22         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG23         1:A:90:VAL:HG23         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG23         1:A:90:VAL:HG23         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG23         1:A:90:VAL:HG23         9         0.11           (1,1032)         1:A:131:GLU:H         1:A:131:GLY:H         19         0.11           (1,1032)         1:A:131:GLU:H	· /		1:A:112:LEU:HD22	4	0.11
(1,1032)         1:A:75:VAL:HG21         1:A:90:VAL:HG21         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG21         1:A:90:VAL:HG22         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG21         1:A:90:VAL:HG23         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG22         1:A:90:VAL:HG21         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG22         1:A:90:VAL:HG23         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG23         1:A:90:VAL:HG21         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG23         1:A:90:VAL:HG21         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG23         1:A:90:VAL:HG22         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG23         1:A:90:VAL:HG23         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG23         1:A:90:VAL:HG22         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG23         1:A:90:VAL:HG23         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG23         1:A:90:VAL:HG22         9         0.11           (1,1032)         1:A:131:GLU:H         1:A:4:90:VAL:HG23         9         0.11           (1,1032)         1:A:131:GLU:H	( , ,	1:A:102:VAL:HG13	1:A:112:LEU:HD23		
(1,1032)         1:A:75:VAL:HG21         1:A:90:VAL:HG22         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG21         1:A:90:VAL:HG23         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG22         1:A:90:VAL:HG21         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG22         1:A:90:VAL:HG23         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG23         1:A:90:VAL:HG23         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG23         1:A:90:VAL:HG21         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG23         1:A:90:VAL:HG22         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG23         1:A:90:VAL:HG23         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG23         1:A:90:VAL:HG23         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG23         1:A:90:VAL:HG23         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG23         1:A:90:VAL:HG22         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG23         1:A:90:VAL:HG23         9         0.11           (1,1032)         1:A:13:GLU:H         1:A:13:GLU:H         19         0.11           (1,1001)         1:A:13:GLU:H	( )				
(1,1032)         1:A:75:VAL:HG21         1:A:90:VAL:HG23         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG22         1:A:90:VAL:HG21         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG22         1:A:90:VAL:HG22         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG22         1:A:90:VAL:HG23         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG23         1:A:90:VAL:HG21         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG23         1:A:90:VAL:HG22         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG23         1:A:90:VAL:HG23         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG23         1:A:90:VAL:HG21         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG23         1:A:4:90:VAL:HG21         9         0.11           (1,104)         1:A:13:1:GLU:H         1:A:13:13:GLU:H         19         0.11           (1,104)         1:A:13:1:GLU:H	, ,		1:A:90:VAL:HG22	9	
(1,1032)         1:A:75:VAL:HG22         1:A:90:VAL:HG21         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG22         1:A:90:VAL:HG22         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG22         1:A:90:VAL:HG23         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG23         1:A:90:VAL:HG21         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG23         1:A:90:VAL:HG22         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG23         1:A:90:VAL:HG23         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG23         1:A:90:VAL:HG23         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG23         1:A:90:VAL:HG22         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG23         1:A:90:VAL:HG22         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG23         1:A:90:VAL:HG22         9         0.11           (1,1032)         1:A:71:ILE:HD14         1:A:90:VAL:HG23         9         0.11           (1,1032)         1:A:13:ILEU:HD21         1:A:4:90:VAL:HG23         9         0.11           (1,104)         1:A:13:ILEU:HD21         1:A:13:4:TRP:HB1         19         0.11           (1,994)         1:A:26:GLU:H	· '			9	
(1,1032)         1:A:75:VAL:HG22         1:A:90:VAL:HG22         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG22         1:A:90:VAL:HG23         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG23         1:A:90:VAL:HG21         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG23         1:A:90:VAL:HG22         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG23         1:A:90:VAL:HG23         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG23         1:A:90:VAL:HG23         9         0.11           (1,1020)         1:A:131:GLU:H         1:A:133:GLY:H         19         0.11           (1,1019)         1:A:132:GLU:H         1:A:134:TYR:H         4         0.11           (1,900)         1:A:132:GLU:H         1:A:134:TYR:H         19         0.11           (1,990)         1:A:103:PHE:H         1:A:86:ILE:H         10         0.1           (1,977)         1:A:85:MET:H         1:A:86:ILE:H         11         0.1           (1,972)         1:A:78:LYS:H         1:A:89:GLU:H         5         0.1           (1,967)         1:A:54:SER:H         1:A:57:LYS:H         4         0.1           (1,944)         1:A:50:GLU:H         1:A:64:TRP:HE1	/			9	
(1,1032)         1:A:75:VAL:HG22         1:A:90:VAL:HG23         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG23         1:A:90:VAL:HG21         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG23         1:A:90:VAL:HG22         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG23         1:A:90:VAL:HG23         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG23         1:A:90:VAL:HG23         9         0.11           (1,1020)         1:A:131:GLU:H         1:A:90:VAL:HG23         9         0.11           (1,1020)         1:A:131:GLU:H         1:A:90:VAL:HG23         9         0.11           (1,1019)         1:A:131:GLU:H         1:A:133:GLY:H         19         0.11           (1,1019)         1:A:132:GLU:H         1:A:134:TYR:H         4         0.11           (1,990)         1:A:103:PHE:H         1:A:86:ILE:H         10         0.1           (1,977)         1:A:85:MET:H         1:A:86:ILE:H         11         0.1           (1,977)         1:A:75:LYS:H         1:A:89:GLU:H         5         0.1           (1,967)         1:A:54:SER:H         1:A:34:TRP:HE1         2         0.1           (1,953)         1:A:30:GLU:H         1:A:34:TRP:HE1 <t< td=""><td>( ' /</td><td></td><td></td><td>9</td><td></td></t<>	( ' /			9	
(1,1032)         1:A:75:VAL:HG23         1:A:90:VAL:HG21         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG23         1:A:90:VAL:HG22         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG23         1:A:90:VAL:HG23         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG23         1:A:90:VAL:HG23         9         0.11           (1,1020)         1:A:131:GLU:H         1:A:133:GLY:H         19         0.11           (1,1019)         1:A:132:GLU:H         1:A:134:TYR:H         4         0.11           (1,910)         1:A:132:GLU:H         1:A:134:TYR:H         19         0.11           (1,990)         1:A:132:GLU:H         1:A:105:ASP:H         10         0.1           (1,977)         1:A:85:MET:H         1:A:86:ILE:H         11         0.1           (1,972)         1:A:78:LYS:H         1:A:89:GLU:H         5         0.1           (1,967)         1:A:54:SER:H         1:A:34:TRP:HE1         2         0.1           (1,953)         1:A:30:GLN:H         1:A:34:TRP:HE1         2         0.1           (1,944)         1:A:35:MET:H         1:A:64:TRP:HE1         3         0.1           (1,924)         1:A:26:GLU:H         1:A:64:TRP:HE1         9	( )			9	
(1,1032)         1:A:75:VAL:HG23         1:A:90:VAL:HG23         9         0.11           (1,1032)         1:A:75:VAL:HG23         1:A:90:VAL:HG23         9         0.11           (1,1020)         1:A:131:GLU:H         1:A:133:GLY:H         19         0.11           (1,1019)         1:A:132:GLU:H         1:A:134:TYR:H         4         0.11           (1,1019)         1:A:132:GLU:H         1:A:134:TYR:H         19         0.11           (1,990)         1:A:103:PHE:H         1:A:105:ASP:H         10         0.1           (1,977)         1:A:85:MET:H         1:A:86:ILE:H         11         0.1           (1,972)         1:A:78:LYS:H         1:A:89:GLU:H         5         0.1           (1,967)         1:A:54:SER:H         1:A:57:LYS:H         4         0.1           (1,953)         1:A:30:GLN:H         1:A:34:TRP:HE1         2         0.1           (1,944)         1:A:15:MET:H         1:A:18:GLU:H         17         0.1           (1,924)         1:A:26:GLU:H         1:A:64:TRP:HE1         3         0.1           (1,924)         1:A:92:SER:H         1:A:99:LEU:H         10         0.1           (1,904)         1:A:51:LEU:HD21         1:A:71:ILE:HD11         6         0	( ' /			9	
(1,1032)         1:A:75:VAL:HG23         1:A:90:VAL:HG23         9         0.11           (1,1020)         1:A:131:GLU:H         1:A:133:GLY:H         19         0.11           (1,1019)         1:A:132:GLU:H         1:A:134:TYR:H         4         0.11           (1,1019)         1:A:132:GLU:H         1:A:134:TYR:H         19         0.11           (1,990)         1:A:103:PHE:H         1:A:105:ASP:H         10         0.1           (1,977)         1:A:85:MET:H         1:A:86:ILE:H         11         0.1           (1,972)         1:A:78:LYS:H         1:A:89:GLU:H         5         0.1           (1,967)         1:A:54:SER:H         1:A:39:GLU:H         4         0.1           (1,967)         1:A:30:GLN:H         1:A:34:TRP:HE1         2         0.1           (1,944)         1:A:30:GLN:H         1:A:34:TRP:HE1         2         0.1           (1,944)         1:A:26:GLU:H         1:A:64:TRP:HE1         3         0.1           (1,924)         1:A:26:GLU:H         1:A:64:TRP:HE1         9         0.1           (1,920)         1:A:99:SER:H         1:A:71:ILE:HD11         6         0.1           (1,904)         1:A:51:LEU:HD21         1:A:71:ILE:HD12         6         0.1<	( /			9	
(1,1020)         1:A:131:GLU:H         1:A:133:GLY:H         19         0.11           (1,1019)         1:A:132:GLU:H         1:A:134:TYR:H         4         0.11           (1,1019)         1:A:132:GLU:H         1:A:134:TYR:H         19         0.11           (1,990)         1:A:103:PHE:H         1:A:105:ASP:H         10         0.1           (1,977)         1:A:85:MET:H         1:A:86:ILE:H         11         0.1           (1,972)         1:A:78:LYS:H         1:A:89:GLU:H         5         0.1           (1,967)         1:A:54:SER:H         1:A:57:LYS:H         4         0.1           (1,953)         1:A:30:GLN:H         1:A:34:TRP:HE1         2         0.1           (1,944)         1:A:15:MET:H         1:A:18:GLU:H         17         0.1           (1,924)         1:A:26:GLU:H         1:A:64:TRP:HE1         3         0.1           (1,924)         1:A:26:GLU:H         1:A:64:TRP:HE1         9         0.1           (1,920)         1:A:99:SER:H         1:A:99:LEU:H         10         0.1           (1,904)         1:A:51:LEU:HD21         1:A:71:ILE:HD11         6         0.1           (1,904)         1:A:55:LEU:HD21         1:A:71:ILE:HD13         6         0.1	( '	1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG23	9	0.11
(1,1019)         1:A:132:GLU:H         1:A:134:TYR:H         4         0.11           (1,1019)         1:A:132:GLU:H         1:A:134:TYR:H         19         0.11           (1,990)         1:A:103:PHE:H         1:A:105:ASP:H         10         0.1           (1,977)         1:A:85:MET:H         1:A:86:ILE:H         11         0.1           (1,972)         1:A:78:LYS:H         1:A:89:GLU:H         5         0.1           (1,967)         1:A:54:SER:H         1:A:57:LYS:H         4         0.1           (1,967)         1:A:30:GLN:H         1:A:34:TRP:HE1         2         0.1           (1,953)         1:A:30:GLN:H         1:A:18:GLU:H         17         0.1           (1,944)         1:A:15:MET:H         1:A:18:GLU:H         17         0.1           (1,924)         1:A:26:GLU:H         1:A:64:TRP:HE1         3         0.1           (1,924)         1:A:26:GLU:H         1:A:64:TRP:HE1         9         0.1           (1,920)         1:A:92:SER:H         1:A:99:LEU:H         10         0.1           (1,904)         1:A:51:LEU:HD21         1:A:71:ILE:HD11         6         0.1           (1,904)         1:A:51:LEU:HD21         1:A:71:ILE:HD13         6         0.1	· /			19	
(1,1019)         1:A:132:GLU:H         1:A:134:TYR:H         19         0.11           (1,990)         1:A:103:PHE:H         1:A:105:ASP:H         10         0.1           (1,977)         1:A:85:MET:H         1:A:86:ILE:H         11         0.1           (1,972)         1:A:78:LYS:H         1:A:89:GLU:H         5         0.1           (1,967)         1:A:54:SER:H         1:A:57:LYS:H         4         0.1           (1,953)         1:A:30:GLN:H         1:A:34:TRP:HE1         2         0.1           (1,944)         1:A:15:MET:H         1:A:18:GLU:H         17         0.1           (1,924)         1:A:26:GLU:H         1:A:64:TRP:HE1         3         0.1           (1,924)         1:A:26:GLU:H         1:A:64:TRP:HE1         9         0.1           (1,924)         1:A:92:SER:H         1:A:99:LEU:H         10         0.1           (1,904)         1:A:51:LEU:HD21         1:A:71:ILE:HD11         6         0.1           (1,904)         1:A:51:LEU:HD21         1:A:71:ILE:HD13         6         0.1           (1,904)         1:A:51:LEU:HD21         1:A:71:ILE:HD13         6         0.1	( ' /			4	
(1,990)       1:A:103:PHE:H       1:A:105:ASP:H       10       0.1         (1,977)       1:A:85:MET:H       1:A:86:ILE:H       11       0.1         (1,972)       1:A:78:LYS:H       1:A:89:GLU:H       5       0.1         (1,967)       1:A:54:SER:H       1:A:57:LYS:H       4       0.1         (1,953)       1:A:30:GLN:H       1:A:34:TRP:HE1       2       0.1         (1,944)       1:A:15:MET:H       1:A:18:GLU:H       17       0.1         (1,924)       1:A:26:GLU:H       1:A:64:TRP:HE1       3       0.1         (1,924)       1:A:26:GLU:H       1:A:64:TRP:HE1       9       0.1         (1,920)       1:A:92:SER:H       1:A:99:LEU:H       10       0.1         (1,904)       1:A:51:LEU:HD21       1:A:71:ILE:HD11       6       0.1         (1,904)       1:A:51:LEU:HD21       1:A:71:ILE:HD12       6       0.1         (1,904)       1:A:51:LEU:HD21       1:A:71:ILE:HD13       6       0.1	( ' /	1:A:132:GLU:H	1:A:134:TYR:H	19	0.11
(1,977)       1:A:85:MET:H       1:A:86:ILE:H       11       0.1         (1,972)       1:A:78:LYS:H       1:A:89:GLU:H       5       0.1         (1,967)       1:A:54:SER:H       1:A:57:LYS:H       4       0.1         (1,953)       1:A:30:GLN:H       1:A:34:TRP:HE1       2       0.1         (1,944)       1:A:15:MET:H       1:A:18:GLU:H       17       0.1         (1,924)       1:A:26:GLU:H       1:A:64:TRP:HE1       3       0.1         (1,924)       1:A:26:GLU:H       1:A:64:TRP:HE1       9       0.1         (1,920)       1:A:92:SER:H       1:A:99:LEU:H       10       0.1         (1,904)       1:A:51:LEU:HD21       1:A:71:ILE:HD11       6       0.1         (1,904)       1:A:51:LEU:HD21       1:A:71:ILE:HD12       6       0.1         (1,904)       1:A:51:LEU:HD21       1:A:71:ILE:HD13       6       0.1					
(1,972)       1:A:78:LYS:H       1:A:89:GLU:H       5       0.1         (1,967)       1:A:54:SER:H       1:A:57:LYS:H       4       0.1         (1,953)       1:A:30:GLN:H       1:A:34:TRP:HE1       2       0.1         (1,944)       1:A:15:MET:H       1:A:18:GLU:H       17       0.1         (1,924)       1:A:26:GLU:H       1:A:64:TRP:HE1       3       0.1         (1,924)       1:A:26:GLU:H       1:A:64:TRP:HE1       9       0.1         (1,920)       1:A:92:SER:H       1:A:99:LEU:H       10       0.1         (1,904)       1:A:51:LEU:HD21       1:A:71:ILE:HD11       6       0.1         (1,904)       1:A:51:LEU:HD21       1:A:71:ILE:HD12       6       0.1         (1,904)       1:A:51:LEU:HD21       1:A:71:ILE:HD13       6       0.1		1:A:85:MET:H	1:A:86:ILE:H	11	0.1
(1,967)       1:A:54:SER:H       1:A:57:LYS:H       4       0.1         (1,953)       1:A:30:GLN:H       1:A:34:TRP:HE1       2       0.1         (1,944)       1:A:15:MET:H       1:A:18:GLU:H       17       0.1         (1,924)       1:A:26:GLU:H       1:A:64:TRP:HE1       3       0.1         (1,924)       1:A:26:GLU:H       1:A:64:TRP:HE1       9       0.1         (1,920)       1:A:92:SER:H       1:A:99:LEU:H       10       0.1         (1,904)       1:A:51:LEU:HD21       1:A:71:ILE:HD11       6       0.1         (1,904)       1:A:51:LEU:HD21       1:A:71:ILE:HD12       6       0.1         (1,904)       1:A:51:LEU:HD21       1:A:71:ILE:HD13       6       0.1	/				
(1,953)       1:A:30:GLN:H       1:A:34:TRP:HE1       2       0.1         (1,944)       1:A:15:MET:H       1:A:18:GLU:H       17       0.1         (1,924)       1:A:26:GLU:H       1:A:64:TRP:HE1       3       0.1         (1,924)       1:A:26:GLU:H       1:A:64:TRP:HE1       9       0.1         (1,920)       1:A:92:SER:H       1:A:99:LEU:H       10       0.1         (1,904)       1:A:51:LEU:HD21       1:A:71:ILE:HD11       6       0.1         (1,904)       1:A:51:LEU:HD21       1:A:71:ILE:HD12       6       0.1         (1,904)       1:A:51:LEU:HD21       1:A:71:ILE:HD13       6       0.1					
(1,944)       1:A:15:MET:H       1:A:18:GLU:H       17       0.1         (1,924)       1:A:26:GLU:H       1:A:64:TRP:HE1       3       0.1         (1,924)       1:A:26:GLU:H       1:A:64:TRP:HE1       9       0.1         (1,920)       1:A:92:SER:H       1:A:99:LEU:H       10       0.1         (1,904)       1:A:51:LEU:HD21       1:A:71:ILE:HD11       6       0.1         (1,904)       1:A:51:LEU:HD21       1:A:71:ILE:HD12       6       0.1         (1,904)       1:A:51:LEU:HD21       1:A:71:ILE:HD13       6       0.1	· /				
(1,924)       1:A:26:GLU:H       1:A:64:TRP:HE1       3       0.1         (1,924)       1:A:26:GLU:H       1:A:64:TRP:HE1       9       0.1         (1,920)       1:A:92:SER:H       1:A:99:LEU:H       10       0.1         (1,904)       1:A:51:LEU:HD21       1:A:71:ILE:HD11       6       0.1         (1,904)       1:A:51:LEU:HD21       1:A:71:ILE:HD12       6       0.1         (1,904)       1:A:51:LEU:HD21       1:A:71:ILE:HD13       6       0.1	/			17	
(1,924)       1:A:26:GLU:H       1:A:64:TRP:HE1       9       0.1         (1,920)       1:A:92:SER:H       1:A:99:LEU:H       10       0.1         (1,904)       1:A:51:LEU:HD21       1:A:71:ILE:HD11       6       0.1         (1,904)       1:A:51:LEU:HD21       1:A:71:ILE:HD12       6       0.1         (1,904)       1:A:51:LEU:HD21       1:A:71:ILE:HD13       6       0.1	,	1:A:26:GLU:H	1:A:64:TRP:HE1		
(1,920)       1:A:92:SER:H       1:A:99:LEU:H       10       0.1         (1,904)       1:A:51:LEU:HD21       1:A:71:ILE:HD11       6       0.1         (1,904)       1:A:51:LEU:HD21       1:A:71:ILE:HD12       6       0.1         (1,904)       1:A:51:LEU:HD21       1:A:71:ILE:HD13       6       0.1	/				
(1,904)       1:A:51:LEU:HD21       1:A:71:ILE:HD11       6       0.1         (1,904)       1:A:51:LEU:HD21       1:A:71:ILE:HD12       6       0.1         (1,904)       1:A:51:LEU:HD21       1:A:71:ILE:HD13       6       0.1	· · /	1:A:92:SER:H			
(1,904)       1:A:51:LEU:HD21       1:A:71:ILE:HD12       6       0.1         (1,904)       1:A:51:LEU:HD21       1:A:71:ILE:HD13       6       0.1	· · /				
(1,904) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD13 6 0.1					
	· · /				
	(1,904)				



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

(1,904)         1:A:51:LEU:HD22         1:A:71:LE:HD12         6         0.1           (1,904)         1:A:51:LEU:HD23         1:A:71:LE:HD13         6         0.1           (1,904)         1:A:51:LEU:HD23         1:A:71:LE:HD11         6         0.1           (1,904)         1:A:51:LEU:HD23         1:A:71:LE:HD12         6         0.1           (1,904)         1:A:51:LEU:HD23         1:A:71:LE:HD13         6         0.1           (1,901)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:51:LEU:HD11         14         0.1           (1,901)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:51:LEU:HD12         14         0.1           (1,901)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:51:LEU:HD13         14         0.1           (1,901)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:51:LEU:HD12         14         0.1           (1,901)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:51:LEU:HD13         14         0.1           (1,901)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD13         14         0.1           (1,901)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD13         14         0.1           (1,901)         1:A:129:LEU:HD23         1:A:13:8:LEU:H         5         0.1           (1,9)         1:A:129:LEU:HD23         1:A:13:8:LEU:H	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,904) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD11 6 0.1 (1,904) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD12 6 0.1 (1,904) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 6 0.1 (1,904) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 6 0.1 (1,901) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD11 14 0.1 (1,901) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD12 14 0.1 (1,901) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD13 14 0.1 (1,901) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD13 14 0.1 (1,901) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD11 14 0.1 (1,901) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD11 14 0.1 (1,901) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD12 14 0.1 (1,901) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD12 14 0.1 (1,901) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD11 14 0.1 (1,901) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD11 14 0.1 (1,901) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD12 14 0.1 (1,901) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:51:LEU:HD13 14 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:138:LEU:H 5 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:138:LEU:H 5 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:H 5 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:H 5 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:138:LEU:H 15 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:138:LEU:H 15 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:H 15 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:H 15 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:123:ARG:H 10 0.1 (1,892) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 10 0.1 (1,892) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 10 0.1 (1,892) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 10 0.1 (1,892) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 15 0.1 (1,870) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD11 13 0.1 (1,870) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD11 19 0.1 (1,870) 1:A:43:VAL:	(1,904)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD12	6	0.1
(1,904) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD12 6 0.1 (1,904) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 6 0.1 (1,901) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD11 14 0.1 (1,901) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD11 14 0.1 (1,901) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD12 14 0.1 (1,901) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD11 14 0.1 (1,901) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD11 14 0.1 (1,901) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD11 14 0.1 (1,901) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD12 14 0.1 (1,901) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD13 14 0.1 (1,901) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 14 0.1 (1,901) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD11 14 0.1 (1,901) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:138:LEU:H 5 0.1 (1,90) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:138:LEU:H 5 0.1 (1,90) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:138:LEU:H 5 0.1 (1,91) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:138:LEU:H 5 0.1 (1,92) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:H 15 0.1 (1,93) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:138:LEU:H 15 0.1 (1,94) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:138:LEU:H 15 0.1 (1,95) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:H 15 0.1 (1,96) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:H 15 0.1 (1,99) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:H 15 0.1 (1,99) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:H 15 0.1 (1,99) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 10 0.1 (1,892) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 10 0.1 (1,892) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 10 0.1 (1,892) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 15 0.1 (1,892) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 15 0.1 (1,892) 1:A:144:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD11 13 0.1 (1,870) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD11 19 0.1 (1,870) 1:	(1,904)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD13	6	0.1
(1,904) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:HD13 6 0.1 (1,901) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD11 14 0.1 (1,901) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD12 14 0.1 (1,901) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD13 14 0.1 (1,901) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD11 14 0.1 (1,901) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD11 14 0.1 (1,901) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD11 14 0.1 (1,901) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD13 14 0.1 (1,901) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD13 14 0.1 (1,901) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD11 14 0.1 (1,901) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 14 0.1 (1,901) 1:A:42:VLEU:HD21 1:A:138:LEU:H 5 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:138:LEU:H 5 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:138:LEU:H 15 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:138:LEU:H 15 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:138:LEU:H 15 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:H 15 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:H 15 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:H 15 0.1 (1,892) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 10 0.1 (1,892) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 10 0.1 (1,892) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 10 0.1 (1,892) 1:A:121:LEU:HD12 1:A:122:ARG:H 15 0.1 (1,892) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 15 0.1 (1,892) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 15 0.1 (1,892) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 15 0.1 (1,890) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD11 13 0.1 (1,870) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD11 19 0.1 (1,870) 1:A:43:VAL:HG1	(1,904)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD11	6	0.1
(1,901) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD11 14 0.1 (1,901) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD12 14 0.1 (1,901) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD13 14 0.1 (1,901) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD11 14 0.1 (1,901) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD11 14 0.1 (1,901) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD11 14 0.1 (1,901) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD13 14 0.1 (1,901) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD11 14 0.1 (1,901) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD11 14 0.1 (1,901) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD12 14 0.1 (1,901) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD12 14 0.1 (1,901) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 14 0.1 (1,901) 1:A:429:LEU:HD21 1:A:138:LEU:H 5 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:138:LEU:H 5 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:138:LEU:H 5 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:H 5 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:138:LEU:H 15 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:138:LEU:H 15 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:H 15 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:H 15 0.1 (1,892) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 10 0.1 (1,892) 1:A:121:LEU:HD12 1:A:122:ARG:H 10 0.1 (1,892) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 10 0.1 (1,892) 1:A:121:LEU:HD12 1:A:122:ARG:H 10 0.1 (1,892) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 15 0.1 (1,870) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD11 13 0.1 (1,870) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD11 19 0.1 (1,870) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD11 19 0.1 (1,870) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD11 19 0.1 (1,870) 1	(1,904)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD12	6	0.1
(1,901) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD12 14 0.1 (1,901) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD13 14 0.1 (1,901) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD11 14 0.1 (1,901) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD12 14 0.1 (1,901) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD12 14 0.1 (1,901) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD13 14 0.1 (1,901) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD11 14 0.1 (1,901) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD11 14 0.1 (1,901) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD12 14 0.1 (1,901) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 14 0.1 (1,901) 1:A:429:LEU:HD21 1:A:138:LEU:H 5 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:138:LEU:H 5 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:H 5 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:H 5 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:138:LEU:H 15 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:138:LEU:H 15 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:138:LEU:H 15 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:138:LEU:H 15 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:H 15 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:H 15 0.1 (1,9) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 10 0.1 (1,892) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 10 0.1 (1,892) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 10 0.1 (1,892) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 15 0.1 (1,892) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 15 0.1 (1,892) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 15 0.1 (1,890) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD11 13 0.1 (1,870) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD11 19 0.1 (1,870) 1:A:43:VAL:HG1	(1,904)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD13	6	0.1
(1,901) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD13 14 0.1 (1,901) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD11 14 0.1 (1,901) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD12 14 0.1 (1,901) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD13 14 0.1 (1,901) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD11 14 0.1 (1,901) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD11 14 0.1 (1,901) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD12 14 0.1 (1,901) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD12 14 0.1 (1,901) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 14 0.1 (1,901) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:51:LEU:HD13 14 0.1 (1,90) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:138:LEU:H 5 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:138:LEU:H 5 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:138:LEU:H 5 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:H 5 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:138:LEU:H 15 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:138:LEU:H 15 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:H 15 0.1 (1,892) 1:A:121:LEU:HD12 1:A:122:ARG:H 10 0.1 (1,892) 1:A:121:LEU:HD12 1:A:122:ARG:H 10 0.1 (1,892) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 10 0.1 (1,892) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:122:ARG:H 10 0.1 (1,892) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 15 0.1 (1,892) 1:A:121:LEU:HD12 1:A:122:ARG:H 15 0.1 (1,892) 1:A:121:LEU:HD12 1:A:122:ARG:H 15 0.1 (1,892) 1:A:121:LEU:HD12 1:A:122:ARG:H 15 0.1 (1,892) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD11 13 0.1 (1,870) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD11 13 0.1 (1,870) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD12 13 0.1 (1,870) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD12 13 0.1 (1,870) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD13 13 0.1 (1,870) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD11 13 0.1 (1,870) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD11 13 0.1 (1,870) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD11 19 0.1 (1,870) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD11 19 0.1 (1,870) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD12 19 0.1 (1,870) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD11 19 0.1 (1,870) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:71:ILE:HD11 19 0.1 (1,870) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD11 19 0.1 (1,870) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD11 19 0.1 (1,870) 1:A:43	(1,901)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD11	14	0.1
(1,901) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD11 14 0.1 (1,901) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD12 14 0.1 (1,901) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD13 14 0.1 (1,901) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD11 14 0.1 (1,901) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD11 14 0.1 (1,901) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD12 14 0.1 (1,901) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 14 0.1 (1,901) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 14 0.1 (1,90] 1:A:129:LEU:HD21 1:A:138:LEU:H 5 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:138:LEU:H 5 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:H 5 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:H 5 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:138:LEU:H 15 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:138:LEU:H 15 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:138:LEU:H 15 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:138:LEU:H 15 0.1 (1,9) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:138:LEU:H 15 0.1 (1,9) 1:A:121:LEU:HD13 1:A:138:LEU:H 15 0.1 (1,892) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 10 0.1 (1,892) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 10 0.1 (1,892) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 10 0.1 (1,892) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 15 0.1 (1,892) 1:A:121:LEU:HD11 1:A:122:ARG:H 15 0.1 (1,892) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD11 13 0.1 (1,870) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD11 13 0.1 (1,870) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD11 13 0.1 (1,870) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD11 13 0.1 (1,870) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD11 19 0.1 (1,870) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:71:ILE:HD11 19 0.1	(1,901)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD12	14	0.1
(1,901)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:51:LEU:HD12         14         0.1           (1,901)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:51:LEU:HD13         14         0.1           (1,901)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD11         14         0.1           (1,901)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD12         14         0.1           (1,901)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD13         14         0.1           (1,901)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD13         14         0.1           (1,9)         1:A:42:9:LEU:HD22         1:A:138:LEU:H         5         0.1           (1,9)         1:A:129:LEU:HD22         1:A:138:LEU:H         5         0.1           (1,9)         1:A:129:LEU:HD23         1:A:138:LEU:H         5         0.1           (1,9)         1:A:129:LEU:HD21         1:A:138:LEU:H         15         0.1           (1,9)         1:A:129:LEU:HD22         1:A:138:LEU:H         15         0.1           (1,9)         1:A:121:LEU:HD23         1:A:138:LEU:H         15         0.1           (1,892)         1:A:121:LEU:HD11         1:A:122:ARG:H         10         0.1           (1,892)         1:A:121:LEU:HD13         1:A:122:ARG:H	(1,901)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD13	14	0.1
(1,901)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:51:LEU:HD13         14         0.1           (1,901)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD11         14         0.1           (1,901)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD12         14         0.1           (1,901)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD13         14         0.1           (1,901)         1:A:129:LEU:HD21         1:A:138:LEU:H         5         0.1           (1,9)         1:A:129:LEU:HD22         1:A:138:LEU:H         5         0.1           (1,9)         1:A:129:LEU:HD23         1:A:138:LEU:H         5         0.1           (1,9)         1:A:129:LEU:HD21         1:A:138:LEU:H         15         0.1           (1,9)         1:A:129:LEU:HD22         1:A:138:LEU:H         15         0.1           (1,9)         1:A:129:LEU:HD22         1:A:138:LEU:H         15         0.1           (1,9)         1:A:129:LEU:HD23         1:A:138:LEU:H         15         0.1           (1,9)         1:A:121:LEU:HD12         1:A:132:ARG:H         10         0.1           (1,892)         1:A:121:LEU:HD13         1:A:122:ARG:H         10         0.1           (1,892)         1:A:121:LEU:HD13         1:A:122:ARG:H	(1,901)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD11	14	0.1
(1,901)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD11         14         0.1           (1,901)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD12         14         0.1           (1,901)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD13         14         0.1           (1,901)         1:A:129:LEU:HD21         1:A:138:LEU:H         5         0.1           (1,9)         1:A:129:LEU:HD22         1:A:138:LEU:H         5         0.1           (1,9)         1:A:129:LEU:HD23         1:A:138:LEU:H         5         0.1           (1,9)         1:A:129:LEU:HD23         1:A:138:LEU:H         15         0.1           (1,9)         1:A:129:LEU:HD22         1:A:138:LEU:H         15         0.1           (1,9)         1:A:129:LEU:HD22         1:A:138:LEU:H         15         0.1           (1,9)         1:A:129:LEU:HD22         1:A:138:LEU:H         15         0.1           (1,9)         1:A:129:LEU:HD23         1:A:138:LEU:H         15         0.1           (1,892)         1:A:121:LEU:HD11         1:A:122:ARG:H         10         0.1           (1,892)         1:A:121:LEU:HD13         1:A:122:ARG:H         10         0.1           (1,892)         1:A:121:LEU:HD13         1:A:122:ARG:H         <	(1,901)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD12	14	0.1
(1,901)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD12         14         0.1           (1,901)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD13         14         0.1           (1,9)         1:A:129:LEU:HD21         1:A:138:LEU:H         5         0.1           (1,9)         1:A:129:LEU:HD22         1:A:138:LEU:H         5         0.1           (1,9)         1:A:129:LEU:HD23         1:A:138:LEU:H         5         0.1           (1,9)         1:A:129:LEU:HD21         1:A:138:LEU:H         5         0.1           (1,9)         1:A:129:LEU:HD22         1:A:138:LEU:H         15         0.1           (1,9)         1:A:129:LEU:HD22         1:A:138:LEU:H         15         0.1           (1,9)         1:A:121:LEU:HD12         1:A:138:LEU:H         15         0.1           (1,892)         1:A:121:LEU:HD13         1:A:122:ARG:H         10         0.1           (1,892)         1:A:121:LEU:HD11         1:A:122:ARG:H         10         0.1           (1,892)         1:A:121:LEU:HD11         1:A:121:LEU:HD13         1:A:121:LE:HD11         13         0.1           (1,892)         1:A:13:12:EU:HD13         1:A:71:ILE:HD11         13         0.1           (1,870)         1:A:43:VAL:HG11	(1,901)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD13	14	0.1
(1,901)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD13         14         0.1           (1,9)         1:A:129:LEU:HD21         1:A:138:LEU:H         5         0.1           (1,9)         1:A:129:LEU:HD22         1:A:138:LEU:H         5         0.1           (1,9)         1:A:129:LEU:HD23         1:A:138:LEU:H         5         0.1           (1,9)         1:A:129:LEU:HD21         1:A:138:LEU:H         15         0.1           (1,9)         1:A:129:LEU:HD22         1:A:138:LEU:H         15         0.1           (1,9)         1:A:129:LEU:HD23         1:A:138:LEU:H         15         0.1           (1,9)         1:A:121:LEU:HD12         1:A:122:2ARG:H         10         0.1           (1,892)         1:A:121:LEU:HD11         1:A:122:2ARG:H         10         0.1           (1,892)         1:A:121:LEU:HD13         1:A:122:ARG:H         10         0.1           (1,892)         1:A:121:LEU:HD12         1:A:122:ARG:H         15         0.1           (1,892)         1:A:121:LEU:HD13         1:A:121:LE:HD11         13         0.1           (1,870)         1:A:43:VAL:HG11         1:A:71:ILE:HD11         13         0.1           (1,870)         1:A:43:VAL:HG12         1:A:71:ILE:HD11	(1,901)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD11	14	0.1
(1,9)         1:A:129:LEU:HD21         1:A:138:LEU:H         5         0.1           (1,9)         1:A:129:LEU:HD22         1:A:138:LEU:H         5         0.1           (1,9)         1:A:129:LEU:HD23         1:A:138:LEU:H         5         0.1           (1,9)         1:A:129:LEU:HD21         1:A:138:LEU:H         15         0.1           (1,9)         1:A:129:LEU:HD22         1:A:138:LEU:H         15         0.1           (1,9)         1:A:129:LEU:HD23         1:A:138:LEU:H         15         0.1           (1,9)         1:A:129:LEU:HD13         1:A:122:ARG:H         10         0.1           (1,892)         1:A:121:LEU:HD12         1:A:122:ARG:H         10         0.1           (1,892)         1:A:121:LEU:HD13         1:A:122:ARG:H         15         0.1           (1,892)         1:A:121:LEU:HD11         1:A:122:ARG:H         15         0.1           (1,892)         1:A:121:LEU:HD13         1:A:121:LE:HD13         1.3         0.1           (1,892)         1:A:121:LEU:HD13         1:A:121:LE:HD11         13         0.1           (1,892)         1:A:121:LEU:HD13         1:A:121:LE:HD11         13         0.1           (1,892)         1:A:131:LE:HD13         13         0.1 </td <td>(1,901)</td> <td>1:A:46:VAL:HG23</td> <td>1:A:51:LEU:HD12</td> <td>14</td> <td>0.1</td>	(1,901)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD12	14	0.1
(1,9)         1:A:129:LEU:HD22         1:A:138:LEU:H         5         0.1           (1,9)         1:A:129:LEU:HD23         1:A:138:LEU:H         5         0.1           (1,9)         1:A:129:LEU:HD21         1:A:138:LEU:H         15         0.1           (1,9)         1:A:129:LEU:HD22         1:A:138:LEU:H         15         0.1           (1,9)         1:A:129:LEU:HD23         1:A:138:LEU:H         15         0.1           (1,892)         1:A:121:LEU:HD11         1:A:122:ARG:H         10         0.1           (1,892)         1:A:121:LEU:HD12         1:A:122:ARG:H         10         0.1           (1,892)         1:A:121:LEU:HD13         1:A:122:ARG:H         10         0.1           (1,892)         1:A:121:LEU:HD12         1:A:122:ARG:H         15         0.1           (1,892)         1:A:121:LEU:HD13         1:A:122:ARG:H         15         0.1           (1,892)         1:A:121:LEU:HD13         1:A:122:ARG:H         15         0.1           (1,892)         1:A:43:VAL:HG11         1:A:71:ILE:HD11         13         0.1           (1,870)         1:A:43:VAL:HG11         1:A:71:ILE:HD12         13         0.1           (1,870)         1:A:43:VAL:HG12         1:A:71:ILE:HD13	(1,901)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD13	14	0.1
(1,9)         1:A:129:LEU:HD23         1:A:138:LEU:H         5         0.1           (1,9)         1:A:129:LEU:HD21         1:A:138:LEU:H         15         0.1           (1,9)         1:A:129:LEU:HD22         1:A:138:LEU:H         15         0.1           (1,9)         1:A:129:LEU:HD23         1:A:138:LEU:H         15         0.1           (1,892)         1:A:121:LEU:HD11         1:A:122:ARG:H         10         0.1           (1,892)         1:A:121:LEU:HD12         1:A:122:ARG:H         10         0.1           (1,892)         1:A:121:LEU:HD13         1:A:122:ARG:H         10         0.1           (1,892)         1:A:121:LEU:HD11         1:A:122:ARG:H         15         0.1           (1,892)         1:A:121:LEU:HD12         1:A:122:ARG:H         15         0.1           (1,892)         1:A:121:LEU:HD13         1:A:122:ARG:H         15         0.1           (1,892)         1:A:43:VAL:HG11         1:A:71:ILE:HD11         13         0.1           (1,870)         1:A:43:VAL:HG11         1:A:71:ILE:HD12         13         0.1           (1,870)         1:A:43:VAL:HG12         1:A:71:ILE:HD13         13         0.1           (1,870)         1:A:43:VAL:HG13         1:A:71:ILE:HD13	(1,9)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:138:LEU:H	5	0.1
(1,9)         1:A:129:LEU:HD21         1:A:138:LEU:H         15         0.1           (1,9)         1:A:129:LEU:HD22         1:A:138:LEU:H         15         0.1           (1,9)         1:A:129:LEU:HD23         1:A:138:LEU:H         15         0.1           (1,892)         1:A:121:LEU:HD11         1:A:122:ARG:H         10         0.1           (1,892)         1:A:121:LEU:HD12         1:A:122:ARG:H         10         0.1           (1,892)         1:A:121:LEU:HD13         1:A:122:ARG:H         15         0.1           (1,892)         1:A:121:LEU:HD12         1:A:122:ARG:H         15         0.1           (1,892)         1:A:121:LEU:HD13         1:A:122:ARG:H         15         0.1           (1,892)         1:A:121:LEU:HD13         1:A:122:ARG:H         15         0.1           (1,892)         1:A:121:LEU:HD13         1:A:121:LEU:HD13         0.1           (1,890)         1:A:43:VAL:HG11         1:A:71:ILE:HD11         13         0.1           (1,870)         1:A:43:VAL:HG11         1:A:71:ILE:HD13         13         0.1           (1,870)         1:A:43:VAL:HG12         1:A:71:ILE:HD12         13         0.1           (1,870)         1:A:43:VAL:HG13         1:A:71:ILE:HD13         0.	(1,9)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:138:LEU:H	5	0.1
(1,9)         1:A:129:LEU:HD22         1:A:138:LEU:H         15         0.1           (1,9)         1:A:129:LEU:HD23         1:A:138:LEU:H         15         0.1           (1,892)         1:A:121:LEU:HD11         1:A:122:ARG:H         10         0.1           (1,892)         1:A:121:LEU:HD12         1:A:122:ARG:H         10         0.1           (1,892)         1:A:121:LEU:HD13         1:A:122:ARG:H         10         0.1           (1,892)         1:A:121:LEU:HD11         1:A:122:ARG:H         15         0.1           (1,892)         1:A:121:LEU:HD12         1:A:122:ARG:H         15         0.1           (1,892)         1:A:121:LEU:HD13         1:A:122:ARG:H         15         0.1           (1,892)         1:A:121:LEU:HD13         1:A:122:ARG:H         15         0.1           (1,892)         1:A:43:VAL:HG11         1:A:71:ILE:HD11         13         0.1           (1,870)         1:A:43:VAL:HG11         1:A:71:ILE:HD12         13         0.1           (1,870)         1:A:43:VAL:HG12         1:A:71:ILE:HD13         13         0.1           (1,870)         1:A:43:VAL:HG13         1:A:71:ILE:HD13         13         0.1           (1,870)         1:A:43:VAL:HG13         1:A:71:ILE:HD13	(1,9)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:138:LEU:H	5	0.1
(1,9)         1:A:129:LEU:HD22         1:A:138:LEU:H         15         0.1           (1,9)         1:A:129:LEU:HD23         1:A:138:LEU:H         15         0.1           (1,892)         1:A:121:LEU:HD11         1:A:122:ARG:H         10         0.1           (1,892)         1:A:121:LEU:HD12         1:A:122:ARG:H         10         0.1           (1,892)         1:A:121:LEU:HD13         1:A:122:ARG:H         10         0.1           (1,892)         1:A:121:LEU:HD11         1:A:122:ARG:H         15         0.1           (1,892)         1:A:121:LEU:HD12         1:A:122:ARG:H         15         0.1           (1,892)         1:A:121:LEU:HD13         1:A:122:ARG:H         15         0.1           (1,892)         1:A:121:LEU:HD13         1:A:122:ARG:H         15         0.1           (1,892)         1:A:43:VAL:HG11         1:A:71:ILE:HD11         13         0.1           (1,870)         1:A:43:VAL:HG11         1:A:71:ILE:HD12         13         0.1           (1,870)         1:A:43:VAL:HG12         1:A:71:ILE:HD13         13         0.1           (1,870)         1:A:43:VAL:HG13         1:A:71:ILE:HD11         13         0.1           (1,870)         1:A:43:VAL:HG13         1:A:71:ILE:HD13		1:A:129:LEU:HD21	1:A:138:LEU:H	15	0.1
(1,892)         1:A:121:LEU:HD11         1:A:122:ARG:H         10         0.1           (1,892)         1:A:121:LEU:HD12         1:A:122:ARG:H         10         0.1           (1,892)         1:A:121:LEU:HD13         1:A:122:ARG:H         10         0.1           (1,892)         1:A:121:LEU:HD11         1:A:122:ARG:H         15         0.1           (1,892)         1:A:121:LEU:HD12         1:A:122:ARG:H         15         0.1           (1,892)         1:A:121:LEU:HD13         1:A:122:ARG:H         15         0.1           (1,892)         1:A:121:LEU:HD13         1:A:122:ARG:H         15         0.1           (1,892)         1:A:121:LEU:HD13         1:A:122:ARG:H         15         0.1           (1,890)         1:A:43:VAL:HG11         1:A:71:ILE:HD11         13         0.1           (1,870)         1:A:43:VAL:HG12         1:A:71:ILE:HD13         13         0.1           (1,870)         1:A:43:VAL:HG12         1:A:71:ILE:HD13         13         0.1           (1,870)         1:A:43:VAL:HG13         1:A:71:ILE:HD11         13         0.1           (1,870)         1:A:43:VAL:HG11         1:A:71:ILE:HD13         13         0.1           (1,870)         1:A:43:VAL:HG11         1:A:71:ILE		1:A:129:LEU:HD22	1:A:138:LEU:H	15	0.1
(1,892)         1:A:121:LEU:HD12         1:A:122:ARG:H         10         0.1           (1,892)         1:A:121:LEU:HD13         1:A:122:ARG:H         10         0.1           (1,892)         1:A:121:LEU:HD11         1:A:122:ARG:H         15         0.1           (1,892)         1:A:121:LEU:HD12         1:A:122:ARG:H         15         0.1           (1,892)         1:A:121:LEU:HD13         1:A:122:ARG:H         15         0.1           (1,870)         1:A:43:VAL:HG11         1:A:71:ILE:HD11         13         0.1           (1,870)         1:A:43:VAL:HG11         1:A:71:ILE:HD12         13         0.1           (1,870)         1:A:43:VAL:HG12         1:A:71:ILE:HD13         13         0.1           (1,870)         1:A:43:VAL:HG12         1:A:71:ILE:HD12         13         0.1           (1,870)         1:A:43:VAL:HG13         1:A:71:ILE:HD13         13         0.1           (1,870)         1:A:43:VAL:HG13         1:A:71:ILE:HD11         13         0.1           (1,870)         1:A:43:VAL:HG13         1:A:71:ILE:HD13         13         0.1           (1,870)         1:A:43:VAL:HG11         1:A:71:ILE:HD13         19         0.1           (1,870)         1:A:43:VAL:HG11         1:A:71:	(1,9)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:138:LEU:H	15	0.1
(1,892)         1:A:121:LEU:HD13         1:A:122:ARG:H         10         0.1           (1,892)         1:A:121:LEU:HD11         1:A:122:ARG:H         15         0.1           (1,892)         1:A:121:LEU:HD12         1:A:122:ARG:H         15         0.1           (1,892)         1:A:121:LEU:HD13         1:A:122:ARG:H         15         0.1           (1,870)         1:A:43:VAL:HG11         1:A:71:ILE:HD11         13         0.1           (1,870)         1:A:43:VAL:HG11         1:A:71:ILE:HD12         13         0.1           (1,870)         1:A:43:VAL:HG12         1:A:71:ILE:HD13         13         0.1           (1,870)         1:A:43:VAL:HG12         1:A:71:ILE:HD12         13         0.1           (1,870)         1:A:43:VAL:HG12         1:A:71:ILE:HD13         13         0.1           (1,870)         1:A:43:VAL:HG13         1:A:71:ILE:HD11         13         0.1           (1,870)         1:A:43:VAL:HG13         1:A:71:ILE:HD13         13         0.1           (1,870)         1:A:43:VAL:HG11         1:A:71:ILE:HD13         13         0.1           (1,870)         1:A:43:VAL:HG11         1:A:71:ILE:HD11         19         0.1           (1,870)         1:A:43:VAL:HG11         1:A:71	(1,892)	1:A:121:LEU:HD11	1:A:122:ARG:H	10	0.1
(1,892)         1:A:121:LEU:HD11         1:A:122:ARG:H         15         0.1           (1,892)         1:A:121:LEU:HD12         1:A:122:ARG:H         15         0.1           (1,892)         1:A:121:LEU:HD13         1:A:122:ARG:H         15         0.1           (1,870)         1:A:43:VAL:HG11         1:A:71:ILE:HD11         13         0.1           (1,870)         1:A:43:VAL:HG11         1:A:71:ILE:HD12         13         0.1           (1,870)         1:A:43:VAL:HG12         1:A:71:ILE:HD13         13         0.1           (1,870)         1:A:43:VAL:HG12         1:A:71:ILE:HD12         13         0.1           (1,870)         1:A:43:VAL:HG12         1:A:71:ILE:HD13         13         0.1           (1,870)         1:A:43:VAL:HG13         1:A:71:ILE:HD11         13         0.1           (1,870)         1:A:43:VAL:HG13         1:A:71:ILE:HD12         13         0.1           (1,870)         1:A:43:VAL:HG11         1:A:71:ILE:HD13         13         0.1           (1,870)         1:A:43:VAL:HG11         1:A:71:ILE:HD11         19         0.1           (1,870)         1:A:43:VAL:HG11         1:A:71:ILE:HD13         19         0.1           (1,870)         1:A:43:VAL:HG12         1:A:7	(1,892)	1:A:121:LEU:HD12	1:A:122:ARG:H	10	0.1
(1,892)       1:A:121:LEU:HD12       1:A:122:ARG:H       15       0.1         (1,892)       1:A:121:LEU:HD13       1:A:122:ARG:H       15       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG11       1:A:71:ILE:HD11       13       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG11       1:A:71:ILE:HD12       13       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG11       1:A:71:ILE:HD13       13       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG12       1:A:71:ILE:HD11       13       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG12       1:A:71:ILE:HD13       13       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG13       1:A:71:ILE:HD11       13       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG13       1:A:71:ILE:HD12       13       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG13       1:A:71:ILE:HD13       13       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG11       1:A:71:ILE:HD11       19       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG11       1:A:71:ILE:HD12       19       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG12       1:A:71:ILE:HD11       19       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG12       1:A:71:ILE:HD11       19       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG12	(1,892)	1:A:121:LEU:HD13	1:A:122:ARG:H	10	0.1
(1,892)       1:A:121:LEU:HD13       1:A:122:ARG:H       15       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG11       1:A:71:ILE:HD11       13       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG11       1:A:71:ILE:HD12       13       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG11       1:A:71:ILE:HD13       13       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG12       1:A:71:ILE:HD11       13       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG12       1:A:71:ILE:HD13       13       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG13       1:A:71:ILE:HD11       13       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG13       1:A:71:ILE:HD12       13       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG13       1:A:71:ILE:HD13       13       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG11       1:A:71:ILE:HD11       19       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG11       1:A:71:ILE:HD12       19       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG12       1:A:71:ILE:HD11       19       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG12       1:A:71:ILE:HD11       19       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG12       1:A:71:ILE:HD12       19       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG12 <td>(1,892)</td> <td>1:A:121:LEU:HD11</td> <td>1:A:122:ARG:H</td> <td>15</td> <td>0.1</td>	(1,892)	1:A:121:LEU:HD11	1:A:122:ARG:H	15	0.1
(1,870)       1:A:43:VAL:HG11       1:A:71:ILE:HD11       13       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG11       1:A:71:ILE:HD12       13       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG11       1:A:71:ILE:HD13       13       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG12       1:A:71:ILE:HD11       13       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG12       1:A:71:ILE:HD12       13       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG13       1:A:71:ILE:HD13       13       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG13       1:A:71:ILE:HD12       13       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG13       1:A:71:ILE:HD13       13       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG11       1:A:71:ILE:HD11       19       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG11       1:A:71:ILE:HD12       19       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG11       1:A:71:ILE:HD13       19       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG12       1:A:71:ILE:HD11       19       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG12       1:A:71:ILE:HD12       19       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG12       1:A:71:ILE:HD12       19       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG12 <td>(1,892)</td> <td>1:A:121:LEU:HD12</td> <td>1:A:122:ARG:H</td> <td>15</td> <td>0.1</td>	(1,892)	1:A:121:LEU:HD12	1:A:122:ARG:H	15	0.1
(1,870)         1:A:43:VAL:HG11         1:A:71:ILE:HD12         13         0.1           (1,870)         1:A:43:VAL:HG11         1:A:71:ILE:HD13         13         0.1           (1,870)         1:A:43:VAL:HG12         1:A:71:ILE:HD11         13         0.1           (1,870)         1:A:43:VAL:HG12         1:A:71:ILE:HD12         13         0.1           (1,870)         1:A:43:VAL:HG13         1:A:71:ILE:HD13         13         0.1           (1,870)         1:A:43:VAL:HG13         1:A:71:ILE:HD12         13         0.1           (1,870)         1:A:43:VAL:HG13         1:A:71:ILE:HD13         13         0.1           (1,870)         1:A:43:VAL:HG11         1:A:71:ILE:HD11         19         0.1           (1,870)         1:A:43:VAL:HG11         1:A:71:ILE:HD13         19         0.1           (1,870)         1:A:43:VAL:HG12         1:A:71:ILE:HD11         19         0.1           (1,870)         1:A:43:VAL:HG12         1:A:71:ILE:HD11         19         0.1           (1,870)         1:A:43:VAL:HG12         1:A:71:ILE:HD12         19         0.1           (1,870)         1:A:43:VAL:HG12         1:A:71:ILE:HD13         19         0.1	(1,892)	1:A:121:LEU:HD13	1:A:122:ARG:H	15	0.1
(1,870)       1:A:43:VAL:HG11       1:A:71:ILE:HD13       13       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG12       1:A:71:ILE:HD11       13       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG12       1:A:71:ILE:HD12       13       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG12       1:A:71:ILE:HD13       13       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG13       1:A:71:ILE:HD11       13       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG13       1:A:71:ILE:HD12       13       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG13       1:A:71:ILE:HD13       13       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG11       1:A:71:ILE:HD11       19       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG11       1:A:71:ILE:HD13       19       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG12       1:A:71:ILE:HD11       19       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG12       1:A:71:ILE:HD11       19       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG12       1:A:71:ILE:HD12       19       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG12       1:A:71:ILE:HD13       19       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG12       1:A:71:ILE:HD13       19       0.1	(1,870)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:71:ILE:HD11	13	0.1
(1,870)       1:A:43:VAL:HG12       1:A:71:ILE:HD11       13       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG12       1:A:71:ILE:HD12       13       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG12       1:A:71:ILE:HD13       13       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG13       1:A:71:ILE:HD11       13       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG13       1:A:71:ILE:HD12       13       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG11       1:A:71:ILE:HD13       13       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG11       1:A:71:ILE:HD12       19       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG11       1:A:71:ILE:HD13       19       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG12       1:A:71:ILE:HD11       19       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG12       1:A:71:ILE:HD12       19       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG12       1:A:71:ILE:HD12       19       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG12       1:A:71:ILE:HD12       19       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG12       1:A:71:ILE:HD13       19       0.1	(1,870)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:71:ILE:HD12	13	0.1
(1,870)       1:A:43:VAL:HG12       1:A:71:ILE:HD12       13       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG12       1:A:71:ILE:HD13       13       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG13       1:A:71:ILE:HD11       13       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG13       1:A:71:ILE:HD12       13       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG13       1:A:71:ILE:HD13       13       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG11       1:A:71:ILE:HD11       19       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG11       1:A:71:ILE:HD13       19       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG12       1:A:71:ILE:HD11       19       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG12       1:A:71:ILE:HD12       19       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG12       1:A:71:ILE:HD13       19       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG12       1:A:71:ILE:HD13       19       0.1	(1,870)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:71:ILE:HD13	13	0.1
(1,870)       1:A:43:VAL:HG12       1:A:71:ILE:HD13       13       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG13       1:A:71:ILE:HD11       13       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG13       1:A:71:ILE:HD12       13       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG13       1:A:71:ILE:HD13       13       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG11       1:A:71:ILE:HD11       19       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG11       1:A:71:ILE:HD13       19       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG12       1:A:71:ILE:HD11       19       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG12       1:A:71:ILE:HD12       19       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG12       1:A:71:ILE:HD13       19       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG12       1:A:71:ILE:HD13       19       0.1	(1,870)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:71:ILE:HD11	13	0.1
(1,870)       1:A:43:VAL:HG13       1:A:71:ILE:HD11       13       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG13       1:A:71:ILE:HD12       13       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG13       1:A:71:ILE:HD13       13       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG11       1:A:71:ILE:HD11       19       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG11       1:A:71:ILE:HD12       19       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG12       1:A:71:ILE:HD13       19       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG12       1:A:71:ILE:HD11       19       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG12       1:A:71:ILE:HD12       19       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG12       1:A:71:ILE:HD13       19       0.1	(1,870)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:71:ILE:HD12	13	0.1
(1,870)       1:A:43:VAL:HG13       1:A:71:ILE:HD11       13       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG13       1:A:71:ILE:HD12       13       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG13       1:A:71:ILE:HD13       13       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG11       1:A:71:ILE:HD11       19       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG11       1:A:71:ILE:HD12       19       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG12       1:A:71:ILE:HD11       19       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG12       1:A:71:ILE:HD12       19       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG12       1:A:71:ILE:HD13       19       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG12       1:A:71:ILE:HD13       19       0.1		1:A:43:VAL:HG12	1:A:71:ILE:HD13	13	0.1
(1,870)       1:A:43:VAL:HG13       1:A:71:ILE:HD12       13       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG13       1:A:71:ILE:HD13       13       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG11       1:A:71:ILE:HD11       19       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG11       1:A:71:ILE:HD12       19       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG11       1:A:71:ILE:HD13       19       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG12       1:A:71:ILE:HD11       19       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG12       1:A:71:ILE:HD12       19       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG12       1:A:71:ILE:HD13       19       0.1	, ,	1:A:43:VAL:HG13	1:A:71:ILE:HD11	13	0.1
(1,870)       1:A:43:VAL:HG13       1:A:71:ILE:HD13       13       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG11       1:A:71:ILE:HD11       19       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG11       1:A:71:ILE:HD12       19       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG11       1:A:71:ILE:HD13       19       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG12       1:A:71:ILE:HD11       19       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG12       1:A:71:ILE:HD12       19       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG12       1:A:71:ILE:HD13       19       0.1		1:A:43:VAL:HG13	1:A:71:ILE:HD12	13	0.1
(1,870)       1:A:43:VAL:HG11       1:A:71:ILE:HD11       19       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG11       1:A:71:ILE:HD12       19       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG11       1:A:71:ILE:HD13       19       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG12       1:A:71:ILE:HD11       19       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG12       1:A:71:ILE:HD12       19       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG12       1:A:71:ILE:HD13       19       0.1		1:A:43:VAL:HG13	1:A:71:ILE:HD13	13	0.1
(1,870)       1:A:43:VAL:HG11       1:A:71:ILE:HD12       19       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG11       1:A:71:ILE:HD13       19       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG12       1:A:71:ILE:HD11       19       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG12       1:A:71:ILE:HD12       19       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG12       1:A:71:ILE:HD13       19       0.1	(1,870)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:71:ILE:HD11	19	0.1
(1,870)       1:A:43:VAL:HG11       1:A:71:ILE:HD13       19       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG12       1:A:71:ILE:HD11       19       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG12       1:A:71:ILE:HD12       19       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG12       1:A:71:ILE:HD13       19       0.1		1:A:43:VAL:HG11	1:A:71:ILE:HD12	19	0.1
(1,870)       1:A:43:VAL:HG12       1:A:71:ILE:HD11       19       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG12       1:A:71:ILE:HD12       19       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG12       1:A:71:ILE:HD13       19       0.1		1:A:43:VAL:HG11	1:A:71:ILE:HD13	19	0.1
(1,870)       1:A:43:VAL:HG12       1:A:71:ILE:HD12       19       0.1         (1,870)       1:A:43:VAL:HG12       1:A:71:ILE:HD13       19       0.1	_ `	1:A:43:VAL:HG12	1:A:71:ILE:HD11	19	
(1,870) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:71:ILE:HD13 19 0.1			1:A:71:ILE:HD12	19	0.1
	(1,870)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:71:ILE:HD11	19	0.1



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,870)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:71:ILE:HD12	19	0.1
(1,870)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:71:ILE:HD13	19	0.1
(1,864)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:74:GLU:H	1	0.1
(1,864)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:74:GLU:H	1	0.1
(1,864)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:74:GLU:H	1	0.1
(1,857)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:129:LEU:HD11	3	0.1
(1,857)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:129:LEU:HD12	3	0.1
(1,857)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:129:LEU:HD13	3	0.1
(1,857)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:129:LEU:HD11	3	0.1
(1,857)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:129:LEU:HD12	3	0.1
(1,857)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:129:LEU:HD13	3	0.1
(1,857)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:129:LEU:HD11	3	0.1
(1,857)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:129:LEU:HD12	3	0.1
(1,857)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:129:LEU:HD13	3	0.1
(1,857)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:129:LEU:HD11	9	0.1
(1,857)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:129:LEU:HD12	9	0.1
(1,857)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:129:LEU:HD13	9	0.1
(1,857)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:129:LEU:HD11	9	0.1
(1,857)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:129:LEU:HD12	9	0.1
(1,857)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:129:LEU:HD13	9	0.1
(1,857)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:129:LEU:HD11	9	0.1
(1,857)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:129:LEU:HD12	9	0.1
(1,857)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:129:LEU:HD13	9	0.1
(1,84)	1:A:10:LYS:H	1:A:12:LEU:H	8	0.1
(1,84)	1:A:10:LYS:H	1:A:12:LEU:H	16	0.1
(1,837)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:H	7	0.1
(1,837)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:H	7	0.1
(1,837)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:H	7	0.1
(1,816)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG11	3	0.1
(1,816)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG12	3	0.1
(1,816)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG13	3	0.1
(1,81)	1:A:47:SER:H	1:A:48:GLY:H	13	0.1
(1,807)	1:A:92:SER:H	1:A:96:ASP:H	13	0.1
(1,806)	1:A:133:GLY:H	1:A:135:GLU:H	6	0.1
(1,805)	1:A:54:SER:H	1:A:56:ASP:H	5	0.1
(1,792)	1:A:130:LYS:H	1:A:134:TYR:H	3	0.1
(1,792)	1:A:130:LYS:H	1:A:134:TYR:H	11	0.1
(1,792)	1:A:130:LYS:H	1:A:134:TYR:H	12	0.1
(1,778)	1:A:7:GLU:H	1:A:9:ILE:H	18	0.1
(1,776)	1:A:17:TYR:H	1:A:19:VAL:H	2	0.1
(1,760)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:H	8	0.1
(1,729)	1:A:10:LYS:H	1:A:12:LEU:H	8	0.1



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

(1,729) 1:A:10:LYS:H 1:A:12:LEU:H 16 0.1 (1,726) 1:A:47:SER:H 1:A:48:GLY:H 13 0.1 (1,713) 1:A:34:TRP:H 1:A:36:HIS:H 17 0.1 (1,702) 1:A:112:LEU:HD11 1:A:13:ARG:H 1 0.1 (1,702) 1:A:112:LEU:HD11 1:A:113:ARG:H 1 0.1 (1,702) 1:A:112:LEU:HD12 1:A:113:ARG:H 1 0.1 (1,702) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H 1 0.1 (1,702) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H 1 0.1 (1,702) 1:A:112:LEU:HD11 1:A:113:ARG:H 1 0.1 (1,702) 1:A:112:LEU:HD12 1:A:113:ARG:H 10 0.1 (1,702) 1:A:112:LEU:HD12 1:A:113:ARG:H 10 0.1 (1,702) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H 10 0.1 (1,702) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:13:ARG:H 10 0.1 (1,690) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD11 8 0.1 (1,690) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD12 8 0.1 (1,690) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD13 8 0.1 (1,689) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:48:GLY:H 4 0.1 (1,689) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:48:GLY:H 4 0.1 (1,689) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:48:GLY:H 4 0.1 (1,689) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:48:GLY:H 8 0.1 (1,689) 1:A:49:LE:HD11 1:A:13:ASN:HD22 7 0.1 (1,682) 1:A:9:ILE:HD12 1:A:13:ASN:HD22 7 0.1 (1,683) 1:A:9:ILE:HD11 1:A:13:ASN:HD22 7 0.1 (1,682) 1:A:9:ILE:HD11 1:A:13:ASN:HD22 7 0.1 (1,682) 1:A:9:ILE:HD12 1:A:13:ASN:HD22 7 0.1 (1,662) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:13:ASN:HD21 4 0.1 (1,662) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:13:ASN:HD21 4 0.1 (1,666) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:49:LYS:H 7 0.1 (1,666) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:49:LYS:H 7 0.1 (1,666) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:49:LYS:H 7 0.1 (1,666) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 14 0.1 (1,666) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 14 0.1 (1,666) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 14 0.1 (1,662) 1:A:126:LYS:H 1:A:129	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,713) 1:A:34:TRP:H 1:A:36:HIS:H 17 0.1 (1,708) 1:A:54:SER:HG 1:A:57:IYS:H 15 0.1 (1,702) 1:A:112:LEU:HD11 1:A:113:ARG:H 1 0.1 (1,702) 1:A:112:LEU:HD12 1:A:113:ARG:H 1 0.1 (1,702) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H 1 0.1 (1,702) 1:A:112:LEU:HD11 1:A:113:ARG:H 1 0.1 (1,702) 1:A:112:LEU:HD11 1:A:113:ARG:H 1 0 0.1 (1,702) 1:A:112:LEU:HD11 1:A:113:ARG:H 10 0.1 (1,702) 1:A:112:LEU:HD11 1:A:113:ARG:H 10 0.1 (1,702) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H 10 0.1 (1,702) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H 10 0.1 (1,690) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD11 8 0.1 (1,690) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD12 8 0.1 (1,690) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD13 8 0.1 (1,699) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:48:GLY:H 4 0.1 (1,689) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:48:GLY:H 4 0.1 (1,689) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:48:GLY:H 4 0.1 (1,689) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:48:GLY:H 8 0.1 (1,689) 1:A:49:ILE:HD11 1:A:13:ASN:HD22 7 0.1 (1,683) 1:A:9:ILE:HD11 1:A:13:ASN:HD22 7 0.1 (1,683) 1:A:9:ILE:HD11 1:A:13:ASN:HD22 7 0.1 (1,683) 1:A:9:ILE:HD11 1:A:13:ASN:HD22 7 0.1 (1,682) 1:A:9:ILE:HD11 1:A:13:ASN:HD21 4 0.1 (1,682) 1:A:9:ILE:HD11 1:A:13:ASN:HD21 4 0.1 (1,682) 1:A:9:ILE:HD11 1:A:13:ASN:HD21 4 0.1 (1,682) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:13:ASN:HD21 4 0.1 (1,682) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:13:ASN:HD21 4 0.1 (1,676) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:49:IVS:H 7 0.1 (1,676) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:49:IVS:H 7 0.1 (1,676) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:12:LEU:HD23 14 0.1 (1,676) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:12:LEU:HD23 14 0.1 (1,676) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:12:LEU:HD23 14 0.1 (1,676) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:13:ASN:HD21 4 0.1 (1,676) 1:A:12:LEU:HD13 1:A:12:LEU:HD23 14 0.1 (1,664) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:12:LEU:HD23 14 0.1 (1,662) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:L	(1,729)	1:A:10:LYS:H	1:A:12:LEU:H	16	0.1
(1,708) 1:A:54:SER:HG	(1,726)	1:A:47:SER:H	1:A:48:GLY:H	13	0.1
(1,702) 1:A:112:LEU:HD11 1:A:113:ARG:H 1 0.1 (1,702) 1:A:112:LEU:HD12 1:A:113:ARG:H 1 0.1 (1,702) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H 1 0.1 (1,702) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H 10 0.1 (1,702) 1:A:112:LEU:HD11 1:A:113:ARG:H 10 0.1 (1,702) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H 10 0.1 (1,702) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H 10 0.1 (1,600) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD11 8 0.1 (1,600) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD12 8 0.1 (1,600) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD12 8 0.1 (1,600) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD13 8 0.1 (1,600) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:48:GLY:H 4 0.1 (1,689) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:48:GLY:H 4 0.1 (1,689) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:48:GLY:H 4 0.1 (1,689) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:48:GLY:H 8 0.1 (1,689) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:48:GLY:H 8 0.1 (1,689) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:48:GLY:H 8 0.1 (1,689) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:48:GLY:H 8 0.1 (1,689) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:48:GLY:H 8 0.1 (1,689) 1:A:49:LE:HD11 1:A:13:ASN:HD22 7 0.1 (1,683) 1:A:9:ILE:HD11 1:A:13:ASN:HD22 7 0.1 (1,683) 1:A:9:ILE:HD11 1:A:13:ASN:HD22 7 0.1 (1,683) 1:A:9:ILE:HD11 1:A:13:ASN:HD22 7 0.1 (1,682) 1:A:9:ILE:HD11 1:A:13:ASN:HD21 4 0.1 (1,682) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:13:ASN:HD21 4 0.1 (1,682) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:13:ASN:HD21 4 0.1 (1,682) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:13:ASN:HD21 4 0.1 (1,683) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:13:ASN:HD21 4 0.1 (1,680) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:49:LYS:H 7 0.1 (1,676) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:49:LYS:H 7 0.1 (1,675) 1:A:106:GLY:H 1:A:112:LEU:HD21 14 0.1 (1,675) 1:A:106:GLY:H 1:A:112:LEU:HD12 15 0.1 (1,671) 1:A:128:LYS:H 1:A:112:LEU:HD12 15 0.1 (1,664) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:129:LEU:HD11 15 0.1 (1,666) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:129:LEU:HD11 15 0.1 (1,666) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:129:LEU:HD11 15 0.1 (1,666) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:129:LEU:HD11 15 0.1 (1,661) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD12 15 0.1 (1,662) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD12 15 0.1 (1,662) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD12 15 0.1 (1,662) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD12 13 0.1	(1,713)	1:A:34:TRP:H	1:A:36:HIS:H	17	0.1
(1,702) 1:A:112:LEU:HD12 1:A:113:ARG:H 1 0.1 (1,702) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H 1 0.1 (1,702) 1:A:112:LEU:HD11 1:A:113:ARG:H 10 0.1 (1,702) 1:A:112:LEU:HD12 1:A:113:ARG:H 10 0.1 (1,702) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H 10 0.1 (1,600) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD11 8 0.1 (1,600) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD12 8 0.1 (1,600) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD13 8 0.1 (1,600) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:48:GLY:H 4 0.1 (1,600) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:48:GLY:H 4 0.1 (1,600) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:48:GLY:H 4 0.1 (1,600) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:48:GLY:H 8 0.1 (1,600) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:48:GLY:H 8 0.1 (1,600) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:48:GLY:H 8 0.1 (1,600) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:48:GLY:H 8 0.1 (1,600) 1:A:49:LE:HD11 1:A:13:ASN:HD22 7 0.1 (1,600) 1:A:9:LE:HD11 1:A:13:ASN:HD21 4 0.1 (1,600) 1:A:9:LE:HD11 1:A:13:ASN:HD21 4 0.1 (1,600) 1:A:9:LE:HD11 1:A:13:ASN:HD21 4 0.1 (1,600) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:49:LYS:H 7 0.1 (1,600) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:49:LYS:H 7 0.1 (1,600) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:49:LYS:H 7 0.1 (1,600) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:49:LYS:H 7 0.1 (1,600) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:12:LEU:HD21 14 0.1 (1,600) 1:A:128:LYS:H 1:A:112:LEU:HD21 15 0.1 (1,600) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 15 0.1 (1,600) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 13 0.1 (1,600) 1:A:128:	(1,708)	1:A:54:SER:HG	1:A:57:LYS:H	15	0.1
(1,702) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H 1 0.1 (1,702) 1:A:112:LEU:HD11 1:A:113:ARG:H 10 0.1 (1,702) 1:A:112:LEU:HD12 1:A:113:ARG:H 10 0.1 (1,702) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H 10 0.1 (1,702) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H 10 0.1 (1,600) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD11 8 0.1 (1,600) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD12 8 0.1 (1,600) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD13 8 0.1 (1,689) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:48:GLY:H 4 0.1 (1,689) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:48:GLY:H 4 0.1 (1,689) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:48:GLY:H 4 0.1 (1,689) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:48:GLY:H 8 0.1 (1,689) 1:A:49:LE:HD11 1:A:13:ASN:HD22 7 0.1 (1,683) 1:A:9:LE:HD11 1:A:13:ASN:HD22 7 0.1 (1,683) 1:A:9:LE:HD11 1:A:13:ASN:HD22 7 0.1 (1,683) 1:A:9:LE:HD11 1:A:13:ASN:HD22 7 0.1 (1,682) 1:A:9:LE:HD11 1:A:13:ASN:HD21 4 0.1 (1,682) 1:A:9:LE:HD11 1:A:13:ASN:HD21 4 0.1 (1,682) 1:A:9:LE:HD11 1:A:13:ASN:HD21 4 0.1 (1,682) 1:A:9:LE:HD13 1:A:13:ASN:HD21 4 0.1 (1,681) 1:A:3:LE:HD13 1:A:13:ASN:HD21 4 0.1 (1,682) 1:A:9:LE:HD13 1:A:13:ASN:HD21 4 0.1 (1,681) 1:A:3:AS:LE:HD11 1:A:13:ASN:HD21 4 0.1 (1,682) 1:A:9:LE:HD13 1:A:13:ASN:HD21 4 0.1 (1,681) 1:A:3:LE:HD13 1:A:13:ASN:HD21 4 0.1 (1,682) 1:A:9:LE:HD13 1:A:13:ASN:HD21 4 0.1 (1,681) 1:A:3:LE:LHD13 1:A:13:ASN:HD21 4 0.1 (1,676) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:49:LYS:H 7 0.1 (1,676) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:49:LYS:H 7 0.1 (1,675) 1:A:106:GLY:H 1:A:112:LEU:HD21 14 0.1 (1,675) 1:A:106:GLY:H 1:A:112:LEU:HD21 15 0.1 (1,671) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD13 15 0.1 (1,664) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:129:LEU:HD13 15 0.1 (1,664) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:129:LEU:HD13 15 0.1 (1,664) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:129:LEU:HD21 13 0.1 (1,662) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 13 0.1 (1,662) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 13 0.1	(1,702)	1:A:112:LEU:HD11	1:A:113:ARG:H	1	0.1
(1,702) 1:A:112:LEU:HD11 1:A:113:ARG:H 10 0.1 (1,702) 1:A:112:LEU:HD12 1:A:113:ARG:H 10 0.1 (1,702) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H 10 0.1 (1,600) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD11 8 0.1 (1,600) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD12 8 0.1 (1,600) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD13 8 0.1 (1,600) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD13 8 0.1 (1,600) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD13 8 0.1 (1,600) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:48:GLY:H 4 0.1 (1,689) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:48:GLY:H 4 0.1 (1,689) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:48:GLY:H 4 0.1 (1,689) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:48:GLY:H 8 0.1 (1,689) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:48:GLY:H 8 0.1 (1,689) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:48:GLY:H 8 0.1 (1,689) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:48:GLY:H 8 0.1 (1,689) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:48:GLY:H 8 0.1 (1,689) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:48:GLY:H 8 0.1 (1,689) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:48:GLY:H 8 0.1 (1,689) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:48:GLY:H 8 0.1 (1,689) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:13:ASN:HD22 7 0.1 (1,683) 1:A:9:ILE:HD11 1:A:13:ASN:HD22 7 0.1 (1,683) 1:A:9:ILE:HD11 1:A:13:ASN:HD22 7 0.1 (1,683) 1:A:9:ILE:HD12 1:A:13:ASN:HD22 7 0.1 (1,682) 1:A:9:ILE:HD11 1:A:13:ASN:HD21 4 0.1 (1,682) 1:A:9:ILE:HD11 1:A:13:ASN:HD21 4 0.1 (1,682) 1:A:9:ILE:HD12 1:A:13:ASN:HD21 4 0.1 (1,682) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:13:ASN:HD21 4 0.1 (1,682) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:13:ASN:HD21 4 0.1 (1,668) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:49:LYS:H 7 0.1 (1,676) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:49:LYS:H 7 0.1 (1,676) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:49:LYS:H 7 0.1 (1,675) 1:A:106:GLY:H 1:A:112:LEU:HD22 14 0.1 (1,675) 1:A:106:GLY:H 1:A:112:LEU:HD23 14 0.1 (1,671) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD11 15 0.1 (1,671) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD11 15 0.1 (1,671) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD11 15 0.1 (1,664) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:129:LEU:HD13 15 0.1 (1,664) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:129:LEU:HD13 15 0.1 (1,664) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:129:LEU:HD13 15 0.1 (1,664) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:129:LEU:HD22 13 0.1 (1,662) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 13 0.1	(1,702)	1:A:112:LEU:HD12	1:A:113:ARG:H	1	0.1
(1,702) 1:A:112:LEU:HD12 1:A:113:ARG:H 10 0.1 (1,702) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H 10 0.1 (1,690) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD11 8 0.1 (1,690) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD12 8 0.1 (1,690) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD13 8 0.1 (1,690) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD13 8 0.1 (1,689) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:48:GLY:H 4 0.1 (1,689) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:48:GLY:H 4 0.1 (1,689) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:48:GLY:H 4 0.1 (1,689) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:48:GLY:H 8 0.1 (1,689) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:48:GLY:H 8 0.1 (1,689) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:48:GLY:H 8 0.1 (1,689) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:48:GLY:H 8 0.1 (1,689) 1:A:9:ILE:HD11 1:A:13:ASN:HD22 7 0.1 (1,683) 1:A:9:ILE:HD11 1:A:13:ASN:HD22 7 0.1 (1,683) 1:A:9:ILE:HD11 1:A:13:ASN:HD22 7 0.1 (1,683) 1:A:9:ILE:HD11 1:A:13:ASN:HD22 7 0.1 (1,682) 1:A:9:ILE:HD11 1:A:13:ASN:HD21 4 0.1 (1,682) 1:A:9:ILE:HD12 1:A:13:ASN:HD21 4 0.1 (1,682) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:13:ASN:HD21 4 0.1 (1,682) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:13:ASN:HD21 4 0.1 (1,682) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:13:ASN:HD21 4 0.1 (1,676) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:49:LYS:H 7 0.1 (1,676) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:49:LYS:H 7 0.1 (1,675) 1:A:106:GLY:H 1:A:12:LEU:HD21 14 0.1 (1,675) 1:A:106:GLY:H 1:A:112:LEU:HD21 14 0.1 (1,671) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD11 15 0.1 (1,662) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:129:LEU:HD13 15 0.1 (1,664) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:129:LEU:HD11 15 0.1 (1,662) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD11 15 0.1 (1,662) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 13 0.1 (1,662) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 13 0.1 (1,662) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 13 0.1	(1,702)	1:A:112:LEU:HD13	1:A:113:ARG:H	1	0.1
(1,702) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H 10 0.1 (1,690) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD11 8 0.1 (1,690) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD12 8 0.1 (1,690) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD13 8 0.1 (1,690) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD13 8 0.1 (1,689) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:48:GLY:H 4 0.1 (1,689) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:48:GLY:H 4 0.1 (1,689) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:48:GLY:H 4 0.1 (1,689) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:48:GLY:H 8 0.1 (1,689) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:48:GLY:H 8 0.1 (1,689) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:48:GLY:H 8 0.1 (1,689) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:48:GLY:H 8 0.1 (1,689) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:48:GLY:H 8 0.1 (1,689) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:48:GLY:H 8 0.1 (1,680) 1:A:49:ILE:HD11 1:A:13:ASN:HD22 7 0.1 (1,683) 1:A:9:ILE:HD12 1:A:13:ASN:HD22 7 0.1 (1,683) 1:A:9:ILE:HD12 1:A:13:ASN:HD22 7 0.1 (1,683) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:13:ASN:HD21 4 0.1 (1,682) 1:A:9:ILE:HD11 1:A:13:ASN:HD21 4 0.1 (1,682) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:13:ASN:HD21 4 0.1 (1,682) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:13:ASN:HD21 4 0.1 (1,682) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:13:ASN:HD21 4 0.1 (1,680) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:49:LVS:H 7 0.1 (1,676) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:49:LVS:H 7 0.1 (1,676) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:49:LVS:H 7 0.1 (1,675) 1:A:106:GLY:H 1:A:112:LEU:HD21 14 0.1 (1,675) 1:A:106:GLY:H 1:A:112:LEU:HD22 14 0.1 (1,671) 1:A:128:LYS:H 1:A:112:LEU:HD23 14 0.1 (1,671) 1:A:128:LYS:H 1:A:112:LEU:HD13 15 0.1 (1,671) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD13 15 0.1 (1,672) 1:A:106:GLY:H 1:A:112:LEU:HD23 14 0.1 (1,674) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD13 15 0.1 (1,675) 1:A:106:GLY:H 1:A:112:LEU:HD23 14 0.1 (1,674) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD13 15 0.1 (1,674) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:L	(1,702)	1:A:112:LEU:HD11	1:A:113:ARG:H	10	0.1
(1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD11         8         0.1           (1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD12         8         0.1           (1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD13         8         0.1           (1,690)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:48:GLY:H         4         0.1           (1,689)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:48:GLY:H         4         0.1           (1,689)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:48:GLY:H         8         0.1           (1,689)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:48:GLY:H         8         0.1           (1,689)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:48:GLY:H         8         0.1           (1,683)         1:A:49:ILE:HD13         1:A:13:ASN:HD22         7         0.1           (1,683)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:13:ASN:HD21         4	(1,702)	1:A:112:LEU:HD12	1:A:113:ARG:H	10	0.1
(1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD12         8         0.1           (1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD13         8         0.1           (1,689)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:48:GLY:H         4         0.1           (1,689)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:48:GLY:H         4         0.1           (1,689)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:48:GLY:H         8         0.1           (1,689)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:48:GLY:H         8         0.1           (1,689)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:48:GLY:H         8         0.1           (1,683)         1:A:9:ILE:HD11         1:A:13:ASN:HD22         7         0.1           (1,683)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:13:ASN:HD21         4         0.1           (1,682)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:13:ASN:HD21         4 <th< td=""><td>(1,702)</td><td>1:A:112:LEU:HD13</td><td>1:A:113:ARG:H</td><td>10</td><td>0.1</td></th<>	(1,702)	1:A:112:LEU:HD13	1:A:113:ARG:H	10	0.1
(1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD13         8         0.1           (1,689)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:48:GLY:H         4         0.1           (1,689)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:48:GLY:H         4         0.1           (1,689)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:48:GLY:H         8         0.1           (1,689)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:48:GLY:H         8         0.1           (1,689)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:48:GLY:H         8         0.1           (1,689)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:48:GLY:H         8         0.1           (1,689)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:48:GLY:H         8         0.1           (1,689)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:48:GLY:H         8         0.1           (1,689)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:48:GLY:H         8         0.1           (1,680)         1:A:49:ILE:HD12         1:A:13:ASN:HD22         7         0.1           (1,682)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:13:ASN:HD21         4         0.1           (1,682)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:13:ASN:HD21         4         0.1           (1,682)         1:A:43:VAL:HG21         1:A:49:LYS:H         7 <t< td=""><td>(1,690)</td><td>1:A:79:LEU:H</td><td>1:A:79:LEU:HD11</td><td>8</td><td>0.1</td></t<>	(1,690)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD11	8	0.1
(1,689)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:48:GLY:H         4         0.1           (1,689)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:48:GLY:H         4         0.1           (1,689)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:48:GLY:H         4         0.1           (1,689)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:48:GLY:H         8         0.1           (1,689)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:48:GLY:H         8         0.1           (1,689)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:48:GLY:H         8         0.1           (1,680)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:48:GLY:H         8         0.1           (1,683)         1:A:49:ILE:HD11         1:A:13:ASN:HD22         7         0.1           (1,683)         1:A:9:ILE:HD12         1:A:13:ASN:HD22         7         0.1           (1,683)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:13:ASN:HD21         4         0.1           (1,682)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:13:ASN:HD21         4         0.1           (1,682)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:36:HIS:H         17         0.1           (1,676)         1:A:34:VAL:HG21         1:A:49:LYS:H         7         0.1           (1,676)         1:A:43:VAL:HG22         1:A:49:LYS:H         7	(1,690)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD12	8	0.1
(1,689)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:48:GLY:H         4         0.1           (1,689)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:48:GLY:H         4         0.1           (1,689)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:48:GLY:H         8         0.1           (1,689)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:48:GLY:H         8         0.1           (1,689)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:43:ASN:HD22         7         0.1           (1,683)         1:A:9:ILE:HD11         1:A:13:ASN:HD22         7         0.1           (1,683)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:13:ASN:HD21         4         0.1           (1,682)         1:A:9:ILE:HD12         1:A:13:ASN:HD21         4         0.1           (1,682)         1:A:43:ILE:HD13         1:A:13:ASN:HD21         4         0.1           (1,682)         1:A:43:VAL:HG21         1:A:13:ASN:HD21         4         0.1           (1,676)         1:A:43:VAL:HG21         1:A:49:LYS:H         7	(1,690)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD13	8	0.1
(1,689)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:48:GLY:H         4         0.1           (1,689)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:48:GLY:H         8         0.1           (1,689)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:48:GLY:H         8         0.1           (1,689)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:48:GLY:H         8         0.1           (1,680)         1:A:9:ILE:HD11         1:A:13:ASN:HD22         7         0.1           (1,683)         1:A:9:ILE:HD12         1:A:13:ASN:HD22         7         0.1           (1,683)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:13:ASN:HD21         4         0.1           (1,682)         1:A:9:ILE:HD12         1:A:13:ASN:HD21         4         0.1           (1,682)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:13:ASN:HD21         4         0.1           (1,682)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:13:ASN:HD21         4         0.1           (1,682)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:13:ASN:HD21         4         0.1           (1,682)         1:A:49:ILE:HD13         1:A:13:ASN:HD21         4         0.1           (1,682)         1:A:49:ILE:HD13         1:A:13:ASN:HD21         4         0.1           (1,682)         1:A:443:VAL:HG21         1:A:49:LYS:H         7 </td <td>(1,689)</td> <td>1:A:46:VAL:HG21</td> <td>1:A:48:GLY:H</td> <td>4</td> <td>0.1</td>	(1,689)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:48:GLY:H	4	0.1
(1,689)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:48:GLY:H         8         0.1           (1,689)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:48:GLY:H         8         0.1           (1,689)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:48:GLY:H         8         0.1           (1,683)         1:A:9:ILE:HD11         1:A:13:ASN:HD22         7         0.1           (1,683)         1:A:9:ILE:HD12         1:A:13:ASN:HD22         7         0.1           (1,683)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:13:ASN:HD21         4         0.1           (1,682)         1:A:9:ILE:HD12         1:A:13:ASN:HD21         4         0.1           (1,682)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:13:ASN:HD21         4         0.1           (1,682)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:13:ASN:HD21         4         0.1           (1,682)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:13:ASN:HD21         4         0.1           (1,682)         1:A:49:ILE:HD13         1:A:49:ILE:HD14         0.1           (1,682)         1:A:43:VAL:HG21         1:A:49:LYS:H         7         0.1           (1,676)         1:A:43:VAL:HG21         1:A:49:LYS:H         7         0.1           (1,676)         1:A:106:GLY:H         1:A:112:LEU:HD21         14         0.1<	(1,689)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:48:GLY:H	4	0.1
(1,689)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:48:GLY:H         8         0.1           (1,689)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:48:GLY:H         8         0.1           (1,683)         1:A:9:ILE:HD11         1:A:13:ASN:HD22         7         0.1           (1,683)         1:A:9:ILE:HD12         1:A:13:ASN:HD22         7         0.1           (1,683)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:13:ASN:HD22         7         0.1           (1,682)         1:A:9:ILE:HD11         1:A:13:ASN:HD21         4         0.1           (1,682)         1:A:9:ILE:HD12         1:A:13:ASN:HD21         4         0.1           (1,682)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:43:ASN:HD21         4         0.1           (1,682)         1:A:43:VAL:HG21         1:A:49:LYS:H         7         0.1           (1,676)         1:A:43:VAL:HG21         1:A:49:LYS:H         7         0.1           (1,676)         1:A:106:GLY:H         1:A:112:LEU:HD21         14 </td <td>(1,689)</td> <td>1:A:46:VAL:HG23</td> <td>1:A:48:GLY:H</td> <td>4</td> <td>0.1</td>	(1,689)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:48:GLY:H	4	0.1
(1,689)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:48:GLY:H         8         0.1           (1,683)         1:A:9:ILE:HD11         1:A:13:ASN:HD22         7         0.1           (1,683)         1:A:9:ILE:HD12         1:A:13:ASN:HD22         7         0.1           (1,683)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:13:ASN:HD22         7         0.1           (1,682)         1:A:9:ILE:HD11         1:A:13:ASN:HD21         4         0.1           (1,682)         1:A:9:ILE:HD12         1:A:13:ASN:HD21         4         0.1           (1,682)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:13:ASN:HD21         4         0.1           (1,682)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:13:ASN:HD21         4         0.1           (1,682)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:13:ASN:HD21         4         0.1           (1,682)         1:A:49:ILE:HD13         1:A:49:ILE:HD13         1         0.1           (1,680)         1:A:43:VAL:HG21         1:A:49:LYS:H         7         0.1           (1,676)         1:A:43:VAL:HG22         1:A:49:LYS:H         7         0.1           (1,676)         1:A:106:GLY:H         1:A:112:LEU:HD21         14         0.1           (1,675)         1:A:106:GLY:H         1:A:112:LEU:HD22	(1,689)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:48:GLY:H	8	0.1
(1,683)         1:A:9:ILE:HD11         1:A:13:ASN:HD22         7         0.1           (1,683)         1:A:9:ILE:HD12         1:A:13:ASN:HD22         7         0.1           (1,683)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:13:ASN:HD22         7         0.1           (1,682)         1:A:9:ILE:HD11         1:A:13:ASN:HD21         4         0.1           (1,682)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:43:VASH:D21         4         0.1           (1,688)         1:A:49:ILE:HD13         1:A:49:ILS:H         7         0.1           (1,676)         1:A:43:VAL:HG21         1:A:49:ILS:H         7         0.1           (1,676)         1:A:43:VAL:HG22         1:A:49:ILS:H         7         0.1           (1,676)         1:A:43:VAL:HG23         1:A:49:ILS:HD21         14         0.1           (1,675)         1:A:106:GLY:H         1:A:112:LEU:HD21         14         0.1           (1,675)         1:A:106:GLY:H         1:A:122:LEU:HD23 <td< td=""><td>(1,689)</td><td>1:A:46:VAL:HG22</td><td>1:A:48:GLY:H</td><td>8</td><td>0.1</td></td<>	(1,689)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:48:GLY:H	8	0.1
(1,683)         1:A:9:ILE:HD12         1:A:13:ASN:HD22         7         0.1           (1,683)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:13:ASN:HD22         7         0.1           (1,682)         1:A:9:ILE:HD11         1:A:13:ASN:HD21         4         0.1           (1,682)         1:A:9:ILE:HD12         1:A:13:ASN:HD21         4         0.1           (1,682)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:13:ASN:HD21         4         0.1           (1,682)         1:A:49:ILE:HD13         1:A:13:ASN:HD21         4         0.1           (1,682)         1:A:49:ILE:HD13         1:A:43:ASN:HD21         4         0.1           (1,688)         1:A:43:VAL:HG21         1:A:49:LYS:H         7         0.1           (1,676)         1:A:43:VAL:HG22         1:A:49:LYS:H         7         0.1           (1,676)         1:A:43:VAL:HG23         1:A:49:LYS:H         7         0.1           (1,675)         1:A:106:GLY:H         1:A:112:LEU:HD21         14         0.1           (1,675)         1:A:106:GLY:H         1:A:112:LEU:HD22         14         0.1           (1,675)         1:A:120:GLY:H         1:A:129:LEU:HD23         14         0.1           (1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD11         <	(1,689)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:48:GLY:H	8	0.1
(1,683)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:13:ASN:HD22         7         0.1           (1,682)         1:A:9:ILE:HD11         1:A:13:ASN:HD21         4         0.1           (1,682)         1:A:9:ILE:HD12         1:A:13:ASN:HD21         4         0.1           (1,682)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:13:ASN:HD21         4         0.1           (1,682)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:13:ASN:HD21         4         0.1           (1,688)         1:A:34:TRP:H         1:A:36:HIS:H         17         0.1           (1,676)         1:A:43:VAL:HG21         1:A:49:LYS:H         7         0.1           (1,676)         1:A:43:VAL:HG22         1:A:49:LYS:H         7         0.1           (1,676)         1:A:43:VAL:HG23         1:A:49:LYS:H         7         0.1           (1,676)         1:A:106:GLY:H         1:A:112:LEU:HD21         14         0.1           (1,675)         1:A:106:GLY:H         1:A:112:LEU:HD22         14         0.1           (1,675)         1:A:106:GLY:H         1:A:112:LEU:HD23         14         0.1           (1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD11         15         0.1           (1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD13         15	(1,683)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:13:ASN:HD22	7	0.1
(1,682)         1:A:9:ILE:HD11         1:A:13:ASN:HD21         4         0.1           (1,682)         1:A:9:ILE:HD12         1:A:13:ASN:HD21         4         0.1           (1,682)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:13:ASN:HD21         4         0.1           (1,682)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:13:ASN:HD21         4         0.1           (1,688)         1:A:49:ILE:HD13         1:A:49:LYS:H         7         0.1           (1,676)         1:A:43:VAL:HG21         1:A:49:LYS:H         7         0.1           (1,676)         1:A:43:VAL:HG22         1:A:49:LYS:H         7         0.1           (1,676)         1:A:43:VAL:HG23         1:A:49:LYS:H         7         0.1           (1,676)         1:A:106:GLY:H         1:A:112:LEU:HD21         14         0.1           (1,675)         1:A:106:GLY:H         1:A:112:LEU:HD22         14         0.1           (1,675)         1:A:106:GLY:H         1:A:112:LEU:HD23         14         0.1           (1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD11         15         0.1           (1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD13         15         0.1           (1,664)         1:A:124:VAL:HG11         1:A:127:HIS:H <td< td=""><td>(1,683)</td><td>1:A:9:ILE:HD12</td><td>1:A:13:ASN:HD22</td><td>7</td><td>0.1</td></td<>	(1,683)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:13:ASN:HD22	7	0.1
(1,682)         1:A:9:ILE:HD12         1:A:13:ASN:HD21         4         0.1           (1,682)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:13:ASN:HD21         4         0.1           (1,68)         1:A:34:TRP:H         1:A:36:HIS:H         17         0.1           (1,676)         1:A:43:VAL:HG21         1:A:49:LYS:H         7         0.1           (1,676)         1:A:43:VAL:HG22         1:A:49:LYS:H         7         0.1           (1,676)         1:A:43:VAL:HG23         1:A:49:LYS:H         7         0.1           (1,676)         1:A:106:GLY:H         1:A:112:LEU:HD21         14         0.1           (1,675)         1:A:106:GLY:H         1:A:112:LEU:HD22         14         0.1           (1,675)         1:A:106:GLY:H         1:A:112:LEU:HD23         14         0.1           (1,675)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD13         15         0.1           (1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD13         15         0.1           (1,661)         1:A:124:VAL:HG11         1:A:127:HIS:H         3         0.1           (1,664)         1:A:124:VAL:HG12         1:A:127:HIS:H         3         0.1           (1,662)         1:A:126:LYS:H         1:A:129:LEU:HD21         13	(1,683)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:13:ASN:HD22	7	0.1
(1,682)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:13:ASN:HD21         4         0.1           (1,68)         1:A:34:TRP:H         1:A:36:HIS:H         17         0.1           (1,676)         1:A:43:VAL:HG21         1:A:49:LYS:H         7         0.1           (1,676)         1:A:43:VAL:HG22         1:A:49:LYS:H         7         0.1           (1,676)         1:A:43:VAL:HG23         1:A:49:LYS:H         7         0.1           (1,676)         1:A:106:GLY:H         1:A:112:LEU:HD21         14         0.1           (1,675)         1:A:106:GLY:H         1:A:112:LEU:HD22         14         0.1           (1,675)         1:A:106:GLY:H         1:A:112:LEU:HD23         14         0.1           (1,675)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD13         15         0.1           (1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD12         15         0.1           (1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD13         15         0.1           (1,664)         1:A:124:VAL:HG11         1:A:127:HIS:H         3         0.1           (1,664)         1:A:124:VAL:HG12         1:A:127:HIS:H         3         0.1           (1,662)         1:A:126:LYS:H         1:A:129:LEU:HD21         1	(1,682)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:13:ASN:HD21	4	0.1
(1,682)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:13:ASN:HD21         4         0.1           (1,68)         1:A:34:TRP:H         1:A:36:HIS:H         17         0.1           (1,676)         1:A:43:VAL:HG21         1:A:49:LYS:H         7         0.1           (1,676)         1:A:43:VAL:HG22         1:A:49:LYS:H         7         0.1           (1,676)         1:A:43:VAL:HG23         1:A:49:LYS:H         7         0.1           (1,676)         1:A:106:GLY:H         1:A:112:LEU:HD21         14         0.1           (1,675)         1:A:106:GLY:H         1:A:112:LEU:HD22         14         0.1           (1,675)         1:A:106:GLY:H         1:A:112:LEU:HD23         14         0.1           (1,675)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD13         15         0.1           (1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD12         15         0.1           (1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD13         15         0.1           (1,664)         1:A:124:VAL:HG11         1:A:127:HIS:H         3         0.1           (1,664)         1:A:124:VAL:HG12         1:A:127:HIS:H         3         0.1           (1,662)         1:A:126:LYS:H         1:A:129:LEU:HD21         1	(1,682)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:13:ASN:HD21	4	0.1
(1,676)         1:A:43:VAL:HG21         1:A:49:LYS:H         7         0.1           (1,676)         1:A:43:VAL:HG22         1:A:49:LYS:H         7         0.1           (1,676)         1:A:43:VAL:HG23         1:A:49:LYS:H         7         0.1           (1,676)         1:A:106:GLY:H         1:A:112:LEU:HD21         14         0.1           (1,675)         1:A:106:GLY:H         1:A:112:LEU:HD22         14         0.1           (1,675)         1:A:106:GLY:H         1:A:112:LEU:HD23         14         0.1           (1,675)         1:A:106:GLY:H         1:A:112:LEU:HD23         14         0.1           (1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD11         15         0.1           (1,671)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD12         15         0.1           (1,664)         1:A:124:VAL:HG11         1:A:127:HIS:H         3         0.1           (1,664)         1:A:124:VAL:HG12         1:A:127:HIS:H         3         0.1           (1,662)         1:A:126:LYS:H         1:A:129:LEU:HD21         13         0.1           (1,662)         1:A:126:LYS:H         1:A:129:LEU:HD22         13         0.1           (1,662)         1:A:126:LYS:H         1:A:129:LEU:HD23		1:A:9:ILE:HD13	1:A:13:ASN:HD21	4	0.1
(1,676)       1:A:43:VAL:HG22       1:A:49:LYS:H       7       0.1         (1,676)       1:A:43:VAL:HG23       1:A:49:LYS:H       7       0.1         (1,675)       1:A:106:GLY:H       1:A:112:LEU:HD21       14       0.1         (1,675)       1:A:106:GLY:H       1:A:112:LEU:HD22       14       0.1         (1,675)       1:A:106:GLY:H       1:A:112:LEU:HD23       14       0.1         (1,671)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD11       15       0.1         (1,671)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD12       15       0.1         (1,671)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD13       15       0.1         (1,664)       1:A:124:VAL:HG11       1:A:127:HIS:H       3       0.1         (1,664)       1:A:124:VAL:HG12       1:A:127:HIS:H       3       0.1         (1,664)       1:A:124:VAL:HG13       1:A:127:HIS:H       3       0.1         (1,662)       1:A:126:LYS:H       1:A:129:LEU:HD21       13       0.1         (1,662)       1:A:126:LYS:H       1:A:129:LEU:HD22       13       0.1         (1,662)       1:A:126:LYS:H       1:A:129:LEU:HD23       13       0.1	(1,68)	1:A:34:TRP:H	1:A:36:HIS:H	17	0.1
(1,676)       1:A:43:VAL:HG23       1:A:49:LYS:H       7       0.1         (1,675)       1:A:106:GLY:H       1:A:112:LEU:HD21       14       0.1         (1,675)       1:A:106:GLY:H       1:A:112:LEU:HD22       14       0.1         (1,675)       1:A:106:GLY:H       1:A:12:LEU:HD23       14       0.1         (1,671)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD11       15       0.1         (1,671)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD12       15       0.1         (1,671)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD13       15       0.1         (1,664)       1:A:124:VAL:HG11       1:A:127:HIS:H       3       0.1         (1,664)       1:A:124:VAL:HG12       1:A:127:HIS:H       3       0.1         (1,664)       1:A:124:VAL:HG13       1:A:127:HIS:H       3       0.1         (1,662)       1:A:126:LYS:H       1:A:129:LEU:HD21       13       0.1         (1,662)       1:A:126:LYS:H       1:A:129:LEU:HD22       13       0.1         (1,662)       1:A:126:LYS:H       1:A:129:LEU:HD23       13       0.1	(1,676)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:49:LYS:H	7	0.1
(1,675)       1:A:106:GLY:H       1:A:112:LEU:HD21       14       0.1         (1,675)       1:A:106:GLY:H       1:A:112:LEU:HD22       14       0.1         (1,675)       1:A:106:GLY:H       1:A:112:LEU:HD23       14       0.1         (1,671)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD11       15       0.1         (1,671)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD12       15       0.1         (1,671)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD13       15       0.1         (1,664)       1:A:124:VAL:HG11       1:A:127:HIS:H       3       0.1         (1,664)       1:A:124:VAL:HG12       1:A:127:HIS:H       3       0.1         (1,664)       1:A:124:VAL:HG13       1:A:127:HIS:H       3       0.1         (1,662)       1:A:126:LYS:H       1:A:129:LEU:HD21       13       0.1         (1,662)       1:A:126:LYS:H       1:A:129:LEU:HD22       13       0.1         (1,662)       1:A:126:LYS:H       1:A:129:LEU:HD23       13       0.1	(1,676)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:49:LYS:H	7	0.1
(1,675)       1:A:106:GLY:H       1:A:112:LEU:HD22       14       0.1         (1,675)       1:A:106:GLY:H       1:A:112:LEU:HD23       14       0.1         (1,671)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD11       15       0.1         (1,671)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD12       15       0.1         (1,671)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD13       15       0.1         (1,664)       1:A:124:VAL:HG11       1:A:127:HIS:H       3       0.1         (1,664)       1:A:124:VAL:HG12       1:A:127:HIS:H       3       0.1         (1,664)       1:A:124:VAL:HG13       1:A:127:HIS:H       3       0.1         (1,662)       1:A:126:LYS:H       1:A:129:LEU:HD21       13       0.1         (1,662)       1:A:126:LYS:H       1:A:129:LEU:HD22       13       0.1         (1,662)       1:A:126:LYS:H       1:A:129:LEU:HD23       13       0.1	(1,676)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:49:LYS:H	7	0.1
(1,675)       1:A:106:GLY:H       1:A:112:LEU:HD23       14       0.1         (1,671)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD11       15       0.1         (1,671)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD12       15       0.1         (1,671)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD13       15       0.1         (1,664)       1:A:124:VAL:HG11       1:A:127:HIS:H       3       0.1         (1,664)       1:A:124:VAL:HG12       1:A:127:HIS:H       3       0.1         (1,664)       1:A:124:VAL:HG13       1:A:127:HIS:H       3       0.1         (1,662)       1:A:126:LYS:H       1:A:129:LEU:HD21       13       0.1         (1,662)       1:A:126:LYS:H       1:A:129:LEU:HD22       13       0.1         (1,662)       1:A:126:LYS:H       1:A:129:LEU:HD23       13       0.1	(1,675)	1:A:106:GLY:H	1:A:112:LEU:HD21	14	0.1
(1,671)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD11       15       0.1         (1,671)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD12       15       0.1         (1,671)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD13       15       0.1         (1,664)       1:A:124:VAL:HG11       1:A:127:HIS:H       3       0.1         (1,664)       1:A:124:VAL:HG12       1:A:127:HIS:H       3       0.1         (1,664)       1:A:124:VAL:HG13       1:A:127:HIS:H       3       0.1         (1,662)       1:A:126:LYS:H       1:A:129:LEU:HD21       13       0.1         (1,662)       1:A:126:LYS:H       1:A:129:LEU:HD22       13       0.1         (1,662)       1:A:126:LYS:H       1:A:129:LEU:HD23       13       0.1	(1,675)	1:A:106:GLY:H	1:A:112:LEU:HD22	14	0.1
(1,671)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD12       15       0.1         (1,671)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD13       15       0.1         (1,664)       1:A:124:VAL:HG11       1:A:127:HIS:H       3       0.1         (1,664)       1:A:124:VAL:HG12       1:A:127:HIS:H       3       0.1         (1,664)       1:A:124:VAL:HG13       1:A:127:HIS:H       3       0.1         (1,662)       1:A:126:LYS:H       1:A:129:LEU:HD21       13       0.1         (1,662)       1:A:126:LYS:H       1:A:129:LEU:HD22       13       0.1         (1,662)       1:A:126:LYS:H       1:A:129:LEU:HD23       13       0.1	(1,675)	1:A:106:GLY:H	1:A:112:LEU:HD23	14	0.1
(1,671)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD12       15       0.1         (1,671)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD13       15       0.1         (1,664)       1:A:124:VAL:HG11       1:A:127:HIS:H       3       0.1         (1,664)       1:A:124:VAL:HG12       1:A:127:HIS:H       3       0.1         (1,664)       1:A:124:VAL:HG13       1:A:127:HIS:H       3       0.1         (1,662)       1:A:126:LYS:H       1:A:129:LEU:HD21       13       0.1         (1,662)       1:A:126:LYS:H       1:A:129:LEU:HD22       13       0.1         (1,662)       1:A:126:LYS:H       1:A:129:LEU:HD23       13       0.1	, ,	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD11	15	0.1
(1,671)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD13       15       0.1         (1,664)       1:A:124:VAL:HG11       1:A:127:HIS:H       3       0.1         (1,664)       1:A:124:VAL:HG12       1:A:127:HIS:H       3       0.1         (1,664)       1:A:124:VAL:HG13       1:A:127:HIS:H       3       0.1         (1,662)       1:A:126:LYS:H       1:A:129:LEU:HD21       13       0.1         (1,662)       1:A:126:LYS:H       1:A:129:LEU:HD22       13       0.1         (1,662)       1:A:126:LYS:H       1:A:129:LEU:HD23       13       0.1		1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD12	15	0.1
(1,664)       1:A:124:VAL:HG12       1:A:127:HIS:H       3       0.1         (1,664)       1:A:124:VAL:HG13       1:A:127:HIS:H       3       0.1         (1,662)       1:A:126:LYS:H       1:A:129:LEU:HD21       13       0.1         (1,662)       1:A:126:LYS:H       1:A:129:LEU:HD22       13       0.1         (1,662)       1:A:126:LYS:H       1:A:129:LEU:HD23       13       0.1         (1,662)       1:A:126:LYS:H       1:A:129:LEU:HD23       13       0.1			1:A:129:LEU:HD13	15	0.1
(1,664)       1:A:124:VAL:HG12       1:A:127:HIS:H       3       0.1         (1,664)       1:A:124:VAL:HG13       1:A:127:HIS:H       3       0.1         (1,662)       1:A:126:LYS:H       1:A:129:LEU:HD21       13       0.1         (1,662)       1:A:126:LYS:H       1:A:129:LEU:HD22       13       0.1         (1,662)       1:A:126:LYS:H       1:A:129:LEU:HD23       13       0.1	(1,664)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:127:HIS:H	3	0.1
(1,664)       1:A:124:VAL:HG13       1:A:127:HIS:H       3       0.1         (1,662)       1:A:126:LYS:H       1:A:129:LEU:HD21       13       0.1         (1,662)       1:A:126:LYS:H       1:A:129:LEU:HD22       13       0.1         (1,662)       1:A:126:LYS:H       1:A:129:LEU:HD23       13       0.1		1:A:124:VAL:HG12	1:A:127:HIS:H	3	0.1
(1,662)       1:A:126:LYS:H       1:A:129:LEU:HD21       13       0.1         (1,662)       1:A:126:LYS:H       1:A:129:LEU:HD22       13       0.1         (1,662)       1:A:126:LYS:H       1:A:129:LEU:HD23       13       0.1	` '	1:A:124:VAL:HG13	1:A:127:HIS:H	3	0.1
(1,662)       1:A:126:LYS:H       1:A:129:LEU:HD22       13       0.1         (1,662)       1:A:126:LYS:H       1:A:129:LEU:HD23       13       0.1	_ `	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD21	13	0.1
(1,662) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 13 0.1		1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD22	13	0.1
	,	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD23	13	0.1
	· · /				



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

(1,658)         1:A:129:LEU:HD22         1:A:131:GLU:H         6         0.1           (1,658)         1:A:129:LEU:HD21         1:A:131:GLU:H         6         0.1           (1,658)         1:A:129:LEU:HD21         1:A:131:GLU:H         13         0.1           (1,658)         1:A:129:LEU:HD22         1:A:131:GLU:H         13         0.1           (1,658)         1:A:129:LEU:HD23         1:A:131:GLU:H         13         0.1           (1,656)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD21         19         0.1           (1,656)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD22         19         0.1           (1,656)         1:A:129:LEU:HD21         1:A:138:LEU:H         5         0.1           (1,654)         1:A:129:LEU:HD21         1:A:138:LEU:H         5         0.1           (1,654)         1:A:129:LEU:HD22         1:A:138:LEU:H         5         0.1           (1,654)         1:A:129:LEU:HD23         1:A:138:LEU:H         5         0.1           (1,654)         1:A:14:129:LEU:HD22         1:A:1318:LEU:H         15         0.1           (1,654)         1:A:14:129:LEU:HD123         1:A:14:14:TYR:H         7         0.1           (1,654)         1:A:14:14:14         1	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,658)         1:A:129:LEU:HD21         1:A:131:GLU:H         13         0.1           (1,658)         1:A:129:LEU:HD22         1:A:131:GLU:H         13         0.1           (1,658)         1:A:129:LEU:HD23         1:A:131:GLU:H         13         0.1           (1,656)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD22         19         0.1           (1,656)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD23         19         0.1           (1,656)         1:A:129:LEU:HD21         1:A:138:LEU:H         5         0.1           (1,654)         1:A:129:LEU:HD21         1:A:138:LEU:H         5         0.1           (1,654)         1:A:129:LEU:HD22         1:A:138:LEU:H         5         0.1           (1,654)         1:A:129:LEU:HD22         1:A:138:LEU:H         5         0.1           (1,654)         1:A:129:LEU:HD22         1:A:138:LEU:H         15         0.1           (1,654)         1:A:129:LEU:HD23         1:A:14:TYR:H         7         0.1           (1,654)         1:A:14:199:LEU:HD23         1:A:14:14:TYR:H         7         0.1           (1,654)         1:A:14:199:LEU:HD23         1:A:14:14:TYR:H         7         0.1           (1,654)         1:A:14:14:14         1:A:14:14:TYR:H<	(1,658)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:131:GLU:H	6	0.1
(1,658)         1:A:129:LEU:HD22         1:A:131:GLU:H         13         0.1           (1,658)         1:A:129:LEU:HD23         1:A:131:GLU:H         13         0.1           (1,656)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD21         19         0.1           (1,656)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD22         19         0.1           (1,656)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD23         19         0.1           (1,654)         1:A:129:LEU:HD21         1:A:138:LEU:H         5         0.1           (1,654)         1:A:129:LEU:HD23         1:A:138:LEU:H         5         0.1           (1,654)         1:A:129:LEU:HD23         1:A:138:LEU:H         5         0.1           (1,654)         1:A:129:LEU:HD23         1:A:138:LEU:H         5         0.1           (1,654)         1:A:129:LEU:HD21         1:A:138:LEU:H         15         0.1           (1,654)         1:A:129:LEU:HD22         1:A:138:LEU:H         15         0.1           (1,654)         1:A:129:LEU:HD22         1:A:141:TYR:H         7         0.1           (1,654)         1:A:140:LEU:HD22         1:A:141:TYR:H         7         0.1           (1,654)         1:A:140:LEU:HD23         1:A:141:TYR:H	(1,658)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:131:GLU:H	6	0.1
(1,658)         1:A:129:LEU:HD23         1:A:131:GLU:H         13         0.1           (1,656)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD21         19         0.1           (1,656)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD22         19         0.1           (1,656)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD23         19         0.1           (1,654)         1:A:129:LEU:HD21         1:A:138:LEU:H         5         0.1           (1,654)         1:A:129:LEU:HD23         1:A:138:LEU:H         5         0.1           (1,654)         1:A:129:LEU:HD21         1:A:138:LEU:H         5         0.1           (1,654)         1:A:129:LEU:HD21         1:A:138:LEU:H         5         0.1           (1,654)         1:A:129:LEU:HD23         1:A:138:LEU:H         15         0.1           (1,654)         1:A:129:LEU:HD23         1:A:138:LEU:H         15         0.1           (1,654)         1:A:14:129:LEU:HD23         1:A:138:LEU:H         15         0.1           (1,654)         1:A:14:129:LEU:HD23         1:A:138:LEU:H         7         0.1           (1,654)         1:A:14:129:LEU:HD23         1:A:14:14:TYR:H         7         0.1           (1,647)         1:A:14:1623         1:A:14:14:TYR:	(1,658)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:131:GLU:H	13	0.1
(1,656)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD21         19         0.1           (1,656)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD22         19         0.1           (1,656)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD23         19         0.1           (1,654)         1:A:129:LEU:HD21         1:A:138:LEU:H         5         0.1           (1,654)         1:A:129:LEU:HD22         1:A:138:LEU:H         5         0.1           (1,654)         1:A:129:LEU:HD21         1:A:138:LEU:H         15         0.1           (1,654)         1:A:129:LEU:HD22         1:A:141:TYR:H         7         0.1           (1,647)         1:A:102:VAL:HG21         1:A:114:TYR:H         7         0.1           (1,647)         1:A:102:VAL:HG22         1:A:114:TYR:H         7         0.1           (1,646)         1:A:14:1EU:HD22         1:A:14:1EU:HD11	(1,658)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:131:GLU:H	13	0.1
(1,656)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD22         19         0.1           (1,656)         1:A:129:LEU:HD21         1:A:129:LEU:HD23         19         0.1           (1,654)         1:A:129:LEU:HD21         1:A:138:LEU:H         5         0.1           (1,654)         1:A:129:LEU:HD22         1:A:138:LEU:H         5         0.1           (1,654)         1:A:129:LEU:HD23         1:A:138:LEU:H         15         0.1           (1,654)         1:A:129:LEU:HD21         1:A:138:LEU:H         15         0.1           (1,654)         1:A:129:LEU:HD23         1:A:141:TYR:H         7         0.1           (1,647)         1:A:102:VAL:HG22         1:A:141:TYR:H         7         0.1           (1,647)         1:A:140:LEU:HD23         1:A:141:TYR:H         7         0.1           (1,644)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD12	(1,658)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:131:GLU:H	13	0.1
(1,656)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD23         19         0.1           (1,654)         1:A:129:LEU:HD21         1:A:138:LEU:H         5         0.1           (1,654)         1:A:129:LEU:HD22         1:A:138:LEU:H         5         0.1           (1,654)         1:A:129:LEU:HD23         1:A:138:LEU:H         5         0.1           (1,654)         1:A:129:LEU:HD21         1:A:138:LEU:H         15         0.1           (1,654)         1:A:129:LEU:HD22         1:A:138:LEU:H         15         0.1           (1,647)         1:A:102:VAL:HG21         1:A:114:TYR:H         7         0.1           (1,647)         1:A:102:VAL:HG22         1:A:114:TYR:H         7         0.1           (1,647)         1:A:102:VAL:HG22         1:A:114:TYR:H         7         0.1           (1,647)         1:A:138:LEU:HD23         1:A:114:TYR:H         7         0.1           (1,644)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD11	(1,656)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD21	19	0.1
(1,654)         1:A:129:LEU:HD21         1:A:138:LEU:H         5         0.1           (1,654)         1:A:129:LEU:HD22         1:A:138:LEU:H         5         0.1           (1,654)         1:A:129:LEU:HD23         1:A:138:LEU:H         5         0.1           (1,654)         1:A:129:LEU:HD21         1:A:138:LEU:H         15         0.1           (1,654)         1:A:129:LEU:HD22         1:A:138:LEU:H         15         0.1           (1,654)         1:A:129:LEU:HD23         1:A:138:LEU:H         15         0.1           (1,654)         1:A:129:LEU:HD22         1:A:138:LEU:H         15         0.1           (1,654)         1:A:129:LEU:HD23         1:A:14:14:TYR:H         7         0.1           (1,647)         1:A:102:VAL:HG21         1:A:114:TYR:H         7         0.1           (1,647)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:114:TYR:H         7         0.1           (1,647)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:114:TYR:H         7         0.1           (1,647)         1:A:1312:TYR:H         1         0.1           (1,644)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD11         12         0.1           (1,644)         1:A:14:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD13         12         0.	(1,656)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD22	19	0.1
(1,654)         1:A:129:LEU:HD22         1:A:138:LEU:H         5         0.1           (1,654)         1:A:129:LEU:HD23         1:A:138:LEU:H         5         0.1           (1,654)         1:A:129:LEU:HD21         1:A:138:LEU:H         15         0.1           (1,654)         1:A:129:LEU:HD22         1:A:138:LEU:H         15         0.1           (1,654)         1:A:129:LEU:HD23         1:A:138:LEU:H         15         0.1           (1,647)         1:A:102:VAL:HG21         1:A:114:TYR:H         7         0.1           (1,647)         1:A:102:VAL:HG22         1:A:114:TYR:H         7         0.1           (1,647)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:114:TYR:H         7         0.1           (1,647)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:114:TYR:H         7         0.1           (1,647)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:114:TYR:H         7         0.1           (1,644)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD11         12         0.1           (1,644)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD12         12         0.1           (1,644)         1:A:14:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD13         12         0.1           (1,626)         1:A:44:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD11	(1,656)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD23	19	0.1
(1,654)         1:A:129:LEU:HD23         1:A:138:LEU:H         5         0.1           (1,654)         1:A:129:LEU:HD21         1:A:138:LEU:H         15         0.1           (1,654)         1:A:129:LEU:HD22         1:A:138:LEU:H         15         0.1           (1,654)         1:A:129:LEU:HD23         1:A:138:LEU:H         15         0.1           (1,647)         1:A:102:VAL:HG21         1:A:114:TYR:H         7         0.1           (1,647)         1:A:102:VAL:HG22         1:A:114:TYR:H         7         0.1           (1,647)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:114:TYR:H         7         0.1           (1,647)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:114:TYR:H         7         0.1           (1,644)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD11         12         0.1           (1,644)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD12         12         0.1           (1,644)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD12         12         0.1           (1,644)         1:A:47:LEU:HD21         1:A:40:LEU:HD13         12         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD12         4         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:HD13	(1,654)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:138:LEU:H	5	0.1
(1,654)         1:A:129:LEU:HD21         1:A:138:LEU:H         15         0.1           (1,654)         1:A:129:LEU:HD22         1:A:138:LEU:H         15         0.1           (1,654)         1:A:129:LEU:HD23         1:A:138:LEU:H         15         0.1           (1,647)         1:A:102:VAL:HG21         1:A:114:TYR:H         7         0.1           (1,647)         1:A:102:VAL:HG22         1:A:114:TYR:H         7         0.1           (1,647)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:114:TYR:H         7         0.1           (1,647)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:114:TYR:H         7         0.1           (1,644)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD11         12         0.1           (1,644)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD12         12         0.1           (1,644)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD12         12         0.1           (1,644)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD12         12         0.1           (1,631)         1:A:43:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD13         12         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD12         4         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:HD13	(1,654)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:138:LEU:H	5	0.1
(1,654)         1:A:129:LEU:HD22         1:A:138:LEU:H         15         0.1           (1,654)         1:A:129:LEU:HD23         1:A:138:LEU:H         15         0.1           (1,647)         1:A:102:VAL:HG21         1:A:114:TYR:H         7         0.1           (1,647)         1:A:102:VAL:HG22         1:A:114:TYR:H         7         0.1           (1,647)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:114:TYR:H         7         0.1           (1,644)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD11         12         0.1           (1,644)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD12         12         0.1           (1,644)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD12         12         0.1           (1,644)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD12         12         0.1           (1,644)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD13         12         0.1           (1,633)         1:A:54:SER:HG         1:A:57:LYS:H         15         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD11         4         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD11         4         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD12	(1,654)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:138:LEU:H	5	0.1
(1,654)         1:A:129:LEU:HD23         1:A:138:LEU:H         15         0.1           (1,647)         1:A:102:VAL:HG21         1:A:114:TYR:H         7         0.1           (1,647)         1:A:102:VAL:HG22         1:A:114:TYR:H         7         0.1           (1,647)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:114:TYR:H         7         0.1           (1,644)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD11         12         0.1           (1,644)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD12         12         0.1           (1,644)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD13         12         0.1           (1,644)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD13         12         0.1           (1,630)         1:A:48:EEU:HD21         1:A:410:LEU:HD11         4         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD12         4         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:HD13         4         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:HD12         4         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD13         4         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD11	(1,654)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:138:LEU:H	15	0.1
(1,647)         1:A:102:VAL:HG21         1:A:114:TYR:H         7         0.1           (1,647)         1:A:102:VAL:HG22         1:A:114:TYR:H         7         0.1           (1,647)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:114:TYR:H         7         0.1           (1,644)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD11         12         0.1           (1,644)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD12         12         0.1           (1,644)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD13         12         0.1           (1,644)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD13         12         0.1           (1,63)         1:A:54:SER:HG         1:A:57:LYS:H         15         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:40:LEU:HD11         4         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD13         4         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:HD11         4         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:HD12         4         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:HD13         4         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD11	(1,654)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:138:LEU:H	15	0.1
(1,647)         1:A:102:VAL:HG22         1:A:114:TYR:H         7         0.1           (1,647)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:114:TYR:H         7         0.1           (1,644)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD11         12         0.1           (1,644)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD12         12         0.1           (1,644)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD13         12         0.1           (1,63)         1:A:54:SER:HG         1:A:57:LYS:H         15         0.1           (1,63)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD11         4         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD12         4         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:HD13         4         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:HD12         4         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:HD13         4         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD11         4         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD13         4         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD11	(1,654)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:138:LEU:H	15	0.1
(1,647)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:114:TYR:H         7         0.1           (1,644)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD11         12         0.1           (1,644)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD12         12         0.1           (1,644)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD13         12         0.1           (1,63)         1:A:45:SER:HG         1:A:57:LYS:H         15         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD11         4         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD12         4         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD13         4         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:HD11         4         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:HD13         4         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD13         4         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD11         4         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD13         4         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD13 <td>(1,647)</td> <td>1:A:102:VAL:HG21</td> <td>1:A:114:TYR:H</td> <td>7</td> <td>0.1</td>	(1,647)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:114:TYR:H	7	0.1
(1,644)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD11         12         0.1           (1,644)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD12         12         0.1           (1,644)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD13         12         0.1           (1,644)         1:A:47:LEU:HD21         1:A:40:LEU:HD13         12         0.1           (1,63)         1:A:45:SER:HG         1:A:57:LYS:H         15         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD11         4         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD13         4         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:HD11         4         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:HD12         4         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:HD13         4         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD13         4         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD12         4         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD13         4         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD13<	(1,647)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:114:TYR:H	7	0.1
(1,644)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD12         12         0.1           (1,644)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD13         12         0.1           (1,63)         1:A:54:SER:HG         1:A:57:LYS:H         15         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:410:LEU:HD11         4         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD12         4         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD13         4         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:HD11         4         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:HD12         4         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD13         4         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD11         4         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD13         4         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD11         13         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD12         13         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:	(1,647)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:114:TYR:H	7	0.1
(1,644)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD13         12         0.1           (1,63)         1:A:54:SER:HG         1:A:57:LYS:H         15         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD11         4         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD12         4         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD13         4         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:HD11         4         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:HD12         4         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD13         4         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD11         4         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD12         4         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD13         4         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD11         13         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD13         13         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:L	(1,644)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD11	12	0.1
(1,63)         1:A:54:SER:HG         1:A:57:LYS:H         15         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD11         4         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD12         4         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD13         4         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:HD11         4         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:HD12         4         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:HD13         4         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD11         4         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD12         4         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD13         4         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD11         13         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD13         13         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:HD13         13         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:1	(1,644)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD12	12	0.1
(1,626)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD11         4         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD12         4         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD13         4         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:HD11         4         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:HD12         4         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:HD13         4         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD11         4         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD12         4         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD13         4         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD11         13         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD13         13         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:HD11         13         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:HD12         13         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD23 <t< td=""><td>(1,644)</td><td>1:A:17:TYR:H</td><td>1:A:12:LEU:HD13</td><td>12</td><td>0.1</td></t<>	(1,644)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD13	12	0.1
(1,626)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD12         4         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD13         4         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:HD11         4         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:HD12         4         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:HD13         4         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD11         4         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD12         4         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD13         4         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD13         3         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD13         13         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:HD13         13         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:HD13         13         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD13         13         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD23 <t< td=""><td>(1,63)</td><td>1:A:54:SER:HG</td><td>1:A:57:LYS:H</td><td>15</td><td>0.1</td></t<>	(1,63)	1:A:54:SER:HG	1:A:57:LYS:H	15	0.1
(1,626)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD13         4         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:HD11         4         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:HD12         4         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:HD13         4         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD11         4         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD12         4         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD13         4         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD13         3         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD12         13         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:HD13         13         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:HD12         13         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD13         13         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD13         13         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD23         <	(1,626)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:140:LEU:HD11	4	0.1
(1,626)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:HD11         4         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:HD12         4         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:HD13         4         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD11         4         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD12         4         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD13         4         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD11         13         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD12         13         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:HD13         13         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:HD12         13         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD13         13         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD11         13         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD13         13         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD23	(1,626)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:140:LEU:HD12	4	0.1
(1,626)       1:A:41:LEU:HD22       1:A:140:LEU:HD12       4       0.1         (1,626)       1:A:41:LEU:HD22       1:A:140:LEU:HD13       4       0.1         (1,626)       1:A:41:LEU:HD23       1:A:140:LEU:HD11       4       0.1         (1,626)       1:A:41:LEU:HD23       1:A:140:LEU:HD12       4       0.1         (1,626)       1:A:41:LEU:HD23       1:A:140:LEU:HD13       4       0.1         (1,626)       1:A:41:LEU:HD21       1:A:140:LEU:HD11       13       0.1         (1,626)       1:A:41:LEU:HD21       1:A:140:LEU:HD12       13       0.1         (1,626)       1:A:41:LEU:HD21       1:A:140:LEU:HD13       13       0.1         (1,626)       1:A:41:LEU:HD22       1:A:140:LEU:HD11       13       0.1         (1,626)       1:A:41:LEU:HD22       1:A:140:LEU:HD12       13       0.1         (1,626)       1:A:41:LEU:HD23       1:A:140:LEU:HD13       13       0.1         (1,626)       1:A:41:LE	(1,626)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:140:LEU:HD13	4	0.1
(1,626)       1:A:41:LEU:HD22       1:A:140:LEU:HD13       4       0.1         (1,626)       1:A:41:LEU:HD23       1:A:140:LEU:HD11       4       0.1         (1,626)       1:A:41:LEU:HD23       1:A:140:LEU:HD12       4       0.1         (1,626)       1:A:41:LEU:HD23       1:A:140:LEU:HD13       4       0.1         (1,626)       1:A:41:LEU:HD21       1:A:140:LEU:HD11       13       0.1         (1,626)       1:A:41:LEU:HD21       1:A:140:LEU:HD12       13       0.1         (1,626)       1:A:41:LEU:HD21       1:A:140:LEU:HD13       13       0.1         (1,626)       1:A:41:LEU:HD22       1:A:140:LEU:HD11       13       0.1         (1,626)       1:A:41:LEU:HD22       1:A:140:LEU:HD13       13       0.1         (1,626)       1:A:41:LEU:HD23       1:A:140:LEU:HD13       13       0.1         (1,626)       1:A:41:LEU:HD23       1:A:140:LEU:HD12       13       0.1         (1,626)       1:A:41:LEU:HD23       1:A:140:LEU:HD12       13       0.1         (1,626)       1:A:41:LEU:HD23       1:A:140:LEU:HD12       13       0.1         (1,626)       1:A:41:LEU:HD23       1:A:140:LEU:HD13       13       0.1         (1,619)       1:A:19:V	(1,626)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:140:LEU:HD11	4	0.1
(1,626)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD11         4         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD12         4         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD13         4         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD11         13         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD12         13         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD13         13         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:HD12         13         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:HD13         13         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD13         13         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD12         13         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD12         13         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD12         13         0.1           (1,626)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD13         13         0.1           (1,619)         1:A:19:VAL:HG11	(1,626)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:140:LEU:HD12	4	0.1
(1,626)       1:A:41:LEU:HD23       1:A:140:LEU:HD12       4       0.1         (1,626)       1:A:41:LEU:HD23       1:A:140:LEU:HD13       4       0.1         (1,626)       1:A:41:LEU:HD21       1:A:140:LEU:HD11       13       0.1         (1,626)       1:A:41:LEU:HD21       1:A:140:LEU:HD12       13       0.1         (1,626)       1:A:41:LEU:HD21       1:A:140:LEU:HD13       13       0.1         (1,626)       1:A:41:LEU:HD22       1:A:140:LEU:HD11       13       0.1         (1,626)       1:A:41:LEU:HD22       1:A:140:LEU:HD13       13       0.1         (1,626)       1:A:41:LEU:HD23       1:A:140:LEU:HD13       13       0.1         (1,626)       1:A:41:LEU:HD23       1:A:140:LEU:HD11       13       0.1         (1,626)       1:A:41:LEU:HD23       1:A:140:LEU:HD12       13       0.1         (1,626)       1:A:41:LEU:HD23       1:A:140:LEU:HD12       13       0.1         (1,626)       1:A:41:LEU:HD23       1:A:140:LEU:HD13       13       0.1         (1,619)       1:A:19:VAL:HG11       1:A:117:ASN:H       18       0.1         (1,619)       1:A:19:VAL:HG12       1:A:117:ASN:H       18       0.1	(1,626)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:140:LEU:HD13	4	0.1
(1,626)       1:A:41:LEU:HD23       1:A:140:LEU:HD13       4       0.1         (1,626)       1:A:41:LEU:HD21       1:A:140:LEU:HD11       13       0.1         (1,626)       1:A:41:LEU:HD21       1:A:140:LEU:HD12       13       0.1         (1,626)       1:A:41:LEU:HD21       1:A:140:LEU:HD13       13       0.1         (1,626)       1:A:41:LEU:HD22       1:A:140:LEU:HD11       13       0.1         (1,626)       1:A:41:LEU:HD22       1:A:140:LEU:HD13       13       0.1         (1,626)       1:A:41:LEU:HD23       1:A:140:LEU:HD13       13       0.1         (1,626)       1:A:41:LEU:HD23       1:A:140:LEU:HD12       13       0.1         (1,626)       1:A:41:LEU:HD23       1:A:140:LEU:HD12       13       0.1         (1,626)       1:A:41:LEU:HD23       1:A:140:LEU:HD13       13       0.1         (1,619)       1:A:19:VAL:HG11       1:A:117:ASN:H       18       0.1         (1,619)       1:A:19:VAL:HG12       1:A:117:ASN:H       18       0.1	(1,626)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:140:LEU:HD11	4	0.1
(1,626)       1:A:41:LEU:HD21       1:A:140:LEU:HD11       13       0.1         (1,626)       1:A:41:LEU:HD21       1:A:140:LEU:HD12       13       0.1         (1,626)       1:A:41:LEU:HD21       1:A:140:LEU:HD13       13       0.1         (1,626)       1:A:41:LEU:HD22       1:A:140:LEU:HD11       13       0.1         (1,626)       1:A:41:LEU:HD22       1:A:140:LEU:HD12       13       0.1         (1,626)       1:A:41:LEU:HD23       1:A:140:LEU:HD13       13       0.1         (1,626)       1:A:41:LEU:HD23       1:A:140:LEU:HD11       13       0.1         (1,626)       1:A:41:LEU:HD23       1:A:140:LEU:HD12       13       0.1         (1,626)       1:A:41:LEU:HD23       1:A:140:LEU:HD13       13       0.1         (1,619)       1:A:19:VAL:HG11       1:A:117:ASN:H       18       0.1         (1,619)       1:A:19:VAL:HG12       1:A:117:ASN:H       18       0.1	(1,626)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:140:LEU:HD12	4	0.1
(1,626)       1:A:41:LEU:HD21       1:A:140:LEU:HD12       13       0.1         (1,626)       1:A:41:LEU:HD21       1:A:140:LEU:HD13       13       0.1         (1,626)       1:A:41:LEU:HD22       1:A:140:LEU:HD11       13       0.1         (1,626)       1:A:41:LEU:HD22       1:A:140:LEU:HD12       13       0.1         (1,626)       1:A:41:LEU:HD22       1:A:140:LEU:HD13       13       0.1         (1,626)       1:A:41:LEU:HD23       1:A:140:LEU:HD11       13       0.1         (1,626)       1:A:41:LEU:HD23       1:A:140:LEU:HD12       13       0.1         (1,626)       1:A:41:LEU:HD23       1:A:140:LEU:HD13       13       0.1         (1,619)       1:A:19:VAL:HG11       1:A:117:ASN:H       18       0.1         (1,619)       1:A:19:VAL:HG12       1:A:117:ASN:H       18       0.1	(1,626)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:140:LEU:HD13	4	0.1
(1,626)       1:A:41:LEU:HD21       1:A:140:LEU:HD13       13       0.1         (1,626)       1:A:41:LEU:HD22       1:A:140:LEU:HD11       13       0.1         (1,626)       1:A:41:LEU:HD22       1:A:140:LEU:HD12       13       0.1         (1,626)       1:A:41:LEU:HD22       1:A:140:LEU:HD13       13       0.1         (1,626)       1:A:41:LEU:HD23       1:A:140:LEU:HD11       13       0.1         (1,626)       1:A:41:LEU:HD23       1:A:140:LEU:HD12       13       0.1         (1,626)       1:A:41:LEU:HD23       1:A:140:LEU:HD13       13       0.1         (1,619)       1:A:19:VAL:HG11       1:A:117:ASN:H       18       0.1         (1,619)       1:A:19:VAL:HG12       1:A:117:ASN:H       18       0.1	(1,626)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:140:LEU:HD11	13	0.1
(1,626)       1:A:41:LEU:HD22       1:A:140:LEU:HD11       13       0.1         (1,626)       1:A:41:LEU:HD22       1:A:140:LEU:HD12       13       0.1         (1,626)       1:A:41:LEU:HD22       1:A:140:LEU:HD13       13       0.1         (1,626)       1:A:41:LEU:HD23       1:A:140:LEU:HD11       13       0.1         (1,626)       1:A:41:LEU:HD23       1:A:140:LEU:HD12       13       0.1         (1,626)       1:A:41:LEU:HD23       1:A:140:LEU:HD13       13       0.1         (1,619)       1:A:19:VAL:HG11       1:A:117:ASN:H       18       0.1         (1,619)       1:A:19:VAL:HG12       1:A:117:ASN:H       18       0.1	(1,626)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:140:LEU:HD12	13	0.1
(1,626)       1:A:41:LEU:HD22       1:A:140:LEU:HD12       13       0.1         (1,626)       1:A:41:LEU:HD22       1:A:140:LEU:HD13       13       0.1         (1,626)       1:A:41:LEU:HD23       1:A:140:LEU:HD11       13       0.1         (1,626)       1:A:41:LEU:HD23       1:A:140:LEU:HD12       13       0.1         (1,626)       1:A:41:LEU:HD23       1:A:140:LEU:HD13       13       0.1         (1,619)       1:A:19:VAL:HG11       1:A:117:ASN:H       18       0.1         (1,619)       1:A:19:VAL:HG12       1:A:117:ASN:H       18       0.1	(1,626)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:140:LEU:HD13	13	0.1
(1,626)       1:A:41:LEU:HD22       1:A:140:LEU:HD12       13       0.1         (1,626)       1:A:41:LEU:HD22       1:A:140:LEU:HD13       13       0.1         (1,626)       1:A:41:LEU:HD23       1:A:140:LEU:HD11       13       0.1         (1,626)       1:A:41:LEU:HD23       1:A:140:LEU:HD12       13       0.1         (1,626)       1:A:41:LEU:HD23       1:A:140:LEU:HD13       13       0.1         (1,619)       1:A:19:VAL:HG11       1:A:117:ASN:H       18       0.1         (1,619)       1:A:19:VAL:HG12       1:A:117:ASN:H       18       0.1	(1,626)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:140:LEU:HD11	13	0.1
(1,626)       1:A:41:LEU:HD23       1:A:140:LEU:HD11       13       0.1         (1,626)       1:A:41:LEU:HD23       1:A:140:LEU:HD12       13       0.1         (1,626)       1:A:41:LEU:HD23       1:A:140:LEU:HD13       13       0.1         (1,619)       1:A:19:VAL:HG11       1:A:117:ASN:H       18       0.1         (1,619)       1:A:19:VAL:HG12       1:A:117:ASN:H       18       0.1		1:A:41:LEU:HD22	1:A:140:LEU:HD12	13	0.1
(1,626)       1:A:41:LEU:HD23       1:A:140:LEU:HD12       13       0.1         (1,626)       1:A:41:LEU:HD23       1:A:140:LEU:HD13       13       0.1         (1,619)       1:A:19:VAL:HG11       1:A:117:ASN:H       18       0.1         (1,619)       1:A:19:VAL:HG12       1:A:117:ASN:H       18       0.1	(1,626)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:140:LEU:HD13	13	0.1
(1,626)       1:A:41:LEU:HD23       1:A:140:LEU:HD12       13       0.1         (1,626)       1:A:41:LEU:HD23       1:A:140:LEU:HD13       13       0.1         (1,619)       1:A:19:VAL:HG11       1:A:117:ASN:H       18       0.1         (1,619)       1:A:19:VAL:HG12       1:A:117:ASN:H       18       0.1		1:A:41:LEU:HD23	1:A:140:LEU:HD11	13	0.1
(1,619)       1:A:19:VAL:HG11       1:A:117:ASN:H       18       0.1         (1,619)       1:A:19:VAL:HG12       1:A:117:ASN:H       18       0.1		1:A:41:LEU:HD23	1:A:140:LEU:HD12	13	0.1
(1,619) 1:A:19:VAL:HG12 1:A:117:ASN:H 18 0.1	(1,626)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:140:LEU:HD13	13	0.1
		1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:H	18	0.1
	(1,619)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:H	18	0.1
(,,	(1,619)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:H	18	0.1



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,619)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:H	20	0.1
(1,619)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:H	20	0.1
(1,619)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:H	20	0.1
(1,612)	1:A:102:VAL:H	1:A:88:THR:H	12	0.1
(1,588)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:22:ASN:H	19	0.1
(1,588)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:22:ASN:H	19	0.1
(1,588)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:22:ASN:H	19	0.1
(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG11	12	0.1
(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG12	12	0.1
(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG13	12	0.1
(1,577)	1:A:111:GLY:H	1:A:112:LEU:HD21	14	0.1
(1,577)	1:A:111:GLY:H	1:A:112:LEU:HD22	14	0.1
(1,577)	1:A:111:GLY:H	1:A:112:LEU:HD23	14	0.1
(1,571)	1:A:140:LEU:HD11	1:A:141:PHE:H	10	0.1
(1,571)	1:A:140:LEU:HD12	1:A:141:PHE:H	10	0.1
(1,571)	1:A:140:LEU:HD13	1:A:141:PHE:H	10	0.1
(1,571)	1:A:140:LEU:HD11	1:A:141:PHE:H	13	0.1
(1,571)	1:A:140:LEU:HD12	1:A:141:PHE:H	13	0.1
(1,571)	1:A:140:LEU:HD13	1:A:141:PHE:H	13	0.1
(1,57)	1:A:112:LEU:HD11	1:A:113:ARG:H	1	0.1
(1,57)	1:A:112:LEU:HD12	1:A:113:ARG:H	1	0.1
(1,57)	1:A:112:LEU:HD13	1:A:113:ARG:H	1	0.1
(1,57)	1:A:112:LEU:HD11	1:A:113:ARG:H	10	0.1
(1,57)	1:A:112:LEU:HD12	1:A:113:ARG:H	10	0.1
(1,57)	1:A:112:LEU:HD13	1:A:113:ARG:H	10	0.1
(1,565)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:H	14	0.1
(1,565)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:H	14	0.1
(1,565)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:H	14	0.1
(1,564)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:137:TYR:H	9	0.1
(1,564)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:137:TYR:H	9	0.1
(1,564)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:137:TYR:H	9	0.1
(1,562)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD21	6	0.1
(1,562)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD22	6	0.1
(1,562)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD23	6	0.1
(1,551)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD11	3	0.1
(1,551)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD12	3	0.1
(1,551)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD13	3	0.1
(1,546)	1:A:121:LEU:H	1:A:121:LEU:HD21	19	0.1
(1,546)	1:A:121:LEU:H	1:A:121:LEU:HD22	19	0.1
(1,546)	1:A:121:LEU:H	1:A:121:LEU:HD23	19	0.1
(1,544)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:120:ALA:H	20	0.1
(1,544)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:120:ALA:H	20	0.1



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,544)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:120:ALA:H	20	0.1
(1,536)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:102:VAL:H	2	0.1
(1,536)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:102:VAL:H	2	0.1
(1,536)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:102:VAL:H	2	0.1
(1,518)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD11	17	0.1
(1,518)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD12	17	0.1
(1,518)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD13	17	0.1
(1,517)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:HG21	13	0.1
(1,517)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:HG22	13	0.1
(1,517)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:HG23	13	0.1
(1,517)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:HG21	19	0.1
(1,517)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:HG22	19	0.1
(1,517)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:HG23	19	0.1
(1,512)	1:A:79:LEU:HD21	1:A:87:ARG:H	5	0.1
(1,512)	1:A:79:LEU:HD22	1:A:87:ARG:H	5	0.1
(1,512)	1:A:79:LEU:HD23	1:A:87:ARG:H	5	0.1
(1,497)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:H	11	0.1
(1,497)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:H	11	0.1
(1,497)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:H	11	0.1
(1,491)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:52:PHE:H	17	0.1
(1,491)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:52:PHE:H	17	0.1
(1,491)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:52:PHE:H	17	0.1
(1,465)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG11	19	0.1
(1,465)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG12	19	0.1
(1,465)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG13	19	0.1
(1,464)	1:A:16:GLN:H	1:A:46:VAL:HG11	3	0.1
(1,464)	1:A:16:GLN:H	1:A:46:VAL:HG12	3	0.1
(1,464)	1:A:16:GLN:H	1:A:46:VAL:HG13	3	0.1
(1,462)	1:A:45:ILE:HD11	1:A:46:VAL:H	13	0.1
(1,462)	1:A:45:ILE:HD12	1:A:46:VAL:H	13	0.1
(1,462)	1:A:45:ILE:HD13	1:A:46:VAL:H	13	0.1
(1,458)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:10:LYS:H	3	0.1
(1,458)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:10:LYS:H	3	0.1
(1,458)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:10:LYS:H	3	0.1
(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD11	8	0.1
(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD12	8	0.1
(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD13	8	0.1
(1,445)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:113:ARG:H	8	0.1
(1,445)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:113:ARG:H	8	0.1
(1,445)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:113:ARG:H	8	0.1
(1,445)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:113:ARG:H	9	0.1
(1,445)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:113:ARG:H	9	0.1
( ) /	·	1 13 5 1 1		od on next mage



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,445)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:113:ARG:H	9	0.1
(1,440)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:100:GLY:H	2	0.1
(1,440)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:100:GLY:H	2	0.1
(1,440)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:100:GLY:H	2	0.1
(1,44)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:48:GLY:H	4	0.1
(1,44)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:48:GLY:H	4	0.1
(1,44)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:48:GLY:H	4	0.1
(1,44)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:48:GLY:H	8	0.1
(1,44)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:48:GLY:H	8	0.1
(1,44)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:48:GLY:H	8	0.1
(1,431)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:103:PHE:H	7	0.1
(1,431)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:103:PHE:H	7	0.1
(1,431)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:103:PHE:H	7	0.1
(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD21	3	0.1
(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD22	3	0.1
(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD23	3	0.1
(1,416)	1:A:86:ILE:H	1:A:86:ILE:HD11	20	0.1
(1,416)	1:A:86:ILE:H	1:A:86:ILE:HD12	20	0.1
(1,416)	1:A:86:ILE:H	1:A:86:ILE:HD13	20	0.1
(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD21	18	0.1
(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD22	18	0.1
(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD23	18	0.1
(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD21	19	0.1
(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD22	19	0.1
(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD23	19	0.1
(1,387)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:90:VAL:HG21	14	0.1
(1,387)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:90:VAL:HG22	14	0.1
(1,387)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:90:VAL:HG23	14	0.1
(1,387)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:90:VAL:HG21	14	0.1
(1,387)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:90:VAL:HG22	14	0.1
(1,387)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:90:VAL:HG23	14	0.1
(1,387)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG21	14	0.1
(1,387)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG22	14	0.1
(1,387)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG23	14	0.1
(1,38)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:13:ASN:HD22	7	0.1
(1,38)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:13:ASN:HD22	7	0.1
(1,38)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:13:ASN:HD22	7	0.1
(1,375)	1:A:131:GLU:H	1:A:133:GLY:H	7	0.1
(1,37)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:13:ASN:HD21	4	0.1
(1,37)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:13:ASN:HD21	4	0.1
(1,37)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:13:ASN:HD21	4	0.1
(1,361)	1:A:45:ILE:H	1:A:122:ARG:H	17	0.1



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,345)	1:A:103:PHE:H	1:A:105:ASP:H	10	0.1
(1,332)	1:A:85:MET:H	1:A:86:ILE:H	11	0.1
(1,327)	1:A:78:LYS:H	1:A:89:GLU:H	5	0.1
(1,322)	1:A:54:SER:H	1:A:57:LYS:H	4	0.1
(1,31)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:49:LYS:H	7	0.1
(1,31)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:49:LYS:H	7	0.1
(1,31)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:49:LYS:H	7	0.1
(1,308)	1:A:30:GLN:H	1:A:34:TRP:HE1	2	0.1
(1,30)	1:A:106:GLY:H	1:A:112:LEU:HD21	14	0.1
(1,30)	1:A:106:GLY:H	1:A:112:LEU:HD22	14	0.1
(1,30)	1:A:106:GLY:H	1:A:112:LEU:HD23	14	0.1
(1,299)	1:A:15:MET:H	1:A:18:GLU:H	17	0.1
(1,279)	1:A:26:GLU:H	1:A:64:TRP:HE1	3	0.1
(1,279)	1:A:26:GLU:H	1:A:64:TRP:HE1	9	0.1
(1,275)	1:A:92:SER:H	1:A:99:LEU:H	10	0.1
(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD11	15	0.1
(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD12	15	0.1
(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD13	15	0.1
(1,259)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD11	6	0.1
(1,259)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD12	6	0.1
(1,259)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD13	6	0.1
(1,259)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD11	6	0.1
(1,259)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD12	6	0.1
(1,259)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD13	6	0.1
(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD11	6	0.1
(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD12	6	0.1
(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD13	6	0.1
(1,256)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD11	14	0.1
(1,256)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD12	14	0.1
(1,256)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD13	14	0.1
(1,256)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD11	14	0.1
(1,256)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD12	14	0.1
(1,256)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD13	14	0.1
(1,256)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD11	14	0.1
(1,256)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD12	14	0.1
(1,256)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD13	14	0.1
(1,247)	1:A:121:LEU:HD11	1:A:122:ARG:H	10	0.1
(1,247)	1:A:121:LEU:HD12	1:A:122:ARG:H	10	0.1
(1,247)	1:A:121:LEU:HD13	1:A:122:ARG:H	10	0.1
(1,247)	1:A:121:LEU:HD11	1:A:122:ARG:H	15	0.1
(1,247)	1:A:121:LEU:HD12	1:A:122:ARG:H	15	0.1
(1,247)	1:A:121:LEU:HD13	1:A:122:ARG:H	15	0.1



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,225)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:71:ILE:HD11	13	0.1
(1,225)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:71:ILE:HD12	13	0.1
(1,225)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:71:ILE:HD13	13	0.1
(1,225)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:71:ILE:HD11	13	0.1
(1,225)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:71:ILE:HD12	13	0.1
(1,225)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:71:ILE:HD13	13	0.1
(1,225)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:71:ILE:HD11	13	0.1
(1,225)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:71:ILE:HD12	13	0.1
(1,225)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:71:ILE:HD13	13	0.1
(1,225)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:71:ILE:HD11	19	0.1
(1,225)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:71:ILE:HD12	19	0.1
(1,225)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:71:ILE:HD13	19	0.1
(1,225)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:71:ILE:HD11	19	0.1
(1,225)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:71:ILE:HD12	19	0.1
(1,225)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:71:ILE:HD13	19	0.1
(1,225)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:71:ILE:HD11	19	0.1
(1,225)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:71:ILE:HD12	19	0.1
(1,225)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:71:ILE:HD13	19	0.1
(1,219)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:74:GLU:H	1	0.1
(1,219)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:74:GLU:H	1	0.1
(1,219)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:74:GLU:H	1	0.1
(1,212)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:129:LEU:HD11	3	0.1
(1,212)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:129:LEU:HD12	3	0.1
(1,212)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:129:LEU:HD13	3	0.1
(1,212)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:129:LEU:HD11	3	0.1
(1,212)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:129:LEU:HD12	3	0.1
(1,212)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:129:LEU:HD13	3	0.1
(1,212)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:129:LEU:HD11	3	0.1
(1,212)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:129:LEU:HD12	3	0.1
(1,212)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:129:LEU:HD13	3	0.1
(1,212)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:129:LEU:HD11	9	0.1
(1,212)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:129:LEU:HD12	9	0.1
(1,212)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:129:LEU:HD13	9	0.1
(1,212)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:129:LEU:HD11	9	0.1
(1,212)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:129:LEU:HD12	9	0.1
(1,212)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:129:LEU:HD13	9	0.1
(1,212)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:129:LEU:HD11	9	0.1
(1,212)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:129:LEU:HD12	9	0.1
(1,212)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:129:LEU:HD13	9	0.1
(1,2)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:114:TYR:H	7	0.1
(1,2)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:114:TYR:H	7	0.1
(1,2)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:114:TYR:H	7	0.1
( ) .)		1	-	od on next nage



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,192)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:H	7	0.1
(1,192)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:H	7	0.1
(1,192)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:H	7	0.1
(1,19)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:127:HIS:H	3	0.1
(1,19)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:127:HIS:H	3	0.1
(1,19)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:127:HIS:H	3	0.1
(1,171)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG11	3	0.1
(1,171)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG12	3	0.1
(1,171)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG13	3	0.1
(1,17)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD21	13	0.1
(1,17)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD22	13	0.1
(1,17)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD23	13	0.1
(1,162)	1:A:92:SER:H	1:A:96:ASP:H	13	0.1
(1,161)	1:A:133:GLY:H	1:A:135:GLU:H	6	0.1
(1,160)	1:A:54:SER:H	1:A:56:ASP:H	5	0.1
(1,147)	1:A:130:LYS:H	1:A:134:TYR:H	3	0.1
(1,147)	1:A:130:LYS:H	1:A:134:TYR:H	11	0.1
(1,147)	1:A:130:LYS:H	1:A:134:TYR:H	12	0.1
(1,133)	1:A:7:GLU:H	1:A:9:ILE:H	18	0.1
(1,131)	1:A:17:TYR:H	1:A:19:VAL:H	2	0.1
(1,13)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:131:GLU:H	6	0.1
(1,13)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:131:GLU:H	6	0.1
(1,13)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:131:GLU:H	6	0.1
(1,13)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:131:GLU:H	13	0.1
(1,13)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:131:GLU:H	13	0.1
(1,13)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:131:GLU:H	13	0.1
(1,1289)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD11	12	0.1
(1,1289)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD12	12	0.1
(1,1289)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD13	12	0.1
(1,1271)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:140:LEU:HD11	4	0.1
(1,1271)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:140:LEU:HD12	4	0.1
(1,1271)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:140:LEU:HD13	4	0.1
(1,1271)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:140:LEU:HD11	4	0.1
(1,1271)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:140:LEU:HD12	4	0.1
(1,1271)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:140:LEU:HD13	4	0.1
(1,1271)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:140:LEU:HD11	4	0.1
(1,1271)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:140:LEU:HD12	4	0.1
(1,1271)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:140:LEU:HD13	4	0.1
(1,1271)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:140:LEU:HD11	13	0.1
(1,1271)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:140:LEU:HD12	13	0.1
(1,1271)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:140:LEU:HD13	13	0.1
(1,1271)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:140:LEU:HD11	13	0.1
	l .		~	od on nort nago



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1271)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:140:LEU:HD12	13	0.1
(1,1271)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:140:LEU:HD13	13	0.1
(1,1271)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:140:LEU:HD11	13	0.1
(1,1271)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:140:LEU:HD12	13	0.1
(1,1271)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:140:LEU:HD13	13	0.1
(1,1264)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:H	18	0.1
(1,1264)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:H	18	0.1
(1,1264)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:H	18	0.1
(1,1264)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:H	20	0.1
(1,1264)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:H	20	0.1
(1,1264)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:H	20	0.1
(1,1257)	1:A:102:VAL:H	1:A:88:THR:H	12	0.1
(1,1233)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:22:ASN:H	19	0.1
(1,1233)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:22:ASN:H	19	0.1
(1,1233)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:22:ASN:H	19	0.1
(1,1230)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG11	12	0.1
(1,1230)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG12	12	0.1
(1,1230)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG13	12	0.1
(1,1222)	1:A:111:GLY:H	1:A:112:LEU:HD21	14	0.1
(1,1222)	1:A:111:GLY:H	1:A:112:LEU:HD22	14	0.1
(1,1222)	1:A:111:GLY:H	1:A:112:LEU:HD23	14	0.1
(1,1216)	1:A:140:LEU:HD11	1:A:141:PHE:H	10	0.1
(1,1216)	1:A:140:LEU:HD12	1:A:141:PHE:H	10	0.1
(1,1216)	1:A:140:LEU:HD13	1:A:141:PHE:H	10	0.1
(1,1216)	1:A:140:LEU:HD11	1:A:141:PHE:H	13	0.1
(1,1216)	1:A:140:LEU:HD12	1:A:141:PHE:H	13	0.1
(1,1216)	1:A:140:LEU:HD13	1:A:141:PHE:H	13	0.1
(1,1210)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:H	14	0.1
(1,1210)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:H	14	0.1
(1,1210)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:H	14	0.1
(1,1209)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:137:TYR:H	9	0.1
(1,1209)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:137:TYR:H	9	0.1
(1,1209)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:137:TYR:H	9	0.1
(1,1207)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD21	6	0.1
(1,1207)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD22	6	0.1
(1,1207)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD23	6	0.1
(1,1196)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD11	3	0.1
(1,1196)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD12	3	0.1
(1,1196)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD13	3	0.1
(1,1191)	1:A:121:LEU:H	1:A:121:LEU:HD21	19	0.1
(1,1191)	1:A:121:LEU:H	1:A:121:LEU:HD22	19	0.1
(1,1191)	1:A:121:LEU:H	1:A:121:LEU:HD23	19	0.1



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

(1,1189)         1:A:19:VAL:HG11         1:A:120:ALA:H         20         0.1           (1,1189)         1:A:19:VAL:HG12         1:A:120:ALA:H         20         0.1           (1,1181)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:102:VAL:H         2         0.1           (1,1181)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:102:VAL:H         2         0.1           (1,1181)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:102:VAL:H         2         0.1           (1,1183)         1:A:115:CYS:H         1:A:116:ILE:HD11         17         0.1           (1,1163)         1:A:115:CYS:H         1:A:116:ILE:HD12         17         0.1           (1,1163)         1:A:115:CYS:H         1:A:116:ILE:HD13         17         0.1           (1,1163)         1:A:115:CYS:H         1:A:116:ILE:HD13         17         0.1           (1,1162)         1:A:89:GLU:H         1:A:116:ILE:HD13         17         0.1           (1,1162)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:HG21         13         0.1           (1,1162)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:HG22         13         0.1           (1,1162)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:HG23         19         0.1           (1,1162)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:HG23	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1189)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:10:VAL:H         20         0.1           (1,1181)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:102:VAL:H         2         0.1           (1,1181)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:102:VAL:H         2         0.1           (1,1181)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:102:VAL:H         2         0.1           (1,1183)         1:A:115:CYS:H         1:A:116:ILE:HD11         17         0.1           (1,1163)         1:A:115:CYS:H         1:A:116:ILE:HD13         17         0.1           (1,1162)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:HG21         13         0.1           (1,1162)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:HG22         13         0.1           (1,1162)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:HG21         19         0.1           (1,1162)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:HG22         19         0.1           (1,1162)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:HG23         19         0.1           (1,1157)         1:A:79:LEU:HD21         1:A:87:ARG:H         5         0.1           (1,1157)         1:A:79:LEU:HD22         1:A:87:ARG:H         5         0.1           (1,1157)         1:A:79:LEU:HD23         1:A:71:ILE:H	(1,1189)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:120:ALA:H	20	0.1
(1,1181)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:102:VAL:H         2         0.1           (1,1181)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:102:VAL:H         2         0.1           (1,1181)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:102:VAL:H         2         0.1           (1,1163)         1:A:115:CYS:H         1:A:116:ILE:HD11         17         0.1           (1,1163)         1:A:115:CYS:H         1:A:116:ILE:HD13         17         0.1           (1,1163)         1:A:115:CYS:H         1:A:116:ILE:HD13         17         0.1           (1,1162)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:HG21         13         0.1           (1,1162)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:HG22         13         0.1           (1,1162)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:HG23         19         0.1           (1,1157)         1:A:79:LEU:HD21         1:A:87:ARG:H         5         0.1           (1,1157)         1:A:79:LEU:HD22         1:A:87:ARG:H <td>(1,1189)</td> <td>1:A:19:VAL:HG12</td> <td>1:A:120:ALA:H</td> <td>20</td> <td>0.1</td>	(1,1189)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:120:ALA:H	20	0.1
(1,1181) 1:A:90:VAL:HG12 1:A:102:VAL:H 2 0.1 (1,1181) 1:A:90:VAL:HG13 1:A:102:VAL:H 2 0.1 (1,1163) 1:A:115:CYS:H 1:A:116:ILE:HD11 17 0.1 (1,1163) 1:A:115:CYS:H 1:A:116:ILE:HD12 17 0.1 (1,1163) 1:A:115:CYS:H 1:A:116:ILE:HD13 17 0.1 (1,1163) 1:A:115:CYS:H 1:A:116:ILE:HD13 17 0.1 (1,1162) 1:A:89:GLU:H 1:A:102:VAL:HG21 13 0.1 (1,1162) 1:A:89:GLU:H 1:A:102:VAL:HG22 13 0.1 (1,1162) 1:A:89:GLU:H 1:A:102:VAL:HG23 13 0.1 (1,1162) 1:A:89:GLU:H 1:A:102:VAL:HG23 13 0.1 (1,1162) 1:A:89:GLU:H 1:A:102:VAL:HG21 19 0.1 (1,1162) 1:A:89:GLU:H 1:A:102:VAL:HG21 19 0.1 (1,1162) 1:A:89:GLU:H 1:A:102:VAL:HG21 19 0.1 (1,1162) 1:A:89:GLU:H 1:A:102:VAL:HG23 19 0.1 (1,1157) 1:A:79:LEU:HD21 1:A:87:ARG:H 5 0.1 (1,1157) 1:A:79:LEU:HD22 1:A:87:ARG:H 5 0.1 (1,1157) 1:A:79:LEU:HD23 1:A:87:ARG:H 5 0.1 (1,1157) 1:A:89:GLU:H 1:A:102:VAL:H 8 0.1 (1,1142) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:H 11 0.1 (1,1142) 1:A:51:LEU:HD21 1:A:71:ILE:H 11 0.1 (1,1142) 1:A:51:LEU:HD22 1:A:71:ILE:H 11 0.1 (1,1142) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:H 11 0.1 (1,1142) 1:A:51:LEU:HD23 1:A:71:ILE:H 11 0.1 (1,1110) 1:A:17:TYR:H 1:A:46:VAL:HG11 19 0.1 (1,1110) 1:A:17:TYR:H 1:A:46:VAL:HG11 19 0.1 (1,1110) 1:A:17:TYR:H 1:A:46:VAL:HG11 19 0.1 (1,1110) 1:A:17:TYR:H 1:A:46:VAL:HG11 3 0.1 (1,1109) 1:A:16:GLN:H 1:A:46:VAL:HG13 3 0.1 (1,1107) 1:A:45:ILE:HD11 1:A:46:VAL:HG13 3 0.1 (1,1109) 1:A:16:GLN:H 1:A:46:VAL:HG13 3 0.1 (1,1107) 1:A:45:ILE:HD11 1:A:46:VAL:HG13 3 0.1 (1,1109) 1:A:16:GLN:H 1:A:46:VAL:HG13 3 0.1 (1,1100) 1:A:16:GLN:H 1:A:46:VAL:HG13 3 0.1 (1,1101) 1:A:16:GLN:H 1:A:46:VAL:HG13 3 0.1 (1,1102) 1:A:45:ILE:HD13 1:A:46:VAL:HG13 3 0.1 (1,1103) 1:A:9:ILE:HD12 1:A:46:VAL:HG13 3 0.1 (1,1103) 1:A:9:ILE:HD12 1:A:46:VAL:HG13 3 0.1 (1,1103) 1:A:9:ILE:HD12 1:A:46:VAL:HG13 3 0.1 (1,1103) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:46:VAL:H 13 0.1 (1,1103) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:46:VAL:H 13 0.1 (1,1103) 1:A:9:ILE:HD13 1:A:46:VAL:H 13 0.1 (1,1103) 1:A:9:ILE:HD14 1:A:10:IXYS:H 3 0.1	(1,1189)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:120:ALA:H	20	0.1
(1,1181)         1:A:190:VAL:HG13         1:A:102:VAL:H         2         0.1           (1,1163)         1:A:115:CYS:H         1:A:116:ILE:HD11         17         0.1           (1,1163)         1:A:115:CYS:H         1:A:116:ILE:HD12         17         0.1           (1,1163)         1:A:115:CYS:H         1:A:116:ILE:HD13         17         0.1           (1,1162)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:HG21         13         0.1           (1,1162)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:HG23         13         0.1           (1,1162)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:HG23         13         0.1           (1,1162)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:HG21         19         0.1           (1,1162)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:HG22         19         0.1           (1,1162)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:HG23         19         0.1           (1,1162)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:HG23         19         0.1           (1,1157)         1:A:79:LEU:HD21         1:A:87:ARG:H         5         0.1           (1,1157)         1:A:79:LEU:HD22         1:A:87:ARG:H         5         0.1           (1,1157)         1:A:19:LEU:HD23         1:A:71:ILE:H <td>(1,1181)</td> <td>1:A:90:VAL:HG11</td> <td>1:A:102:VAL:H</td> <td>2</td> <td>0.1</td>	(1,1181)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:102:VAL:H	2	0.1
(1,1163)         1:A:115:CYS:H         1:A:116:ILE:HD11         17         0.1           (1,1163)         1:A:115:CYS:H         1:A:116:ILE:HD12         17         0.1           (1,1163)         1:A:115:CYS:H         1:A:116:ILE:HD13         17         0.1           (1,1162)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:HG21         13         0.1           (1,1162)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:HG23         13         0.1           (1,1162)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:HG21         19         0.1           (1,1162)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:HG22         19         0.1           (1,1162)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:HG23         19         0.1           (1,1162)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:HG23         19         0.1           (1,1162)         1:A:79:LEU:HD21         1:A:87:ARG:H         5         0.1           (1,1157)         1:A:79:LEU:HD22         1:A:87:ARG:H         5         0.1           (1,1157)         1:A:79:LEU:HD23         1:A:87:ARG:H         5         0.1           (1,1142)         1:A:51:LEU:HD23         1:A:71:ILE:H         1         0.1           (1,1142)         1:A:51:LEU:HD21         1:A:77:ILE:H	(1,1181)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:102:VAL:H	2	0.1
(1,1163)         1:A:115:CYS:H         1:A:116:ILE:HD12         17         0.1           (1,1163)         1:A:115:CYS:H         1:A:116:ILE:HD13         17         0.1           (1,1162)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:HG21         13         0.1           (1,1162)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:HG22         13         0.1           (1,1162)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:HG23         13         0.1           (1,1162)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:HG22         19         0.1           (1,1162)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:HG23         19         0.1           (1,1162)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:HG23         19         0.1           (1,1162)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:HG23         19         0.1           (1,1157)         1:A:79:LEU:HD21         1:A:87:ARG:H         5         0.1           (1,1157)         1:A:79:LEU:HD23         1:A:87:ARG:H         5         0.1           (1,1157)         1:A:59:LEU:HD23         1:A:71:ILE:H         1         0.1           (1,1142)         1:A:51:LEU:HD23         1:A:71:ILE:H         11         0.1           (1,1142)         1:A:51:LEU:HD23         1:A:71:ILE:H	(1,1181)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:102:VAL:H	2	0.1
(1,1163)         1:A:115:CYS:H         1:A:116:ILE:HD13         17         0.1           (1,1162)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:HG21         13         0.1           (1,1162)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:HG22         13         0.1           (1,1162)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:HG23         13         0.1           (1,1162)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:HG21         19         0.1           (1,1162)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:HG22         19         0.1           (1,1162)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:HG23         19         0.1           (1,1157)         1:A:79:LEU:HD21         1:A:87:ARG:H         5         0.1           (1,1157)         1:A:79:LEU:HD22         1:A:87:ARG:H         5         0.1           (1,1157)         1:A:79:LEU:HD23         1:A:87:ARG:H         5         0.1           (1,1157)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:H         8         0.1           (1,1152)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:H         8         0.1           (1,1142)         1:A:51:LEU:HD23         1:A:71:ILE:H         11         0.1           (1,1142)         1:A:51:LEU:HD21         1:A:71:ILE:H <t< td=""><td>(1,1163)</td><td>1:A:115:CYS:H</td><td>1:A:116:ILE:HD11</td><td>17</td><td>0.1</td></t<>	(1,1163)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD11	17	0.1
(1,1162)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:HG21         13         0.1           (1,1162)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:HG22         13         0.1           (1,1162)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:HG23         13         0.1           (1,1162)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:HG21         19         0.1           (1,1162)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:HG22         19         0.1           (1,1162)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:HG23         19         0.1           (1,1157)         1:A:79:LEU:HD21         1:A:87:ARG:H         5         0.1           (1,1157)         1:A:79:LEU:HD22         1:A:78:ARG:H         5         0.1           (1,1157)         1:A:79:LEU:HD23         1:A:78:ARG:H         5         0.1           (1,1157)         1:A:79:LEU:HD23         1:A:78:TARG:H         5         0.1           (1,1157)         1:A:79:LEU:HD23         1:A:71:ILE:H         1         0.1           (1,1142)         1:A:51:LEU:HD23         1:A:71:ILE:H         1         0.1           (1,1142)         1:A:51:LEU:HD22         1:A:71:ILE:H         1         0.1           (1,1142)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:52:PHE:H         <	(1,1163)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD12	17	0.1
(1,1162)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:HG22         13         0.1           (1,1162)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:HG23         13         0.1           (1,1162)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:HG21         19         0.1           (1,1162)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:HG22         19         0.1           (1,1162)         1:A:89:GLU:H         1:A:87:ARG:H         5         0.1           (1,1157)         1:A:79:LEU:HD21         1:A:87:ARG:H         5         0.1           (1,1157)         1:A:79:LEU:HD22         1:A:87:ARG:H         5         0.1           (1,1157)         1:A:79:LEU:HD22         1:A:87:ARG:H         5         0.1           (1,1157)         1:A:79:LEU:HD23         1:A:87:ARG:H         5         0.1           (1,1157)         1:A:79:LEU:HD23         1:A:71:ILE:H         1         0.1           (1,1142)         1:A:51:LEU:HD23         1:A:71:ILE:H         11         0.1           (1,1142)         1:A:51:LEU:HD23         1:A:71:ILE:H         11         0.1           (1,1142)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:52:PHE:H         17         0.1           (1,1136)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:52:PHE:H         17	(1,1163)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD13	17	0.1
(1,1162)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:HG23         13         0.1           (1,1162)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:HG21         19         0.1           (1,1162)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:HG22         19         0.1           (1,1162)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:HG23         19         0.1           (1,1157)         1:A:79:LEU:HD21         1:A:87:ARG:H         5         0.1           (1,1157)         1:A:79:LEU:HD22         1:A:87:ARG:H         5         0.1           (1,1157)         1:A:79:LEU:HD23         1:A:87:ARG:H         5         0.1           (1,1157)         1:A:79:LEU:HD23         1:A:87:ARG:H         5         0.1           (1,1157)         1:A:79:LEU:HD23         1:A:87:LEU:H         8         0.1           (1,1142)         1:A:51:LEU:HD21         1:A:71:LE:H         11         0.1           (1,1142)         1:A:51:LEU:HD22         1:A:71:LE:H         11         0.1           (1,1142)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:52:PHE:H         17         0.1           (1,1136)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:52:PHE:H         17         0.1           (1,1136)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:52:PHE:H	(1,1162)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:HG21	13	0.1
(1,1162)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:HG21         19         0.1           (1,1162)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:HG22         19         0.1           (1,1162)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:HG23         19         0.1           (1,1157)         1:A:79:LEU:HD21         1:A:87:ARG:H         5         0.1           (1,1157)         1:A:79:LEU:HD22         1:A:87:ARG:H         5         0.1           (1,1157)         1:A:79:LEU:HD23         1:A:87:ARG:H         5         0.1           (1,1157)         1:A:79:LEU:HD23         1:A:87:ILE:H         5         0.1           (1,115)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:H         8         0.1           (1,1142)         1:A:51:LEU:HD23         1:A:71:ILE:H         11         0.1           (1,1142)         1:A:51:LEU:HD22         1:A:71:ILE:H         11         0.1           (1,1136)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:52:PHE:H         17         0.1           (1,1136)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:52:PHE:H         17         0.1           (1,1136)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:52:PHE:H         17         0.1           (1,1110)         1:A:17:TYR:H         1:A:46:VAL:HG11         19	(1,1162)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:HG22	13	0.1
(1,1162)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:HG22         19         0.1           (1,1162)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:HG23         19         0.1           (1,1157)         1:A:79:LEU:HD21         1:A:87:ARG:H         5         0.1           (1,1157)         1:A:79:LEU:HD22         1:A:87:ARG:H         5         0.1           (1,1157)         1:A:79:LEU:HD23         1:A:87:ARG:H         5         0.1           (1,115)         1:A:89:GLU:H         1:A:71:ILE:H         1         0.1           (1,1142)         1:A:51:LEU:HD21         1:A:71:ILE:H         11         0.1           (1,1142)         1:A:51:LEU:HD22         1:A:71:ILE:H         11         0.1           (1,1142)         1:A:51:LEU:HD23         1:A:71:ILE:H         11         0.1           (1,1136)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:52:PHE:H         17         0.1           (1,1136)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:52:PHE:H         17         0.1           (1,1110)         1:A:17:TYR:H         1:A:46:VAL:HG11         19         0.1           (1,1110)         1:A:17:TYR:H         1:A:46:VAL:HG13         19         0.1           (1,1109)         1:A:16:GLN:H         1:A:46:VAL:HG13         3 </td <td>(1,1162)</td> <td>1:A:89:GLU:H</td> <td>1:A:102:VAL:HG23</td> <td>13</td> <td>0.1</td>	(1,1162)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:HG23	13	0.1
(1,1162)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:HG23         19         0.1           (1,1157)         1:A:79:LEU:HD21         1:A:87:ARG:H         5         0.1           (1,1157)         1:A:79:LEU:HD22         1:A:87:ARG:H         5         0.1           (1,1157)         1:A:79:LEU:HD23         1:A:87:ARG:H         5         0.1           (1,115)         1:A:89:GLU:H         1:A:71:ILE:H         5         0.1           (1,1142)         1:A:89:GLU:H         1:A:71:ILE:H         11         0.1           (1,1142)         1:A:51:LEU:HD21         1:A:71:ILE:H         11         0.1           (1,1142)         1:A:51:LEU:HD22         1:A:71:ILE:H         11         0.1           (1,1142)         1:A:51:LEU:HD23         1:A:71:ILE:H         11         0.1           (1,1136)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:52:PHE:H         17         0.1           (1,1136)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:52:PHE:H         17         0.1           (1,1136)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:52:PHE:H         17         0.1           (1,1136)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:46:VAL:HG11         19         0.1           (1,1110)         1:A:17:TYR:H         1:A:46:VAL:HG12         19 </td <td>(1,1162)</td> <td>1:A:89:GLU:H</td> <td>1:A:102:VAL:HG21</td> <td>19</td> <td>0.1</td>	(1,1162)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:HG21	19	0.1
(1,1162)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:HG23         19         0.1           (1,1157)         1:A:79:LEU:HD21         1:A:87:ARG:H         5         0.1           (1,1157)         1:A:79:LEU:HD22         1:A:87:ARG:H         5         0.1           (1,1157)         1:A:79:LEU:HD23         1:A:87:ARG:H         5         0.1           (1,115)         1:A:89:GLU:H         1:A:71:ILE:H         8         0.1           (1,1142)         1:A:51:LEU:HD21         1:A:71:ILE:H         11         0.1           (1,1142)         1:A:51:LEU:HD22         1:A:71:ILE:H         11         0.1           (1,1142)         1:A:51:LEU:HD23         1:A:71:ILE:H         11         0.1           (1,1142)         1:A:51:LEU:HD23         1:A:52:PHE:H         17         0.1           (1,1136)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:52:PHE:H         17         0.1           (1,1136)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:52:PHE:H         17         0.1           (1,1136)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:52:PHE:H         17         0.1           (1,1110)         1:A:17:TYR:H         1:A:46:VAL:HG11         19         0.1           (1,1110)         1:A:16:GLN:H         1:A:46:VAL:HG13         19 </td <td>(1,1162)</td> <td>1:A:89:GLU:H</td> <td>1:A:102:VAL:HG22</td> <td>19</td> <td>0.1</td>	(1,1162)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:HG22	19	0.1
(1,1157)         1:A:79:LEU:HD22         1:A:87:ARG:H         5         0.1           (1,1157)         1:A:79:LEU:HD23         1:A:87:ARG:H         5         0.1           (1,115)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:H         8         0.1           (1,1142)         1:A:51:LEU:HD21         1:A:71:ILE:H         11         0.1           (1,1142)         1:A:51:LEU:HD22         1:A:71:ILE:H         11         0.1           (1,1142)         1:A:51:LEU:HD23         1:A:71:ILE:H         11         0.1           (1,1136)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:52:PHE:H         17         0.1           (1,1136)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:52:PHE:H         17         0.1           (1,1136)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:52:PHE:H         17         0.1           (1,1136)         1:A:41:TTYR:H         1:A:46:VAL:HG11         19         0.1           (1,1110)         1:A:17:TYR:H         1:A:46:VAL:HG12         19         0.1           (1,1110)         1:A:16:GLN:H         1:A:46:VAL:HG13         19         0.1           (1,1109)         1:A:16:GLN:H         1:A:46:VAL:HG13         3         0.1           (1,1107)         1:A:45:ILE:HD11         1:A:46:VAL:HG13	(1,1162)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:HG23	19	0.1
(1,1157)         1:A:79:LEU:HD23         1:A:87:ARG:H         5         0.1           (1,115)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:H         8         0.1           (1,1142)         1:A:51:LEU:HD21         1:A:71:ILE:H         11         0.1           (1,1142)         1:A:51:LEU:HD22         1:A:71:ILE:H         11         0.1           (1,1142)         1:A:51:LEU:HD23         1:A:71:ILE:H         11         0.1           (1,1136)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:52:PHE:H         17         0.1           (1,1136)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:52:PHE:H         17         0.1           (1,1136)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:52:PHE:H         17         0.1           (1,1110)         1:A:17:TYR:H         1:A:46:VAL:HG11         19         0.1           (1,1110)         1:A:17:TYR:H         1:A:46:VAL:HG12         19         0.1           (1,1109)         1:A:16:GLN:H         1:A:46:VAL:HG13         19         0.1           (1,1109)         1:A:16:GLN:H         1:A:46:VAL:HG13         3         0.1           (1,1107)         1:A:45:ILE:HD11         1:A:46:VAL:H         13         0.1           (1,1107)         1:A:45:ILE:HD12         1:A:46:VAL:H         13<	(1,1157)	1:A:79:LEU:HD21	1:A:87:ARG:H	5	0.1
(1,115)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:H         8         0.1           (1,1142)         1:A:51:LEU:HD21         1:A:71:ILE:H         11         0.1           (1,1142)         1:A:51:LEU:HD22         1:A:71:ILE:H         11         0.1           (1,1142)         1:A:51:LEU:HD23         1:A:71:ILE:H         11         0.1           (1,1136)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:52:PHE:H         17         0.1           (1,1136)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:52:PHE:H         17         0.1           (1,1136)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:52:PHE:H         17         0.1           (1,1136)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:46:VAL:HG11         19         0.1           (1,1110)         1:A:47:TYR:H         1:A:46:VAL:HG12         19         0.1           (1,1110)         1:A:17:TYR:H         1:A:46:VAL:HG13         19         0.1           (1,1109)         1:A:16:GLN:H         1:A:46:VAL:HG13         3         0.1           (1,1109)         1:A:16:GLN:H         1:A:46:VAL:HG13         3         0.1           (1,1107)         1:A:45:ILE:HD11         1:A:46:VAL:H         13         0.1           (1,1107)         1:A:45:ILE:HD12         1:A:46:VAL:H	(1,1157)	1:A:79:LEU:HD22	1:A:87:ARG:H	5	0.1
(1,1142)         1:A:51:LEU:HD21         1:A:71:ILE:H         11         0.1           (1,1142)         1:A:51:LEU:HD22         1:A:71:ILE:H         11         0.1           (1,1142)         1:A:51:LEU:HD23         1:A:71:ILE:H         11         0.1           (1,1136)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:52:PHE:H         17         0.1           (1,1136)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:52:PHE:H         17         0.1           (1,1136)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:52:PHE:H         17         0.1           (1,1136)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:52:PHE:H         17         0.1           (1,1100)         1:A:17:TYR:H         1:A:46:VAL:HG11         19         0.1           (1,1110)         1:A:17:TYR:H         1:A:46:VAL:HG13         19         0.1           (1,1109)         1:A:16:GLN:H         1:A:46:VAL:HG13         3         0.1           (1,1109)         1:A:16:GLN:H         1:A:46:VAL:HG13         3         0.1           (1,1107)         1:A:45:ILE:HD11         1:A:46:VAL:H         13         0.1           (1,1107)         1:A:45:ILE:HD12         1:A:46:VAL:H         13         0.1           (1,1103)         1:A:9:ILE:HD11         1:A:10:LYS:H	(1,1157)	1:A:79:LEU:HD23	1:A:87:ARG:H	5	0.1
(1,1142)         1:A:51:LEU:HD22         1:A:71:ILE:H         11         0.1           (1,1142)         1:A:51:LEU:HD23         1:A:71:ILE:H         11         0.1           (1,1136)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:52:PHE:H         17         0.1           (1,1136)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:52:PHE:H         17         0.1           (1,1136)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:52:PHE:H         17         0.1           (1,1140)         1:A:17:TYR:H         1:A:46:VAL:HG11         19         0.1           (1,1110)         1:A:17:TYR:H         1:A:46:VAL:HG12         19         0.1           (1,1100)         1:A:16:GLN:H         1:A:46:VAL:HG13         19         0.1           (1,1109)         1:A:16:GLN:H         1:A:46:VAL:HG13         3         0.1           (1,1109)         1:A:16:GLN:H         1:A:46:VAL:HG13         3         0.1           (1,1107)         1:A:45:ILE:HD11         1:A:46:VAL:H         13         0.1           (1,1107)         1:A:45:ILE:HD12         1:A:46:VAL:H         13         0.1           (1,1107)         1:A:45:ILE:HD13         1:A:46:VAL:H         13         0.1           (1,1103)         1:A:9:ILE:HD11         1:A:10:LYS:H	(1,115)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:H	8	0.1
(1,1142)         1:A:51:LEU:HD23         1:A:71:ILE:H         11         0.1           (1,1136)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:52:PHE:H         17         0.1           (1,1136)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:52:PHE:H         17         0.1           (1,1136)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:52:PHE:H         17         0.1           (1,1110)         1:A:17:TYR:H         1:A:46:VAL:HG11         19         0.1           (1,1110)         1:A:17:TYR:H         1:A:46:VAL:HG12         19         0.1           (1,1109)         1:A:16:GLN:H         1:A:46:VAL:HG13         19         0.1           (1,1109)         1:A:16:GLN:H         1:A:46:VAL:HG12         3         0.1           (1,1109)         1:A:16:GLN:H         1:A:46:VAL:HG13         3         0.1           (1,1109)         1:A:16:GLN:H         1:A:46:VAL:HG13         3         0.1           (1,1107)         1:A:45:ILE:HD11         1:A:46:VAL:H         13         0.1           (1,1107)         1:A:45:ILE:HD12         1:A:46:VAL:H         13         0.1           (1,1103)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:10:LYS:H         3         0.1           (1,1103)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:10:LYS:H         3 </td <td>(1,1142)</td> <td>1:A:51:LEU:HD21</td> <td>1:A:71:ILE:H</td> <td>11</td> <td>0.1</td>	(1,1142)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:H	11	0.1
(1,1136)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:52:PHE:H         17         0.1           (1,1136)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:52:PHE:H         17         0.1           (1,1136)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:52:PHE:H         17         0.1           (1,1110)         1:A:17:TYR:H         1:A:46:VAL:HG11         19         0.1           (1,1110)         1:A:17:TYR:H         1:A:46:VAL:HG12         19         0.1           (1,1110)         1:A:16:GLN:H         1:A:46:VAL:HG13         19         0.1           (1,1109)         1:A:16:GLN:H         1:A:46:VAL:HG11         3         0.1           (1,1109)         1:A:16:GLN:H         1:A:46:VAL:HG12         3         0.1           (1,1109)         1:A:16:GLN:H         1:A:46:VAL:HG13         3         0.1           (1,1109)         1:A:16:GLN:H         1:A:46:VAL:HG13         3         0.1           (1,1107)         1:A:45:ILE:HD11         1:A:46:VAL:H         13         0.1           (1,1107)         1:A:45:ILE:HD12         1:A:46:VAL:H         13         0.1           (1,1103)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:10:LYS:H         3         0.1           (1,1103)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:10:LYS:H         3 <td>(1,1142)</td> <td>1:A:51:LEU:HD22</td> <td>1:A:71:ILE:H</td> <td>11</td> <td>0.1</td>	(1,1142)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:H	11	0.1
(1,1136)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:52:PHE:H         17         0.1           (1,1136)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:52:PHE:H         17         0.1           (1,1110)         1:A:17:TYR:H         1:A:46:VAL:HG11         19         0.1           (1,1110)         1:A:17:TYR:H         1:A:46:VAL:HG12         19         0.1           (1,1110)         1:A:17:TYR:H         1:A:46:VAL:HG13         19         0.1           (1,1109)         1:A:16:GLN:H         1:A:46:VAL:HG11         3         0.1           (1,1109)         1:A:16:GLN:H         1:A:46:VAL:HG13         3         0.1           (1,1109)         1:A:16:GLN:H         1:A:46:VAL:HG13         3         0.1           (1,1107)         1:A:45:ILE:HD11         1:A:46:VAL:H         13         0.1           (1,1107)         1:A:45:ILE:HD12         1:A:46:VAL:H         13         0.1           (1,1107)         1:A:45:ILE:HD13         1:A:46:VAL:H         13         0.1           (1,1103)         1:A:9:ILE:HD11         1:A:10:LYS:H         3         0.1           (1,1103)         1:A:9:ILE:HD12         1:A:10:LYS:H         3         0.1           (1,1103)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:10:LYS:H         3 <td>(1,1142)</td> <td>1:A:51:LEU:HD23</td> <td>1:A:71:ILE:H</td> <td>11</td> <td>0.1</td>	(1,1142)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:H	11	0.1
(1,1136)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:52:PHE:H         17         0.1           (1,1110)         1:A:17:TYR:H         1:A:46:VAL:HG11         19         0.1           (1,1110)         1:A:17:TYR:H         1:A:46:VAL:HG12         19         0.1           (1,110)         1:A:16:GLN:H         1:A:46:VAL:HG13         19         0.1           (1,1109)         1:A:16:GLN:H         1:A:46:VAL:HG11         3         0.1           (1,1109)         1:A:16:GLN:H         1:A:46:VAL:HG12         3         0.1           (1,1109)         1:A:16:GLN:H         1:A:46:VAL:HG13         3         0.1           (1,1107)         1:A:45:ILE:HD11         1:A:46:VAL:H         13         0.1           (1,1107)         1:A:45:ILE:HD12         1:A:46:VAL:H         13         0.1           (1,1103)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:10:LYS:H         3         0.1           (1,1103)         1:A:9:ILE:HD12         1:A:10:LYS:H         3         0.1           (1,1103)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:10:LYS:H         3         0.1           (1,110)         1:A:128:LYS:H         1:A:10:LYS:H         3         0.1	(1,1136)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:52:PHE:H	17	0.1
(1,1110)         1:A:17:TYR:H         1:A:46:VAL:HG11         19         0.1           (1,1110)         1:A:17:TYR:H         1:A:46:VAL:HG12         19         0.1           (1,1110)         1:A:17:TYR:H         1:A:46:VAL:HG13         19         0.1           (1,1109)         1:A:16:GLN:H         1:A:46:VAL:HG11         3         0.1           (1,1109)         1:A:16:GLN:H         1:A:46:VAL:HG12         3         0.1           (1,1109)         1:A:16:GLN:H         1:A:46:VAL:HG13         3         0.1           (1,1107)         1:A:45:ILE:HD11         1:A:46:VAL:H         13         0.1           (1,1107)         1:A:45:ILE:HD12         1:A:46:VAL:H         13         0.1           (1,1103)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:46:VAL:H         13         0.1           (1,1103)         1:A:9:ILE:HD11         1:A:10:LYS:H         3         0.1           (1,1103)         1:A:9:ILE:HD12         1:A:10:LYS:H         3         0.1           (1,1103)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:10:LYS:H         3         0.1           (1,110)         1:A:128:LYS:H         1:A:10:LYS:H         3         0.1	(1,1136)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:52:PHE:H	17	0.1
(1,1110)       1:A:17:TYR:H       1:A:46:VAL:HG12       19       0.1         (1,1110)       1:A:17:TYR:H       1:A:46:VAL:HG13       19       0.1         (1,1109)       1:A:16:GLN:H       1:A:46:VAL:HG11       3       0.1         (1,1109)       1:A:16:GLN:H       1:A:46:VAL:HG12       3       0.1         (1,1107)       1:A:45:ILE:HD11       1:A:46:VAL:H       13       0.1         (1,1107)       1:A:45:ILE:HD12       1:A:46:VAL:H       13       0.1         (1,1107)       1:A:45:ILE:HD13       1:A:46:VAL:H       13       0.1         (1,1107)       1:A:45:ILE:HD13       1:A:46:VAL:H       13       0.1         (1,1103)       1:A:9:ILE:HD13       1:A:10:LYS:H       3       0.1         (1,1103)       1:A:9:ILE:HD12       1:A:10:LYS:H       3       0.1         (1,1103)       1:A:9:ILE:HD13       1:A:10:LYS:H       3       0.1         (1,1103)       1:A:9:ILE:HD13       1:A:10:LYS:H       3       0.1         (1,110)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD21       19       0.1	(1,1136)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:52:PHE:H	17	0.1
(1,1110)       1:A:17:TYR:H       1:A:46:VAL:HG13       19       0.1         (1,1109)       1:A:16:GLN:H       1:A:46:VAL:HG11       3       0.1         (1,1109)       1:A:16:GLN:H       1:A:46:VAL:HG12       3       0.1         (1,1109)       1:A:16:GLN:H       1:A:46:VAL:HG13       3       0.1         (1,1107)       1:A:45:ILE:HD11       1:A:46:VAL:H       13       0.1         (1,1107)       1:A:45:ILE:HD12       1:A:46:VAL:H       13       0.1         (1,1107)       1:A:45:ILE:HD13       1:A:46:VAL:H       13       0.1         (1,1103)       1:A:9:ILE:HD11       1:A:10:LYS:H       3       0.1         (1,1103)       1:A:9:ILE:HD12       1:A:10:LYS:H       3       0.1         (1,1103)       1:A:9:ILE:HD13       1:A:10:LYS:H       3       0.1         (1,110)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD21       19       0.1	(1,1110)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG11	19	0.1
(1,1109)       1:A:16:GLN:H       1:A:46:VAL:HG11       3       0.1         (1,1109)       1:A:16:GLN:H       1:A:46:VAL:HG12       3       0.1         (1,1109)       1:A:16:GLN:H       1:A:46:VAL:HG13       3       0.1         (1,1107)       1:A:45:ILE:HD11       1:A:46:VAL:H       13       0.1         (1,1107)       1:A:45:ILE:HD12       1:A:46:VAL:H       13       0.1         (1,1107)       1:A:45:ILE:HD13       1:A:46:VAL:H       13       0.1         (1,1103)       1:A:9:ILE:HD13       1:A:10:LYS:H       3       0.1         (1,1103)       1:A:9:ILE:HD12       1:A:10:LYS:H       3       0.1         (1,1103)       1:A:9:ILE:HD13       1:A:10:LYS:H       3       0.1         (1,11)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD21       19       0.1	(1,1110)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG12	19	0.1
(1,1109)       1:A:16:GLN:H       1:A:46:VAL:HG12       3       0.1         (1,1109)       1:A:16:GLN:H       1:A:46:VAL:HG13       3       0.1         (1,1107)       1:A:45:ILE:HD11       1:A:46:VAL:H       13       0.1         (1,1107)       1:A:45:ILE:HD12       1:A:46:VAL:H       13       0.1         (1,1107)       1:A:45:ILE:HD13       1:A:46:VAL:H       13       0.1         (1,1103)       1:A:9:ILE:HD11       1:A:10:LYS:H       3       0.1         (1,1103)       1:A:9:ILE:HD12       1:A:10:LYS:H       3       0.1         (1,1103)       1:A:9:ILE:HD13       1:A:10:LYS:H       3       0.1         (1,11)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD21       19       0.1	(1,1110)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG13	19	0.1
(1,1109)       1:A:16:GLN:H       1:A:46:VAL:HG13       3       0.1         (1,1107)       1:A:45:ILE:HD11       1:A:46:VAL:H       13       0.1         (1,1107)       1:A:45:ILE:HD12       1:A:46:VAL:H       13       0.1         (1,1107)       1:A:45:ILE:HD13       1:A:46:VAL:H       13       0.1         (1,1103)       1:A:9:ILE:HD11       1:A:10:LYS:H       3       0.1         (1,1103)       1:A:9:ILE:HD12       1:A:10:LYS:H       3       0.1         (1,1103)       1:A:9:ILE:HD13       1:A:10:LYS:H       3       0.1         (1,11)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD21       19       0.1	(1,1109)	1:A:16:GLN:H	1:A:46:VAL:HG11	3	0.1
(1,1107)       1:A:45:ILE:HD11       1:A:46:VAL:H       13       0.1         (1,1107)       1:A:45:ILE:HD12       1:A:46:VAL:H       13       0.1         (1,1107)       1:A:45:ILE:HD13       1:A:46:VAL:H       13       0.1         (1,1103)       1:A:9:ILE:HD11       1:A:10:LYS:H       3       0.1         (1,1103)       1:A:9:ILE:HD12       1:A:10:LYS:H       3       0.1         (1,1103)       1:A:9:ILE:HD13       1:A:10:LYS:H       3       0.1         (1,11)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD21       19       0.1	(1,1109)	1:A:16:GLN:H	1:A:46:VAL:HG12	3	0.1
(1,1107)       1:A:45:ILE:HD12       1:A:46:VAL:H       13       0.1         (1,1107)       1:A:45:ILE:HD13       1:A:46:VAL:H       13       0.1         (1,1103)       1:A:9:ILE:HD11       1:A:10:LYS:H       3       0.1         (1,1103)       1:A:9:ILE:HD12       1:A:10:LYS:H       3       0.1         (1,1103)       1:A:9:ILE:HD13       1:A:10:LYS:H       3       0.1         (1,11)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD21       19       0.1	(1,1109)	1:A:16:GLN:H	1:A:46:VAL:HG13	3	0.1
(1,1107)       1:A:45:ILE:HD13       1:A:46:VAL:H       13       0.1         (1,1103)       1:A:9:ILE:HD11       1:A:10:LYS:H       3       0.1         (1,1103)       1:A:9:ILE:HD12       1:A:10:LYS:H       3       0.1         (1,1103)       1:A:9:ILE:HD13       1:A:10:LYS:H       3       0.1         (1,11)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD21       19       0.1	(1,1107)		1:A:46:VAL:H	13	0.1
(1,1103)       1:A:9:ILE:HD11       1:A:10:LYS:H       3       0.1         (1,1103)       1:A:9:ILE:HD12       1:A:10:LYS:H       3       0.1         (1,1103)       1:A:9:ILE:HD13       1:A:10:LYS:H       3       0.1         (1,11)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD21       19       0.1	(1,1107)	1:A:45:ILE:HD12	1:A:46:VAL:H	13	0.1
(1,1103)       1:A:9:ILE:HD12       1:A:10:LYS:H       3       0.1         (1,1103)       1:A:9:ILE:HD13       1:A:10:LYS:H       3       0.1         (1,11)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD21       19       0.1	(1,1107)	1:A:45:ILE:HD13	1:A:46:VAL:H	13	0.1
(1,1103)       1:A:9:ILE:HD13       1:A:10:LYS:H       3       0.1         (1,11)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD21       19       0.1	(1,1103)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:10:LYS:H	3	0.1
(1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 19 0.1	(1,1103)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:10:LYS:H	3	0.1
(1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 19 0.1	(1,1103)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:10:LYS:H	3	0.1
		1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD21	19	0.1
(1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 19 0.1		1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD22	19	0.1
(1,11) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 19 0.1		1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD23	19	0.1
(1,1090) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:113:ARG:H 8 0.1	(1,1090)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:113:ARG:H	8	0.1
(1,1090) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:113:ARG:H 8 0.1	(1,1090)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:113:ARG:H	8	0.1



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1090)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:113:ARG:H	8	0.1
(1,1090)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:113:ARG:H	9	0.1
(1,1090)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:113:ARG:H	9	0.1
(1,1090)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:113:ARG:H	9	0.1
(1,1085)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:100:GLY:H	2	0.1
(1,1085)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:100:GLY:H	2	0.1
(1,1085)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:100:GLY:H	2	0.1
(1,1076)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:103:PHE:H	7	0.1
(1,1076)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:103:PHE:H	7	0.1
(1,1076)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:103:PHE:H	7	0.1
(1,1064)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD21	3	0.1
(1,1064)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD22	3	0.1
(1,1064)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD23	3	0.1
(1,1061)	1:A:86:ILE:H	1:A:86:ILE:HD11	20	0.1
(1,1061)	1:A:86:ILE:H	1:A:86:ILE:HD12	20	0.1
(1,1061)	1:A:86:ILE:H	1:A:86:ILE:HD13	20	0.1
(1,1060)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD21	18	0.1
(1,1060)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD22	18	0.1
(1,1060)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD23	18	0.1
(1,1060)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD21	19	0.1
(1,1060)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD22	19	0.1
(1,1060)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD23	19	0.1
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:90:VAL:HG21	14	0.1
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:90:VAL:HG22	14	0.1
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:90:VAL:HG23	14	0.1
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:90:VAL:HG21	14	0.1
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:90:VAL:HG22	14	0.1
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:90:VAL:HG23	14	0.1
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG21	14	0.1
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG22	14	0.1
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG23	14	0.1
(1,1020)	1:A:131:GLU:H	1:A:133:GLY:H	7	0.1
(1,1006)	1:A:45:ILE:H	1:A:122:ARG:H	17	0.1
(1,995)	1:A:108:GLY:H	1:A:111:GLY:H	15	0.09
(1,99)	1:A:20:THR:H	1:A:23:ASN:H	18	0.09
(1,981)	1:A:90:VAL:H	1:A:101:HIS:H	16	0.09
(1,977)	1:A:85:MET:H	1:A:86:ILE:H	6	0.09
(1,974)	1:A:79:LEU:H	1:A:89:GLU:H	8	0.09
(1,967)	1:A:54:SER:H	1:A:57:LYS:H	13	0.09
(1,957)	1:A:41:LEU:H	1:A:124:VAL:H	13	0.09
(1,948)	1:A:18:GLU:H	1:A:20:THR:H	7	0.09
(1,943)	1:A:14:ARG:H	1:A:17:TYR:H	2	0.09



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,943)	1:A:14:ARG:H	1:A:17:TYR:H	10	0.09
(1,943)	1:A:14:ARG:H	1:A:17:TYR:H	11	0.09
(1,943)	1:A:14:ARG:H	1:A:17:TYR:H	16	0.09
(1,930)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:H	10	0.09
(1,93)	1:A:8:LYS:H	1:A:10:LYS:H	20	0.09
(1,928)	1:A:131:GLU:H	1:A:134:TYR:H	9	0.09
(1,919)	1:A:80:ASP:H	1:A:89:GLU:H	8	0.09
(1,912)	1:A:21:GLN:H	1:A:24:GLY:H	10	0.09
(1,912)	1:A:21:GLN:H	1:A:24:GLY:H	14	0.09
(1,911)	1:A:19:VAL:H	1:A:21:GLN:H	20	0.09
(1,904)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD11	13	0.09
(1,904)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD12	13	0.09
(1,904)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD13	13	0.09
(1,904)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD11	13	0.09
(1,904)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD12	13	0.09
(1,904)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD13	13	0.09
(1,904)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD11	13	0.09
(1,904)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD12	13	0.09
(1,904)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD13	13	0.09
(1,904)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD11	16	0.09
(1,904)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD12	16	0.09
(1,904)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD13	16	0.09
(1,904)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD11	16	0.09
(1,904)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD12	16	0.09
(1,904)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD13	16	0.09
(1,904)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD11	16	0.09
(1,904)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD12	16	0.09
(1,904)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD13	16	0.09
(1,893)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD11	3	0.09
(1,893)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD12	3	0.09
(1,893)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD13	3	0.09
(1,89)	1:A:55:LYS:H	1:A:57:LYS:H	13	0.09
(1,882)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:129:LEU:HD11	4	0.09
(1,882)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:129:LEU:HD12	4	0.09
(1,882)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:129:LEU:HD13	4	0.09
(1,882)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:129:LEU:HD11	4	0.09
(1,882)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:129:LEU:HD12	4	0.09
(1,882)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:129:LEU:HD13	4	0.09
(1,882)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:129:LEU:HD11	4	0.09
(1,882)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:129:LEU:HD12	4	0.09
(1,882)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:129:LEU:HD13	4	0.09
(1,880)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:13:ASN:HD21	15	0.09



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,880)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:13:ASN:HD21	15	0.09
(1,880)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:13:ASN:HD21	15	0.09
(1,864)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:74:GLU:H	11	0.09
(1,864)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:74:GLU:H	11	0.09
(1,864)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:74:GLU:H	11	0.09
(1,855)	1:A:41:LEU:H	1:A:41:LEU:HD21	10	0.09
(1,855)	1:A:41:LEU:H	1:A:41:LEU:HD22	10	0.09
(1,855)	1:A:41:LEU:H	1:A:41:LEU:HD23	10	0.09
(1,837)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:H	19	0.09
(1,837)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:H	19	0.09
(1,837)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:H	19	0.09
(1,834)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:124:VAL:HG21	11	0.09
(1,834)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:124:VAL:HG22	11	0.09
(1,834)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:124:VAL:HG23	11	0.09
(1,834)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:HG21	11	0.09
(1,834)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:HG22	11	0.09
(1,834)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:HG23	11	0.09
(1,834)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:HG21	11	0.09
(1,834)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:HG22	11	0.09
(1,834)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:HG23	11	0.09
(1,83)	1:A:9:ILE:H	1:A:12:LEU:H	9	0.09
(1,821)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:45:ILE:HD11	3	0.09
(1,821)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:45:ILE:HD12	3	0.09
(1,821)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:45:ILE:HD13	3	0.09
(1,821)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:45:ILE:HD11	3	0.09
(1,821)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:45:ILE:HD12	3	0.09
(1,821)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:45:ILE:HD13	3	0.09
(1,821)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:45:ILE:HD11	3	0.09
(1,821)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:45:ILE:HD12	3	0.09
(1,821)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:45:ILE:HD13	3	0.09
(1,817)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:20:THR:H	12	0.09
(1,817)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:20:THR:H	12	0.09
(1,817)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:20:THR:H	12	0.09
(1,784)	1:A:46:VAL:H	1:A:48:GLY:H	11	0.09
(1,777)	1:A:16:GLN:H	1:A:19:VAL:H	15	0.09
(1,776)	1:A:17:TYR:H	1:A:19:VAL:H	3	0.09
(1,764)	1:A:88:THR:H	1:A:102:VAL:H	19	0.09
(1,760)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:H	18	0.09
(1,760)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:H	20	0.09
(1,751)	1:A:105:ASP:H	1:A:113:ARG:H	18	0.09
(1,75)	1:A:29:PHE:H	1:A:30:GLN:H	11	0.09
1 \ / / /				



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,744)	1:A:20:THR:H	1:A:23:ASN:H	18	0.09
(1,738)	1:A:8:LYS:H	1:A:10:LYS:H	20	0.09
(1,734)	1:A:55:LYS:H	1:A:57:LYS:H	13	0.09
(1,728)	1:A:9:ILE:H	1:A:12:LEU:H	9	0.09
(1,720)	1:A:29:PHE:H	1:A:30:GLN:H	11	0.09
(1,710)	1:A:118:SER:HG	1:A:119:ALA:H	2	0.09
(1,708)	1:A:54:SER:HG	1:A:57:LYS:H	12	0.09
(1,705)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD11	6	0.09
(1,705)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD12	6	0.09
(1,705)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD13	6	0.09
(1,704)	1:A:132:GLU:H	1:A:138:LEU:HD11	18	0.09
(1,704)	1:A:132:GLU:H	1:A:138:LEU:HD12	18	0.09
(1,704)	1:A:132:GLU:H	1:A:138:LEU:HD13	18	0.09
(1,698)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD21	20	0.09
(1,698)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD22	20	0.09
(1,698)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD23	20	0.09
(1,693)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:88:THR:H	18	0.09
(1,693)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:88:THR:H	18	0.09
(1,693)	1:A:79:LEU:HD13	1:A:88:THR:H	18	0.09
(1,692)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:115:CYS:H	6	0.09
(1,692)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:115:CYS:H	6	0.09
(1,692)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:115:CYS:H	6	0.09
(1,690)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD11	6	0.09
(1,690)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD12	6	0.09
(1,690)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD13	6	0.09
(1,690)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD11	9	0.09
(1,690)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD12	9	0.09
(1,690)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD13	9	0.09
(1,690)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD11	13	0.09
(1,690)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD12	13	0.09
(1,690)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD13	13	0.09
(1,689)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:48:GLY:H	17	0.09
(1,689)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:48:GLY:H	17	0.09
(1,689)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:48:GLY:H	17	0.09
(1,686)	1:A:45:ILE:H	1:A:46:VAL:HG21	16	0.09
(1,686)	1:A:45:ILE:H	1:A:46:VAL:HG22	16	0.09
(1,686)	1:A:45:ILE:H	1:A:46:VAL:HG23	16	0.09
(1,682)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:13:ASN:HD21	2	0.09
(1,682)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:13:ASN:HD21	2	0.09
(1,682)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:13:ASN:HD21	2	0.09
(1,670)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:123:PHE:H	7	0.09
1 (-,0.0)	111111011111111111111111111111111111111	_		Į.



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,670)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:123:PHE:H	7	0.09
(1,664)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:127:HIS:H	9	0.09
(1,664)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:127:HIS:H	9	0.09
(1,664)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:127:HIS:H	9	0.09
(1,664)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:127:HIS:H	16	0.09
(1,664)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:127:HIS:H	16	0.09
(1,664)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:127:HIS:H	16	0.09
(1,662)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD21	17	0.09
(1,662)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD22	17	0.09
(1,662)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD23	17	0.09
(1,659)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD21	9	0.09
(1,659)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD22	9	0.09
(1,659)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD23	9	0.09
(1,659)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD21	11	0.09
(1,659)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD22	11	0.09
(1,659)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD23	11	0.09
(1,65)	1:A:118:SER:HG	1:A:119:ALA:H	2	0.09
(1,649)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:124:VAL:H	11	0.09
(1,649)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:H	11	0.09
(1,649)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:H	11	0.09
(1,649)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:124:VAL:H	17	0.09
(1,649)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:H	17	0.09
(1,649)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:H	17	0.09
(1,649)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:124:VAL:H	19	0.09
(1,649)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:H	19	0.09
(1,649)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:H	19	0.09
(1,63)	1:A:54:SER:HG	1:A:57:LYS:H	12	0.09
(1,625)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:140:LEU:HD11	12	0.09
(1,625)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:140:LEU:HD12	12	0.09
(1,625)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:140:LEU:HD13	12	0.09
(1,625)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:140:LEU:HD11	12	0.09
(1,625)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:140:LEU:HD12	12	0.09
(1,625)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:140:LEU:HD13	12	0.09
(1,625)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:140:LEU:HD11	12	0.09
(1,625)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:140:LEU:HD12	12	0.09
(1,625)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:140:LEU:HD13	12	0.09
(1,619)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:H	5	0.09
(1,619)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:H	5	0.09
(1,619)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:H	5	0.09
(1,619)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:H	14	0.09
(1,619)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:H	14	0.09
(1,619)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:H	14	0.09



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,613)	1:A:115:CYS:H	1:A:101:HIS:H	9	0.09
(1,612)	1:A:102:VAL:H	1:A:88:THR:H	6	0.09
(1,612)	1:A:102:VAL:H	1:A:88:THR:H	7	0.09
(1,60)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD11	6	0.09
(1,60)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD12	6	0.09
(1,60)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD13	6	0.09
(1,592)	1:A:22:ASN:H	1:A:22:ASN:HD21	5	0.09
(1,59)	1:A:132:GLU:H	1:A:138:LEU:HD11	18	0.09
(1,59)	1:A:132:GLU:H	1:A:138:LEU:HD12	18	0.09
(1,59)	1:A:132:GLU:H	1:A:138:LEU:HD13	18	0.09
(1,571)	1:A:140:LEU:HD11	1:A:141:PHE:H	18	0.09
(1,571)	1:A:140:LEU:HD12	1:A:141:PHE:H	18	0.09
(1,571)	1:A:140:LEU:HD13	1:A:141:PHE:H	18	0.09
(1,565)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:H	16	0.09
(1,565)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:H	16	0.09
(1,565)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:H	16	0.09
(1,565)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:H	19	0.09
(1,565)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:H	19	0.09
(1,565)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:H	19	0.09
(1,564)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:137:TYR:H	10	0.09
(1,564)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:137:TYR:H	10	0.09
(1,564)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:137:TYR:H	10	0.09
(1,564)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:137:TYR:H	16	0.09
(1,564)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:137:TYR:H	16	0.09
(1,564)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:137:TYR:H	16	0.09
(1,562)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD21	18	0.09
(1,562)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD22	18	0.09
(1,562)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD23	18	0.09
(1,562)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD21	19	0.09
(1,562)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD22	19	0.09
(1,562)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD23	19	0.09
(1,550)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG21	16	0.09
(1,550)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG22	16	0.09
(1,550)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG23	16	0.09
(1,549)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD21	6	0.09
(1,549)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD22	6	0.09
(1,549)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD23	6	0.09
(1,549)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD21	20	0.09
(1,549)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD22	20	0.09
(1,549)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD23	20	0.09
(1,542)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD21	1	0.09
(1,542)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD22	1	0.09



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

(1,542) (1,542) (1,542) (1,542)	1:A:117:ASN:H 1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD23	1	0.00
(1,542)	1:A:117:ASN:H		1	0.09
( ' /		1:A:121:LEU:HD21	10	0.09
(1.542)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD22	10	0.09
(1,044)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD23	10	0.09
(1,534)	1:A:101:HIS:H	1:A:102:VAL:HG11	8	0.09
(1,534)	1:A:101:HIS:H	1:A:102:VAL:HG12	8	0.09
(1,534)	1:A:101:HIS:H	1:A:102:VAL:HG13	8	0.09
(1,53)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD21	20	0.09
(1,53)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD22	20	0.09
(1,53)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD23	20	0.09
(1,518)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD11	19	0.09
(1,518)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD12	19	0.09
(1,518)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD13	19	0.09
(1,517)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:HG21	18	0.09
(1,517)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:HG22	18	0.09
(1,517)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:HG23	18	0.09
(1,512)	1:A:79:LEU:HD21	1:A:87:ARG:H	4	0.09
(1,512)	1:A:79:LEU:HD22	1:A:87:ARG:H	4	0.09
(1,512)	1:A:79:LEU:HD23	1:A:87:ARG:H	4	0.09
(1,512)	1:A:79:LEU:HD21	1:A:87:ARG:H	7	0.09
(1,512)	1:A:79:LEU:HD22	1:A:87:ARG:H	7	0.09
(1,512)	1:A:79:LEU:HD23	1:A:87:ARG:H	7	0.09
(1,505)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:76:GLU:H	7	0.09
(1,505)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:76:GLU:H	7	0.09
(1,505)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:76:GLU:H	7	0.09
(1,505)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:76:GLU:H	13	0.09
(1,505)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:76:GLU:H	13	0.09
(1,505)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:76:GLU:H	13	0.09
(1,501)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG21	13	0.09
(1,501)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG22	13	0.09
(1,501)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG23	13	0.09
(1,501)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG21	16	0.09
(1,501)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG22	16	0.09
(1,501)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG23	16	0.09
(1,499)	1:A:71:ILE:H	1:A:71:ILE:HD11	12	0.09
(1,499)	1:A:71:ILE:H	1:A:71:ILE:HD12	12	0.09
(1,499)	1:A:71:ILE:H	1:A:71:ILE:HD13	12	0.09
(1,48)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:88:THR:H	18	0.09
(1,48)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:88:THR:H	18	0.09
(1,48)	1:A:79:LEU:HD13	1:A:88:THR:H	18	0.09
(1,472)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:42:TYR:H	7	0.09
(1,472)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:42:TYR:H	7	0.09



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,472)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:42:TYR:H	7	0.09
(1,470)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:24:GLY:H	7	0.09
(1,470)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:24:GLY:H	7	0.09
(1,470)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:24:GLY:H	7	0.09
(1,47)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:115:CYS:H	6	0.09
(1,47)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:115:CYS:H	6	0.09
(1,47)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:115:CYS:H	6	0.09
(1,468)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:23:ASN:H	18	0.09
(1,468)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:23:ASN:H	18	0.09
(1,468)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:23:ASN:H	18	0.09
(1,462)	1:A:45:ILE:HD11	1:A:46:VAL:H	16	0.09
(1,462)	1:A:45:ILE:HD12	1:A:46:VAL:H	16	0.09
(1,462)	1:A:45:ILE:HD13	1:A:46:VAL:H	16	0.09
(1,458)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:10:LYS:H	9	0.09
(1,458)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:10:LYS:H	9	0.09
(1,458)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:10:LYS:H	9	0.09
(1,453)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG21	14	0.09
(1,453)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG22	14	0.09
(1,453)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG23	14	0.09
(1,453)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG21	15	0.09
(1,453)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG22	15	0.09
(1,453)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG23	15	0.09
(1,453)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG21	19	0.09
(1,453)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG22	19	0.09
(1,453)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG23	19	0.09
(1,451)	1:A:75:VAL:HG11	1:A:91:ARG:H	1	0.09
(1,451)	1:A:75:VAL:HG12	1:A:91:ARG:H	1	0.09
(1,451)	1:A:75:VAL:HG13	1:A:91:ARG:H	1	0.09
(1,451)	1:A:75:VAL:HG11	1:A:91:ARG:H	9	0.09
(1,451)	1:A:75:VAL:HG12	1:A:91:ARG:H	9	0.09
(1,451)	1:A:75:VAL:HG13	1:A:91:ARG:H	9	0.09
(1,451)	1:A:75:VAL:HG11	1:A:91:ARG:H	14	0.09
(1,451)	1:A:75:VAL:HG12	1:A:91:ARG:H	14	0.09
(1,451)	1:A:75:VAL:HG13	1:A:91:ARG:H	14	0.09
(1,451)	1:A:75:VAL:HG11	1:A:91:ARG:H	16	0.09
(1,451)	1:A:75:VAL:HG12	1:A:91:ARG:H	16	0.09
(1,451)	1:A:75:VAL:HG13	1:A:91:ARG:H	16	0.09
(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD11	6	0.09
(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD12	6	0.09
(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD13	6	0.09
(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD11	9	0.09
(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD12	9	0.09



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD13	9	0.09
(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD11	13	0.09
(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD12	13	0.09
(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD13	13	0.09
(1,447)	1:A:41:LEU:H	1:A:124:VAL:HG21	5	0.09
(1,447)	1:A:41:LEU:H	1:A:124:VAL:HG22	5	0.09
(1,447)	1:A:41:LEU:H	1:A:124:VAL:HG23	5	0.09
(1,447)	1:A:41:LEU:H	1:A:124:VAL:HG21	14	0.09
(1,447)	1:A:41:LEU:H	1:A:124:VAL:HG22	14	0.09
(1,447)	1:A:41:LEU:H	1:A:124:VAL:HG23	14	0.09
(1,445)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:113:ARG:H	4	0.09
(1,445)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:113:ARG:H	4	0.09
(1,445)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:113:ARG:H	4	0.09
(1,445)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:113:ARG:H	11	0.09
(1,445)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:113:ARG:H	11	0.09
(1,445)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:113:ARG:H	11	0.09
(1,443)	1:A:90:VAL:HG21	1:A:101:HIS:H	13	0.09
(1,443)	1:A:90:VAL:HG22	1:A:101:HIS:H	13	0.09
(1,443)	1:A:90:VAL:HG23	1:A:101:HIS:H	13	0.09
(1,440)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:100:GLY:H	17	0.09
(1,440)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:100:GLY:H	17	0.09
(1,440)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:100:GLY:H	17	0.09
(1,440)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:100:GLY:H	19	0.09
(1,440)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:100:GLY:H	19	0.09
(1,440)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:100:GLY:H	19	0.09
(1,44)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:48:GLY:H	17	0.09
(1,44)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:48:GLY:H	17	0.09
(1,44)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:48:GLY:H	17	0.09
(1,435)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:26:GLU:H	1	0.09
(1,435)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:26:GLU:H	1	0.09
(1,435)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:26:GLU:H	1	0.09
(1,435)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:26:GLU:H	13	0.09
(1,435)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:26:GLU:H	13	0.09
(1,435)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:26:GLU:H	13	0.09
(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD21	16	0.09
(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD22	16	0.09
(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD23	16	0.09
(1,416)	1:A:86:ILE:H	1:A:86:ILE:HD11	5	0.09
(1,416)	1:A:86:ILE:H	1:A:86:ILE:HD12	5	0.09
(1,416)	1:A:86:ILE:H	1:A:86:ILE:HD13	5	0.09
(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD21	9	0.09
(1,110)	1.71.10.1110.11	1.11.10.1111111111111111111111111111111		0.00



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD23	9	0.09
(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD21	15	0.09
(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD22	15	0.09
(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD23	15	0.09
(1,41)	1:A:45:ILE:H	1:A:46:VAL:HG21	16	0.09
(1,41)	1:A:45:ILE:H	1:A:46:VAL:HG22	16	0.09
(1,41)	1:A:45:ILE:H	1:A:46:VAL:HG23	16	0.09
(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD11	14	0.09
(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD12	14	0.09
(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD13	14	0.09
(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD11	14	0.09
(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD12	14	0.09
(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD13	14	0.09
(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD11	14	0.09
(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD12	14	0.09
(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD13	14	0.09
(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD11	19	0.09
(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD12	19	0.09
(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD13	19	0.09
(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD11	19	0.09
(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD12	19	0.09
(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD13	19	0.09
(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD11	19	0.09
(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD12	19	0.09
(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD13	19	0.09
(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD11	20	0.09
(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD12	20	0.09
(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD13	20	0.09
(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD11	20	0.09
(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD12	20	0.09
(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD13	20	0.09
(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD11	20	0.09
(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD12	20	0.09
(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD13	20	0.09
(1,4)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:124:VAL:H	11	0.09
(1,4)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:H	11	0.09
(1,4)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:H	11	0.09
(1,4)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:124:VAL:H	17	0.09
(1,4)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:H	17	0.09
(1,4)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:H	17	0.09
(1,4)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:124:VAL:H	19	0.09
(1,4)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:H	19	0.09



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,4)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:H	19	0.09
(1,399)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:129:LEU:HD21	11	0.09
(1,399)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:129:LEU:HD22	11	0.09
(1,399)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:129:LEU:HD23	11	0.09
(1,399)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:129:LEU:HD21	11	0.09
(1,399)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:129:LEU:HD22	11	0.09
(1,399)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:129:LEU:HD23	11	0.09
(1,399)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:129:LEU:HD21	11	0.09
(1,399)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:129:LEU:HD22	11	0.09
(1,399)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:129:LEU:HD23	11	0.09
(1,375)	1:A:131:GLU:H	1:A:133:GLY:H	5	0.09
(1,374)	1:A:132:GLU:H	1:A:134:TYR:H	1	0.09
(1,37)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:13:ASN:HD21	2	0.09
(1,37)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:13:ASN:HD21	2	0.09
(1,37)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:13:ASN:HD21	2	0.09
(1,364)	1:A:43:VAL:H	1:A:124:VAL:H	15	0.09
(1,350)	1:A:108:GLY:H	1:A:111:GLY:H	15	0.09
(1,336)	1:A:90:VAL:H	1:A:101:HIS:H	16	0.09
(1,332)	1:A:85:MET:H	1:A:86:ILE:H	6	0.09
(1,329)	1:A:79:LEU:H	1:A:89:GLU:H	8	0.09
(1,322)	1:A:54:SER:H	1:A:57:LYS:H	13	0.09
(1,312)	1:A:41:LEU:H	1:A:124:VAL:H	13	0.09
(1,303)	1:A:18:GLU:H	1:A:20:THR:H	7	0.09
(1,298)	1:A:14:ARG:H	1:A:17:TYR:H	2	0.09
(1,298)	1:A:14:ARG:H	1:A:17:TYR:H	10	0.09
(1,298)	1:A:14:ARG:H	1:A:17:TYR:H	11	0.09
(1,298)	1:A:14:ARG:H	1:A:17:TYR:H	16	0.09
(1,285)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:H	10	0.09
(1,283)	1:A:131:GLU:H	1:A:134:TYR:H	9	0.09
(1,274)	1:A:80:ASP:H	1:A:89:GLU:H	8	0.09
(1,267)	1:A:21:GLN:H	1:A:24:GLY:H	10	0.09
(1,267)	1:A:21:GLN:H	1:A:24:GLY:H	14	0.09
(1,266)	1:A:19:VAL:H	1:A:21:GLN:H	20	0.09
(1,259)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD11	13	0.09
(1,259)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD12	13	0.09
(1,259)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD13	13	0.09
(1,259)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD11	13	0.09
(1,259)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD12	13	0.09
(1,259)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD13	13	0.09
(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD11	13	0.09
(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD12	13	0.09
(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD13	13	0.09



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,259)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD11	16	0.09
(1,259)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD12	16	0.09
(1,259)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD13	16	0.09
(1,259)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD11	16	0.09
(1,259)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD12	16	0.09
(1,259)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD13	16	0.09
(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD11	16	0.09
(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD12	16	0.09
(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD13	16	0.09
(1,25)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:123:PHE:H	7	0.09
(1,25)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:123:PHE:H	7	0.09
(1,25)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:123:PHE:H	7	0.09
(1,248)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD11	3	0.09
(1,248)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD12	3	0.09
(1,248)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD13	3	0.09
(1,237)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:129:LEU:HD11	4	0.09
(1,237)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:129:LEU:HD12	4	0.09
(1,237)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:129:LEU:HD13	4	0.09
(1,237)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:129:LEU:HD11	4	0.09
(1,237)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:129:LEU:HD12	4	0.09
(1,237)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:129:LEU:HD13	4	0.09
(1,237)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:129:LEU:HD11	4	0.09
(1,237)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:129:LEU:HD12	4	0.09
(1,237)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:129:LEU:HD13	4	0.09
(1,235)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:13:ASN:HD21	15	0.09
(1,235)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:13:ASN:HD21	15	0.09
(1,235)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:13:ASN:HD21	15	0.09
(1,219)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:74:GLU:H	11	0.09
(1,219)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:74:GLU:H	11	0.09
(1,219)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:74:GLU:H	11	0.09
(1,210)	1:A:41:LEU:H	1:A:41:LEU:HD21	10	0.09
(1,210)	1:A:41:LEU:H	1:A:41:LEU:HD22	10	0.09
(1,210)	1:A:41:LEU:H	1:A:41:LEU:HD23	10	0.09
(1,192)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:H	19	0.09
(1,192)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:H	19	0.09
(1,192)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:H	19	0.09
(1,19)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:127:HIS:H	9	0.09
(1,19)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:127:HIS:H	9	0.09
(1,19)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:127:HIS:H	9	0.09
(1,19)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:127:HIS:H	16	0.09
(1,19)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:127:HIS:H	16	0.09
(1,19)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:127:HIS:H	16	0.09



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

Key	$rac{a \ from \ previous \ page}{\mathbf{Atom-1}}$	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,189)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:124:VAL:HG21	11	0.09
(1,189)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:124:VAL:HG22	11	0.09
(1,189)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:124:VAL:HG23	11	0.09
(1,189)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:HG21	11	0.09
(1,189)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:HG22	11	0.09
(1,189)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:HG23	11	0.09
(1,189)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:HG21	11	0.09
(1,189)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:HG22	11	0.09
(1,189)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:HG23	11	0.09
(1,176)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:45:ILE:HD11	3	0.09
(1,176)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:45:ILE:HD12	3	0.09
(1,176)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:45:ILE:HD13	3	0.09
(1,176)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:45:ILE:HD11	3	0.09
(1,176)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:45:ILE:HD12	3	0.09
(1,176)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:45:ILE:HD13	3	0.09
(1,176)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:45:ILE:HD11	3	0.09
(1,176)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:45:ILE:HD12	3	0.09
(1,176)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:45:ILE:HD13	3	0.09
(1,172)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:20:THR:H	12	0.09
(1,172)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:20:THR:H	12	0.09
(1,172)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:20:THR:H	12	0.09
(1,17)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD21	17	0.09
(1,17)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD22	17	0.09
(1,17)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD23	17	0.09
(1,14)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD21	9	0.09
(1,14)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD22	9	0.09
(1,14)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD23	9	0.09
(1,14)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD21	11	0.09
(1,14)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD22	11	0.09
(1,14)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD23	11	0.09
(1,139)	1:A:46:VAL:H	1:A:48:GLY:H	11	0.09
(1,132)	1:A:16:GLN:H	1:A:19:VAL:H	15	0.09
(1,131)	1:A:17:TYR:H	1:A:19:VAL:H	3	0.09
(1,1270)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:140:LEU:HD11	12	0.09
(1,1270)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:140:LEU:HD12	12	0.09
(1,1270)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:140:LEU:HD13	12	0.09
(1,1270)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:140:LEU:HD11	12	0.09
(1,1270)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:140:LEU:HD12	12	0.09
(1,1270)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:140:LEU:HD13	12	0.09
(1,1270)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:140:LEU:HD11	12	0.09
(1,1270)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:140:LEU:HD12	12	0.09
(1,1270)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:140:LEU:HD13	12	0.09



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1264)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:H	5	0.09
(1,1264)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:H	5	0.09
(1,1264)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:H	5	0.09
(1,1264)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:H	14	0.09
(1,1264)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:H	14	0.09
(1,1264)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:H	14	0.09
(1,1258)	1:A:115:CYS:H	1:A:101:HIS:H	9	0.09
(1,1257)	1:A:102:VAL:H	1:A:88:THR:H	6	0.09
(1,1257)	1:A:102:VAL:H	1:A:88:THR:H	7	0.09
(1,1237)	1:A:22:ASN:H	1:A:22:ASN:HD21	5	0.09
(1,1216)	1:A:140:LEU:HD11	1:A:141:PHE:H	18	0.09
(1,1216)	1:A:140:LEU:HD12	1:A:141:PHE:H	18	0.09
(1,1216)	1:A:140:LEU:HD13	1:A:141:PHE:H	18	0.09
(1,1210)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:H	16	0.09
(1,1210)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:H	16	0.09
(1,1210)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:H	16	0.09
(1,1210)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:H	19	0.09
(1,1210)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:H	19	0.09
(1,1210)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:H	19	0.09
(1,1209)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:137:TYR:H	10	0.09
(1,1209)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:137:TYR:H	10	0.09
(1,1209)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:137:TYR:H	10	0.09
(1,1209)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:137:TYR:H	16	0.09
(1,1209)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:137:TYR:H	16	0.09
(1,1209)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:137:TYR:H	16	0.09
(1,1207)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD21	18	0.09
(1,1207)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD22	18	0.09
(1,1207)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD23	18	0.09
(1,1207)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD21	19	0.09
(1,1207)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD22	19	0.09
(1,1207)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD23	19	0.09
(1,1195)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG21	16	0.09
(1,1195)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG22	16	0.09
(1,1195)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG23	16	0.09
(1,1194)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD21	6	0.09
(1,1194)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD22	6	0.09
(1,1194)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD23	6	0.09
(1,1194)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD21	20	0.09
(1,1194)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD22	20	0.09
(1,1194)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD23	20	0.09
(1,119)	1:A:88:THR:H	1:A:102:VAL:H	19	0.09
(1,1187)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD21	1	0.09



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1187)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD22	1	0.09
(1,1187)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD23	1	0.09
(1,1187)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD21	10	0.09
(1,1187)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD22	10	0.09
(1,1187)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD23	10	0.09
(1,1179)	1:A:101:HIS:H	1:A:102:VAL:HG11	8	0.09
(1,1179)	1:A:101:HIS:H	1:A:102:VAL:HG12	8	0.09
(1,1179)	1:A:101:HIS:H	1:A:102:VAL:HG13	8	0.09
(1,1163)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD11	19	0.09
(1,1163)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD12	19	0.09
(1,1163)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD13	19	0.09
(1,1162)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:HG21	18	0.09
(1,1162)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:HG22	18	0.09
(1,1162)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:HG23	18	0.09
(1,1157)	1:A:79:LEU:HD21	1:A:87:ARG:H	4	0.09
(1,1157)	1:A:79:LEU:HD22	1:A:87:ARG:H	4	0.09
(1,1157)	1:A:79:LEU:HD23	1:A:87:ARG:H	4	0.09
(1,1157)	1:A:79:LEU:HD21	1:A:87:ARG:H	7	0.09
(1,1157)	1:A:79:LEU:HD22	1:A:87:ARG:H	7	0.09
(1,1157)	1:A:79:LEU:HD23	1:A:87:ARG:H	7	0.09
(1,1150)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:76:GLU:H	7	0.09
(1,1150)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:76:GLU:H	7	0.09
(1,1150)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:76:GLU:H	7	0.09
(1,1150)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:76:GLU:H	13	0.09
(1,1150)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:76:GLU:H	13	0.09
(1,1150)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:76:GLU:H	13	0.09
(1,115)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:H	18	0.09
(1,115)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:H	20	0.09
(1,1146)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG21	13	0.09
(1,1146)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG22	13	0.09
(1,1146)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG23	13	0.09
(1,1146)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG21	16	0.09
(1,1146)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG22	16	0.09
(1,1146)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG23	16	0.09
(1,1144)	1:A:71:ILE:H	1:A:71:ILE:HD11	12	0.09
(1,1144)	1:A:71:ILE:H	1:A:71:ILE:HD12	12	0.09
(1,1144)	1:A:71:ILE:H	1:A:71:ILE:HD13	12	0.09
(1,1117)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:42:TYR:H	7	0.09
(1,1117)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:42:TYR:H	7	0.09
(1,1117)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:42:TYR:H	7	0.09
(1,1115)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:24:GLY:H	7	0.09
(1,1115)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:24:GLY:H	7	0.09



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1115)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:24:GLY:H	7	0.09
(1,1113)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:23:ASN:H	18	0.09
(1,1113)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:23:ASN:H	18	0.09
(1,1113)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:23:ASN:H	18	0.09
(1,1107)	1:A:45:ILE:HD11	1:A:46:VAL:H	16	0.09
(1,1107)	1:A:45:ILE:HD12	1:A:46:VAL:H	16	0.09
(1,1107)	1:A:45:ILE:HD13	1:A:46:VAL:H	16	0.09
(1,1103)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:10:LYS:H	9	0.09
(1,1103)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:10:LYS:H	9	0.09
(1,1103)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:10:LYS:H	9	0.09
(1,1098)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG21	14	0.09
(1,1098)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG22	14	0.09
(1,1098)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG23	14	0.09
(1,1098)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG21	15	0.09
(1,1098)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG22	15	0.09
(1,1098)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG23	15	0.09
(1,1098)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG21	19	0.09
(1,1098)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG22	19	0.09
(1,1098)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG23	19	0.09
(1,1096)	1:A:75:VAL:HG11	1:A:91:ARG:H	1	0.09
(1,1096)	1:A:75:VAL:HG12	1:A:91:ARG:H	1	0.09
(1,1096)	1:A:75:VAL:HG13	1:A:91:ARG:H	1	0.09
(1,1096)	1:A:75:VAL:HG11	1:A:91:ARG:H	9	0.09
(1,1096)	1:A:75:VAL:HG12	1:A:91:ARG:H	9	0.09
(1,1096)	1:A:75:VAL:HG13	1:A:91:ARG:H	9	0.09
(1,1096)	1:A:75:VAL:HG11	1:A:91:ARG:H	14	0.09
(1,1096)	1:A:75:VAL:HG12	1:A:91:ARG:H	14	0.09
(1,1096)	1:A:75:VAL:HG13	1:A:91:ARG:H	14	0.09
(1,1096)	1:A:75:VAL:HG11	1:A:91:ARG:H	16	0.09
(1,1096)	1:A:75:VAL:HG12	1:A:91:ARG:H	16	0.09
(1,1096)	1:A:75:VAL:HG13	1:A:91:ARG:H	16	0.09
(1,1092)	1:A:41:LEU:H	1:A:124:VAL:HG21	5	0.09
(1,1092)	1:A:41:LEU:H	1:A:124:VAL:HG22	5	0.09
(1,1092)	1:A:41:LEU:H	1:A:124:VAL:HG23	5	0.09
(1,1092)	1:A:41:LEU:H	1:A:124:VAL:HG21	14	0.09
(1,1092)	1:A:41:LEU:H	1:A:124:VAL:HG22	14	0.09
(1,1092)	1:A:41:LEU:H	1:A:124:VAL:HG23	14	0.09
(1,1090)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:113:ARG:H	4	0.09
(1,1090)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:113:ARG:H	4	0.09
(1,1090)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:113:ARG:H	4	0.09
(1,1090)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:113:ARG:H	11	0.09
(1,1090)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:113:ARG:H	11	0.09



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1090)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:113:ARG:H	11	0.09
(1,1088)	1:A:90:VAL:HG21	1:A:101:HIS:H	13	0.09
(1,1088)	1:A:90:VAL:HG22	1:A:101:HIS:H	13	0.09
(1,1088)	1:A:90:VAL:HG23	1:A:101:HIS:H	13	0.09
(1,1085)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:100:GLY:H	17	0.09
(1,1085)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:100:GLY:H	17	0.09
(1,1085)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:100:GLY:H	17	0.09
(1,1085)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:100:GLY:H	19	0.09
(1,1085)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:100:GLY:H	19	0.09
(1,1085)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:100:GLY:H	19	0.09
(1,1080)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:26:GLU:H	1	0.09
(1,1080)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:26:GLU:H	1	0.09
(1,1080)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:26:GLU:H	1	0.09
(1,1080)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:26:GLU:H	13	0.09
(1,1080)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:26:GLU:H	13	0.09
(1,1080)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:26:GLU:H	13	0.09
(1,1064)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD21	16	0.09
(1,1064)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD22	16	0.09
(1,1064)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD23	16	0.09
(1,1061)	1:A:86:ILE:H	1:A:86:ILE:HD11	5	0.09
(1,1061)	1:A:86:ILE:H	1:A:86:ILE:HD12	5	0.09
(1,1061)	1:A:86:ILE:H	1:A:86:ILE:HD13	5	0.09
(1,1060)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD21	9	0.09
(1,1060)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD22	9	0.09
(1,1060)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD23	9	0.09
(1,1060)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD21	15	0.09
(1,1060)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD22	15	0.09
(1,1060)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD23	15	0.09
(1,106)	1:A:105:ASP:H	1:A:113:ARG:H	18	0.09
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD11	14	0.09
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD12	14	0.09
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD13	14	0.09
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD11	14	0.09
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD12	14	0.09
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD13	14	0.09
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD11	14	0.09
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD12	14	0.09
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD13	14	0.09
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD11	19	0.09
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD12	19	0.09
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD13	19	0.09
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD11	19	0.09



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD12	19	0.09
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD13	19	0.09
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD11	19	0.09
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD12	19	0.09
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD13	19	0.09
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD11	20	0.09
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD12	20	0.09
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD13	20	0.09
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD11	20	0.09
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD12	20	0.09
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD13	20	0.09
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD11	20	0.09
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD12	20	0.09
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD13	20	0.09
(1,1044)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:129:LEU:HD21	11	0.09
(1,1044)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:129:LEU:HD22	11	0.09
(1,1044)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:129:LEU:HD23	11	0.09
(1,1044)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:129:LEU:HD21	11	0.09
(1,1044)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:129:LEU:HD22	11	0.09
(1,1044)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:129:LEU:HD23	11	0.09
(1,1044)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:129:LEU:HD21	11	0.09
(1,1044)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:129:LEU:HD22	11	0.09
(1,1044)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:129:LEU:HD23	11	0.09
(1,1020)	1:A:131:GLU:H	1:A:133:GLY:H	5	0.09
(1,102)	1:A:52:PHE:H	1:A:71:ILE:H	1	0.09
(1,1019)	1:A:132:GLU:H	1:A:134:TYR:H	1	0.09
(1,1009)	1:A:43:VAL:H	1:A:124:VAL:H	15	0.09
(1,99)	1:A:20:THR:H	1:A:23:ASN:H	12	0.08
(1,974)	1:A:79:LEU:H	1:A:89:GLU:H	7	0.08
(1,973)	1:A:78:LYS:H	1:A:79:LEU:H	3	0.08
(1,972)	1:A:78:LYS:H	1:A:89:GLU:H	4	0.08
(1,972)	1:A:78:LYS:H	1:A:89:GLU:H	18	0.08
(1,963)	1:A:44:ASP:H	1:A:48:GLY:H	18	0.08
(1,953)	1:A:30:GLN:H	1:A:34:TRP:HE1	12	0.08
(1,944)	1:A:15:MET:H	1:A:18:GLU:H	3	0.08
(1,944)	1:A:15:MET:H	1:A:18:GLU:H	18	0.08
(1,926)	1:A:110:ASN:HD22	1:A:112:LEU:H	6	0.08
(1,924)	1:A:26:GLU:H	1:A:64:TRP:HE1	14	0.08
(1,924)	1:A:26:GLU:H	1:A:64:TRP:HE1	17	0.08
(1,919)	1:A:80:ASP:H	1:A:89:GLU:H	10	0.08
(1,919)	1:A:80:ASP:H	1:A:89:GLU:H	20	0.08
(1,912)	1:A:21:GLN:H	1:A:24:GLY:H	9	0.08



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

(1,911)			Model	Violation (Å)
/ :	1:A:19:VAL:H	1:A:21:GLN:H	3	0.08
(1,904)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD11	5	0.08
(1,904)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD12	5	0.08
(1,904)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD13	5	0.08
(1,904)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD11	5	0.08
(1,904)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD12	5	0.08
(1,904)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD13	5	0.08
(1,904)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD11	5	0.08
(1,904)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD12	5	0.08
(1,904)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD13	5	0.08
(1,904)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD11	10	0.08
(1,904)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD12	10	0.08
(1,904)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD13	10	0.08
(1,904)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD11	10	0.08
(1,904)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD12	10	0.08
(1,904)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD13	10	0.08
(1,904)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD11	10	0.08
(1,904)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD12	10	0.08
(1,904)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD13	10	0.08
(1,901)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD11	15	0.08
(1,901)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD12	15	0.08
(1,901)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD13	15	0.08
(1,901)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD11	15	0.08
(1,901)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD12	15	0.08
(1,901)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD13	15	0.08
(1,901)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD11	15	0.08
(1,901)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD12	15	0.08
(1,901)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD13	15	0.08
(1,9)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:138:LEU:H	17	0.08
(1,9)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:138:LEU:H	17	0.08
(1,9)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:138:LEU:H	17	0.08
(1,899)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:46:VAL:HG11	19	0.08
(1,899)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:46:VAL:HG12	19	0.08
(1,899)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:46:VAL:HG13	19	0.08
(1,899)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:46:VAL:HG11	19	0.08
(1,899)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:46:VAL:HG12	19	0.08
(1,899)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:46:VAL:HG13	19	0.08
(1,899)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:46:VAL:HG11	19	0.08
(1,899)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:46:VAL:HG12	19	0.08
(1,899)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:46:VAL:HG13	19	0.08
(1,842)	1:A:13:ASN:HD21	1:A:46:VAL:HG11	13	0.08
(1,842)	1:A:13:ASN:HD21	1:A:46:VAL:HG12	13	0.08



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,842)	1:A:13:ASN:HD21	1:A:46:VAL:HG13	13	0.08
(1,839)	1:A:42:TYR:H	1:A:43:VAL:HG11	13	0.08
(1,839)	1:A:42:TYR:H	1:A:43:VAL:HG12	13	0.08
(1,839)	1:A:42:TYR:H	1:A:43:VAL:HG13	13	0.08
(1,834)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:124:VAL:HG21	6	0.08
(1,834)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:124:VAL:HG22	6	0.08
(1,834)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:124:VAL:HG23	6	0.08
(1,834)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:HG21	6	0.08
(1,834)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:HG22	6	0.08
(1,834)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:HG23	6	0.08
(1,834)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:HG21	6	0.08
(1,834)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:HG22	6	0.08
(1,834)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:HG23	6	0.08
(1,821)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:45:ILE:HD11	6	0.08
(1,821)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:45:ILE:HD12	6	0.08
(1,821)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:45:ILE:HD13	6	0.08
(1,821)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:45:ILE:HD11	6	0.08
(1,821)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:45:ILE:HD12	6	0.08
(1,821)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:45:ILE:HD13	6	0.08
(1,821)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:45:ILE:HD11	6	0.08
(1,821)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:45:ILE:HD12	6	0.08
(1,821)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:45:ILE:HD13	6	0.08
(1,821)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:45:ILE:HD11	8	0.08
(1,821)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:45:ILE:HD12	8	0.08
(1,821)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:45:ILE:HD13	8	0.08
(1,821)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:45:ILE:HD11	8	0.08
(1,821)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:45:ILE:HD12	8	0.08
(1,821)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:45:ILE:HD13	8	0.08
(1,821)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:45:ILE:HD11	8	0.08
(1,821)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:45:ILE:HD12	8	0.08
(1,821)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:45:ILE:HD13	8	0.08
(1,816)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG11	15	0.08
(1,816)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG12	15	0.08
(1,816)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG13	15	0.08
(1,81)	1:A:47:SER:H	1:A:48:GLY:H	4	0.08
(1,808)	1:A:15:MET:H	1:A:17:TYR:H	13	0.08
(1,8)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:42:TYR:H	4	0.08
(1,8)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:42:TYR:H	4	0.08
(1,8)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:42:TYR:H	4	0.08
(1,793)	1:A:44:ASP:H	1:A:122:ARG:H	16	0.08
(1,792)	1:A:130:LYS:H	1:A:134:TYR:H	16	0.08
(1,79)	1:A:45:ILE:H	1:A:47:SER:H	7	0.08



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

(1,79)         1:A:45:ILE:H         1:A:47:SER:H         12         0.08           (1,78)         1:A:126:LYS:H         1:A:129:LEU:H         3         0.08           (1,777)         1:A:16:GLN:H         1:A:19:VAL:H         1         0.08           (1,776)         1:A:17:TYR:H         1:A:19:VAL:H         1         0.08           (1,776)         1:A:21:GLN:H         1:A:23:ASN:H         12         0.08           (1,772)         1:A:21:GLN:H         1:A:23:ASN:H         20         0.08           (1,760)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:H         3         0.08           (1,760)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:H         1         0.08           (1,760)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:H         13         0.08           (1,760)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:H         13         0.08           (1,760)         1:A:89:GLU:H         1:A:13:ASN:H         14         0.08           (1,760)         1:A:89:GLU:H         1:A:13:ASN:H         14         0.08           (1,760)         1:A:29:PHE:H         1:A:3:13:ASN:H         14         0.08           (1,759)         1:A:29:PHE:H         1:A:113:ASR:H         14         0.08 <th>Key</th> <th>Atom-1</th> <th>Atom-2</th> <th>Model</th> <th>Violation (Å)</th>	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,777)         1:A:16:GLN:H         1:A:19:VAL:H         1         0.08           (1,776)         1:A:17:TYR:H         1:A:19:VAL:H         1         0.08           (1,776)         1:A:17:TYR:H         1:A:19:VAL:H         11         0.08           (1,776)         1:A:17:TYR:H         1:A:19:VAL:H         11         0.08           (1,772)         1:A:21:GLN:H         1:A:23:ASN:H         12         0.08           (1,772)         1:A:21:GLN:H         1:A:102:VAL:H         3         0.08           (1,760)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:H         6         0.08           (1,760)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:H         13         0.08           (1,751)         1:A:105:ASP:H         1:A:113:ARG:H         10         0.08           (1,761)         1:A:2:2:PHE:H         1:A:113:ARG:H         10         0.08	(1,79)	1:A:45:ILE:H	1:A:47:SER:H	12	0.08
(1,776)         1:A:17:TYR:H         1:A:19:VAL:H         1         0.08           (1,776)         1:A:17:TYR:H         1:A:19:VAL:H         11         0.08           (1,772)         1:A:21:GLN:H         1:A:23:ASN:H         12         0.08           (1,772)         1:A:21:GLN:H         1:A:23:ASN:H         20         0.08           (1,760)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:H         3         0.08           (1,760)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:H         11         0.08           (1,760)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:H         11         0.08           (1,760)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:H         13         0.08           (1,760)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:H         13         0.08           (1,760)         1:A:3:9:PHE:H         1:A:102:VAL:H         13         0.08           (1,750)         1:A:2:2:PHE:H         1:A:113:ARG:H         10         0.08           (1,751)         1:A:105:ASP:HE:H         1:A:113:ARG:H         10         0.08           (1,741)         1:A:2:D:PHE:H         1:A:113:ARG:H         10         0.08           (1,741)         1:A:45:IEE:H         1:A:47:SER:H         9         0.08 <td>(1,78)</td> <td>1:A:126:LYS:H</td> <td>1:A:129:LEU:H</td> <td>3</td> <td>0.08</td>	(1,78)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:H	3	0.08
(1,776) 1:A:17:TYR:H 1:A:19:VAL:H 11 0.08 (1,772) 1:A:21:GLN:H 1:A:23:ASN:H 12 0.08 (1,772) 1:A:21:GLN:H 1:A:23:ASN:H 20 0.08 (1,760) 1:A:89:GLU:H 1:A:102:VAL:H 3 0.08 (1,760) 1:A:89:GLU:H 1:A:102:VAL:H 6 0.08 (1,760) 1:A:89:GLU:H 1:A:102:VAL:H 11 0.08 (1,759) 1:A:29:PHE:H 1:A:113:ASN:H 14 0.08 (1,751) 1:A:105:ASP:H 1:A:113:ARG:H 10 0.08 (1,747) 1:A:52:PHE:H 1:A:113:ARG:H 10 0.08 (1,747) 1:A:52:PHE:H 1:A:47:ILE:H 9 0.08 (1,744) 1:A:20:THR:H 1:A:23:ASN:H 12 0.08 (1,726) 1:A:47:SER:H 1:A:48:GLY:H 4 0.08 (1,726) 1:A:47:SER:H 1:A:47:SER:H 7 0.08 (1,724) 1:A:45:ILE:H 1:A:47:SER:H 7 0.08 (1,724) 1:A:45:ILE:H 1:A:47:SER:H 12 0.08 (1,723) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:H 3 0.08 (1,708) 1:A:54:SER:HG 1:A:57:LYS:H 5 0.08 (1,708) 1:A:54:SER:HG 1:A:57:LYS:H 5 0.08 (1,702) 1:A:112:LEU:HD11 1:A:113:ARG:H 17 0.08 (1,702) 1:A:112:LEU:HD11 1:A:113:ARG:H 17 0.08 (1,695) 1:A:112:LEU:HD12 1:A:113:ARG:H 17 0.08 (1,695) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:64:TRP:HE1 2 0.08 (1,692) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:115:CYS:H 10 0.08 (1,692) 1:A:19:VAL:HG11 1:A:115:CYS:H 10 0.08 (1,692) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:115:CYS:H 10 0.08 (1,690) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD11 1:A:115:CYS:H 10 0.08 (1,692) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:140:LEU:HD11 1 1.A:115:CYS:H 10 0.08 (1,692) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:140:LEU:HD11 1 1.A:115:CYS:H 10 0.08 (1,692) 1:A:90:VAL:HG11 1:A:140:LEU:HD11 1 1.A:115:CYS:H 10 0.08 (1,684) 1:A:140:LEU:H 1:A:140:LEU:HD11 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1	(1,777)	1:A:16:GLN:H	1:A:19:VAL:H	1	0.08
(1,772)         1:A:21:GLN:H         1:A:23:ASN:H         12         0.08           (1,772)         1:A:21:GLN:H         1:A:23:ASN:H         20         0.08           (1,760)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:H         3         0.08           (1,760)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:H         6         0.08           (1,760)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:H         11         0.08           (1,760)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:H         13         0.08           (1,760)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:H         13         0.08           (1,760)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:H         13         0.08           (1,760)         1:A:29:PHE:H         1:A:31:ASN:H         14         0.08           (1,759)         1:A:29:PHE:H         1:A:31:ASRG:H         10         0.08           (1,751)         1:A:10:SASP:H         1:A:13:ARG:H         10         0.08           (1,741)         1:A:47:SER:H         1:A:47:SER:H         9         0.08           (1,724)         1:A:45:ILE:H         1:A:47:SER:H         7         0.08           (1,724)         1:A:45:ILE:H         1:A:47:SER:H         12         0.08 </td <td>(1,776)</td> <td>1:A:17:TYR:H</td> <td>1:A:19:VAL:H</td> <td>1</td> <td>0.08</td>	(1,776)	1:A:17:TYR:H	1:A:19:VAL:H	1	0.08
(1,772)         1:A:21:GLN:H         1:A:23:ASN:H         20         0.08           (1,760)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:H         3         0.08           (1,760)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:H         6         0.08           (1,760)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:H         11         0.08           (1,760)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:H         11         0.08           (1,760)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:H         13         0.08           (1,759)         1:A:29:PHE:H         1:A:31:ASN:H         14         0.08           (1,751)         1:A:105:ASP:H         1:A:113:ARG:H         10         0.08           (1,751)         1:A:20:THR:H         1:A:23:ASN:H         12         0.08           (1,747)         1:A:52:PHE:H         1:A:47:SER:H         9         0.08           (1,744)         1:A:420:THR:H         1:A:43:GLY:H         4         0.08           (1,724)         1:A:45:ILE:H         1:A:47:SER:H         7         0.08           (1,724)         1:A:45:ILE:H         1:A:47:SER:H         12         0.08           (1,702)         1:A:13:CHS:HB:A         13         0.08           (1,	(1,776)	1:A:17:TYR:H	1:A:19:VAL:H	11	0.08
(1,760)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:H         3         0.08           (1,760)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:H         6         0.08           (1,760)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:H         11         0.08           (1,760)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:H         13         0.08           (1,750)         1:A:29:PHE:H         1:A:31:ASN:H         14         0.08           (1,751)         1:A:105:ASP:H         1:A:113:ARG:H         10         0.08           (1,751)         1:A:52:PHE:H         1:A:71:ILE:H         9         0.08           (1,747)         1:A:52:PHE:H         1:A:71:ILE:H         9         0.08           (1,744)         1:A:20:THR:H         1:A:71:ILE:H         9         0.08           (1,744)         1:A:47:SER:H         1:A:43:ASSN:H         12         0.08           (1,724)         1:A:45:ILE:H         1:A:47:SER:H         7         0.08           (1,724)         1:A:45:ILE:H         1:A:47:SER:H         12         0.08           (1,723)         1:A:12:EE:H         1:A:12:D:U:H         3         0.08           (1,708)         1:A:54:SER:HG         1:A:57:LYS:H         5         0.08	(1,772)	1:A:21:GLN:H	1:A:23:ASN:H	12	0.08
(1,760)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:H         6         0.08           (1,760)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:H         11         0.08           (1,760)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:H         13         0.08           (1,750)         1:A:29:PHE:H         1:A:31:ASN:H         14         0.08           (1,751)         1:A:105:ASP:H         1:A:113:ARG:H         10         0.08           (1,771)         1:A:52:PHE:H         1:A:113:ARG:H         10         0.08           (1,747)         1:A:52:PHE:H         1:A:71:ILE:H         9         0.08           (1,744)         1:A:20:THR:H         1:A:23:ASN:H         12         0.08           (1,726)         1:A:47:SER:H         1:A:48:GLY:H         4         0.08           (1,724)         1:A:45:ILE:H         1:A:47:SER:H         7         0.08           (1,724)         1:A:45:ILE:H         1:A:47:SER:H         12         0.08           (1,723)         1:A:12:EE:H         1:A:47:SER:H         12         0.08           (1,708)         1:A:54:SER:HG         1:A:57:LVS:H         5         0.08           (1,702)         1:A:112:LEU:HD11         1:A:113:ARG:H         17         0.08	(1,772)	1:A:21:GLN:H	1:A:23:ASN:H	20	0.08
(1,760)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:H         11         0.08           (1,760)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:H         13         0.08           (1,759)         1:A:29:PHE:H         1:A:31:ASN:H         14         0.08           (1,751)         1:A:105:ASP:H         1:A:113:ARG:H         10         0.08           (1,747)         1:A:52:PHE:H         1:A:71:ILE:H         9         0.08           (1,744)         1:A:45:CSPHE:H         1:A:43:ASSN:H         12         0.08           (1,726)         1:A:47:SER:H         1:A:48:GLY:H         4         0.08           (1,724)         1:A:45:ILE:H         1:A:47:SER:H         7         0.08           (1,724)         1:A:45:ILE:H         1:A:47:SER:H         7         0.08           (1,724)         1:A:45:ILE:H         1:A:47:SER:H         12         0.08           (1,724)         1:A:45:ILE:H         1:A:47:SER:H         7         0.08           (1,724)         1:A:45:ILE:H         1:A:47:SER:H         7         0.08           (1,723)         1:A:13:ASSHG         1:A:47:DI:A         0.08           (1,708)         1:A:54:SER:HG         1:A:57:LYS:H         5         0.08 <th< td=""><td>(1,760)</td><td>1:A:89:GLU:H</td><td>1:A:102:VAL:H</td><td>3</td><td>0.08</td></th<>	(1,760)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:H	3	0.08
(1,760)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:H         13         0.08           (1,759)         1:A:29:PHE:H         1:A:31:ASN:H         14         0.08           (1,751)         1:A:105:ASP:H         1:A:113:ARG:H         10         0.08           (1,747)         1:A:52:PHE:H         1:A:71:ILE:H         9         0.08           (1,744)         1:A:52:PHE:H         1:A:71:ILE:H         9         0.08           (1,724)         1:A:47:SER:H         1:A:48:GLY:H         4         0.08           (1,724)         1:A:45:ILE:H         1:A:47:SER:H         7         0.08           (1,724)         1:A:45:ILE:H         1:A:47:SER:H         7         0.08           (1,724)         1:A:45:ILE:H         1:A:47:SER:H         7         0.08           (1,724)         1:A:45:ILE:H         1:A:47:SER:H         12         0.08           (1,723)         1:A:12:ELY:H         1:A:129:LEU:H         3         0.08           (1,708)         1:A:54:SER:HG         1:A:57:LYS:H         5         0.08           (1,702)         1:A:112:LEU:HD111         1:A:113:ARG:H         17         0.08           (1,702)         1:A:119:VAL:HG21         1:A:64:TRP:HE1         2         0.08	(1,760)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:H	6	0.08
(1,759)         1:A:29:PHE:H         1:A:31:ASN:H         14         0.08           (1,751)         1:A:105:ASP:H         1:A:113:ARG:H         10         0.08           (1,747)         1:A:52:PHE:H         1:A:71:ILE:H         9         0.08           (1,744)         1:A:52:PHE:H         1:A:71:ILE:H         9         0.08           (1,724)         1:A:47:SER:H         1:A:48:GLY:H         4         0.08           (1,724)         1:A:45:ILE:H         1:A:47:SER:H         7         0.08           (1,724)         1:A:45:ILE:H         1:A:47:SER:H         7         0.08           (1,724)         1:A:45:ILE:H         1:A:47:SER:H         12         0.08           (1,724)         1:A:45:ILE:H         1:A:47:SER:H         7         0.08           (1,723)         1:A:45:ILE:H         1:A:47:SER:H         12         0.08           (1,708)         1:A:54:SER:HG         1:A:57:LYS:H         5         0.08           (1,708)         1:A:112:LEU:HD11         1:A:113:ARG:H         17         0.08           (1,702)         1:A:112:LEU:HD12         1:A:113:ARG:H         17         0.08           (1,702)         1:A:19:VAL:HG21         1:A:64:TRP:HE1         2         0.08	(1,760)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:H	11	0.08
(1,751)         1:A:105:ASP:H         1:A:113:ARG:H         10         0.08           (1,747)         1:A:52:PHE:H         1:A:71:ILE:H         9         0.08           (1,744)         1:A:20:THR:H         1:A:43:ASN:H         12         0.08           (1,726)         1:A:47:SER:H         1:A:48:GLY:H         4         0.08           (1,724)         1:A:45:ILE:H         1:A:47:SER:H         7         0.08           (1,724)         1:A:45:ILE:H         1:A:47:SER:H         12         0.08           (1,724)         1:A:45:ILE:H         1:A:47:SER:H         12         0.08           (1,723)         1:A:126:LYS:H         1:A:129:LEU:H         3         0.08           (1,708)         1:A:54:SER:HG         1:A:57:LYS:H         5         0.08           (1,708)         1:A:54:SER:HG         1:A:57:LYS:H         13         0.08           (1,702)         1:A:1112:LEU:HD11         1:A:113:ARG:H         17         0.08           (1,702)         1:A:112:LEU:HD12         1:A:113:ARG:H         17         0.08           (1,695)         1:A:19:VAL:HG21         1:A:64:TRP:HE1         2         0.08           (1,695)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:64:TRP:HE1         2	(1,760)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:H	13	0.08
(1,747)         1:A:52:PHE:H         1:A:71:ILE:H         9         0.08           (1,744)         1:A:20:THR:H         1:A:23:ASN:H         12         0.08           (1,726)         1:A:47:SER:H         1:A:48:GLY:H         4         0.08           (1,724)         1:A:45:ILE:H         1:A:47:SER:H         7         0.08           (1,724)         1:A:45:ILE:H         1:A:47:SER:H         7         0.08           (1,724)         1:A:45:ILE:H         1:A:47:SER:H         12         0.08           (1,723)         1:A:126:LYS:H         1:A:129:LEU:H         3         0.08           (1,708)         1:A:54:SER:HG         1:A:57:LYS:H         5         0.08           (1,708)         1:A:54:SER:HG         1:A:57:LYS:H         13         0.08           (1,702)         1:A:1112:LEU:HD11         1:A:113:ARG:H         17         0.08           (1,702)         1:A:112:LEU:HD12         1:A:113:ARG:H         17         0.08           (1,695)         1:A:19:VAL:HG21         1:A:64:TRP:HE1         2         0.08           (1,695)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:64:TRP:HE1         2         0.08           (1,695)         1:A:19:VAL:HG11         1:A:115:CYS:H         10 <th< td=""><td>(1,759)</td><td>1:A:29:PHE:H</td><td>1:A:31:ASN:H</td><td>14</td><td>0.08</td></th<>	(1,759)	1:A:29:PHE:H	1:A:31:ASN:H	14	0.08
(1,744)         1:A:20:THR:H         1:A:23:ASN:H         12         0.08           (1,726)         1:A:47:SER:H         1:A:48:GLY:H         4         0.08           (1,724)         1:A:45:ILE:H         1:A:47:SER:H         7         0.08           (1,723)         1:A:126:LYS:H         1:A:129:LEU:H         3         0.08           (1,708)         1:A:54:SER:HG         1:A:57:LYS:H         5         0.08           (1,708)         1:A:54:SER:HG         1:A:57:LYS:H         13         0.08           (1,702)         1:A:112:LEU:HD11         1:A:13:ARG:H         17         0.08           (1,702)         1:A:112:LEU:HD12         1:A:113:ARG:H         17         0.08           (1,702)         1:A:112:LEU:HD13         1:A:13:ARG:H         17         0.08           (1,695)         1:A:19:VAL:HG21         1:A:64:TRP:HE1         2         0.08           (1,695)         1:A:19:VAL:HG22         1:A:64:TRP:HE1         2         0.	(1,751)	1:A:105:ASP:H	1:A:113:ARG:H	10	0.08
(1,744)         1:A:20:THR:H         1:A:23:ASN:H         12         0.08           (1,726)         1:A:47:SER:H         1:A:48:GLY:H         4         0.08           (1,724)         1:A:45:ILE:H         1:A:47:SER:H         7         0.08           (1,724)         1:A:55:ILE:H         1:A:47:SER:H         12         0.08           (1,724)         1:A:45:ILE:H         1:A:47:SER:H         12         0.08           (1,724)         1:A:45:ILE:H         1:A:47:SER:H         12         0.08           (1,723)         1:A:126:LYS:H         13         0.08           (1,708)         1:A:54:SER:HG         1:A:57:LYS:H         5         0.08           (1,708)         1:A:54:SER:HG         1:A:57:LYS:H         13         0.08           (1,702)         1:A:112:LEU:HD11         1:A:57:LYS:H         13         0.08           (1,702)         1:A:112:LEU:HD12         1:A:113:ARG:H         17         0.08           (1,702)         1:A:112:LEU:HD13         1:A:13:ARG:H         17         0.08           (1,695)         1:A:19:VAL:HG21         1:A:64:TRP:HE1         2         0.08           (1,695)         1:A:19:VAL:HG22         1:A:64:TRP:HE1         2         0.08	(1,747)	1:A:52:PHE:H	1:A:71:ILE:H	9	0.08
(1,724)         1:A:45:ILE:H         1:A:47:SER:H         7         0.08           (1,724)         1:A:45:ILE:H         1:A:47:SER:H         12         0.08           (1,723)         1:A:126:LYS:H         1:A:129:LEU:H         3         0.08           (1,708)         1:A:54:SER:HG         1:A:57:LYS:H         5         0.08           (1,708)         1:A:54:SER:HG         1:A:57:LYS:H         13         0.08           (1,702)         1:A:112:LEU:HD11         1:A:113:ARG:H         17         0.08           (1,702)         1:A:112:LEU:HD12         1:A:113:ARG:H         17         0.08           (1,702)         1:A:112:LEU:HD13         1:A:113:ARG:H         17         0.08           (1,695)         1:A:119:VAL:HG21         1:A:64:TRP:HE1         2         0.08           (1,695)         1:A:19:VAL:HG22         1:A:64:TRP:HE1         2         0.08           (1,695)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:64:TRP:HE1         2         0.08           (1,692)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:115:CYS:H         10         0.08           (1,692)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:115:CYS:H         10         0.08           (1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD11	(1,744)	1:A:20:THR:H	1:A:23:ASN:H	12	0.08
(1,724)         1:A:45:ILE:H         1:A:47:SER:H         12         0.08           (1,723)         1:A:126:LYS:H         1:A:129:LEU:H         3         0.08           (1,708)         1:A:54:SER:HG         1:A:57:LYS:H         5         0.08           (1,708)         1:A:54:SER:HG         1:A:57:LYS:H         13         0.08           (1,702)         1:A:112:LEU:HD11         1:A:113:ARG:H         17         0.08           (1,702)         1:A:112:LEU:HD12         1:A:113:ARG:H         17         0.08           (1,702)         1:A:112:LEU:HD13         1:A:113:ARG:H         17         0.08           (1,695)         1:A:112:LEU:HD13         1:A:113:ARG:H         17         0.08           (1,695)         1:A:112:LEU:HD13         1:A:113:ARG:H         17         0.08           (1,695)         1:A:19:VAL:HG21         1:A:64:TRP:HE1         2         0.08           (1,695)         1:A:19:VAL:HG22         1:A:64:TRP:HE1         2         0.08           (1,692)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:15:CYS:H         10         0.08           (1,692)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:115:CYS:H         10         0.08           (1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD11	(1,726)	1:A:47:SER:H	1:A:48:GLY:H	4	0.08
(1,723)         1:A:126:LYS:H         1:A:129:LEU:H         3         0.08           (1,708)         1:A:54:SER:HG         1:A:57:LYS:H         5         0.08           (1,708)         1:A:54:SER:HG         1:A:57:LYS:H         13         0.08           (1,702)         1:A:112:LEU:HD11         1:A:113:ARG:H         17         0.08           (1,702)         1:A:112:LEU:HD12         1:A:113:ARG:H         17         0.08           (1,702)         1:A:112:LEU:HD13         1:A:13:ARG:H         17         0.08           (1,702)         1:A:112:LEU:HD13         1:A:13:ARG:H         17         0.08           (1,695)         1:A:19:VAL:HG21         1:A:64:TRP:HE1         2         0.08           (1,695)         1:A:19:VAL:HG22         1:A:64:TRP:HE1         2         0.08           (1,695)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:64:TRP:HE1         2         0.08           (1,695)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:64:TRP:HE1         2         0.08           (1,692)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:115:CYS:H         10         0.08           (1,692)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:115:CYS:H         10         0.08           (1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD11	(1,724)	1:A:45:ILE:H	1:A:47:SER:H	7	0.08
(1,708)         1:A:54:SER:HG         1:A:57:LYS:H         5         0.08           (1,708)         1:A:54:SER:HG         1:A:57:LYS:H         13         0.08           (1,702)         1:A:112:LEU:HD11         1:A:113:ARG:H         17         0.08           (1,702)         1:A:112:LEU:HD12         1:A:113:ARG:H         17         0.08           (1,702)         1:A:112:LEU:HD13         1:A:113:ARG:H         17         0.08           (1,695)         1:A:19:VAL:HG21         1:A:64:TRP:HE1         2         0.08           (1,695)         1:A:19:VAL:HG22         1:A:64:TRP:HE1         2         0.08           (1,695)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:64:TRP:HE1         2         0.08           (1,695)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:64:TRP:HE1         2         0.08           (1,692)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:115:CYS:H         10         0.08           (1,692)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:115:CYS:H         10         0.08           (1,692)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:115:CYS:H         10         0.08           (1,692)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD11         4         0.08           (1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD12	· · /	1:A:45:ILE:H	1:A:47:SER:H	12	0.08
(1,708)         1:A:54:SER:HG         1:A:57:LYS:H         13         0.08           (1,702)         1:A:112:LEU:HD11         1:A:113:ARG:H         17         0.08           (1,702)         1:A:112:LEU:HD12         1:A:113:ARG:H         17         0.08           (1,702)         1:A:112:LEU:HD13         1:A:13:ARG:H         17         0.08           (1,695)         1:A:19:VAL:HG21         1:A:64:TRP:HE1         2         0.08           (1,695)         1:A:19:VAL:HG22         1:A:64:TRP:HE1         2         0.08           (1,695)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:64:TRP:HE1         2         0.08           (1,695)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:15:CYS:H         10         0.08           (1,692)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:115:CYS:H         10         0.08           (1,692)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:115:CYS:H         10         0.08           (1,692)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:115:CYS:H         10         0.08           (1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD11         4         0.08           (1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD13         4         0.08           (1,684)         1:A:140:LEU:H         1:A:140:LEU:HD11	(1,723)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:H	3	0.08
(1,708)         1:A:54:SER:HG         1:A:57:LYS:H         13         0.08           (1,702)         1:A:112:LEU:HD11         1:A:113:ARG:H         17         0.08           (1,702)         1:A:112:LEU:HD12         1:A:113:ARG:H         17         0.08           (1,702)         1:A:112:LEU:HD13         1:A:13:ARG:H         17         0.08           (1,695)         1:A:19:VAL:HG21         1:A:64:TRP:HE1         2         0.08           (1,695)         1:A:19:VAL:HG22         1:A:64:TRP:HE1         2         0.08           (1,695)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:64:TRP:HE1         2         0.08           (1,695)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:64:TRP:HE1         2         0.08           (1,692)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:15:CYS:H         10         0.08           (1,692)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:115:CYS:H         10         0.08           (1,692)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:115:CYS:H         10         0.08           (1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD11         4         0.08           (1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD13         4         0.08           (1,684)         1:A:140:LEU:H         1:A:140:LEU:HD11	(1,708)	1:A:54:SER:HG	1:A:57:LYS:H	5	0.08
(1,702)         1:A:112:LEU:HD12         1:A:113:ARG:H         17         0.08           (1,702)         1:A:112:LEU:HD13         1:A:113:ARG:H         17         0.08           (1,695)         1:A:19:VAL:HG21         1:A:64:TRP:HE1         2         0.08           (1,695)         1:A:19:VAL:HG22         1:A:64:TRP:HE1         2         0.08           (1,695)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:64:TRP:HE1         2         0.08           (1,695)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:115:CYS:H         10         0.08           (1,692)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:115:CYS:H         10         0.08           (1,692)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:115:CYS:H         10         0.08           (1,692)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:115:CYS:H         10         0.08           (1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD11         4         0.08           (1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD12         4         0.08           (1,684)         1:A:140:LEU:H         1:A:140:LEU:HD11         13         0.08           (1,684)         1:A:140:LEU:H         1:A:140:LEU:HD12         13         0.08           (1,682)         1:A:9:ILE:HD11         1:A:13:ASN:HD21<	(1,708)	1:A:54:SER:HG	1:A:57:LYS:H	13	0.08
(1,702)         1:A:112:LEU:HD12         1:A:113:ARG:H         17         0.08           (1,702)         1:A:112:LEU:HD13         1:A:113:ARG:H         17         0.08           (1,695)         1:A:19:VAL:HG21         1:A:64:TRP:HE1         2         0.08           (1,695)         1:A:19:VAL:HG22         1:A:64:TRP:HE1         2         0.08           (1,695)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:64:TRP:HE1         2         0.08           (1,695)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:115:CYS:H         10         0.08           (1,692)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:115:CYS:H         10         0.08           (1,692)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:115:CYS:H         10         0.08           (1,692)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:115:CYS:H         10         0.08           (1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD11         4         0.08           (1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD12         4         0.08           (1,684)         1:A:140:LEU:H         1:A:140:LEU:HD11         13         0.08           (1,684)         1:A:140:LEU:H         1:A:140:LEU:HD12         13         0.08           (1,682)         1:A:9:ILE:HD11         1:A:13:ASN:HD21<	(1,702)	1:A:112:LEU:HD11	1:A:113:ARG:H	17	0.08
(1,695)         1:A:19:VAL:HG21         1:A:64:TRP:HE1         2         0.08           (1,695)         1:A:19:VAL:HG22         1:A:64:TRP:HE1         2         0.08           (1,695)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:64:TRP:HE1         2         0.08           (1,692)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:115:CYS:H         10         0.08           (1,692)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:115:CYS:H         10         0.08           (1,692)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:115:CYS:H         10         0.08           (1,692)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD11         4         0.08           (1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD12         4         0.08           (1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD13         4         0.08           (1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:140:LEU:HD13         4         0.08           (1,684)         1:A:140:LEU:H         1:A:140:LEU:HD12         13         0.08           (1,684)         1:A:140:LEU:H         1:A:140:LEU:HD13         13         0.08           (1,682)         1:A:9:ILE:HD11         1:A:13:ASN:HD21         16         0.08           (1,682)         1:A:9:ILE:HD12         1:A:13:ASN:HD21		1:A:112:LEU:HD12	1:A:113:ARG:H	17	0.08
(1,695)         1:A:19:VAL:HG22         1:A:64:TRP:HE1         2         0.08           (1,695)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:64:TRP:HE1         2         0.08           (1,692)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:115:CYS:H         10         0.08           (1,692)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:115:CYS:H         10         0.08           (1,692)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:115:CYS:H         10         0.08           (1,692)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD11         4         0.08           (1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD12         4         0.08           (1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD13         4         0.08           (1,684)         1:A:140:LEU:H         1:A:140:LEU:HD11         13         0.08           (1,684)         1:A:140:LEU:H         1:A:140:LEU:HD12         13         0.08           (1,682)         1:A:9:ILE:HD11         1:A:13:ASN:HD21         16         0.08           (1,682)         1:A:9:ILE:HD12         1:A:13:ASN:HD21         16         0.08	(1,702)	1:A:112:LEU:HD13	1:A:113:ARG:H	17	0.08
(1,695)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:64:TRP:HE1         2         0.08           (1,692)         1:A:90:VAL:HG11         1:A:115:CYS:H         10         0.08           (1,692)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:115:CYS:H         10         0.08           (1,692)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:115:CYS:H         10         0.08           (1,692)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD11         4         0.08           (1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD12         4         0.08           (1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD13         4         0.08           (1,684)         1:A:140:LEU:H         1:A:140:LEU:HD11         13         0.08           (1,684)         1:A:140:LEU:H         1:A:140:LEU:HD12         13         0.08           (1,682)         1:A:9:ILE:HD11         1:A:13:ASN:HD21         16         0.08           (1,682)         1:A:9:ILE:HD12         1:A:13:ASN:HD21         16         0.08	(1,695)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:64:TRP:HE1	2	0.08
(1,692)       1:A:90:VAL:HG11       1:A:115:CYS:H       10       0.08         (1,692)       1:A:90:VAL:HG12       1:A:115:CYS:H       10       0.08         (1,692)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:115:CYS:H       10       0.08         (1,690)       1:A:79:LEU:H       1:A:79:LEU:HD11       4       0.08         (1,690)       1:A:79:LEU:H       1:A:79:LEU:HD12       4       0.08         (1,690)       1:A:79:LEU:H       1:A:79:LEU:HD13       4       0.08         (1,694)       1:A:140:LEU:H       1:A:140:LEU:HD11       13       0.08         (1,684)       1:A:140:LEU:H       1:A:140:LEU:HD12       13       0.08         (1,684)       1:A:140:LEU:H       1:A:140:LEU:HD13       13       0.08         (1,682)       1:A:9:ILE:HD11       1:A:13:ASN:HD21       16       0.08         (1,682)       1:A:9:ILE:HD12       1:A:13:ASN:HD21       16       0.08	(1,695)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:64:TRP:HE1	2	0.08
(1,692)         1:A:90:VAL:HG12         1:A:115:CYS:H         10         0.08           (1,692)         1:A:90:VAL:HG13         1:A:115:CYS:H         10         0.08           (1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD11         4         0.08           (1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD12         4         0.08           (1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD13         4         0.08           (1,684)         1:A:140:LEU:H         1:A:140:LEU:HD11         13         0.08           (1,684)         1:A:140:LEU:H         1:A:140:LEU:HD12         13         0.08           (1,684)         1:A:140:LEU:H         1:A:140:LEU:HD13         13         0.08           (1,682)         1:A:9:ILE:HD11         1:A:13:ASN:HD21         16         0.08           (1,682)         1:A:9:ILE:HD12         1:A:13:ASN:HD21         16         0.08	(1,695)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:64:TRP:HE1	2	0.08
(1,692)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:115:CYS:H       10       0.08         (1,690)       1:A:79:LEU:H       1:A:79:LEU:HD11       4       0.08         (1,690)       1:A:79:LEU:H       1:A:79:LEU:HD12       4       0.08         (1,690)       1:A:79:LEU:H       1:A:79:LEU:HD13       4       0.08         (1,684)       1:A:140:LEU:H       1:A:140:LEU:HD11       13       0.08         (1,684)       1:A:140:LEU:H       1:A:140:LEU:HD12       13       0.08         (1,684)       1:A:140:LEU:H       1:A:140:LEU:HD13       13       0.08         (1,682)       1:A:9:ILE:HD11       1:A:13:ASN:HD21       16       0.08         (1,682)       1:A:9:ILE:HD12       1:A:13:ASN:HD21       16       0.08	(1,692)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:115:CYS:H	10	0.08
(1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD11         4         0.08           (1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD12         4         0.08           (1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD13         4         0.08           (1,684)         1:A:140:LEU:H         1:A:140:LEU:HD11         13         0.08           (1,684)         1:A:140:LEU:H         1:A:140:LEU:HD12         13         0.08           (1,684)         1:A:140:LEU:H         1:A:140:LEU:HD13         13         0.08           (1,682)         1:A:9:ILE:HD11         1:A:13:ASN:HD21         16         0.08           (1,682)         1:A:9:ILE:HD12         1:A:13:ASN:HD21         16         0.08	(1,692)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:115:CYS:H	10	0.08
(1,690)       1:A:79:LEU:H       1:A:79:LEU:HD12       4       0.08         (1,690)       1:A:79:LEU:H       1:A:79:LEU:HD13       4       0.08         (1,684)       1:A:140:LEU:H       1:A:140:LEU:HD11       13       0.08         (1,684)       1:A:140:LEU:H       1:A:140:LEU:HD12       13       0.08         (1,684)       1:A:140:LEU:H       1:A:140:LEU:HD13       13       0.08         (1,684)       1:A:9:ILE:HD11       1:A:13:ASN:HD21       16       0.08         (1,682)       1:A:9:ILE:HD12       1:A:13:ASN:HD21       16       0.08	(1,692)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:115:CYS:H	10	0.08
(1,690)       1:A:79:LEU:H       1:A:79:LEU:HD13       4       0.08         (1,684)       1:A:140:LEU:H       1:A:140:LEU:HD11       13       0.08         (1,684)       1:A:140:LEU:H       1:A:140:LEU:HD12       13       0.08         (1,684)       1:A:140:LEU:H       1:A:140:LEU:HD13       13       0.08         (1,682)       1:A:9:ILE:HD11       1:A:13:ASN:HD21       16       0.08         (1,682)       1:A:9:ILE:HD12       1:A:13:ASN:HD21       16       0.08	(1,690)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD11	4	0.08
(1,690)       1:A:79:LEU:H       1:A:79:LEU:HD13       4       0.08         (1,684)       1:A:140:LEU:H       1:A:140:LEU:HD11       13       0.08         (1,684)       1:A:140:LEU:H       1:A:140:LEU:HD12       13       0.08         (1,684)       1:A:140:LEU:H       1:A:140:LEU:HD13       13       0.08         (1,682)       1:A:9:ILE:HD11       1:A:13:ASN:HD21       16       0.08         (1,682)       1:A:9:ILE:HD12       1:A:13:ASN:HD21       16       0.08	· · /	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD12	4	0.08
(1,684)       1:A:140:LEU:H       1:A:140:LEU:HD12       13       0.08         (1,684)       1:A:140:LEU:H       1:A:140:LEU:HD13       13       0.08         (1,682)       1:A:9:ILE:HD11       1:A:13:ASN:HD21       16       0.08         (1,682)       1:A:9:ILE:HD12       1:A:13:ASN:HD21       16       0.08		1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD13	4	0.08
(1,684)       1:A:140:LEU:H       1:A:140:LEU:HD12       13       0.08         (1,684)       1:A:140:LEU:H       1:A:140:LEU:HD13       13       0.08         (1,682)       1:A:9:ILE:HD11       1:A:13:ASN:HD21       16       0.08         (1,682)       1:A:9:ILE:HD12       1:A:13:ASN:HD21       16       0.08	_ ` ' /	1:A:140:LEU:H	1:A:140:LEU:HD11	13	0.08
(1,682)       1:A:9:ILE:HD11       1:A:13:ASN:HD21       16       0.08         (1,682)       1:A:9:ILE:HD12       1:A:13:ASN:HD21       16       0.08	· · /	1:A:140:LEU:H	1:A:140:LEU:HD12	13	0.08
(1,682)       1:A:9:ILE:HD11       1:A:13:ASN:HD21       16       0.08         (1,682)       1:A:9:ILE:HD12       1:A:13:ASN:HD21       16       0.08	(1,684)	1:A:140:LEU:H	1:A:140:LEU:HD13	13	0.08
(1,682) 1:A:9:ILE:HD12 1:A:13:ASN:HD21 16 0.08	· · /	1:A:9:ILE:HD11	1:A:13:ASN:HD21	16	0.08
		1:A:9:ILE:HD12	1:A:13:ASN:HD21	16	0.08
[1,002] $[1.11.0.11D10]$ $[1.11.10.13010.11D21]$ $[10]$ $[0.00]$	(1,682)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:13:ASN:HD21	16	0.08
(1,676) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:49:LYS:H 13 0.08		1:A:43:VAL:HG21	1:A:49:LYS:H	13	0.08
(1,676) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:49:LYS:H 13 0.08	· · /	1:A:43:VAL:HG22	1:A:49:LYS:H	13	0.08
(1,676) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:49:LYS:H 13 0.08	· · /	1:A:43:VAL:HG23	1:A:49:LYS:H	13	0.08



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,671)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD11	4	0.08
(1,671)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD12	4	0.08
(1,671)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD13	4	0.08
(1,667)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:137:TYR:H	16	0.08
(1,667)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:137:TYR:H	16	0.08
(1,667)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:137:TYR:H	16	0.08
(1,666)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD11	11	0.08
(1,666)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD12	11	0.08
(1,666)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD13	11	0.08
(1,662)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD21	14	0.08
(1,662)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD22	14	0.08
(1,662)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD23	14	0.08
(1,660)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG11	3	0.08
(1,660)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG12	3	0.08
(1,660)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG13	3	0.08
(1,660)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG11	4	0.08
(1,660)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG12	4	0.08
(1,660)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG13	4	0.08
(1,658)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:131:GLU:H	5	0.08
(1,658)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:131:GLU:H	5	0.08
(1,658)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:131:GLU:H	5	0.08
(1,656)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD21	6	0.08
(1,656)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD22	6	0.08
(1,656)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD23	6	0.08
(1,656)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD21	11	0.08
(1,656)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD22	11	0.08
(1,656)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD23	11	0.08
(1,654)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:138:LEU:H	17	0.08
(1,654)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:138:LEU:H	17	0.08
(1,654)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:138:LEU:H	17	0.08
(1,653)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:42:TYR:H	4	0.08
(1,653)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:42:TYR:H	4	0.08
(1,653)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:42:TYR:H	4	0.08
(1,649)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:124:VAL:H	6	0.08
(1,649)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:H	6	0.08
(1,649)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:H	6	0.08
(1,649)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:124:VAL:H	7	0.08
(1,649)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:H	7	0.08
(1,649)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:H	7	0.08
(1,644)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD11	3	0.08
(1,644)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD12	3	0.08
(1,644)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD13	3	0.08
/	<u> </u>			d on nort nago



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,644)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD11	18	0.08
(1,644)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD12	18	0.08
(1,644)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD13	18	0.08
(1,63)	1:A:54:SER:HG	1:A:57:LYS:H	5	0.08
(1,63)	1:A:54:SER:HG	1:A:57:LYS:H	13	0.08
(1,626)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:140:LEU:HD11	16	0.08
(1,626)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:140:LEU:HD12	16	0.08
(1,626)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:140:LEU:HD13	16	0.08
(1,626)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:140:LEU:HD11	16	0.08
(1,626)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:140:LEU:HD12	16	0.08
(1,626)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:140:LEU:HD13	16	0.08
(1,626)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:140:LEU:HD11	16	0.08
(1,626)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:140:LEU:HD12	16	0.08
(1,626)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:140:LEU:HD13	16	0.08
(1,622)	1:A:86:ILE:HD11	1:A:80:ASP:H	10	0.08
(1,622)	1:A:86:ILE:HD12	1:A:80:ASP:H	10	0.08
(1,622)	1:A:86:ILE:HD13	1:A:80:ASP:H	10	0.08
(1,619)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:H	7	0.08
(1,619)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:H	7	0.08
(1,619)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:H	7	0.08
(1,613)	1:A:115:CYS:H	1:A:101:HIS:H	10	0.08
(1,611)	1:A:100:GLY:H	1:A:90:VAL:H	3	0.08
(1,593)	1:A:22:ASN:HD21	1:A:23:ASN:H	13	0.08
(1,590)	1:A:16:GLN:HE21	1:A:45:ILE:HD11	11	0.08
(1,590)	1:A:16:GLN:HE21	1:A:45:ILE:HD12	11	0.08
(1,590)	1:A:16:GLN:HE21	1:A:45:ILE:HD13	11	0.08
(1,590)	1:A:16:GLN:HE22	1:A:45:ILE:HD11	11	0.08
(1,590)	1:A:16:GLN:HE22	1:A:45:ILE:HD12	11	0.08
(1,590)	1:A:16:GLN:HE22	1:A:45:ILE:HD13	11	0.08
(1,584)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD11	20	0.08
(1,584)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD12	20	0.08
(1,584)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD13	20	0.08
(1,571)	1:A:140:LEU:HD11	1:A:141:PHE:H	3	0.08
(1,571)	1:A:140:LEU:HD12	1:A:141:PHE:H	3	0.08
(1,571)	1:A:140:LEU:HD13	1:A:141:PHE:H	3	0.08
(1,571)	1:A:140:LEU:HD11	1:A:141:PHE:H	9	0.08
(1,571)	1:A:140:LEU:HD12	1:A:141:PHE:H	9	0.08
(1,571)	1:A:140:LEU:HD13	1:A:141:PHE:H	9	0.08
(1,57)	1:A:112:LEU:HD11	1:A:113:ARG:H	17	0.08
(1,57)	1:A:112:LEU:HD12	1:A:113:ARG:H	17	0.08
(1,57)	1:A:112:LEU:HD13	1:A:113:ARG:H	17	0.08
(1,563)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:137:TYR:H	17	0.08
_ ` ′ /	<u> </u>			d on nort nago



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,563)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:137:TYR:H	17	0.08
(1,563)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:137:TYR:H	17	0.08
(1,558)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:132:GLU:H	14	0.08
(1,558)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:132:GLU:H	14	0.08
(1,558)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:132:GLU:H	14	0.08
(1,556)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD11	18	0.08
(1,556)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD12	18	0.08
(1,556)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD13	18	0.08
(1,555)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD11	15	0.08
(1,555)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD12	15	0.08
(1,555)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD13	15	0.08
(1,551)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD11	19	0.08
(1,551)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD12	19	0.08
(1,551)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD13	19	0.08
(1,534)	1:A:101:HIS:H	1:A:102:VAL:HG11	10	0.08
(1,534)	1:A:101:HIS:H	1:A:102:VAL:HG12	10	0.08
(1,534)	1:A:101:HIS:H	1:A:102:VAL:HG13	10	0.08
(1,525)	1:A:98:HIS:H	1:A:99:LEU:HD21	14	0.08
(1,525)	1:A:98:HIS:H	1:A:99:LEU:HD22	14	0.08
(1,525)	1:A:98:HIS:H	1:A:99:LEU:HD23	14	0.08
(1,513)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:87:ARG:H	1	0.08
(1,513)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:87:ARG:H	1	0.08
(1,513)	1:A:79:LEU:HD13	1:A:87:ARG:H	1	0.08
(1,512)	1:A:79:LEU:HD21	1:A:87:ARG:H	18	0.08
(1,512)	1:A:79:LEU:HD22	1:A:87:ARG:H	18	0.08
(1,512)	1:A:79:LEU:HD23	1:A:87:ARG:H	18	0.08
(1,505)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:76:GLU:H	3	0.08
(1,505)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:76:GLU:H	3	0.08
(1,505)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:76:GLU:H	3	0.08
(1,505)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:76:GLU:H	6	0.08
(1,505)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:76:GLU:H	6	0.08
(1,505)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:76:GLU:H	6	0.08
(1,505)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:76:GLU:H	11	0.08
(1,505)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:76:GLU:H	11	0.08
(1,505)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:76:GLU:H	11	0.08
(1,50)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:64:TRP:HE1	2	0.08
(1,50)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:64:TRP:HE1	2	0.08
(1,50)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:64:TRP:HE1	2	0.08
(1,496)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:54:SER:H	4	0.08
(1,496)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:54:SER:H	4	0.08
(1,496)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:54:SER:H	4	0.08
(1,490)	1:A:51:LEU:HD11	1:A:52:PHE:H	15	0.08



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,490)	1:A:51:LEU:HD12	1:A:52:PHE:H	15	0.08
(1,490)	1:A:51:LEU:HD13	1:A:52:PHE:H	15	0.08
(1,488)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:51:LEU:H	9	0.08
(1,488)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:51:LEU:H	9	0.08
(1,488)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:51:LEU:H	9	0.08
(1,488)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:51:LEU:H	13	0.08
(1,488)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:51:LEU:H	13	0.08
(1,488)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:51:LEU:H	13	0.08
(1,475)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:44:ASP:H	15	0.08
(1,475)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:44:ASP:H	15	0.08
(1,475)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:44:ASP:H	15	0.08
(1,47)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:115:CYS:H	10	0.08
(1,47)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:115:CYS:H	10	0.08
(1,47)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:115:CYS:H	10	0.08
(1,469)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:24:GLY:H	5	0.08
(1,469)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:24:GLY:H	5	0.08
(1,469)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:24:GLY:H	5	0.08
(1,469)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:24:GLY:H	13	0.08
(1,469)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:24:GLY:H	13	0.08
(1,469)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:24:GLY:H	13	0.08
(1,468)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:23:ASN:H	20	0.08
(1,468)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:23:ASN:H	20	0.08
(1,468)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:23:ASN:H	20	0.08
(1,465)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG11	7	0.08
(1,465)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG12	7	0.08
(1,465)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG13	7	0.08
(1,462)	1:A:45:ILE:HD11	1:A:46:VAL:H	4	0.08
(1,462)	1:A:45:ILE:HD12	1:A:46:VAL:H	4	0.08
(1,462)	1:A:45:ILE:HD13	1:A:46:VAL:H	4	0.08
(1,462)	1:A:45:ILE:HD11	1:A:46:VAL:H	20	0.08
(1,462)	1:A:45:ILE:HD12	1:A:46:VAL:H	20	0.08
(1,462)	1:A:45:ILE:HD13	1:A:46:VAL:H	20	0.08
(1,458)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:10:LYS:H	12	0.08
(1,458)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:10:LYS:H	12	0.08
(1,458)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:10:LYS:H	12	0.08
(1,458)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:10:LYS:H	20	0.08
(1,458)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:10:LYS:H	20	0.08
(1,458)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:10:LYS:H	20	0.08
(1,456)	1:A:9:ILE:H	1:A:12:LEU:HD21	16	0.08
(1,456)	1:A:9:ILE:H	1:A:12:LEU:HD22	16	0.08
(1,456)	1:A:9:ILE:H	1:A:12:LEU:HD23	16	0.08
(1,454)	1:A:134:TYR:H	1:A:138:LEU:HD21	7	0.08



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,454)	1:A:134:TYR:H	1:A:138:LEU:HD22	7	0.08
(1,454)	1:A:134:TYR:H	1:A:138:LEU:HD23	7	0.08
(1,452)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG21	4	0.08
(1,452)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG22	4	0.08
(1,452)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG23	4	0.08
(1,452)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG21	15	0.08
(1,452)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG22	15	0.08
(1,452)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG23	15	0.08
(1,451)	1:A:75:VAL:HG11	1:A:91:ARG:H	15	0.08
(1,451)	1:A:75:VAL:HG12	1:A:91:ARG:H	15	0.08
(1,451)	1:A:75:VAL:HG13	1:A:91:ARG:H	15	0.08
(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD11	4	0.08
(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD12	4	0.08
(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD13	4	0.08
(1,447)	1:A:41:LEU:H	1:A:124:VAL:HG21	10	0.08
(1,447)	1:A:41:LEU:H	1:A:124:VAL:HG22	10	0.08
(1,447)	1:A:41:LEU:H	1:A:124:VAL:HG23	10	0.08
(1,445)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:113:ARG:H	16	0.08
(1,445)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:113:ARG:H	16	0.08
(1,445)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:113:ARG:H	16	0.08
(1,445)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:113:ARG:H	18	0.08
(1,445)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:113:ARG:H	18	0.08
(1,445)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:113:ARG:H	18	0.08
(1,440)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:100:GLY:H	10	0.08
(1,440)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:100:GLY:H	10	0.08
(1,440)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:100:GLY:H	10	0.08
(1,440)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:100:GLY:H	20	0.08
(1,440)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:100:GLY:H	20	0.08
(1,440)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:100:GLY:H	20	0.08
(1,437)	1:A:46:VAL:HG11	1:A:48:GLY:H	17	0.08
(1,437)	1:A:46:VAL:HG12	1:A:48:GLY:H	17	0.08
(1,437)	1:A:46:VAL:HG13	1:A:48:GLY:H	17	0.08
(1,435)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:26:GLU:H	18	0.08
(1,435)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:26:GLU:H	18	0.08
(1,435)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:26:GLU:H	18	0.08
(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD21	10	0.08
(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD22	10	0.08
(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD23	10	0.08
(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD21	6	0.08
(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD22	6	0.08
(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD23	6	0.08
(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD21	11	0.08



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD22	11	0.08
(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD23	11	0.08
(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD21	11	0.08
(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD22	11	0.08
(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD23	11	0.08
(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD21	11	0.08
(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD22	11	0.08
(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD23	11	0.08
(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD21	11	0.08
(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD22	11	0.08
(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD23	11	0.08
(1,4)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:124:VAL:H	6	0.08
(1,4)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:H	6	0.08
(1,4)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:H	6	0.08
(1,4)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:124:VAL:H	7	0.08
(1,4)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:H	7	0.08
(1,4)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:H	7	0.08
(1,39)	1:A:140:LEU:H	1:A:140:LEU:HD11	13	0.08
(1,39)	1:A:140:LEU:H	1:A:140:LEU:HD12	13	0.08
(1,39)	1:A:140:LEU:H	1:A:140:LEU:HD13	13	0.08
(1,387)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:90:VAL:HG21	10	0.08
(1,387)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:90:VAL:HG22	10	0.08
(1,387)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:90:VAL:HG23	10	0.08
(1,387)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:90:VAL:HG21	10	0.08
(1,387)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:90:VAL:HG22	10	0.08
(1,387)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:90:VAL:HG23	10	0.08
(1,387)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG21	10	0.08
(1,387)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG22	10	0.08
(1,387)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG23	10	0.08
(1,387)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:90:VAL:HG21	16	0.08
(1,387)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:90:VAL:HG22	16	0.08
(1,387)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:90:VAL:HG23	16	0.08
(1,387)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:90:VAL:HG21	16	0.08
(1,387)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:90:VAL:HG22	16	0.08
(1,387)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:90:VAL:HG23	16	0.08
(1,387)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG21	16	0.08
(1,387)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG22	16	0.08
(1,387)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG23	16	0.08
(1,381)	1:A:140:LEU:H	1:A:142:ASN:H	14	0.08
(1,374)	1:A:132:GLU:H	1:A:134:TYR:H	7	0.08
(1,374)	1:A:132:GLU:H	1:A:134:TYR:H	11	0.08
(1,37)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:13:ASN:HD21	16	0.08



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,37)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:13:ASN:HD21	16	0.08
(1,37)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:13:ASN:HD21	16	0.08
(1,361)	1:A:45:ILE:H	1:A:122:ARG:H	16	0.08
(1,360)	1:A:43:VAL:H	1:A:122:ARG:H	20	0.08
(1,355)	1:A:67:PHE:H	1:A:114:TYR:H	4	0.08
(1,329)	1:A:79:LEU:H	1:A:89:GLU:H	7	0.08
(1,328)	1:A:78:LYS:H	1:A:79:LEU:H	3	0.08
(1,327)	1:A:78:LYS:H	1:A:89:GLU:H	4	0.08
(1,327)	1:A:78:LYS:H	1:A:89:GLU:H	18	0.08
(1,318)	1:A:44:ASP:H	1:A:48:GLY:H	18	0.08
(1,31)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:49:LYS:H	13	0.08
(1,31)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:49:LYS:H	13	0.08
(1,31)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:49:LYS:H	13	0.08
(1,308)	1:A:30:GLN:H	1:A:34:TRP:HE1	12	0.08
(1,299)	1:A:15:MET:H	1:A:18:GLU:H	3	0.08
(1,299)	1:A:15:MET:H	1:A:18:GLU:H	18	0.08
(1,281)	1:A:110:ASN:HD22	1:A:112:LEU:H	6	0.08
(1,279)	1:A:26:GLU:H	1:A:64:TRP:HE1	14	0.08
(1,279)	1:A:26:GLU:H	1:A:64:TRP:HE1	17	0.08
(1,274)	1:A:80:ASP:H	1:A:89:GLU:H	10	0.08
(1,274)	1:A:80:ASP:H	1:A:89:GLU:H	20	0.08
(1,267)	1:A:21:GLN:H	1:A:24:GLY:H	9	0.08
(1,266)	1:A:19:VAL:H	1:A:21:GLN:H	3	0.08
(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD11	4	0.08
(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD12	4	0.08
(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD13	4	0.08
(1,259)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD11	5	0.08
(1,259)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD12	5	0.08
(1,259)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD13	5	0.08
(1,259)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD11	5	0.08
(1,259)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD12	5	0.08
(1,259)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD13	5	0.08
(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD11	5	0.08
(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD12	5	0.08
(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD13	5	0.08
(1,259)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD11	10	0.08
(1,259)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD12	10	0.08
(1,259)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD13	10	0.08
(1,259)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD11	10	0.08
(1,259)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD12	10	0.08
(1,259)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD13	10	0.08
(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD11	10	0.08
_ \	<u> </u>			nd on mort nago



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD12	10	0.08
(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD13	10	0.08
(1,256)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD11	15	0.08
(1,256)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD12	15	0.08
(1,256)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD13	15	0.08
(1,256)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD11	15	0.08
(1,256)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD12	15	0.08
(1,256)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD13	15	0.08
(1,256)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD11	15	0.08
(1,256)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD12	15	0.08
(1,256)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD13	15	0.08
(1,254)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:46:VAL:HG11	19	0.08
(1,254)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:46:VAL:HG12	19	0.08
(1,254)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:46:VAL:HG13	19	0.08
(1,254)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:46:VAL:HG11	19	0.08
(1,254)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:46:VAL:HG12	19	0.08
(1,254)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:46:VAL:HG13	19	0.08
(1,254)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:46:VAL:HG11	19	0.08
(1,254)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:46:VAL:HG12	19	0.08
(1,254)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:46:VAL:HG13	19	0.08
(1,22)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:137:TYR:H	16	0.08
(1,22)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:137:TYR:H	16	0.08
(1,22)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:137:TYR:H	16	0.08
(1,21)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD11	11	0.08
(1,21)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD12	11	0.08
(1,21)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD13	11	0.08
(1,197)	1:A:13:ASN:HD21	1:A:46:VAL:HG11	13	0.08
(1,197)	1:A:13:ASN:HD21	1:A:46:VAL:HG12	13	0.08
(1,197)	1:A:13:ASN:HD21	1:A:46:VAL:HG13	13	0.08
(1,194)	1:A:42:TYR:H	1:A:43:VAL:HG11	13	0.08
(1,194)	1:A:42:TYR:H	1:A:43:VAL:HG12	13	0.08
(1,194)	1:A:42:TYR:H	1:A:43:VAL:HG13	13	0.08
(1,189)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:124:VAL:HG21	6	0.08
(1,189)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:124:VAL:HG22	6	0.08
(1,189)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:124:VAL:HG23	6	0.08
(1,189)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:HG21	6	0.08
(1,189)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:HG22	6	0.08
(1,189)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:HG23	6	0.08
(1,189)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:HG21	6	0.08
(1,189)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:HG22	6	0.08
(1,189)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:HG23	6	0.08
(1,176)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:45:ILE:HD11	6	0.08



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,176)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:45:ILE:HD12	6	0.08
(1,176)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:45:ILE:HD13	6	0.08
(1,176)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:45:ILE:HD11	6	0.08
(1,176)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:45:ILE:HD12	6	0.08
(1,176)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:45:ILE:HD13	6	0.08
(1,176)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:45:ILE:HD11	6	0.08
(1,176)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:45:ILE:HD12	6	0.08
(1,176)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:45:ILE:HD13	6	0.08
(1,176)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:45:ILE:HD11	8	0.08
(1,176)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:45:ILE:HD12	8	0.08
(1,176)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:45:ILE:HD13	8	0.08
(1,176)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:45:ILE:HD11	8	0.08
(1,176)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:45:ILE:HD12	8	0.08
(1,176)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:45:ILE:HD13	8	0.08
(1,176)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:45:ILE:HD11	8	0.08
(1,176)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:45:ILE:HD12	8	0.08
(1,176)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:45:ILE:HD13	8	0.08
(1,171)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG11	15	0.08
(1,171)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG12	15	0.08
(1,171)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG13	15	0.08
(1,17)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD21	14	0.08
(1,17)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD22	14	0.08
(1,17)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD23	14	0.08
(1,163)	1:A:15:MET:H	1:A:17:TYR:H	13	0.08
(1,15)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG11	3	0.08
(1,15)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG12	3	0.08
(1,15)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG13	3	0.08
(1,15)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG11	4	0.08
(1,15)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG12	4	0.08
(1,15)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG13	4	0.08
(1,148)	1:A:44:ASP:H	1:A:122:ARG:H	16	0.08
(1,147)	1:A:130:LYS:H	1:A:134:TYR:H	16	0.08
(1,132)	1:A:16:GLN:H	1:A:19:VAL:H	1	0.08
(1,131)	1:A:17:TYR:H	1:A:19:VAL:H	1	0.08
(1,131)	1:A:17:TYR:H	1:A:19:VAL:H	11	0.08
(1,13)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:131:GLU:H	5	0.08
(1,13)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:131:GLU:H	5	0.08
(1,13)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:131:GLU:H	5	0.08
(1,1289)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD11	3	0.08
(1,1289)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD12	3	0.08
(1,1289)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD13	3	0.08
(1,1289)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD11	18	0.08



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1289)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD12	18	0.08
(1,1289)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD13	18	0.08
(1,1271)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:140:LEU:HD11	16	0.08
(1,1271)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:140:LEU:HD12	16	0.08
(1,1271)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:140:LEU:HD13	16	0.08
(1,1271)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:140:LEU:HD11	16	0.08
(1,1271)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:140:LEU:HD12	16	0.08
(1,1271)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:140:LEU:HD13	16	0.08
(1,1271)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:140:LEU:HD11	16	0.08
(1,1271)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:140:LEU:HD12	16	0.08
(1,1271)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:140:LEU:HD13	16	0.08
(1,127)	1:A:21:GLN:H	1:A:23:ASN:H	12	0.08
(1,127)	1:A:21:GLN:H	1:A:23:ASN:H	20	0.08
(1,1267)	1:A:86:ILE:HD11	1:A:80:ASP:H	10	0.08
(1,1267)	1:A:86:ILE:HD12	1:A:80:ASP:H	10	0.08
(1,1267)	1:A:86:ILE:HD13	1:A:80:ASP:H	10	0.08
(1,1264)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:H	7	0.08
(1,1264)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:H	7	0.08
(1,1264)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:H	7	0.08
(1,1258)	1:A:115:CYS:H	1:A:101:HIS:H	10	0.08
(1,1256)	1:A:100:GLY:H	1:A:90:VAL:H	3	0.08
(1,1238)	1:A:22:ASN:HD21	1:A:23:ASN:H	13	0.08
(1,1235)	1:A:16:GLN:HE21	1:A:45:ILE:HD11	11	0.08
(1,1235)	1:A:16:GLN:HE21	1:A:45:ILE:HD12	11	0.08
(1,1235)	1:A:16:GLN:HE21	1:A:45:ILE:HD13	11	0.08
(1,1235)	1:A:16:GLN:HE22	1:A:45:ILE:HD11	11	0.08
(1,1235)	1:A:16:GLN:HE22	1:A:45:ILE:HD12	11	0.08
(1,1235)	1:A:16:GLN:HE22	1:A:45:ILE:HD13	11	0.08
(1,1229)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD11	20	0.08
(1,1229)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD12	20	0.08
(1,1229)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD13	20	0.08
(1,1216)	1:A:140:LEU:HD11	1:A:141:PHE:H	3	0.08
(1,1216)	1:A:140:LEU:HD12	1:A:141:PHE:H	3	0.08
(1,1216)	1:A:140:LEU:HD13	1:A:141:PHE:H	3	0.08
(1,1216)	1:A:140:LEU:HD11	1:A:141:PHE:H	9	0.08
(1,1216)	1:A:140:LEU:HD12	1:A:141:PHE:H	9	0.08
(1,1216)	1:A:140:LEU:HD13	1:A:141:PHE:H	9	0.08
(1,1208)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:137:TYR:H	17	0.08
(1,1208)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:137:TYR:H	17	0.08
(1,1208)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:137:TYR:H	17	0.08
(1,1203)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:132:GLU:H	14	0.08
(1,1203)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:132:GLU:H	14	0.08



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1203)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:132:GLU:H	14	0.08
(1,1201)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD11	18	0.08
(1,1201)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD12	18	0.08
(1,1201)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD13	18	0.08
(1,1200)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD11	15	0.08
(1,1200)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD12	15	0.08
(1,1200)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD13	15	0.08
(1,1196)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD11	19	0.08
(1,1196)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD12	19	0.08
(1,1196)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD13	19	0.08
(1,1179)	1:A:101:HIS:H	1:A:102:VAL:HG11	10	0.08
(1,1179)	1:A:101:HIS:H	1:A:102:VAL:HG12	10	0.08
(1,1179)	1:A:101:HIS:H	1:A:102:VAL:HG13	10	0.08
(1,1170)	1:A:98:HIS:H	1:A:99:LEU:HD21	14	0.08
(1,1170)	1:A:98:HIS:H	1:A:99:LEU:HD22	14	0.08
(1,1170)	1:A:98:HIS:H	1:A:99:LEU:HD23	14	0.08
(1,1158)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:87:ARG:H	1	0.08
(1,1158)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:87:ARG:H	1	0.08
(1,1158)	1:A:79:LEU:HD13	1:A:87:ARG:H	1	0.08
(1,1157)	1:A:79:LEU:HD21	1:A:87:ARG:H	18	0.08
(1,1157)	1:A:79:LEU:HD22	1:A:87:ARG:H	18	0.08
(1,1157)	1:A:79:LEU:HD23	1:A:87:ARG:H	18	0.08
(1,1150)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:76:GLU:H	3	0.08
(1,1150)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:76:GLU:H	3	0.08
(1,1150)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:76:GLU:H	3	0.08
(1,1150)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:76:GLU:H	6	0.08
(1,1150)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:76:GLU:H	6	0.08
(1,1150)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:76:GLU:H	6	0.08
(1,1150)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:76:GLU:H	11	0.08
(1,1150)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:76:GLU:H	11	0.08
(1,1150)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:76:GLU:H	11	0.08
(1,115)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:H	3	0.08
(1,115)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:H	6	0.08
(1,115)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:H	11	0.08
(1,115)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:H	13	0.08
(1,1141)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:54:SER:H	4	0.08
(1,1141)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:54:SER:H	4	0.08
(1,1141)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:54:SER:H	4	0.08
(1,114)	1:A:29:PHE:H	1:A:31:ASN:H	14	0.08
(1,1135)	1:A:51:LEU:HD11	1:A:52:PHE:H	15	0.08
(1,1135)	1:A:51:LEU:HD12	1:A:52:PHE:H	15	0.08
(1,1135)	1:A:51:LEU:HD13	1:A:52:PHE:H	15	0.08



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1133)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:51:LEU:H	9	0.08
(1,1133)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:51:LEU:H	9	0.08
(1,1133)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:51:LEU:H	9	0.08
(1,1133)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:51:LEU:H	13	0.08
(1,1133)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:51:LEU:H	13	0.08
(1,1133)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:51:LEU:H	13	0.08
(1,1120)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:44:ASP:H	15	0.08
(1,1120)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:44:ASP:H	15	0.08
(1,1120)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:44:ASP:H	15	0.08
(1,1114)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:24:GLY:H	5	0.08
(1,1114)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:24:GLY:H	5	0.08
(1,1114)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:24:GLY:H	5	0.08
(1,1114)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:24:GLY:H	13	0.08
(1,1114)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:24:GLY:H	13	0.08
(1,1114)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:24:GLY:H	13	0.08
(1,1113)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:23:ASN:H	20	0.08
(1,1113)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:23:ASN:H	20	0.08
(1,1113)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:23:ASN:H	20	0.08
(1,1110)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG11	7	0.08
(1,1110)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG12	7	0.08
(1,1110)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG13	7	0.08
(1,1107)	1:A:45:ILE:HD11	1:A:46:VAL:H	4	0.08
(1,1107)	1:A:45:ILE:HD12	1:A:46:VAL:H	4	0.08
(1,1107)	1:A:45:ILE:HD13	1:A:46:VAL:H	4	0.08
(1,1107)	1:A:45:ILE:HD11	1:A:46:VAL:H	20	0.08
(1,1107)	1:A:45:ILE:HD12	1:A:46:VAL:H	20	0.08
(1,1107)	1:A:45:ILE:HD13	1:A:46:VAL:H	20	0.08
(1,1103)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:10:LYS:H	12	0.08
(1,1103)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:10:LYS:H	12	0.08
(1,1103)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:10:LYS:H	12	0.08
(1,1103)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:10:LYS:H	20	0.08
(1,1103)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:10:LYS:H	20	0.08
(1,1103)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:10:LYS:H	20	0.08
(1,1101)	1:A:9:ILE:H	1:A:12:LEU:HD21	16	0.08
(1,1101)	1:A:9:ILE:H	1:A:12:LEU:HD22	16	0.08
(1,1101)	1:A:9:ILE:H	1:A:12:LEU:HD23	16	0.08
(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD21	6	0.08
(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD22	6	0.08
(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD23	6	0.08
(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD21	11	0.08
(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD22	11	0.08
(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD23	11	0.08



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1099)	1:A:134:TYR:H	1:A:138:LEU:HD21	7	0.08
(1,1099)	1:A:134:TYR:H	1:A:138:LEU:HD22	7	0.08
(1,1099)	1:A:134:TYR:H	1:A:138:LEU:HD23	7	0.08
(1,1097)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG21	4	0.08
(1,1097)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG22	4	0.08
(1,1097)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG23	4	0.08
(1,1097)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG21	15	0.08
(1,1097)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG22	15	0.08
(1,1097)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG23	15	0.08
(1,1096)	1:A:75:VAL:HG11	1:A:91:ARG:H	15	0.08
(1,1096)	1:A:75:VAL:HG12	1:A:91:ARG:H	15	0.08
(1,1096)	1:A:75:VAL:HG13	1:A:91:ARG:H	15	0.08
(1,1092)	1:A:41:LEU:H	1:A:124:VAL:HG21	10	0.08
(1,1092)	1:A:41:LEU:H	1:A:124:VAL:HG22	10	0.08
(1,1092)	1:A:41:LEU:H	1:A:124:VAL:HG23	10	0.08
(1,1090)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:113:ARG:H	16	0.08
(1,1090)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:113:ARG:H	16	0.08
(1,1090)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:113:ARG:H	16	0.08
(1,1090)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:113:ARG:H	18	0.08
(1,1090)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:113:ARG:H	18	0.08
(1,1090)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:113:ARG:H	18	0.08
(1,1085)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:100:GLY:H	10	0.08
(1,1085)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:100:GLY:H	10	0.08
(1,1085)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:100:GLY:H	10	0.08
(1,1085)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:100:GLY:H	20	0.08
(1,1085)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:100:GLY:H	20	0.08
(1,1085)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:100:GLY:H	20	0.08
(1,1082)	1:A:46:VAL:HG11	1:A:48:GLY:H	17	0.08
(1,1082)	1:A:46:VAL:HG12	1:A:48:GLY:H	17	0.08
(1,1082)	1:A:46:VAL:HG13	1:A:48:GLY:H	17	0.08
(1,1080)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:26:GLU:H	18	0.08
(1,1080)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:26:GLU:H	18	0.08
(1,1080)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:26:GLU:H	18	0.08
(1,1064)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD21	10	0.08
(1,1064)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD22	10	0.08
(1,1064)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD23	10	0.08
(1,1060)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD21	6	0.08
(1,1060)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD22	6	0.08
(1,1060)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD23	6	0.08
(1,1060)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD21	11	0.08
(1,1060)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD22	11	0.08
(1,1060)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD23	11	0.08



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,106)	1:A:105:ASP:H	1:A:113:ARG:H	10	0.08
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD21	11	0.08
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD22	11	0.08
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD23	11	0.08
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD21	11	0.08
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD22	11	0.08
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD23	11	0.08
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD21	11	0.08
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD22	11	0.08
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD23	11	0.08
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:90:VAL:HG21	10	0.08
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:90:VAL:HG22	10	0.08
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:90:VAL:HG23	10	0.08
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:90:VAL:HG21	10	0.08
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:90:VAL:HG22	10	0.08
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:90:VAL:HG23	10	0.08
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG21	10	0.08
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG22	10	0.08
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG23	10	0.08
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:90:VAL:HG21	16	0.08
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:90:VAL:HG22	16	0.08
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:90:VAL:HG23	16	0.08
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:90:VAL:HG21	16	0.08
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:90:VAL:HG22	16	0.08
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:90:VAL:HG23	16	0.08
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG21	16	0.08
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG22	16	0.08
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG23	16	0.08
(1,1026)	1:A:140:LEU:H	1:A:142:ASN:H	14	0.08
(1,102)	1:A:52:PHE:H	1:A:71:ILE:H	9	0.08
(1,1019)	1:A:132:GLU:H	1:A:134:TYR:H	7	0.08
(1,1019)	1:A:132:GLU:H	1:A:134:TYR:H	11	0.08
(1,1006)	1:A:45:ILE:H	1:A:122:ARG:H	16	0.08
(1,1005)	1:A:43:VAL:H	1:A:122:ARG:H	20	0.08
(1,1000)	1:A:67:PHE:H	1:A:114:TYR:H	4	0.08
(1,996)	1:A:108:GLY:H	1:A:112:LEU:H	8	0.07
(1,996)	1:A:108:GLY:H	1:A:112:LEU:H	15	0.07
(1,994)	1:A:106:GLY:H	1:A:113:ARG:H	8	0.07
(1,986)	1:A:99:LEU:H	1:A:100:GLY:H	19	0.07
(1,976)	1:A:80:ASP:H	1:A:88:THR:H	8	0.07
(1,974)	1:A:79:LEU:H	1:A:89:GLU:H	11	0.07
(1,963)	1:A:44:ASP:H	1:A:48:GLY:H	15	0.07



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,950)	1:A:25:THR:H	1:A:26:GLU:H	12	0.07
(1,943)	1:A:14:ARG:H	1:A:17:TYR:H	6	0.07
(1,93)	1:A:8:LYS:H	1:A:10:LYS:H	9	0.07
(1,929)	1:A:6:GLU:H	1:A:8:LYS:H	16	0.07
(1,928)	1:A:131:GLU:H	1:A:134:TYR:H	14	0.07
(1,924)	1:A:26:GLU:H	1:A:64:TRP:HE1	10	0.07
(1,919)	1:A:80:ASP:H	1:A:89:GLU:H	14	0.07
(1,912)	1:A:21:GLN:H	1:A:24:GLY:H	3	0.07
(1,911)	1:A:19:VAL:H	1:A:21:GLN:H	4	0.07
(1,904)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD11	3	0.07
(1,904)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD12	3	0.07
(1,904)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD13	3	0.07
(1,904)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD11	3	0.07
(1,904)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD12	3	0.07
(1,904)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD13	3	0.07
(1,904)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD11	3	0.07
(1,904)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD12	3	0.07
(1,904)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD13	3	0.07
(1,902)	1:A:51:LEU:HD11	1:A:75:VAL:HG21	12	0.07
(1,902)	1:A:51:LEU:HD11	1:A:75:VAL:HG22	12	0.07
(1,902)	1:A:51:LEU:HD11	1:A:75:VAL:HG23	12	0.07
(1,902)	1:A:51:LEU:HD12	1:A:75:VAL:HG21	12	0.07
(1,902)	1:A:51:LEU:HD12	1:A:75:VAL:HG22	12	0.07
(1,902)	1:A:51:LEU:HD12	1:A:75:VAL:HG23	12	0.07
(1,902)	1:A:51:LEU:HD13	1:A:75:VAL:HG21	12	0.07
(1,902)	1:A:51:LEU:HD13	1:A:75:VAL:HG22	12	0.07
(1,902)	1:A:51:LEU:HD13	1:A:75:VAL:HG23	12	0.07
(1,892)	1:A:121:LEU:HD11	1:A:122:ARG:H	3	0.07
(1,892)	1:A:121:LEU:HD12	1:A:122:ARG:H	3	0.07
(1,892)	1:A:121:LEU:HD13	1:A:122:ARG:H	3	0.07
(1,864)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:74:GLU:H	15	0.07
(1,864)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:74:GLU:H	15	0.07
(1,864)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:74:GLU:H	15	0.07
(1,857)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:129:LEU:HD11	12	0.07
(1,857)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:129:LEU:HD12	12	0.07
(1,857)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:129:LEU:HD13	12	0.07
(1,857)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:129:LEU:HD11	12	0.07
(1,857)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:129:LEU:HD12	12	0.07
(1,857)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:129:LEU:HD13	12	0.07
(1,857)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:129:LEU:HD11	12	0.07
(1,857)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:129:LEU:HD12	12	0.07
(1,857)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:129:LEU:HD13	12	0.07



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,829)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:112:LEU:HD11	14	0.07
(1,829)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:112:LEU:HD12	14	0.07
(1,829)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:112:LEU:HD13	14	0.07
(1,829)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:112:LEU:HD11	14	0.07
(1,829)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:112:LEU:HD12	14	0.07
(1,829)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:112:LEU:HD13	14	0.07
(1,829)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:112:LEU:HD11	14	0.07
(1,829)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:112:LEU:HD12	14	0.07
(1,829)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:112:LEU:HD13	14	0.07
(1,821)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:45:ILE:HD11	19	0.07
(1,821)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:45:ILE:HD12	19	0.07
(1,821)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:45:ILE:HD13	19	0.07
(1,821)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:45:ILE:HD11	19	0.07
(1,821)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:45:ILE:HD12	19	0.07
(1,821)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:45:ILE:HD13	19	0.07
(1,821)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:45:ILE:HD11	19	0.07
(1,821)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:45:ILE:HD12	19	0.07
(1,821)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:45:ILE:HD13	19	0.07
(1,821)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:45:ILE:HD11	20	0.07
(1,821)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:45:ILE:HD12	20	0.07
(1,821)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:45:ILE:HD13	20	0.07
(1,821)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:45:ILE:HD11	20	0.07
(1,821)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:45:ILE:HD12	20	0.07
(1,821)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:45:ILE:HD13	20	0.07
(1,821)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:45:ILE:HD11	20	0.07
(1,821)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:45:ILE:HD12	20	0.07
(1,821)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:45:ILE:HD13	20	0.07
(1,817)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:20:THR:H	6	0.07
(1,817)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:20:THR:H	6	0.07
(1,817)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:20:THR:H	6	0.07
(1,816)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG11	19	0.07
(1,816)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG12	19	0.07
(1,816)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG13	19	0.07
(1,81)	1:A:47:SER:H	1:A:48:GLY:H	5	0.07
(1,808)	1:A:15:MET:H	1:A:17:TYR:H	10	0.07
(1,807)	1:A:92:SER:H	1:A:96:ASP:H	15	0.07
(1,805)	1:A:54:SER:H	1:A:56:ASP:H	4	0.07
(1,8)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:42:TYR:H	18	0.07
(1,8)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:42:TYR:H	18	0.07
(1,8)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:42:TYR:H	18	0.07
(1,792)	1:A:130:LYS:H	1:A:134:TYR:H	18	0.07
(1,791)	1:A:130:LYS:H	1:A:132:GLU:H	4	0.07



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

(1,778)         1:A:7:GLU:H         1:A:9:ILE:H         6         0.07           (1,772)         1:A:21:GLN:H         1:A:23:ASN:H         17         0.07           (1,760)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:H         14         0.07           (1,760)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:H         17         0.07           (1,75)         1:A:29:PHE:H         1:A:30:GLN:H         20         0.07           (1,726)         1:A:47:SER:H         1:A:48:GLY:H         5         0.07           (1,726)         1:A:47:SER:H         1:A:48:GLY:H         5         0.07           (1,726)         1:A:47:SER:H         1:A:46:VAL:H         5         0.07           (1,720)         1:A:29:PHE:H         1:A:36:GLN:H         20         0.07           (1,715)         1:A:16:GLN:HE21         1:A:46:VAL:H         5         0.07           (1,713)         1:A:34:TRP:H         1:A:36:HIS:H         6         0.07           (1,702)         1:A:112:LEU:HD11         1:A:113:ARG:H         8         0.07           (1,702)         1:A:112:LEU:HD12         1:A:13:ARG:H         8         0.07           (1,702)         1:A:112:LEU:HD13         1:A:13:ARG:H         12         0.07	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,760)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:H         14         0.07           (1,760)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:H         17         0.07           (1,750)         1:A:29:PHE:H         1:A:30:GLN:H         20         0.07           (1,738)         1:A:8:LYS:H         1:A:40:LYS:H         9         0.07           (1,726)         1:A:47:SER:H         1:A:48:GLY:H         5         0.07           (1,720)         1:A:29:PHE:H         1:A:30:GLN:H         20         0.07           (1,715)         1:A:16:GLN:HE21         1:A:46:VAL:H         5         0.07           (1,715)         1:A:16:GLN:HE21         1:A:46:VAL:H         5         0.07           (1,715)         1:A:16:GLN:HE21         1:A:46:VAL:H         15         0.07           (1,713)         1:A:34:TRP:H         1:A:46:VAL:H         15         0.07           (1,702)         1:A:4112:LEU:HD11         1:A:13:ARG:H         8         0.07           (1,702)         1:A:112:LEU:HD12         1:A:13:ARG:H         8         0.07           (1,702)         1:A:112:LEU:HD13         1:A:13:ARG:H         12         0.07           (1,702)         1:A:110:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         15	(1,778)	1:A:7:GLU:H	1:A:9:ILE:H	6	0.07
(1,760)         1:A:89:GLU:H         1:A:102:VAL:H         17         0.07           (1,75)         1:A:29:PHE:H         1:A:30:GLN:H         20         0.07           (1,738)         1:A:29:PHE:H         1:A:10:LYS:H         9         0.07           (1,726)         1:A:47:SER:H         1:A:48:GLY:H         5         0.07           (1,720)         1:A:29:PHE:H         1:A:30:GLN:H         20         0.07           (1,715)         1:A:16:GLN:HE21         1:A:46:VAL:H         5         0.07           (1,713)         1:A:36:TRP:H         1:A:34:VS:H         15         0.07           (1,709)         1:A:47:SER:HG         1:A:49:LYS:H         17         0.07           (1,709)         1:A:47:SER:HG         1:A:49:LYS:H         17         0.07           (1,702)         1:A:112:LEU:HD12         1:A:113:ARG:H         8         0.07           (1,702)         1:A:112:LEU:HD13         1:A:113:ARG:H         8         0.07           (1,702)         1:A:112:LEU:HD11         1:A:113:ARG:H         12         0.07           (1,702)         1:A:112:LEU:HD11         1:A:113:ARG:H         12         0.07           (1,702)         1:A:112:LEU:HD11         1:A:113:ARG:H         12	(1,772)	1:A:21:GLN:H	1:A:23:ASN:H	17	0.07
(1,75) 1:A:29:PHE:H 1:A:30:GLN:H 20 0.07 (1,738) 1:A:8:LYS:H 1:A:10:LYS:H 9 0.07 (1,726) 1:A:47:SER:H 1:A:48:GLY:H 5 0.07 (1,720) 1:A:29:PHE:H 1:A:30:GLN:H 20 0.07 (1,720) 1:A:29:PHE:H 1:A:30:GLN:H 20 0.07 (1,715) 1:A:16:GLN:HE21 1:A:46:VAL:H 5 0.07 (1,715) 1:A:16:GLN:HE21 1:A:46:VAL:H 15 0.07 (1,713) 1:A:34:TRP:H 1:A:36:HIS:H 6 0.07 (1,709) 1:A:47:SER:HG 1:A:49:LYS:H 17 0.07 (1,702) 1:A:112:LEU:HD11 1:A:113:ARG:H 8 0.07 (1,702) 1:A:112:LEU:HD11 1:A:113:ARG:H 8 0.07 (1,702) 1:A:112:LEU:HD11 1:A:113:ARG:H 8 0.07 (1,702) 1:A:112:LEU:HD11 1:A:113:ARG:H 12 0.07 (1,702) 1:A:112:LEU:HD12 1:A:113:ARG:H 12 0.07 (1,702) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H 12 0.07 (1,702) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H 12 0.07 (1,702) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H 12 0.07 (1,700) 1:A:110:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD11 15 0.07 (1,700) 1:A:110:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD12 15 0.07 (1,700) 1:A:110:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD13 15 0.07 (1,700) 1:A:110:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD13 15 0.07 (1,700) 1:A:110:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD13 15 0.07 (1,700) 1:A:16:GLN:HE21 1:A:46:VAL:H 5 0.07 (1,701) 1:A:16:GLN:HE21 1:A:46:VAL:H 5 0.07 (1,701) 1:A:16:GLN:HE21 1:A:41:LEU:HD13 15 0.07 (1,701) 1:A:16:GLN:HE21 1:A:41:LEU:HD13 14 0.07 (1,701) 1:A:16:GLN:HE21 1:A:41:LEU:HD13 14 0.07 (1,701) 1:A:16:GLN:HE21 1:A:41:LEU:HD13 15 0.07 (1,694) 1:A:79:LEU:H 1:A:41:LEU:HD13 14 0.07 (1,694) 1:A:79:LEU:H 1:A:41:LEU:HD13 15 0.07 (1,690) 1:A:79:LEU:H 1:A:49:LEU:HD13 2 0.07 (1,690) 1:A:79:LEU:H 1:A:49:LEU:HD13 5 0.07 (1,690) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD13 5 0.07 (1,690) 1:A:79:LEU:H 1:A:49:LEU:HD13 5 0.07 (1,690) 1:A:79:LEU:H 1:A:49:LEU:HD13 5 0.07 (1,690) 1:A:79:LEU:H 1:A:49:LEU:HD13 5 0.07 (1,690) 1:A:79:LEU:H 1:A:49:LEU:HD1	(1,760)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:H	14	0.07
(1,738)         1:A:8:LYS:H         1:A:10:LYS:H         9         0.07           (1,726)         1:A:47:SER:H         1:A:48:GLY:H         5         0.07           (1,720)         1:A:29:PHE:H         1:A:30:GLN:H         20         0.07           (1,715)         1:A:16:GLN:HE21         1:A:46:VAL:H         5         0.07           (1,715)         1:A:34:GRN:HE21         1:A:46:VAL:H         15         0.07           (1,713)         1:A:347:SER:HG         1:A:49:LYS:H         17         0.07           (1,709)         1:A:47:SER:HG         1:A:49:LYS:H         17         0.07           (1,702)         1:A:112:LEU:HD11         1:A:113:ARG:H         8         0.07           (1,702)         1:A:112:LEU:HD12         1:A:113:ARG:H         8         0.07           (1,702)         1:A:112:LEU:HD13         1:A:113:ARG:H         12         0.07           (1,702)         1:A:112:LEU:HD12         1:A:113:ARG:H         12         0.07           (1,702)         1:A:112:LEU:HD13         1:A:113:ARG:H         12         0.07           (1,702)         1:A:112:LEU:HD13         1:A:113:ARG:H         12         0.07           (1,702)         1:A:110:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD12 <td< td=""><td>(1,760)</td><td>1:A:89:GLU:H</td><td>1:A:102:VAL:H</td><td>17</td><td>0.07</td></td<>	(1,760)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:H	17	0.07
(1,726)         1:A:47:SER:H         1:A:48:GLY:H         5         0.07           (1,720)         1:A:29:PHE:H         1:A:30:GLN:H         20         0.07           (1,715)         1:A:16:GLN:HE21         1:A:46:VAL:H         5         0.07           (1,715)         1:A:16:GLN:HE21         1:A:46:VAL:H         5         0.07           (1,713)         1:A:47:SER:HG         1:A:46:VAL:H         15         0.07           (1,709)         1:A:47:SER:HG         1:A:49:IYS:H         17         0.07           (1,702)         1:A:112:LEU:HD11         1:A:13:ARG:H         8         0.07           (1,702)         1:A:112:LEU:HD13         1:A:113:ARG:H         8         0.07           (1,702)         1:A:112:LEU:HD13         1:A:113:ARG:H         12         0.07           (1,702)         1:A:112:LEU:HD11         1:A:113:ARG:H         12         0.07           (1,702)         1:A:112:LEU:HD13         1:A:112:ARG:H         12         0.07           (1,702)         1:A:110:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         15         0.07           (1,700)         1:A:110:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         15         0.07           (1,700)         1:A:16:GLN:HE21         1:A:46:VAL:H	(1,75)	1:A:29:PHE:H	1:A:30:GLN:H	20	0.07
(1,720) 1:A:129:PHE:H 1:A:30:GLN:H 20 0.07 (1,715) 1:A:16:GLN:HE21 1:A:46:VAL:H 5 0.07 (1,715) 1:A:16:GLN:HE21 1:A:46:VAL:H 15 0.07 (1,713) 1:A:34:TRP:H 1:A:36:HIS:H 6 0.07 (1,709) 1:A:47:SER:HG 1:A:49:LYS:H 17 0.07 (1,702) 1:A:112:LEU:HD11 1:A:113:ARG:H 8 0.07 (1,702) 1:A:112:LEU:HD12 1:A:113:ARG:H 8 0.07 (1,702) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H 8 0.07 (1,702) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H 8 0.07 (1,702) 1:A:112:LEU:HD11 1:A:113:ARG:H 8 0.07 (1,702) 1:A:112:LEU:HD13 1:A:113:ARG:H 12 0.07 (1,700) 1:A:110:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD11 15 0.07 (1,700) 1:A:110:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD13 15 0.07 (1,700) 1:A:110:ASN:HD21 1:A:112:LEU:HD13 15 0.07 (1,700) 1:A:16:GLN:HE21 1:A:46:VAL:H 5 0.07 (1,70) 1:A:16:GLN:HE21 1:A:46:VAL:H 5 0.07 (1,70) 1:A:14:LEU:H 1:A:41:LEU:HD11 14 0.07 (1,70) 1:A:41:LEU:H 1:A:41:LEU:HD13 14 0.07 (1,694) 1:A:78:LYS:H 1:A:90:VAL:HG11 14 0.07 (1,694) 1:A:78:LYS:H 1:A:90:VAL:HG11 14 0.07 (1,694) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD13 2 0.07 (1,690) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:HD13 5 0.07 (1,689) 1:A:46:VAL:HG22 6 0.07 (1,687) 1:A:15:MET:H 1:A:19:VAL:HG23 6	(1,738)	1:A:8:LYS:H	1:A:10:LYS:H	9	0.07
(1,715)         1:A:16:GLN:HE21         1:A:46:VAL:H         5         0.07           (1,715)         1:A:16:GLN:HE21         1:A:46:VAL:H         15         0.07           (1,713)         1:A:34:TRP:H         1:A:36:HIS:H         6         0.07           (1,709)         1:A:47:SER:HG         1:A:49:LYS:H         17         0.07           (1,702)         1:A:112:LEU:HD11         1:A:113:ARG:H         8         0.07           (1,702)         1:A:112:LEU:HD13         1:A:113:ARG:H         8         0.07           (1,702)         1:A:112:LEU:HD13         1:A:113:ARG:H         8         0.07           (1,702)         1:A:112:LEU:HD11         1:A:113:ARG:H         12         0.07           (1,702)         1:A:112:LEU:HD13         1:A:113:ARG:H         12         0.07           (1,702)         1:A:112:LEU:HD13         1:A:113:ARG:H         12         0.07           (1,700)         1:A:110:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         15         0.07           (1,700)         1:A:16:GLN:HE21         1:A:46:VAL:H         5         0.07           (1,70)         1:A:16:GLN:HE21         1:A:46:VAL:H         5         0.07           (1,7)         1:A:41:LEU:H         1:A:41:LEU:HD11	(1,726)	1:A:47:SER:H	1:A:48:GLY:H	5	0.07
(1,715)         1:A:16:GLN:HE21         1:A:46:VAL:H         15         0.07           (1,713)         1:A:34:TRP:H         1:A:36:HIS:H         6         0.07           (1,709)         1:A:47:SER:HG         1:A:49:LYS:H         17         0.07           (1,702)         1:A:112:LEU:HD11         1:A:113:ARG:H         8         0.07           (1,702)         1:A:112:LEU:HD12         1:A:113:ARG:H         8         0.07           (1,702)         1:A:112:LEU:HD13         1:A:113:ARG:H         12         0.07           (1,702)         1:A:112:LEU:HD12         1:A:113:ARG:H         12         0.07           (1,702)         1:A:112:LEU:HD13         1:A:113:ARG:H         12         0.07           (1,702)         1:A:112:LEU:HD13         1:A:113:ARG:H         12         0.07           (1,700)         1:A:110:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         15         0.07           (1,700)         1:A:110:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         15         0.07           (1,70)         1:A:16:GLN:HE21         1:A:46:VAL:H         5         0.07           (1,70)         1:A:16:GLN:HE21         1:A:46:VAL:H         5         0.07           (1,7)         1:A:41:LEU:H         1:A:41:LEU:HD11	(1,720)	1:A:29:PHE:H	1:A:30:GLN:H	20	0.07
(1,713)         1:A:34:TRP:H         1:A:36:HIS:H         6         0.07           (1,709)         1:A:47:SER:HG         1:A:49:LYS:H         17         0.07           (1,702)         1:A:112:LEU:HD11         1:A:113:ARG:H         8         0.07           (1,702)         1:A:112:LEU:HD12         1:A:113:ARG:H         8         0.07           (1,702)         1:A:112:LEU:HD13         1:A:113:ARG:H         8         0.07           (1,702)         1:A:112:LEU:HD11         1:A:113:ARG:H         12         0.07           (1,702)         1:A:112:LEU:HD13         1:A:113:ARG:H         12         0.07           (1,700)         1:A:110:ASN:HD21         1:A:113:ARG:H         12         0.07           (1,700)         1:A:110:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         15         0.07           (1,700)         1:A:110:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD12         15         0.07           (1,700)         1:A:16:GLN:HE21         1:A:46:VAL:H         5         0.07           (1,70)         1:A:41:LEU:H         1:A:44:VAL:H         15         0.07           (1,70)         1:A:44:LEU:H         1:A:44:VAL:H         15         0.07           (1,7)         1:A:44:LEU:H         1:A:44:VAL:HUII	(1,715)	1:A:16:GLN:HE21	1:A:46:VAL:H	5	0.07
(1,709)         1:A:47:SER:HG         1:A:49:LYS:H         17         0.07           (1,702)         1:A:112:LEU:HD11         1:A:113:ARG:H         8         0.07           (1,702)         1:A:112:LEU:HD12         1:A:113:ARG:H         8         0.07           (1,702)         1:A:112:LEU:HD13         1:A:113:ARG:H         8         0.07           (1,702)         1:A:112:LEU:HD11         1:A:113:ARG:H         12         0.07           (1,702)         1:A:112:LEU:HD13         1:A:113:ARG:H         12         0.07           (1,700)         1:A:110:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         15         0.07           (1,700)         1:A:110:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         15         0.07           (1,700)         1:A:110:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         15         0.07           (1,700)         1:A:16:GLN:HE21         1:A:46:VAL:H         5         0.07           (1,70)         1:A:16:GLN:HE21         1:A:46:VAL:H         15         0.07           (1,70)         1:A:14:LEU:H         1:A:44:VEU:HD11         14         0.07           (1,7)         1:A:41:LEU:H         1:A:44:VEU:HD12         14         0.07           (1,7)         1:A:48:LYS:H         1:A:90:VAL:HG11 <td>(1,715)</td> <td>1:A:16:GLN:HE21</td> <td>1:A:46:VAL:H</td> <td>15</td> <td>0.07</td>	(1,715)	1:A:16:GLN:HE21	1:A:46:VAL:H	15	0.07
(1,702)         1:A:112:LEU:HD11         1:A:113:ARG:H         8         0.07           (1,702)         1:A:112:LEU:HD12         1:A:113:ARG:H         8         0.07           (1,702)         1:A:112:LEU:HD13         1:A:113:ARG:H         8         0.07           (1,702)         1:A:112:LEU:HD11         1:A:113:ARG:H         12         0.07           (1,702)         1:A:112:LEU:HD12         1:A:113:ARG:H         12         0.07           (1,702)         1:A:112:LEU:HD13         1:A:113:ARG:H         12         0.07           (1,702)         1:A:112:LEU:HD13         1:A:112:LEU:HD11         15         0.07           (1,700)         1:A:110:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD12         15         0.07           (1,700)         1:A:110:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         15         0.07           (1,70)         1:A:16:GLN:HE21         1:A:46:VAL:H         5         0.07           (1,70)         1:A:16:GLN:HE21         1:A:46:VAL:H         5         0.07           (1,7)         1:A:41:LEU:H         1:A:41:LEU:HD11         14         0.07           (1,7)         1:A:41:LEU:H         1:A:41:LEU:HD12         14         0.07           (1,694)         1:A:78:LYS:H         1:A:90:VAL:HG11	(1,713)	1:A:34:TRP:H	1:A:36:HIS:H	6	0.07
(1,702)         1:A:112:LEU:HD12         1:A:113:ARG:H         8         0.07           (1,702)         1:A:112:LEU:HD13         1:A:113:ARG:H         8         0.07           (1,702)         1:A:112:LEU:HD11         1:A:113:ARG:H         12         0.07           (1,702)         1:A:112:LEU:HD12         1:A:113:ARG:H         12         0.07           (1,702)         1:A:112:LEU:HD13         1:A:113:ARG:H         12         0.07           (1,700)         1:A:110:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         15         0.07           (1,700)         1:A:110:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD12         15         0.07           (1,700)         1:A:110:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         15         0.07           (1,700)         1:A:16:GLN:HE21         1:A:46:VAL:H         5         0.07           (1,70)         1:A:16:GLN:HE21         1:A:46:VAL:H         5         0.07           (1,7)         1:A:41:LEU:H         1:A:41:LEU:HD11         14         0.07           (1,7)         1:A:41:LEU:H         1:A:41:LEU:HD12         14         0.07           (1,7)         1:A:41:LEU:H         1:A:41:LEU:HD13         14         0.07           (1,694)         1:A:78:LYS:H         1:A:90:VAL:HG11 </td <td>(1,709)</td> <td>1:A:47:SER:HG</td> <td>1:A:49:LYS:H</td> <td>17</td> <td>0.07</td>	(1,709)	1:A:47:SER:HG	1:A:49:LYS:H	17	0.07
(1,702)         1:A:112:LEU:HD13         1:A:113:ARG:H         8         0.07           (1,702)         1:A:112:LEU:HD11         1:A:113:ARG:H         12         0.07           (1,702)         1:A:112:LEU:HD12         1:A:113:ARG:H         12         0.07           (1,702)         1:A:112:LEU:HD13         1:A:113:ARG:H         12         0.07           (1,700)         1:A:110:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         15         0.07           (1,700)         1:A:110:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD12         15         0.07           (1,700)         1:A:110:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         15         0.07           (1,700)         1:A:16:GLN:HE21         1:A:46:VAL:H         5         0.07           (1,70)         1:A:16:GLN:HE21         1:A:46:VAL:H         5         0.07           (1,70)         1:A:16:GLN:HE21         1:A:46:VAL:H         15         0.07           (1,7)         1:A:41:LEU:H         1:A:41:LEU:HD11         14         0.07           (1,7)         1:A:41:LEU:H         1:A:41:LEU:HD12         14         0.07           (1,694)         1:A:78:LYS:H         1:A:490:VAL:HG11         14         0.07           (1,694)         1:A:78:LEU:H         1:A:90:VAL:HG13<	(1,702)	1:A:112:LEU:HD11	1:A:113:ARG:H	8	0.07
(1,702)         1:A:112:LEU:HD11         1:A:113:ARG:H         12         0.07           (1,702)         1:A:112:LEU:HD12         1:A:113:ARG:H         12         0.07           (1,702)         1:A:112:LEU:HD13         1:A:113:ARG:H         12         0.07           (1,700)         1:A:110:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         15         0.07           (1,700)         1:A:110:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         15         0.07           (1,700)         1:A:16:GLN:HE21         1:A:46:VAL:H         5         0.07           (1,70)         1:A:16:GLN:HE21         1:A:46:VAL:H         15         0.07           (1,70)         1:A:16:GLN:HE21         1:A:46:VAL:H         15         0.07           (1,70)         1:A:16:GLN:HE21         1:A:46:VAL:H         15         0.07           (1,7)         1:A:14:LEU:H         1:A:41:LEU:HD11         14         0.07           (1,7)         1:A:41:LEU:H         1:A:41:LEU:HD12         14         0.07           (1,694)         1:A:78:LYS:H         1:A:90:VAL:HG11         14         0.07           (1,694)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD11         2         0.07           (1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD11	(1,702)	1:A:112:LEU:HD12	1:A:113:ARG:H	8	0.07
(1,702)         1:A:112:LEU:HD12         1:A:113:ARG:H         12         0.07           (1,702)         1:A:112:LEU:HD13         1:A:113:ARG:H         12         0.07           (1,700)         1:A:110:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         15         0.07           (1,700)         1:A:110:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD12         15         0.07           (1,700)         1:A:16:GLN:HE21         1:A:46:VAL:H         5         0.07           (1,70)         1:A:46:GLN:HE21         1:A:46:VAL:H         15         0.07           (1,70)         1:A:41:LEU:H         1:A:41:LEU:HD11         14         0.07           (1,7)         1:A:41:LEU:H         1:A:41:LEU:HD12         14         0.07           (1,7)         1:A:41:LEU:H         1:A:41:LEU:HD13         14         0.07           (1,7)         1:A:41:LEU:H         1:A:41:LEU:HD13         14         0.07           (1,694)         1:A:78:LYS:H         1:A:90:VAL:HG11         14         0.07           (1,694)         1:A:78:LYS:H         1:A:90:VAL:HG12         14         0.07           (1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD11         2         0.07           (1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD13	(1,702)	1:A:112:LEU:HD13	1:A:113:ARG:H	8	0.07
(1,702)         1:A:112:LEU:HD13         1:A:113:ARG:H         12         0.07           (1,700)         1:A:110:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         15         0.07           (1,700)         1:A:110:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD12         15         0.07           (1,700)         1:A:110:ASN:HD21         1:A:46:VAL:H         5         0.07           (1,70)         1:A:16:GLN:HE21         1:A:46:VAL:H         5         0.07           (1,70)         1:A:41:LEU:H         1:A:44:LEU:HD11         14         0.07           (1,7)         1:A:41:LEU:H         1:A:41:LEU:HD12         14         0.07           (1,7)         1:A:41:LEU:H         1:A:41:LEU:HD13         14         0.07           (1,7)         1:A:41:LEU:H         1:A:41:LEU:HD13         14         0.07           (1,7)         1:A:41:LEU:H         1:A:41:LEU:HD13         14         0.07           (1,694)         1:A:78:LYS:H         1:A:90:VAL:HG11         14         0.07           (1,694)         1:A:78:LYS:H         1:A:90:VAL:HG12         14         0.07           (1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD11         2         0.07           (1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD13 <t< td=""><td>(1,702)</td><td>1:A:112:LEU:HD11</td><td>1:A:113:ARG:H</td><td>12</td><td>0.07</td></t<>	(1,702)	1:A:112:LEU:HD11	1:A:113:ARG:H	12	0.07
(1,700)         1:A:110:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         15         0.07           (1,700)         1:A:110:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD12         15         0.07           (1,700)         1:A:110:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         15         0.07           (1,70)         1:A:16:GLN:HE21         1:A:46:VAL:H         5         0.07           (1,70)         1:A:16:GLN:HE21         1:A:46:VAL:H         15         0.07           (1,70)         1:A:41:LEU:H         1:A:44:LEU:HD11         14         0.07           (1,7)         1:A:41:LEU:H         1:A:41:LEU:HD12         14         0.07           (1,7)         1:A:41:LEU:H         1:A:41:LEU:HD13         14         0.07           (1,7)         1:A:41:LEU:H         1:A:41:LEU:HD13         14         0.07           (1,694)         1:A:78:LYS:H         1:A:90:VAL:HG11         14         0.07           (1,694)         1:A:78:LYS:H         1:A:90:VAL:HG12         14         0.07           (1,694)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD11         2         0.07           (1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD12         2         0.07           (1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD13	(1,702)	1:A:112:LEU:HD12	1:A:113:ARG:H	12	0.07
(1,700)         1:A:110:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD11         15         0.07           (1,700)         1:A:110:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD12         15         0.07           (1,700)         1:A:110:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         15         0.07           (1,70)         1:A:16:GLN:HE21         1:A:46:VAL:H         5         0.07           (1,70)         1:A:16:GLN:HE21         1:A:46:VAL:H         15         0.07           (1,70)         1:A:41:LEU:H         1:A:44:LEU:HD11         14         0.07           (1,7)         1:A:41:LEU:H         1:A:41:LEU:HD12         14         0.07           (1,7)         1:A:41:LEU:H         1:A:41:LEU:HD13         14         0.07           (1,7)         1:A:41:LEU:H         1:A:41:LEU:HD13         14         0.07           (1,694)         1:A:78:LYS:H         1:A:90:VAL:HG11         14         0.07           (1,694)         1:A:78:LYS:H         1:A:90:VAL:HG12         14         0.07           (1,694)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD11         2         0.07           (1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD12         2         0.07           (1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD13	· ' '	1:A:112:LEU:HD13	1:A:113:ARG:H	12	0.07
(1,700)         1:A:110:ASN:HD21         1:A:112:LEU:HD13         15         0.07           (1,70)         1:A:16:GLN:HE21         1:A:46:VAL:H         5         0.07           (1,70)         1:A:16:GLN:HE21         1:A:46:VAL:H         15         0.07           (1,7)         1:A:41:LEU:H         1:A:41:LEU:HD11         14         0.07           (1,7)         1:A:41:LEU:H         1:A:41:LEU:HD13         14         0.07           (1,694)         1:A:78:LYS:H         1:A:90:VAL:HG11         14         0.07           (1,694)         1:A:78:LYS:H         1:A:90:VAL:HG12         14         0.07           (1,694)         1:A:78:LYS:H         1:A:90:VAL:HG13         14         0.07           (1,694)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD11         2         0.07           (1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD12         2         0.07           (1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD13         2         0.07           (1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD11         5         0.07           (1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:49:LEU:HD13         5         0.07           (1,689)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:48:GLY:H         15 <td>` '</td> <td>1:A:110:ASN:HD21</td> <td>1:A:112:LEU:HD11</td> <td>15</td> <td>0.07</td>	` '	1:A:110:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD11	15	0.07
(1,70)         1:A:16:GLN:HE21         1:A:46:VAL:H         5         0.07           (1,70)         1:A:16:GLN:HE21         1:A:46:VAL:H         15         0.07           (1,7)         1:A:41:LEU:H         1:A:41:LEU:HD11         14         0.07           (1,7)         1:A:41:LEU:H         1:A:41:LEU:HD12         14         0.07           (1,7)         1:A:41:LEU:H         1:A:41:LEU:HD13         14         0.07           (1,694)         1:A:78:LYS:H         1:A:90:VAL:HG11         14         0.07           (1,694)         1:A:78:LYS:H         1:A:90:VAL:HG12         14         0.07           (1,694)         1:A:78:LYS:H         1:A:90:VAL:HG13         14         0.07           (1,694)         1:A:78:LYS:H         1:A:90:VAL:HG13         14         0.07           (1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD11         2         0.07           (1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD13         2         0.07           (1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD11         5         0.07           (1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:49:LU:HD13         5         0.07           (1,689)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:48:GLY:H         15	(1,700)	1:A:110:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD12	15	0.07
(1,70)         1:A:16:GLN:HE21         1:A:46:VAL:H         15         0.07           (1,7)         1:A:41:LEU:H         1:A:41:LEU:HD11         14         0.07           (1,7)         1:A:41:LEU:H         1:A:41:LEU:HD12         14         0.07           (1,7)         1:A:41:LEU:H         1:A:41:LEU:HD13         14         0.07           (1,694)         1:A:78:LYS:H         1:A:90:VAL:HG11         14         0.07           (1,694)         1:A:78:LYS:H         1:A:90:VAL:HG12         14         0.07           (1,694)         1:A:78:LYS:H         1:A:90:VAL:HG13         14         0.07           (1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD11         2         0.07           (1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD12         2         0.07           (1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD13         2         0.07           (1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD12         5         0.07           (1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD13         5         0.07           (1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:49:PLEU:HD13         5         0.07           (1,689)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:48:GLY:H         15	(1,700)	1:A:110:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD13	15	0.07
(1,7)         1:A:41:LEU:H         1:A:41:LEU:HD11         14         0.07           (1,7)         1:A:41:LEU:H         1:A:41:LEU:HD12         14         0.07           (1,7)         1:A:41:LEU:H         1:A:41:LEU:HD13         14         0.07           (1,694)         1:A:78:LYS:H         1:A:90:VAL:HG11         14         0.07           (1,694)         1:A:78:LYS:H         1:A:90:VAL:HG12         14         0.07           (1,694)         1:A:78:LYS:H         1:A:90:VAL:HG13         14         0.07           (1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD11         2         0.07           (1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD12         2         0.07           (1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD13         2         0.07           (1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD12         5         0.07           (1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD13         5         0.07           (1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:49:LEU:HD13         5         0.07           (1,689)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:48:GLY:H         15         0.07           (1,689)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:48:GLY:H         15	(1,70)	1:A:16:GLN:HE21	1:A:46:VAL:H	5	0.07
(1,7)         1:A:41:LEU:H         1:A:41:LEU:HD12         14         0.07           (1,7)         1:A:41:LEU:H         1:A:41:LEU:HD13         14         0.07           (1,694)         1:A:78:LYS:H         1:A:90:VAL:HG11         14         0.07           (1,694)         1:A:78:LYS:H         1:A:90:VAL:HG12         14         0.07           (1,694)         1:A:78:LYS:H         1:A:90:VAL:HG13         14         0.07           (1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD11         2         0.07           (1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD12         2         0.07           (1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD13         2         0.07           (1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD12         5         0.07           (1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD13         5         0.07           (1,680)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:48:GLY:H         15         0.07           (1,689)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:48:GLY:H         15         0.07           (1,687)         1:A:15:MET:H         1:A:19:VAL:HG22         6         0.07           (1,687)         1:A:15:MET:H         1:A:19:VAL:HG23         6	(1,70)	1:A:16:GLN:HE21	1:A:46:VAL:H	15	0.07
(1,7)         1:A:41:LEU:H         1:A:41:LEU:HD12         14         0.07           (1,7)         1:A:41:LEU:H         1:A:41:LEU:HD13         14         0.07           (1,694)         1:A:78:LYS:H         1:A:90:VAL:HG11         14         0.07           (1,694)         1:A:78:LYS:H         1:A:90:VAL:HG12         14         0.07           (1,694)         1:A:78:LYS:H         1:A:90:VAL:HG13         14         0.07           (1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD11         2         0.07           (1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD12         2         0.07           (1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD13         2         0.07           (1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD12         5         0.07           (1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD13         5         0.07           (1,680)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:48:GLY:H         15         0.07           (1,689)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:48:GLY:H         15         0.07           (1,687)         1:A:15:MET:H         1:A:19:VAL:HG22         6         0.07           (1,687)         1:A:15:MET:H         1:A:19:VAL:HG23         6	(1,7)	1:A:41:LEU:H	1:A:41:LEU:HD11	14	0.07
(1,694)         1:A:78:LYS:H         1:A:90:VAL:HG11         14         0.07           (1,694)         1:A:78:LYS:H         1:A:90:VAL:HG12         14         0.07           (1,694)         1:A:78:LYS:H         1:A:90:VAL:HG13         14         0.07           (1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD11         2         0.07           (1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD12         2         0.07           (1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD13         2         0.07           (1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD12         5         0.07           (1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD13         5         0.07           (1,690)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:48:GLY:H         15         0.07           (1,689)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:48:GLY:H         15         0.07           (1,689)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:48:GLY:H         15         0.07           (1,687)         1:A:15:MET:H         1:A:19:VAL:HG21         6         0.07           (1,687)         1:A:15:MET:H         1:A:19:VAL:HG23         6         0.07		1:A:41:LEU:H	1:A:41:LEU:HD12	14	0.07
(1,694)         1:A:78:LYS:H         1:A:90:VAL:HG12         14         0.07           (1,694)         1:A:78:LYS:H         1:A:90:VAL:HG13         14         0.07           (1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD11         2         0.07           (1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD12         2         0.07           (1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD13         2         0.07           (1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD12         5         0.07           (1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD13         5         0.07           (1,689)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:48:GLY:H         15         0.07           (1,689)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:48:GLY:H         15         0.07           (1,689)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:48:GLY:H         15         0.07           (1,687)         1:A:15:MET:H         1:A:19:VAL:HG21         6         0.07           (1,687)         1:A:15:MET:H         1:A:19:VAL:HG23         6         0.07           (1,687)         1:A:15:MET:H         1:A:19:VAL:HG23         6         0.07	(1,7)	1:A:41:LEU:H	1:A:41:LEU:HD13	14	0.07
(1,694)         1:A:78:LYS:H         1:A:90:VAL:HG13         14         0.07           (1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD11         2         0.07           (1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD12         2         0.07           (1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD13         2         0.07           (1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD12         5         0.07           (1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD13         5         0.07           (1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD13         5         0.07           (1,689)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:48:GLY:H         15         0.07           (1,689)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:48:GLY:H         15         0.07           (1,687)         1:A:15:MET:H         1:A:19:VAL:HG21         6         0.07           (1,687)         1:A:15:MET:H         1:A:19:VAL:HG22         6         0.07           (1,687)         1:A:15:MET:H         1:A:19:VAL:HG23         6         0.07	(1,694)	1:A:78:LYS:H	1:A:90:VAL:HG11	14	0.07
(1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD11         2         0.07           (1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD12         2         0.07           (1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD13         2         0.07           (1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD11         5         0.07           (1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD12         5         0.07           (1,690)         1:A:49:LEU:H         1:A:48:GLY:H         15         0.07           (1,689)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:48:GLY:H         15         0.07           (1,689)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:48:GLY:H         15         0.07           (1,687)         1:A:15:MET:H         1:A:19:VAL:HG21         6         0.07           (1,687)         1:A:15:MET:H         1:A:19:VAL:HG22         6         0.07           (1,687)         1:A:15:MET:H         1:A:19:VAL:HG23         6         0.07	(1,694)	1:A:78:LYS:H	1:A:90:VAL:HG12	14	0.07
(1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD12         2         0.07           (1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD13         2         0.07           (1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD11         5         0.07           (1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD12         5         0.07           (1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD13         5         0.07           (1,689)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:48:GLY:H         15         0.07           (1,689)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:48:GLY:H         15         0.07           (1,689)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:48:GLY:H         15         0.07           (1,687)         1:A:15:MET:H         1:A:19:VAL:HG21         6         0.07           (1,687)         1:A:15:MET:H         1:A:19:VAL:HG22         6         0.07           (1,687)         1:A:15:MET:H         1:A:19:VAL:HG23         6         0.07	(1,694)	1:A:78:LYS:H	1:A:90:VAL:HG13	14	0.07
(1,690)       1:A:79:LEU:H       1:A:79:LEU:HD13       2       0.07         (1,690)       1:A:79:LEU:H       1:A:79:LEU:HD11       5       0.07         (1,690)       1:A:79:LEU:H       1:A:79:LEU:HD12       5       0.07         (1,690)       1:A:79:LEU:H       1:A:79:LEU:HD13       5       0.07         (1,689)       1:A:46:VAL:HG21       1:A:48:GLY:H       15       0.07         (1,689)       1:A:46:VAL:HG22       1:A:48:GLY:H       15       0.07         (1,689)       1:A:46:VAL:HG23       1:A:48:GLY:H       15       0.07         (1,687)       1:A:15:MET:H       1:A:19:VAL:HG21       6       0.07         (1,687)       1:A:15:MET:H       1:A:19:VAL:HG22       6       0.07         (1,687)       1:A:15:MET:H       1:A:19:VAL:HG23       6       0.07	(1,690)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD11	2	0.07
(1,690)       1:A:79:LEU:H       1:A:79:LEU:HD11       5       0.07         (1,690)       1:A:79:LEU:H       1:A:79:LEU:HD12       5       0.07         (1,690)       1:A:79:LEU:H       1:A:79:LEU:HD13       5       0.07         (1,689)       1:A:46:VAL:HG21       1:A:48:GLY:H       15       0.07         (1,689)       1:A:46:VAL:HG22       1:A:48:GLY:H       15       0.07         (1,689)       1:A:46:VAL:HG23       1:A:48:GLY:H       15       0.07         (1,687)       1:A:15:MET:H       1:A:19:VAL:HG21       6       0.07         (1,687)       1:A:15:MET:H       1:A:19:VAL:HG22       6       0.07         (1,687)       1:A:15:MET:H       1:A:19:VAL:HG23       6       0.07	(1,690)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD12	2	0.07
(1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD11         5         0.07           (1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD12         5         0.07           (1,690)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD13         5         0.07           (1,689)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:48:GLY:H         15         0.07           (1,689)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:48:GLY:H         15         0.07           (1,689)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:48:GLY:H         15         0.07           (1,687)         1:A:15:MET:H         1:A:19:VAL:HG21         6         0.07           (1,687)         1:A:15:MET:H         1:A:19:VAL:HG22         6         0.07           (1,687)         1:A:15:MET:H         1:A:19:VAL:HG23         6         0.07	· · /	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD13	2	0.07
(1,690)       1:A:79:LEU:H       1:A:79:LEU:HD13       5       0.07         (1,689)       1:A:46:VAL:HG21       1:A:48:GLY:H       15       0.07         (1,689)       1:A:46:VAL:HG22       1:A:48:GLY:H       15       0.07         (1,689)       1:A:46:VAL:HG23       1:A:48:GLY:H       15       0.07         (1,687)       1:A:15:MET:H       1:A:19:VAL:HG21       6       0.07         (1,687)       1:A:15:MET:H       1:A:19:VAL:HG22       6       0.07         (1,687)       1:A:15:MET:H       1:A:19:VAL:HG23       6       0.07		1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD11	5	0.07
(1,690)       1:A:79:LEU:H       1:A:79:LEU:HD13       5       0.07         (1,689)       1:A:46:VAL:HG21       1:A:48:GLY:H       15       0.07         (1,689)       1:A:46:VAL:HG22       1:A:48:GLY:H       15       0.07         (1,689)       1:A:46:VAL:HG23       1:A:48:GLY:H       15       0.07         (1,687)       1:A:15:MET:H       1:A:19:VAL:HG21       6       0.07         (1,687)       1:A:15:MET:H       1:A:19:VAL:HG22       6       0.07         (1,687)       1:A:15:MET:H       1:A:19:VAL:HG23       6       0.07	(1,690)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD12	5	0.07
(1,689)       1:A:46:VAL:HG22       1:A:48:GLY:H       15       0.07         (1,689)       1:A:46:VAL:HG23       1:A:48:GLY:H       15       0.07         (1,687)       1:A:15:MET:H       1:A:19:VAL:HG21       6       0.07         (1,687)       1:A:15:MET:H       1:A:19:VAL:HG22       6       0.07         (1,687)       1:A:15:MET:H       1:A:19:VAL:HG23       6       0.07	/	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD13	5	0.07
(1,689)       1:A:46:VAL:HG22       1:A:48:GLY:H       15       0.07         (1,689)       1:A:46:VAL:HG23       1:A:48:GLY:H       15       0.07         (1,687)       1:A:15:MET:H       1:A:19:VAL:HG21       6       0.07         (1,687)       1:A:15:MET:H       1:A:19:VAL:HG22       6       0.07         (1,687)       1:A:15:MET:H       1:A:19:VAL:HG23       6       0.07	(1,689)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:48:GLY:H	15	0.07
(1,689)       1:A:46:VAL:HG23       1:A:48:GLY:H       15       0.07         (1,687)       1:A:15:MET:H       1:A:19:VAL:HG21       6       0.07         (1,687)       1:A:15:MET:H       1:A:19:VAL:HG22       6       0.07         (1,687)       1:A:15:MET:H       1:A:19:VAL:HG23       6       0.07	(1,689)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:48:GLY:H	15	0.07
(1,687)       1:A:15:MET:H       1:A:19:VAL:HG21       6       0.07         (1,687)       1:A:15:MET:H       1:A:19:VAL:HG22       6       0.07         (1,687)       1:A:15:MET:H       1:A:19:VAL:HG23       6       0.07		1:A:46:VAL:HG23	1:A:48:GLY:H	15	0.07
(1,687)       1:A:15:MET:H       1:A:19:VAL:HG22       6       0.07         (1,687)       1:A:15:MET:H       1:A:19:VAL:HG23       6       0.07		1:A:15:MET:H	1:A:19:VAL:HG21	6	0.07
		1:A:15:MET:H	1:A:19:VAL:HG22	6	0.07
	(1,687)	1:A:15:MET:H	1:A:19:VAL:HG23	6	0.07
		1:A:45:ILE:H	1:A:46:VAL:HG21	9	0.07



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,686)	1:A:45:ILE:H	1:A:46:VAL:HG22	9	0.07
(1,686)	1:A:45:ILE:H	1:A:46:VAL:HG23	9	0.07
(1,685)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:97:SER:H	11	0.07
(1,685)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:97:SER:H	11	0.07
(1,685)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:97:SER:H	11	0.07
(1,681)	1:A:12:LEU:HD21	1:A:47:SER:H	15	0.07
(1,681)	1:A:12:LEU:HD22	1:A:47:SER:H	15	0.07
(1,681)	1:A:12:LEU:HD23	1:A:47:SER:H	15	0.07
(1,68)	1:A:34:TRP:H	1:A:36:HIS:H	6	0.07
(1,675)	1:A:106:GLY:H	1:A:112:LEU:HD21	19	0.07
(1,675)	1:A:106:GLY:H	1:A:112:LEU:HD22	19	0.07
(1,675)	1:A:106:GLY:H	1:A:112:LEU:HD23	19	0.07
(1,664)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:127:HIS:H	14	0.07
(1,664)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:127:HIS:H	14	0.07
(1,664)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:127:HIS:H	14	0.07
(1,659)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD21	14	0.07
(1,659)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD22	14	0.07
(1,659)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD23	14	0.07
(1,653)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:42:TYR:H	18	0.07
(1,653)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:42:TYR:H	18	0.07
(1,653)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:42:TYR:H	18	0.07
(1,652)	1:A:41:LEU:H	1:A:41:LEU:HD11	14	0.07
(1,652)	1:A:41:LEU:H	1:A:41:LEU:HD12	14	0.07
(1,652)	1:A:41:LEU:H	1:A:41:LEU:HD13	14	0.07
(1,644)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD11	9	0.07
(1,644)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD12	9	0.07
(1,644)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD13	9	0.07
(1,644)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD11	16	0.07
(1,644)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD12	16	0.07
(1,644)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD13	16	0.07
(1,64)	1:A:47:SER:HG	1:A:49:LYS:H	17	0.07
(1,621)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:51:LEU:H	6	0.07
(1,621)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:51:LEU:H	6	0.07
(1,621)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:51:LEU:H	6	0.07
(1,619)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:H	19	0.07
(1,619)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:H	19	0.07
(1,619)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:H	19	0.07
(1,600)	1:A:142:ASN:H	1:A:142:ASN:HD21	16	0.07
(1,592)	1:A:22:ASN:H	1:A:22:ASN:HD21	20	0.07
(1,584)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD11	12	0.07
(1,584)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD12	12	0.07
(1,584)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD13	12	0.07



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,584)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD11	17	0.07
(1,584)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD12	17	0.07
(1,584)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD13	17	0.07
(1,581)	1:A:102:VAL:HG11	1:A:113:ARG:H	2	0.07
(1,581)	1:A:102:VAL:HG12	1:A:113:ARG:H	2	0.07
(1,581)	1:A:102:VAL:HG13	1:A:113:ARG:H	2	0.07
(1,580)	1:A:112:LEU:HD21	1:A:113:ARG:H	9	0.07
(1,580)	1:A:112:LEU:HD22	1:A:113:ARG:H	9	0.07
(1,580)	1:A:112:LEU:HD23	1:A:113:ARG:H	9	0.07
(1,572)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:141:PHE:H	4	0.07
(1,572)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:141:PHE:H	4	0.07
(1,572)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:141:PHE:H	4	0.07
(1,572)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:141:PHE:H	13	0.07
(1,572)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:141:PHE:H	13	0.07
(1,572)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:141:PHE:H	13	0.07
(1,571)	1:A:140:LEU:HD11	1:A:141:PHE:H	6	0.07
(1,571)	1:A:140:LEU:HD12	1:A:141:PHE:H	6	0.07
(1,571)	1:A:140:LEU:HD13	1:A:141:PHE:H	6	0.07
(1,57)	1:A:112:LEU:HD11	1:A:113:ARG:H	8	0.07
(1,57)	1:A:112:LEU:HD12	1:A:113:ARG:H	8	0.07
(1,57)	1:A:112:LEU:HD13	1:A:113:ARG:H	8	0.07
(1,57)	1:A:112:LEU:HD11	1:A:113:ARG:H	12	0.07
(1,57)	1:A:112:LEU:HD12	1:A:113:ARG:H	12	0.07
(1,57)	1:A:112:LEU:HD13	1:A:113:ARG:H	12	0.07
(1,564)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:137:TYR:H	6	0.07
(1,564)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:137:TYR:H	6	0.07
(1,564)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:137:TYR:H	6	0.07
(1,564)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:137:TYR:H	7	0.07
(1,564)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:137:TYR:H	7	0.07
(1,564)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:137:TYR:H	7	0.07
(1,562)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD21	5	0.07
(1,562)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD22	5	0.07
(1,562)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD23	5	0.07
(1,562)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD21	20	0.07
(1,562)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD22	20	0.07
(1,562)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD23	20	0.07
(1,557)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:131:GLU:H	17	0.07
(1,557)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:131:GLU:H	17	0.07
(1,557)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:131:GLU:H	17	0.07
(1,552)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD21	18	0.07
(1,552)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD22	18	0.07
(1,552)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD23	18	0.07



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,55)	1:A:110:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD11	15	0.07
(1,55)	1:A:110:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD12	15	0.07
(1,55)	1:A:110:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD13	15	0.07
(1,542)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD21	19	0.07
(1,542)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD22	19	0.07
(1,542)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD23	19	0.07
(1,536)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:102:VAL:H	13	0.07
(1,536)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:102:VAL:H	13	0.07
(1,536)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:102:VAL:H	13	0.07
(1,535)	1:A:101:HIS:H	1:A:116:ILE:HD11	10	0.07
(1,535)	1:A:101:HIS:H	1:A:116:ILE:HD12	10	0.07
(1,535)	1:A:101:HIS:H	1:A:116:ILE:HD13	10	0.07
(1,529)	1:A:99:LEU:H	1:A:116:ILE:HD11	11	0.07
(1,529)	1:A:99:LEU:H	1:A:116:ILE:HD12	11	0.07
(1,529)	1:A:99:LEU:H	1:A:116:ILE:HD13	11	0.07
(1,528)	1:A:105:ASP:H	1:A:112:LEU:HD21	12	0.07
(1,528)	1:A:105:ASP:H	1:A:112:LEU:HD22	12	0.07
(1,528)	1:A:105:ASP:H	1:A:112:LEU:HD23	12	0.07
(1,528)	1:A:105:ASP:H	1:A:112:LEU:HD21	19	0.07
(1,528)	1:A:105:ASP:H	1:A:112:LEU:HD22	19	0.07
(1,528)	1:A:105:ASP:H	1:A:112:LEU:HD23	19	0.07
(1,525)	1:A:98:HIS:H	1:A:99:LEU:HD21	10	0.07
(1,525)	1:A:98:HIS:H	1:A:99:LEU:HD22	10	0.07
(1,525)	1:A:98:HIS:H	1:A:99:LEU:HD23	10	0.07
(1,520)	1:A:90:VAL:H	1:A:90:VAL:HG11	10	0.07
(1,520)	1:A:90:VAL:H	1:A:90:VAL:HG12	10	0.07
(1,520)	1:A:90:VAL:H	1:A:90:VAL:HG13	10	0.07
(1,518)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD11	1	0.07
(1,518)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD12	1	0.07
(1,518)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD13	1	0.07
(1,518)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD11	12	0.07
(1,518)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD12	12	0.07
(1,518)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD13	12	0.07
(1,513)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:87:ARG:H	18	0.07
(1,513)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:87:ARG:H	18	0.07
(1,513)	1:A:79:LEU:HD13	1:A:87:ARG:H	18	0.07
(1,513)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:87:ARG:H	20	0.07
(1,513)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:87:ARG:H	20	0.07
(1,513)	1:A:79:LEU:HD13	1:A:87:ARG:H	20	0.07
(1,512)	1:A:79:LEU:HD21	1:A:87:ARG:H	15	0.07
(1,512)	1:A:79:LEU:HD22	1:A:87:ARG:H	15	0.07
(1,512)	1:A:79:LEU:HD23	1:A:87:ARG:H	15	0.07



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,512)	1:A:79:LEU:HD21	1:A:87:ARG:H	19	0.07
(1,512)	1:A:79:LEU:HD22	1:A:87:ARG:H	19	0.07
(1,512)	1:A:79:LEU:HD23	1:A:87:ARG:H	19	0.07
(1,505)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:76:GLU:H	5	0.07
(1,505)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:76:GLU:H	5	0.07
(1,505)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:76:GLU:H	5	0.07
(1,503)	1:A:76:GLU:H	1:A:99:LEU:HD21	5	0.07
(1,503)	1:A:76:GLU:H	1:A:99:LEU:HD22	5	0.07
(1,503)	1:A:76:GLU:H	1:A:99:LEU:HD23	5	0.07
(1,499)	1:A:71:ILE:H	1:A:71:ILE:HD11	9	0.07
(1,499)	1:A:71:ILE:H	1:A:71:ILE:HD12	9	0.07
(1,499)	1:A:71:ILE:H	1:A:71:ILE:HD13	9	0.07
(1,493)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:52:PHE:H	5	0.07
(1,493)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:52:PHE:H	5	0.07
(1,493)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:52:PHE:H	5	0.07
(1,493)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:52:PHE:H	7	0.07
(1,493)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:52:PHE:H	7	0.07
(1,493)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:52:PHE:H	7	0.07
(1,491)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:52:PHE:H	2	0.07
(1,491)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:52:PHE:H	2	0.07
(1,491)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:52:PHE:H	2	0.07
(1,491)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:52:PHE:H	6	0.07
(1,491)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:52:PHE:H	6	0.07
(1,491)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:52:PHE:H	6	0.07
(1,49)	1:A:78:LYS:H	1:A:90:VAL:HG11	14	0.07
(1,49)	1:A:78:LYS:H	1:A:90:VAL:HG12	14	0.07
(1,49)	1:A:78:LYS:H	1:A:90:VAL:HG13	14	0.07
(1,473)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD11	8	0.07
(1,473)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD12	8	0.07
(1,473)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD13	8	0.07
(1,473)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD11	11	0.07
(1,473)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD12	11	0.07
(1,473)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD13	11	0.07
(1,472)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:42:TYR:H	1	0.07
(1,472)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:42:TYR:H	1	0.07
(1,472)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:42:TYR:H	1	0.07
(1,472)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:42:TYR:H	13	0.07
(1,472)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:42:TYR:H	13	0.07
(1,472)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:42:TYR:H	13	0.07
(1,472)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:42:TYR:H	14	0.07
(1,472)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:42:TYR:H	14	0.07
(1,472)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:42:TYR:H	14	0.07



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,469)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:24:GLY:H	2	0.07
(1,469)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:24:GLY:H	2	0.07
(1,469)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:24:GLY:H	2	0.07
(1,468)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:23:ASN:H	4	0.07
(1,468)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:23:ASN:H	4	0.07
(1,468)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:23:ASN:H	4	0.07
(1,468)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:23:ASN:H	11	0.07
(1,468)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:23:ASN:H	11	0.07
(1,468)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:23:ASN:H	11	0.07
(1,468)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:23:ASN:H	13	0.07
(1,468)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:23:ASN:H	13	0.07
(1,468)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:23:ASN:H	13	0.07
(1,465)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG11	4	0.07
(1,465)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG12	4	0.07
(1,465)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG13	4	0.07
(1,463)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:16:GLN:H	13	0.07
(1,463)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:16:GLN:H	13	0.07
(1,463)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:16:GLN:H	13	0.07
(1,462)	1:A:45:ILE:HD11	1:A:46:VAL:H	12	0.07
(1,462)	1:A:45:ILE:HD12	1:A:46:VAL:H	12	0.07
(1,462)	1:A:45:ILE:HD13	1:A:46:VAL:H	12	0.07
(1,458)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:10:LYS:H	16	0.07
(1,458)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:10:LYS:H	16	0.07
(1,458)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:10:LYS:H	16	0.07
(1,458)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:10:LYS:H	18	0.07
(1,458)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:10:LYS:H	18	0.07
(1,458)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:10:LYS:H	18	0.07
(1,458)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:10:LYS:H	19	0.07
(1,458)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:10:LYS:H	19	0.07
(1,458)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:10:LYS:H	19	0.07
(1,453)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG21	10	0.07
(1,453)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG22	10	0.07
(1,453)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG23	10	0.07
(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD11	2	0.07
(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD12	2	0.07
(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD13	2	0.07
(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD11	5	0.07
(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD12	5	0.07
(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD13	5	0.07
(1,448)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:89:GLU:H	14	0.07
(1,448)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:89:GLU:H	14	0.07
(1,448)	1:A:79:LEU:HD13	1:A:89:GLU:H	14	0.07



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,445)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:113:ARG:H	7	0.07
(1,445)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:113:ARG:H	7	0.07
(1,445)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:113:ARG:H	7	0.07
(1,44)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:48:GLY:H	15	0.07
(1,44)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:48:GLY:H	15	0.07
(1,44)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:48:GLY:H	15	0.07
(1,431)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:103:PHE:H	9	0.07
(1,431)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:103:PHE:H	9	0.07
(1,431)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:103:PHE:H	9	0.07
(1,430)	1:A:46:VAL:HG11	1:A:47:SER:H	15	0.07
(1,430)	1:A:46:VAL:HG12	1:A:47:SER:H	15	0.07
(1,430)	1:A:46:VAL:HG13	1:A:47:SER:H	15	0.07
(1,42)	1:A:15:MET:H	1:A:19:VAL:HG21	6	0.07
(1,42)	1:A:15:MET:H	1:A:19:VAL:HG22	6	0.07
(1,42)	1:A:15:MET:H	1:A:19:VAL:HG23	6	0.07
(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD21	16	0.07
(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD22	16	0.07
(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD23	16	0.07
(1,41)	1:A:45:ILE:H	1:A:46:VAL:HG21	9	0.07
(1,41)	1:A:45:ILE:H	1:A:46:VAL:HG22	9	0.07
(1,41)	1:A:45:ILE:H	1:A:46:VAL:HG23	9	0.07
(1,407)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:46:VAL:HG21	2	0.07
(1,407)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:46:VAL:HG22	2	0.07
(1,407)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:46:VAL:HG23	2	0.07
(1,407)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:46:VAL:HG21	2	0.07
(1,407)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:46:VAL:HG22	2	0.07
(1,407)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:46:VAL:HG23	2	0.07
(1,407)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:46:VAL:HG21	2	0.07
(1,407)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:46:VAL:HG22	2	0.07
(1,407)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:46:VAL:HG23	2	0.07
(1,407)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:46:VAL:HG21	18	0.07
(1,407)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:46:VAL:HG22	18	0.07
(1,407)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:46:VAL:HG23	18	0.07
(1,407)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:46:VAL:HG21	18	0.07
(1,407)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:46:VAL:HG22	18	0.07
(1,407)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:46:VAL:HG23	18	0.07
(1,407)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:46:VAL:HG21	18	0.07
(1,407)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:46:VAL:HG22	18	0.07
(1,407)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:46:VAL:HG23	18	0.07
(1,40)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:97:SER:H	11	0.07
(1,40)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:97:SER:H	11	0.07
(1,40)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:97:SER:H	11	0.07



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,379)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:H	8	0.07
(1,374)	1:A:132:GLU:H	1:A:134:TYR:H	6	0.07
(1,368)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:H	15	0.07
(1,366)	1:A:41:LEU:H	1:A:126:LYS:H	3	0.07
(1,366)	1:A:41:LEU:H	1:A:126:LYS:H	4	0.07
(1,361)	1:A:45:ILE:H	1:A:122:ARG:H	12	0.07
(1,36)	1:A:12:LEU:HD21	1:A:47:SER:H	15	0.07
(1,36)	1:A:12:LEU:HD22	1:A:47:SER:H	15	0.07
(1,36)	1:A:12:LEU:HD23	1:A:47:SER:H	15	0.07
(1,351)	1:A:108:GLY:H	1:A:112:LEU:H	8	0.07
(1,351)	1:A:108:GLY:H	1:A:112:LEU:H	15	0.07
(1,349)	1:A:106:GLY:H	1:A:113:ARG:H	8	0.07
(1,341)	1:A:99:LEU:H	1:A:100:GLY:H	19	0.07
(1,331)	1:A:80:ASP:H	1:A:88:THR:H	8	0.07
(1,329)	1:A:79:LEU:H	1:A:89:GLU:H	11	0.07
(1,318)	1:A:44:ASP:H	1:A:48:GLY:H	15	0.07
(1,305)	1:A:25:THR:H	1:A:26:GLU:H	12	0.07
(1,30)	1:A:106:GLY:H	1:A:112:LEU:HD21	19	0.07
(1,30)	1:A:106:GLY:H	1:A:112:LEU:HD22	19	0.07
(1,30)	1:A:106:GLY:H	1:A:112:LEU:HD23	19	0.07
(1,298)	1:A:14:ARG:H	1:A:17:TYR:H	6	0.07
(1,284)	1:A:6:GLU:H	1:A:8:LYS:H	16	0.07
(1,283)	1:A:131:GLU:H	1:A:134:TYR:H	14	0.07
(1,279)	1:A:26:GLU:H	1:A:64:TRP:HE1	10	0.07
(1,274)	1:A:80:ASP:H	1:A:89:GLU:H	14	0.07
(1,267)	1:A:21:GLN:H	1:A:24:GLY:H	3	0.07
(1,266)	1:A:19:VAL:H	1:A:21:GLN:H	4	0.07
(1,259)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD11	3	0.07
(1,259)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD12	3	0.07
(1,259)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD13	3	0.07
(1,259)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD11	3	0.07
(1,259)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD12	3	0.07
(1,259)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD13	3	0.07
(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD11	3	0.07
(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD12	3	0.07
(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD13	3	0.07
(1,257)	1:A:51:LEU:HD11	1:A:75:VAL:HG21	12	0.07
(1,257)	1:A:51:LEU:HD11	1:A:75:VAL:HG22	12	0.07
(1,257)	1:A:51:LEU:HD11	1:A:75:VAL:HG23	12	0.07
(1,257)	1:A:51:LEU:HD12	1:A:75:VAL:HG21	12	0.07
(1,257)	1:A:51:LEU:HD12	1:A:75:VAL:HG22	12	0.07
(1,257)	1:A:51:LEU:HD12	1:A:75:VAL:HG23	12	0.07



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,257)	1:A:51:LEU:HD13	1:A:75:VAL:HG21	12	0.07
(1,257)	1:A:51:LEU:HD13	1:A:75:VAL:HG22	12	0.07
(1,257)	1:A:51:LEU:HD13	1:A:75:VAL:HG23	12	0.07
(1,247)	1:A:121:LEU:HD11	1:A:122:ARG:H	3	0.07
(1,247)	1:A:121:LEU:HD12	1:A:122:ARG:H	3	0.07
(1,247)	1:A:121:LEU:HD13	1:A:122:ARG:H	3	0.07
(1,219)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:74:GLU:H	15	0.07
(1,219)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:74:GLU:H	15	0.07
(1,219)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:74:GLU:H	15	0.07
(1,212)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:129:LEU:HD11	12	0.07
(1,212)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:129:LEU:HD12	12	0.07
(1,212)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:129:LEU:HD13	12	0.07
(1,212)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:129:LEU:HD11	12	0.07
(1,212)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:129:LEU:HD12	12	0.07
(1,212)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:129:LEU:HD13	12	0.07
(1,212)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:129:LEU:HD11	12	0.07
(1,212)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:129:LEU:HD12	12	0.07
(1,212)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:129:LEU:HD13	12	0.07
(1,19)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:127:HIS:H	14	0.07
(1,19)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:127:HIS:H	14	0.07
(1,19)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:127:HIS:H	14	0.07
(1,184)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:112:LEU:HD11	14	0.07
(1,184)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:112:LEU:HD12	14	0.07
(1,184)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:112:LEU:HD13	14	0.07
(1,184)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:112:LEU:HD11	14	0.07
(1,184)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:112:LEU:HD12	14	0.07
(1,184)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:112:LEU:HD13	14	0.07
(1,184)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:112:LEU:HD11	14	0.07
(1,184)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:112:LEU:HD12	14	0.07
(1,184)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:112:LEU:HD13	14	0.07
(1,176)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:45:ILE:HD11	19	0.07
(1,176)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:45:ILE:HD12	19	0.07
(1,176)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:45:ILE:HD13	19	0.07
(1,176)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:45:ILE:HD11	19	0.07
(1,176)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:45:ILE:HD12	19	0.07
(1,176)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:45:ILE:HD13	19	0.07
(1,176)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:45:ILE:HD11	19	0.07
(1,176)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:45:ILE:HD12	19	0.07
(1,176)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:45:ILE:HD13	19	0.07
(1,176)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:45:ILE:HD11	20	0.07
(1,176)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:45:ILE:HD12	20	0.07
(1,176)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:45:ILE:HD13	20	0.07
	<u> </u>			nd on mort nago



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,176)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:45:ILE:HD11	20	0.07
(1,176)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:45:ILE:HD12	20	0.07
(1,176)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:45:ILE:HD13	20	0.07
(1,176)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:45:ILE:HD11	20	0.07
(1,176)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:45:ILE:HD12	20	0.07
(1,176)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:45:ILE:HD13	20	0.07
(1,172)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:20:THR:H	6	0.07
(1,172)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:20:THR:H	6	0.07
(1,172)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:20:THR:H	6	0.07
(1,171)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG11	19	0.07
(1,171)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG12	19	0.07
(1,171)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG13	19	0.07
(1,163)	1:A:15:MET:H	1:A:17:TYR:H	10	0.07
(1,162)	1:A:92:SER:H	1:A:96:ASP:H	15	0.07
(1,160)	1:A:54:SER:H	1:A:56:ASP:H	4	0.07
(1,147)	1:A:130:LYS:H	1:A:134:TYR:H	18	0.07
(1,146)	1:A:130:LYS:H	1:A:132:GLU:H	4	0.07
(1,14)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD21	14	0.07
(1,14)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD22	14	0.07
(1,14)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD23	14	0.07
(1,133)	1:A:7:GLU:H	1:A:9:ILE:H	6	0.07
(1,1289)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD11	9	0.07
(1,1289)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD12	9	0.07
(1,1289)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD13	9	0.07
(1,1289)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD11	16	0.07
(1,1289)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD12	16	0.07
(1,1289)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD13	16	0.07
(1,127)	1:A:21:GLN:H	1:A:23:ASN:H	17	0.07
(1,1266)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:51:LEU:H	6	0.07
(1,1266)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:51:LEU:H	6	0.07
(1,1266)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:51:LEU:H	6	0.07
(1,1264)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:H	19	0.07
(1,1264)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:H	19	0.07
(1,1264)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:H	19	0.07
(1,1245)	1:A:142:ASN:H	1:A:142:ASN:HD21	16	0.07
(1,1237)	1:A:22:ASN:H	1:A:22:ASN:HD21	20	0.07
(1,1229)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD11	12	0.07
(1,1229)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD12	12	0.07
(1,1229)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD13	12	0.07
(1,1229)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD11	17	0.07
(1,1229)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD12	17	0.07
(1,1229)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD13	17	0.07



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1226)	1:A:102:VAL:HG11	1:A:113:ARG:H	2	0.07
(1,1226)	1:A:102:VAL:HG12	1:A:113:ARG:H	2	0.07
(1,1226)	1:A:102:VAL:HG13	1:A:113:ARG:H	2	0.07
(1,1225)	1:A:112:LEU:HD21	1:A:113:ARG:H	9	0.07
(1,1225)	1:A:112:LEU:HD22	1:A:113:ARG:H	9	0.07
(1,1225)	1:A:112:LEU:HD23	1:A:113:ARG:H	9	0.07
(1,1217)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:141:PHE:H	4	0.07
(1,1217)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:141:PHE:H	4	0.07
(1,1217)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:141:PHE:H	4	0.07
(1,1217)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:141:PHE:H	13	0.07
(1,1217)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:141:PHE:H	13	0.07
(1,1217)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:141:PHE:H	13	0.07
(1,1216)	1:A:140:LEU:HD11	1:A:141:PHE:H	6	0.07
(1,1216)	1:A:140:LEU:HD12	1:A:141:PHE:H	6	0.07
(1,1216)	1:A:140:LEU:HD13	1:A:141:PHE:H	6	0.07
(1,1209)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:137:TYR:H	6	0.07
(1,1209)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:137:TYR:H	6	0.07
(1,1209)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:137:TYR:H	6	0.07
(1,1209)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:137:TYR:H	7	0.07
(1,1209)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:137:TYR:H	7	0.07
(1,1209)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:137:TYR:H	7	0.07
(1,1207)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD21	5	0.07
(1,1207)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD22	5	0.07
(1,1207)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD23	5	0.07
(1,1207)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD21	20	0.07
(1,1207)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD22	20	0.07
(1,1207)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD23	20	0.07
(1,1202)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:131:GLU:H	17	0.07
(1,1202)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:131:GLU:H	17	0.07
(1,1202)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:131:GLU:H	17	0.07
(1,1197)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD21	18	0.07
(1,1197)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD22	18	0.07
(1,1197)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD23	18	0.07
(1,1187)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD21	19	0.07
(1,1187)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD22	19	0.07
(1,1187)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD23	19	0.07
(1,1181)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:102:VAL:H	13	0.07
(1,1181)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:102:VAL:H	13	0.07
(1,1181)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:102:VAL:H	13	0.07
(1,1180)	1:A:101:HIS:H	1:A:116:ILE:HD11	10	0.07
(1,1180)	1:A:101:HIS:H	1:A:116:ILE:HD12	10	0.07
(1,1180)	1:A:101:HIS:H	1:A:116:ILE:HD13	10	0.07



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1174)	1:A:99:LEU:H	1:A:116:ILE:HD11	11	0.07
(1,1174)	1:A:99:LEU:H	1:A:116:ILE:HD12	11	0.07
(1,1174)	1:A:99:LEU:H	1:A:116:ILE:HD13	11	0.07
(1,1173)	1:A:105:ASP:H	1:A:112:LEU:HD21	12	0.07
(1,1173)	1:A:105:ASP:H	1:A:112:LEU:HD22	12	0.07
(1,1173)	1:A:105:ASP:H	1:A:112:LEU:HD23	12	0.07
(1,1173)	1:A:105:ASP:H	1:A:112:LEU:HD21	19	0.07
(1,1173)	1:A:105:ASP:H	1:A:112:LEU:HD22	19	0.07
(1,1173)	1:A:105:ASP:H	1:A:112:LEU:HD23	19	0.07
(1,1170)	1:A:98:HIS:H	1:A:99:LEU:HD21	10	0.07
(1,1170)	1:A:98:HIS:H	1:A:99:LEU:HD22	10	0.07
(1,1170)	1:A:98:HIS:H	1:A:99:LEU:HD23	10	0.07
(1,1165)	1:A:90:VAL:H	1:A:90:VAL:HG11	10	0.07
(1,1165)	1:A:90:VAL:H	1:A:90:VAL:HG12	10	0.07
(1,1165)	1:A:90:VAL:H	1:A:90:VAL:HG13	10	0.07
(1,1163)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD11	1	0.07
(1,1163)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD12	1	0.07
(1,1163)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD13	1	0.07
(1,1163)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD11	12	0.07
(1,1163)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD12	12	0.07
(1,1163)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD13	12	0.07
(1,1158)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:87:ARG:H	18	0.07
(1,1158)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:87:ARG:H	18	0.07
(1,1158)	1:A:79:LEU:HD13	1:A:87:ARG:H	18	0.07
(1,1158)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:87:ARG:H	20	0.07
(1,1158)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:87:ARG:H	20	0.07
(1,1158)	1:A:79:LEU:HD13	1:A:87:ARG:H	20	0.07
(1,1157)	1:A:79:LEU:HD21	1:A:87:ARG:H	15	0.07
(1,1157)	1:A:79:LEU:HD22	1:A:87:ARG:H	15	0.07
(1,1157)	1:A:79:LEU:HD23	1:A:87:ARG:H	15	0.07
(1,1157)	1:A:79:LEU:HD21	1:A:87:ARG:H	19	0.07
(1,1157)	1:A:79:LEU:HD22	1:A:87:ARG:H	19	0.07
(1,1157)	1:A:79:LEU:HD23	1:A:87:ARG:H	19	0.07
(1,1150)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:76:GLU:H	5	0.07
(1,1150)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:76:GLU:H	5	0.07
(1,1150)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:76:GLU:H	5	0.07
(1,115)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:H	14	0.07
(1,115)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:H	17	0.07
(1,1148)	1:A:76:GLU:H	1:A:99:LEU:HD21	5	0.07
(1,1148)	1:A:76:GLU:H	1:A:99:LEU:HD22	5	0.07
(1,1148)	1:A:76:GLU:H	1:A:99:LEU:HD23	5	0.07
(1,1144)	1:A:71:ILE:H	1:A:71:ILE:HD11	9	0.07



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1144)	1:A:71:ILE:H	1:A:71:ILE:HD12	9	0.07
(1,1144)	1:A:71:ILE:H	1:A:71:ILE:HD13	9	0.07
(1,1138)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:52:PHE:H	5	0.07
(1,1138)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:52:PHE:H	5	0.07
(1,1138)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:52:PHE:H	5	0.07
(1,1138)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:52:PHE:H	7	0.07
(1,1138)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:52:PHE:H	7	0.07
(1,1138)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:52:PHE:H	7	0.07
(1,1136)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:52:PHE:H	2	0.07
(1,1136)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:52:PHE:H	2	0.07
(1,1136)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:52:PHE:H	2	0.07
(1,1136)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:52:PHE:H	6	0.07
(1,1136)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:52:PHE:H	6	0.07
(1,1136)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:52:PHE:H	6	0.07
(1,1118)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD11	8	0.07
(1,1118)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD12	8	0.07
(1,1118)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD13	8	0.07
(1,1118)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD11	11	0.07
(1,1118)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD12	11	0.07
(1,1118)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD13	11	0.07
(1,1117)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:42:TYR:H	1	0.07
(1,1117)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:42:TYR:H	1	0.07
(1,1117)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:42:TYR:H	1	0.07
(1,1117)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:42:TYR:H	13	0.07
(1,1117)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:42:TYR:H	13	0.07
(1,1117)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:42:TYR:H	13	0.07
(1,1117)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:42:TYR:H	14	0.07
(1,1117)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:42:TYR:H	14	0.07
(1,1117)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:42:TYR:H	14	0.07
(1,1114)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:24:GLY:H	2	0.07
(1,1114)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:24:GLY:H	2	0.07
(1,1114)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:24:GLY:H	2	0.07
(1,1113)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:23:ASN:H	4	0.07
(1,1113)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:23:ASN:H	4	0.07
(1,1113)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:23:ASN:H	4	0.07
(1,1113)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:23:ASN:H	11	0.07
(1,1113)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:23:ASN:H	11	0.07
(1,1113)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:23:ASN:H	11	0.07
(1,1113)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:23:ASN:H	13	0.07
(1,1113)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:23:ASN:H	13	0.07
(1,1113)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:23:ASN:H	13	0.07
(1,1110)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG11	4	0.07



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1110)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG12	4	0.07
(1,1110)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG13	4	0.07
(1,1108)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:16:GLN:H	13	0.07
(1,1108)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:16:GLN:H	13	0.07
(1,1108)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:16:GLN:H	13	0.07
(1,1107)	1:A:45:ILE:HD11	1:A:46:VAL:H	12	0.07
(1,1107)	1:A:45:ILE:HD12	1:A:46:VAL:H	12	0.07
(1,1107)	1:A:45:ILE:HD13	1:A:46:VAL:H	12	0.07
(1,1103)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:10:LYS:H	16	0.07
(1,1103)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:10:LYS:H	16	0.07
(1,1103)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:10:LYS:H	16	0.07
(1,1103)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:10:LYS:H	18	0.07
(1,1103)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:10:LYS:H	18	0.07
(1,1103)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:10:LYS:H	18	0.07
(1,1103)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:10:LYS:H	19	0.07
(1,1103)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:10:LYS:H	19	0.07
(1,1103)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:10:LYS:H	19	0.07
(1,1098)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG21	10	0.07
(1,1098)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG22	10	0.07
(1,1098)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG23	10	0.07
(1,1093)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:89:GLU:H	14	0.07
(1,1093)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:89:GLU:H	14	0.07
(1,1093)	1:A:79:LEU:HD13	1:A:89:GLU:H	14	0.07
(1,1090)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:113:ARG:H	7	0.07
(1,1090)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:113:ARG:H	7	0.07
(1,1090)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:113:ARG:H	7	0.07
(1,1076)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:103:PHE:H	9	0.07
(1,1076)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:103:PHE:H	9	0.07
(1,1076)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:103:PHE:H	9	0.07
(1,1075)	1:A:46:VAL:HG11	1:A:47:SER:H	15	0.07
(1,1075)	1:A:46:VAL:HG12	1:A:47:SER:H	15	0.07
(1,1075)	1:A:46:VAL:HG13	1:A:47:SER:H	15	0.07
(1,1060)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD21	16	0.07
(1,1060)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD22	16	0.07
(1,1060)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD23	16	0.07
(1,1052)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:46:VAL:HG21	2	0.07
(1,1052)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:46:VAL:HG22	2	0.07
(1,1052)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:46:VAL:HG23	2	0.07
(1,1052)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:46:VAL:HG21	2	0.07
(1,1052)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:46:VAL:HG22	2	0.07
(1,1052)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:46:VAL:HG23	2	0.07
(1,1052)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:46:VAL:HG21	2	0.07



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1052)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:46:VAL:HG22	2	0.07
(1,1052)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:46:VAL:HG23	2	0.07
(1,1052)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:46:VAL:HG21	18	0.07
(1,1052)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:46:VAL:HG22	18	0.07
(1,1052)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:46:VAL:HG23	18	0.07
(1,1052)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:46:VAL:HG21	18	0.07
(1,1052)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:46:VAL:HG22	18	0.07
(1,1052)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:46:VAL:HG23	18	0.07
(1,1052)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:46:VAL:HG21	18	0.07
(1,1052)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:46:VAL:HG22	18	0.07
(1,1052)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:46:VAL:HG23	18	0.07
(1,1024)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:H	8	0.07
(1,1019)	1:A:132:GLU:H	1:A:134:TYR:H	6	0.07
(1,1013)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:H	15	0.07
(1,1011)	1:A:41:LEU:H	1:A:126:LYS:H	3	0.07
(1,1011)	1:A:41:LEU:H	1:A:126:LYS:H	4	0.07
(1,1006)	1:A:45:ILE:H	1:A:122:ARG:H	12	0.07
(1,998)	1:A:104:ASN:H	1:A:106:GLY:H	4	0.06
(1,996)	1:A:108:GLY:H	1:A:112:LEU:H	16	0.06
(1,996)	1:A:108:GLY:H	1:A:112:LEU:H	20	0.06
(1,990)	1:A:103:PHE:H	1:A:105:ASP:H	17	0.06
(1,990)	1:A:103:PHE:H	1:A:105:ASP:H	18	0.06
(1,986)	1:A:99:LEU:H	1:A:100:GLY:H	12	0.06
(1,984)	1:A:92:SER:H	1:A:98:HIS:H	9	0.06
(1,981)	1:A:90:VAL:H	1:A:101:HIS:H	17	0.06
(1,976)	1:A:80:ASP:H	1:A:88:THR:H	16	0.06
(1,974)	1:A:79:LEU:H	1:A:89:GLU:H	9	0.06
(1,962)	1:A:46:VAL:H	1:A:49:LYS:H	7	0.06
(1,957)	1:A:41:LEU:H	1:A:124:VAL:H	20	0.06
(1,953)	1:A:30:GLN:H	1:A:34:TRP:HE1	1	0.06
(1,953)	1:A:30:GLN:H	1:A:34:TRP:HE1	15	0.06
(1,950)	1:A:25:THR:H	1:A:26:GLU:H	1	0.06
(1,948)	1:A:18:GLU:H	1:A:20:THR:H	5	0.06
(1,948)	1:A:18:GLU:H	1:A:20:THR:H	13	0.06
(1,944)	1:A:15:MET:H	1:A:18:GLU:H	5	0.06
(1,944)	1:A:15:MET:H	1:A:18:GLU:H	8	0.06
(1,943)	1:A:14:ARG:H	1:A:17:TYR:H	15	0.06
(1,943)	1:A:14:ARG:H	1:A:17:TYR:H	18	0.06
(1,930)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:H	15	0.06
(1,929)	1:A:6:GLU:H	1:A:8:LYS:H	9	0.06
(1,926)	1:A:110:ASN:HD22	1:A:112:LEU:H	1	0.06
(1,912)	1:A:21:GLN:H	1:A:24:GLY:H	13	0.06



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,912)	1:A:21:GLN:H	1:A:24:GLY:H	17	0.06
(1,911)	1:A:19:VAL:H	1:A:21:GLN:H	12	0.06
(1,905)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:99:LEU:HD21	18	0.06
(1,905)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:99:LEU:HD22	18	0.06
(1,905)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:99:LEU:HD23	18	0.06
(1,905)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:99:LEU:HD21	18	0.06
(1,905)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:99:LEU:HD22	18	0.06
(1,905)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:99:LEU:HD23	18	0.06
(1,905)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:99:LEU:HD21	18	0.06
(1,905)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:99:LEU:HD22	18	0.06
(1,905)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:99:LEU:HD23	18	0.06
(1,897)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:99:LEU:HD11	17	0.06
(1,897)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:99:LEU:HD12	17	0.06
(1,897)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:99:LEU:HD13	17	0.06
(1,897)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:99:LEU:HD11	17	0.06
(1,897)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:99:LEU:HD12	17	0.06
(1,897)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:99:LEU:HD13	17	0.06
(1,897)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:99:LEU:HD11	17	0.06
(1,897)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:99:LEU:HD12	17	0.06
(1,897)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:99:LEU:HD13	17	0.06
(1,870)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:71:ILE:HD11	5	0.06
(1,870)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:71:ILE:HD12	5	0.06
(1,870)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:71:ILE:HD13	5	0.06
(1,870)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:71:ILE:HD11	5	0.06
(1,870)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:71:ILE:HD12	5	0.06
(1,870)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:71:ILE:HD13	5	0.06
(1,870)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:71:ILE:HD11	5	0.06
(1,870)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:71:ILE:HD12	5	0.06
(1,870)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:71:ILE:HD13	5	0.06
(1,870)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:71:ILE:HD11	20	0.06
(1,870)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:71:ILE:HD12	20	0.06
(1,870)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:71:ILE:HD13	20	0.06
(1,870)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:71:ILE:HD11	20	0.06
(1,870)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:71:ILE:HD12	20	0.06
(1,870)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:71:ILE:HD13	20	0.06
(1,870)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:71:ILE:HD11	20	0.06
(1,870)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:71:ILE:HD12	20	0.06
(1,870)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:71:ILE:HD13	20	0.06
(1,840)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:124:VAL:HG21	12	0.06
(1,840)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:124:VAL:HG22	12	0.06
(1,840)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:124:VAL:HG23	12	0.06
(1,840)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:124:VAL:HG21	12	0.06



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,840)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:124:VAL:HG22	12	0.06
(1,840)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:124:VAL:HG23	12	0.06
(1,840)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:124:VAL:HG21	12	0.06
(1,840)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:124:VAL:HG22	12	0.06
(1,840)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:124:VAL:HG23	12	0.06
(1,84)	1:A:10:LYS:H	1:A:12:LEU:H	10	0.06
(1,83)	1:A:9:ILE:H	1:A:12:LEU:H	18	0.06
(1,829)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:112:LEU:HD11	7	0.06
(1,829)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:112:LEU:HD12	7	0.06
(1,829)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:112:LEU:HD13	7	0.06
(1,829)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:112:LEU:HD11	7	0.06
(1,829)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:112:LEU:HD12	7	0.06
(1,829)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:112:LEU:HD13	7	0.06
(1,829)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:112:LEU:HD11	7	0.06
(1,829)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:112:LEU:HD12	7	0.06
(1,829)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:112:LEU:HD13	7	0.06
(1,829)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:112:LEU:HD11	17	0.06
(1,829)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:112:LEU:HD12	17	0.06
(1,829)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:112:LEU:HD13	17	0.06
(1,829)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:112:LEU:HD11	17	0.06
(1,829)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:112:LEU:HD12	17	0.06
(1,829)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:112:LEU:HD13	17	0.06
(1,829)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:112:LEU:HD11	17	0.06
(1,829)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:112:LEU:HD12	17	0.06
(1,829)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:112:LEU:HD13	17	0.06
(1,828)	1:A:90:VAL:HG21	1:A:102:VAL:HG21	11	0.06
(1,828)	1:A:90:VAL:HG21	1:A:102:VAL:HG22	11	0.06
(1,828)	1:A:90:VAL:HG21	1:A:102:VAL:HG23	11	0.06
(1,828)	1:A:90:VAL:HG22	1:A:102:VAL:HG21	11	0.06
(1,828)	1:A:90:VAL:HG22	1:A:102:VAL:HG22	11	0.06
(1,828)	1:A:90:VAL:HG22	1:A:102:VAL:HG23	11	0.06
(1,828)	1:A:90:VAL:HG23	1:A:102:VAL:HG21	11	0.06
(1,828)	1:A:90:VAL:HG23	1:A:102:VAL:HG22	11	0.06
(1,828)	1:A:90:VAL:HG23	1:A:102:VAL:HG23	11	0.06
(1,816)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG11	14	0.06
(1,816)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG12	14	0.06
(1,816)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG13	14	0.06
(1,816)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG11	18	0.06
(1,816)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG12	18	0.06
(1,816)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG13	18	0.06
(1,793)	1:A:44:ASP:H	1:A:122:ARG:H	5	0.06
(1,776)	1:A:17:TYR:H	1:A:19:VAL:H	9	0.06



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

(1,769)       1:A:5:LYS:H         (1,760)       1:A:89:GLU:H       1         (1,760)       1:A:89:GLU:H       1         (1,760)       1:A:89:GLU:H       1         (1,729)       1:A:10:LYS:H       1         (1,728)       1:A:9:ILE:H       1         (1,72)       1:A:22:ASN:H       1         (1,717)       1:A:22:ASN:H       1         (1,715)       1:A:16:GLN:HE21       1         (1,709)       1:A:47:SER:HG       3	L:A:23:ASN:H 1:A:7:GLU:H :A:102:VAL:H :A:102:VAL:H L:A:12:LEU:H L:A:12:LEU:H L:A:23:ASN:H L:A:23:ASN:H L:A:46:VAL:H 1:A:49:LYS:H	4 7 4 7 10 18 17	0.06 0.06 0.06 0.06 0.06 0.06 0.06
(1,760)       1:A:89:GLU:H       1         (1,760)       1:A:89:GLU:H       1         (1,729)       1:A:10:LYS:H       1         (1,728)       1:A:9:ILE:H       1         (1,72)       1:A:22:ASN:H       1         (1,717)       1:A:22:ASN:H       1         (1,715)       1:A:16:GLN:HE21       1         (1,709)       1:A:47:SER:HG       1	:A:102:VAL:H :A:102:VAL:H !:A:12:LEU:H !:A:12:LEU:H !:A:23:ASN:H !:A:23:ASN:H	4 7 10 18 17 17	0.06 0.06 0.06 0.06 0.06
(1,760)       1:A:89:GLU:H       1         (1,729)       1:A:10:LYS:H       1         (1,728)       1:A:9:ILE:H       1         (1,72)       1:A:22:ASN:H       1         (1,717)       1:A:22:ASN:H       1         (1,715)       1:A:16:GLN:HE21       1         (1,709)       1:A:47:SER:HG       3	:A:102:VAL:H :A:12:LEU:H :A:12:LEU:H :A:23:ASN:H :A:23:ASN:H	7 10 18 17 17	0.06 0.06 0.06 0.06
(1,729)       1:A:10:LYS:H       1         (1,728)       1:A:9:ILE:H       1         (1,72)       1:A:22:ASN:H       1         (1,717)       1:A:22:ASN:H       1         (1,715)       1:A:16:GLN:HE21       1         (1,709)       1:A:47:SER:HG       1	:A:12:LEU:H :A:12:LEU:H :A:23:ASN:H :A:23:ASN:H :A:46:VAL:H	10 18 17 17	0.06 0.06 0.06
(1,728)       1:A:9:ILE:H       1         (1,72)       1:A:22:ASN:H       1         (1,717)       1:A:22:ASN:H       1         (1,715)       1:A:16:GLN:HE21       1         (1,709)       1:A:47:SER:HG       3	:A:12:LEU:H :A:23:ASN:H :A:23:ASN:H :A:46:VAL:H	18 17 17	0.06 0.06
(1,72)       1:A:22:ASN:H       1         (1,717)       1:A:22:ASN:H       1         (1,715)       1:A:16:GLN:HE21       1         (1,709)       1:A:47:SER:HG       3	:A:23:ASN:H :A:23:ASN:H :A:46:VAL:H	17 17	0.06
(1,717) 1:A:22:ASN:H 1 (1,715) 1:A:16:GLN:HE21 1 (1,709) 1:A:47:SER:HG	:A:23:ASN:H :A:46:VAL:H	17	
(1,715) 1:A:16:GLN:HE21 1 (1,709) 1:A:47:SER:HG	1:A:46:VAL:H		
(1,709) 1:A:47:SER:HG			0.06
( ) /	1 · A · 40 · I V S · H	12	0.06
(4 500)	1.A.49.L1 D.11	18	0.06
(1,708)   1:A:54:SER:HG	1:A:57:LYS:H	16	0.06
(1,708) 1:A:54:SER:HG	1:A:57:LYS:H	18	0.06
(1,704) 1:A:132:GLU:H 1:A	:138:LEU:HD11	10	0.06
(1,704) 1:A:132:GLU:H 1:A	:138:LEU:HD12	10	0.06
(1,704) 1:A:132:GLU:H 1:A	:138:LEU:HD13	10	0.06
(1,70) 1:A:16:GLN:HE21 1	1:A:46:VAL:H	12	0.06
(1,690) 1:A:79:LEU:H 1:A	A:79:LEU:HD11	14	0.06
(1,690) 1:A:79:LEU:H 1:A	A:79:LEU:HD12	14	0.06
(1,690) 1:A:79:LEU:H 1:A	A:79:LEU:HD13	14	0.06
(1,686) 1:A:45:ILE:H 1:A	A:46:VAL:HG21	1	0.06
(1,686) 1:A:45:ILE:H 1:A	A:46:VAL:HG22	1	0.06
(1,686) 1:A:45:ILE:H 1:A	A:46:VAL:HG23	1	0.06
(1,686) 1:A:45:ILE:H 1:A	A:46:VAL:HG21	8	0.06
(1,686) 1:A:45:ILE:H 1:A	A:46:VAL:HG22	8	0.06
(1,686) 1:A:45:ILE:H 1:A	A:46:VAL:HG23	8	0.06
(1,677) 1:A:103:PHE:H 1:A	:112:LEU:HD21	6	0.06
(1,677) 1:A:103:PHE:H 1:A	:112:LEU:HD22	6	0.06
(1,677) 1:A:103:PHE:H 1:A	:112:LEU:HD23	6	0.06
(1,671) 1:A:128:LYS:H 1:A	:129:LEU:HD11	18	0.06
(1,671) 1:A:128:LYS:H 1:A	:129:LEU:HD12	18	0.06
(1,671) 1:A:128:LYS:H 1:A	:129:LEU:HD13	18	0.06
(1,669) 1:A:129:LEU:HD11 1:	:A:134:TYR:H	5	0.06
(1,669) 1:A:129:LEU:HD12 1:	:A:134:TYR:H	5	0.06
(1,669) 1:A:129:LEU:HD13 1:	:A:134:TYR:H	5	0.06
(1,664) 1:A:124:VAL:HG11 1	:A:127:HIS:H	12	0.06
(1,664) 1:A:124:VAL:HG12 1	:A:127:HIS:H	12	0.06
	:A:127:HIS:H	12	0.06
(1,663) 1:A:124:VAL:HG11 1	:A:128:LYS:H	1	0.06
	:A:128:LYS:H	1	0.06
1 1	:A:128:LYS:H	1	0.06
(1,662) 1:A:126:LYS:H 1:A	:129:LEU:HD21	1	0.06
(1,662) 1:A:126:LYS:H 1:A	:129:LEU:HD22	1	0.06



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,662)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD23	1	0.06
(1,662)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD21	20	0.06
(1,662)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD22	20	0.06
(1,662)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD23	20	0.06
(1,660)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG11	2	0.06
(1,660)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG12	2	0.06
(1,660)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG13	2	0.06
(1,659)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD21	13	0.06
(1,659)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD22	13	0.06
(1,659)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD23	13	0.06
(1,659)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD21	17	0.06
(1,659)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD22	17	0.06
(1,659)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD23	17	0.06
(1,649)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:124:VAL:H	15	0.06
(1,649)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:H	15	0.06
(1,649)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:H	15	0.06
(1,647)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:114:TYR:H	12	0.06
(1,647)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:114:TYR:H	12	0.06
(1,647)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:114:TYR:H	12	0.06
(1,64)	1:A:47:SER:HG	1:A:49:LYS:H	18	0.06
(1,63)	1:A:54:SER:HG	1:A:57:LYS:H	16	0.06
(1,63)	1:A:54:SER:HG	1:A:57:LYS:H	18	0.06
(1,626)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:140:LEU:HD11	1	0.06
(1,626)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:140:LEU:HD12	1	0.06
(1,626)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:140:LEU:HD13	1	0.06
(1,626)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:140:LEU:HD11	1	0.06
(1,626)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:140:LEU:HD12	1	0.06
(1,626)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:140:LEU:HD13	1	0.06
(1,626)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:140:LEU:HD11	1	0.06
(1,626)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:140:LEU:HD12	1	0.06
(1,626)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:140:LEU:HD13	1	0.06
(1,625)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:140:LEU:HD11	13	0.06
(1,625)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:140:LEU:HD12	13	0.06
(1,625)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:140:LEU:HD13	13	0.06
(1,625)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:140:LEU:HD11	13	0.06
(1,625)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:140:LEU:HD12	13	0.06
(1,625)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:140:LEU:HD13	13	0.06
(1,625)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:140:LEU:HD11	13	0.06
(1,625)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:140:LEU:HD12	13	0.06
(1,625)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:140:LEU:HD13	13	0.06
(1,622)	1:A:86:ILE:HD11	1:A:80:ASP:H	18	0.06
(1,622)	1:A:86:ILE:HD12	1:A:80:ASP:H	18	0.06



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,622)	1:A:86:ILE:HD13	1:A:80:ASP:H	18	0.06
(1,612)	1:A:102:VAL:H	1:A:88:THR:H	3	0.06
(1,611)	1:A:100:GLY:H	1:A:90:VAL:H	18	0.06
(1,600)	1:A:142:ASN:H	1:A:142:ASN:HD21	14	0.06
(1,59)	1:A:132:GLU:H	1:A:138:LEU:HD11	10	0.06
(1,59)	1:A:132:GLU:H	1:A:138:LEU:HD12	10	0.06
(1,59)	1:A:132:GLU:H	1:A:138:LEU:HD13	10	0.06
(1,584)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD11	9	0.06
(1,584)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD12	9	0.06
(1,584)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD13	9	0.06
(1,583)	1:A:90:VAL:H	1:A:102:VAL:HG21	5	0.06
(1,583)	1:A:90:VAL:H	1:A:102:VAL:HG22	5	0.06
(1,583)	1:A:90:VAL:H	1:A:102:VAL:HG23	5	0.06
(1,581)	1:A:102:VAL:HG11	1:A:113:ARG:H	11	0.06
(1,581)	1:A:102:VAL:HG12	1:A:113:ARG:H	11	0.06
(1,581)	1:A:102:VAL:HG13	1:A:113:ARG:H	11	0.06
(1,580)	1:A:112:LEU:HD21	1:A:113:ARG:H	18	0.06
(1,580)	1:A:112:LEU:HD22	1:A:113:ARG:H	18	0.06
(1,580)	1:A:112:LEU:HD23	1:A:113:ARG:H	18	0.06
(1,577)	1:A:111:GLY:H	1:A:112:LEU:HD21	11	0.06
(1,577)	1:A:111:GLY:H	1:A:112:LEU:HD22	11	0.06
(1,577)	1:A:111:GLY:H	1:A:112:LEU:HD23	11	0.06
(1,575)	1:A:144:LEU:HD21	1:A:145:GLU:H	15	0.06
(1,575)	1:A:144:LEU:HD22	1:A:145:GLU:H	15	0.06
(1,575)	1:A:144:LEU:HD23	1:A:145:GLU:H	15	0.06
(1,571)	1:A:140:LEU:HD11	1:A:141:PHE:H	7	0.06
(1,571)	1:A:140:LEU:HD12	1:A:141:PHE:H	7	0.06
(1,571)	1:A:140:LEU:HD13	1:A:141:PHE:H	7	0.06
(1,571)	1:A:140:LEU:HD11	1:A:141:PHE:H	12	0.06
(1,571)	1:A:140:LEU:HD12	1:A:141:PHE:H	12	0.06
(1,571)	1:A:140:LEU:HD13	1:A:141:PHE:H	12	0.06
(1,570)	1:A:140:LEU:H	1:A:140:LEU:HD21	6	0.06
(1,570)	1:A:140:LEU:H	1:A:140:LEU:HD22	6	0.06
(1,570)	1:A:140:LEU:H	1:A:140:LEU:HD23	6	0.06
(1,565)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:H	6	0.06
(1,565)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:H	6	0.06
(1,565)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:H	6	0.06
(1,564)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:137:TYR:H	20	0.06
(1,564)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:137:TYR:H	20	0.06
(1,564)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:137:TYR:H	20	0.06
(1,562)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD21	7	0.06
(1,562)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD22	7	0.06



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,562)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD23	7	0.06
(1,562)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD21	15	0.06
(1,562)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD22	15	0.06
(1,562)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD23	15	0.06
(1,556)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD11	3	0.06
(1,556)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD12	3	0.06
(1,556)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD13	3	0.06
(1,550)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG21	9	0.06
(1,550)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG22	9	0.06
(1,550)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG23	9	0.06
(1,549)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD21	4	0.06
(1,549)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD22	4	0.06
(1,549)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD23	4	0.06
(1,549)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD21	16	0.06
(1,549)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD22	16	0.06
(1,549)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD23	16	0.06
(1,548)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD11	12	0.06
(1,548)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD12	12	0.06
(1,548)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD13	12	0.06
(1,544)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:120:ALA:H	19	0.06
(1,544)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:120:ALA:H	19	0.06
(1,544)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:120:ALA:H	19	0.06
(1,542)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD21	3	0.06
(1,542)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD22	3	0.06
(1,542)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD23	3	0.06
(1,542)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD21	9	0.06
(1,542)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD22	9	0.06
(1,542)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD23	9	0.06
(1,536)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:102:VAL:H	7	0.06
(1,536)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:102:VAL:H	7	0.06
(1,536)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:102:VAL:H	7	0.06
(1,516)	1:A:89:GLU:H	1:A:90:VAL:HG11	1	0.06
(1,516)	1:A:89:GLU:H	1:A:90:VAL:HG12	1	0.06
(1,516)	1:A:89:GLU:H	1:A:90:VAL:HG13	1	0.06
(1,513)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:87:ARG:H	4	0.06
(1,513)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:87:ARG:H	4	0.06
(1,513)	1:A:79:LEU:HD13	1:A:87:ARG:H	4	0.06
(1,512)	1:A:79:LEU:HD21	1:A:87:ARG:H	1	0.06
(1,512)	1:A:79:LEU:HD22	1:A:87:ARG:H	1	0.06
(1,512)	1:A:79:LEU:HD23	1:A:87:ARG:H	1	0.06
(1,507)	1:A:75:VAL:HG11	1:A:77:GLU:H	8	0.06
(1,507)	1:A:75:VAL:HG12	1:A:77:GLU:H	8	0.06



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,507)	1:A:75:VAL:HG13	1:A:77:GLU:H	8	0.06
(1,505)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:76:GLU:H	18	0.06
(1,505)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:76:GLU:H	18	0.06
(1,505)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:76:GLU:H	18	0.06
(1,503)	1:A:76:GLU:H	1:A:99:LEU:HD21	20	0.06
(1,503)	1:A:76:GLU:H	1:A:99:LEU:HD22	20	0.06
(1,503)	1:A:76:GLU:H	1:A:99:LEU:HD23	20	0.06
(1,499)	1:A:71:ILE:H	1:A:71:ILE:HD11	5	0.06
(1,499)	1:A:71:ILE:H	1:A:71:ILE:HD12	5	0.06
(1,499)	1:A:71:ILE:H	1:A:71:ILE:HD13	5	0.06
(1,497)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:H	8	0.06
(1,497)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:H	8	0.06
(1,497)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:H	8	0.06
(1,497)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:H	13	0.06
(1,497)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:H	13	0.06
(1,497)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:H	13	0.06
(1,496)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:54:SER:H	3	0.06
(1,496)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:54:SER:H	3	0.06
(1,496)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:54:SER:H	3	0.06
(1,493)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:52:PHE:H	10	0.06
(1,493)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:52:PHE:H	10	0.06
(1,493)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:52:PHE:H	10	0.06
(1,491)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:52:PHE:H	19	0.06
(1,491)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:52:PHE:H	19	0.06
(1,491)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:52:PHE:H	19	0.06
(1,488)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:51:LEU:H	3	0.06
(1,488)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:51:LEU:H	3	0.06
(1,488)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:51:LEU:H	3	0.06
(1,483)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:49:LYS:H	20	0.06
(1,483)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:49:LYS:H	20	0.06
(1,483)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:49:LYS:H	20	0.06
(1,473)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD11	15	0.06
(1,473)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD12	15	0.06
(1,473)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD13	15	0.06
(1,473)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD11	16	0.06
(1,473)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD12	16	0.06
(1,473)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD13	16	0.06
(1,468)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:23:ASN:H	14	0.06
(1,468)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:23:ASN:H	14	0.06
(1,468)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:23:ASN:H	14	0.06
(1,465)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG11	14	0.06
(1,465)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG12	14	0.06



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

(1,464)         1:A:16:GLN:H         1:A:46:VAL:HG11         16         0.06           (1,464)         1:A:16:GLN:H         1:A:46:VAL:HG12         16         0.06           (1,464)         1:A:16:GLN:H         1:A:46:VAL:HG13         16         0.06           (1,458)         1:A:9:ILE:HD11         1:A:10:LYS:H         6         0.06           (1,458)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:10:LYS:H         6         0.06           (1,458)         1:A:9:ILE:HD11         1:A:10:LYS:H         14         0.06           (1,458)         1:A:9:ILE:HD12         1:A:10:LYS:H         14         0.06           (1,458)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:10:LYS:H         14         0.06           (1,458)         1:A:9:ILE:HD11         1:A:10:LYS:H         17         0.06           (1,458)         1:A:9:ILE:HD12         1:A:10:LYS:H         17         0.06           (1,458)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:10:LYS:H         17         0.06           (1,458)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:10:LYS:H         17         0.06           (1,455)         1:A:8:LYS:H         1:A:9:ILE:HD11         6         0.06           (1,455)         1:A:8:LYS:H         1:A:9:ILE:HD11         6	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,464)         1:A:16:GLN:H         1:A:46:VAL:HG12         16         0.06           (1,464)         1:A:16:GLN:H         1:A:46:VAL:HG13         16         0.06           (1,458)         1:A:9:ILE:HD11         1:A:10:IVS:H         6         0.06           (1,458)         1:A:9:ILE:HD12         1:A:10:IVS:H         6         0.06           (1,458)         1:A:9:ILE:HD11         1:A:10:IVS:H         14         0.06           (1,458)         1:A:9:ILE:HD12         1:A:10:IVS:H         14         0.06           (1,458)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:10:IVS:H         14         0.06           (1,458)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:10:IVS:H         17         0.06           (1,455)         1:A:8:IVS:H         1:A:9:ILE:HD11         6         0.06           (1,455)         1:A:8:IVS:H         1:A:9:ILE:HD12         6	(1,465)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG13	14	0.06
(1,464)         1:A:16:GLN:H         1:A:46:VAL:HG13         16         0.06           (1,458)         1:A:9:ILE:HD11         1:A:10:LYS:H         6         0.06           (1,458)         1:A:9:ILE:HD12         1:A:10:LYS:H         6         0.06           (1,458)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:10:LYS:H         14         0.06           (1,458)         1:A:9:ILE:HD12         1:A:10:LYS:H         14         0.06           (1,458)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:10:LYS:H         14         0.06           (1,458)         1:A:9:ILE:HD11         1:A:10:LYS:H         17         0.06           (1,458)         1:A:9:ILE:HD11         1:A:10:LYS:H         17         0.06           (1,458)         1:A:9:ILE:HD11         1:A:10:LYS:H         17         0.06           (1,458)         1:A:9:ILE:HD12         1:A:10:LYS:H         17         0.06           (1,458)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:10:LYS:H         17         0.06           (1,458)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:40:LYS:H         17         0.06           (1,455)         1:A:8:LYS:H         1:A:9:ILE:HD11         6         0.06         0.06           (1,453)         1:A:44:ASP:H         1:A:6:VAL:HG21	(1,464)	1:A:16:GLN:H	1:A:46:VAL:HG11	16	0.06
(1,458)         1:A:9:ILE:HD11         1:A:10:LYS:H         6         0.06           (1,458)         1:A:9:ILE:HD12         1:A:10:LYS:H         6         0.06           (1,458)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:10:LYS:H         6         0.06           (1,458)         1:A:9:ILE:HD11         1:A:10:LYS:H         14         0.06           (1,458)         1:A:9:ILE:HD12         1:A:10:LYS:H         14         0.06           (1,458)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:10:LYS:H         17         0.06           (1,458)         1:A:9:ILE:HD11         1:A:10:LYS:H         17         0.06           (1,458)         1:A:9:ILE:HD12         1:A:10:LYS:H         17         0.06           (1,458)         1:A:9:ILE:HD12         1:A:10:LYS:H         17         0.06           (1,458)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:10:LYS:H         17         0.06           (1,458)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:10:LYS:H         17         0.06           (1,458)         1:A:8:LYS:H         1:A:10:LYS:H         17         0.06           (1,455)         1:A:8:LYS:H         1:A:9:ILE:HD13         6         0.06           (1,453)         1:A:44:ASP:H         1:A:46:VAL:HG21         2	(1,464)	1:A:16:GLN:H	1:A:46:VAL:HG12	16	0.06
(1,458)         1:A:9:ILE:HD12         1:A:10:LYS:H         6         0.06           (1,458)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:10:LYS:H         6         0.06           (1,458)         1:A:9:ILE:HD11         1:A:10:LYS:H         14         0.06           (1,458)         1:A:9:ILE:HD12         1:A:10:LYS:H         14         0.06           (1,458)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:10:LYS:H         17         0.06           (1,458)         1:A:9:ILE:HD12         1:A:10:LYS:H         17         0.06           (1,458)         1:A:9:ILE:HD12         1:A:10:LYS:H         17         0.06           (1,458)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:10:LYS:H         17         0.06           (1,458)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:10:LYS:H         17         0.06           (1,455)         1:A:8:LYS:H         1:A:9:ILE:HD11         6         0.06           (1,455)         1:A:8:LYS:H         1:A:9:ILE:HD13         6         0.06           (1,455)         1:A:8:LYS:H         1:A:9:ILE:HD13         6         0.06           (1,453)         1:A:44:ASP:H         1:A:46:VAL:HG21         2         0.06           (1,453)         1:A:44:ASP:H         1:A:46:VAL:HG22         2	(1,464)	1:A:16:GLN:H	1:A:46:VAL:HG13	16	0.06
(1,458)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:10:LYS:H         6         0.06           (1,458)         1:A:9:ILE:HD11         1:A:10:LYS:H         14         0.06           (1,458)         1:A:9:ILE:HD12         1:A:10:LYS:H         14         0.06           (1,458)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:10:LYS:H         17         0.06           (1,458)         1:A:9:ILE:HD12         1:A:10:LYS:H         17         0.06           (1,458)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:10:LYS:H         17         0.06           (1,458)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:10:LYS:H         17         0.06           (1,458)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:0:US:H         17         0.06           (1,455)         1:A:8:LYS:H         1:A:9:ILE:HD11         6         0.06           (1,455)         1:A:8:LYS:H         1:A:9:ILE:HD13         6         0.06           (1,455)         1:A:8:LYS:H         1:A:9:ILE:HD13         6         0.06           (1,455)         1:A:8:LYS:H         1:A:9:ILE:HD13         6         0.06           (1,453)         1:A:44:ASP:H         1:A:6:VAL:HG21         2         0.06           (1,453)         1:A:7:6:GLU:H         1:A:49:VAL:HG22         2         0.0	(1,458)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:10:LYS:H	6	0.06
(1,458)         1:A:9:ILE:HD11         1:A:10:LYS:H         14         0.06           (1,458)         1:A:9:ILE:HD12         1:A:10:LYS:H         14         0.06           (1,458)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:10:LYS:H         17         0.06           (1,458)         1:A:9:ILE:HD11         1:A:10:LYS:H         17         0.06           (1,458)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:10:LYS:H         17         0.06           (1,458)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:10:LYS:H         17         0.06           (1,458)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:0:LYS:H         17         0.06           (1,458)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:0:0         0.06           (1,458)         1:A:9:ILE:HD13         1:C.0         0.06           (1,458)         1:A:8:LYS:H         1:A:9:ILE:HD12         6         0.06           (1,455)         1:A:8:LYS:H         1:A:9:ILE:HD13         6         0.06           (1,455)         1:A:8:LYS:H         1:A:9:ILE:HD13         6         0.06           (1,453)         1:A:4:ASP:H         1:A:4:O:VAL:HG21         2         0.06           (1,453)         1:A:4:ASP:H         1:A:4:CVAL:HG23         2         0.06           (1,452) <td>(1,458)</td> <td>1:A:9:ILE:HD12</td> <td>1:A:10:LYS:H</td> <td>6</td> <td>0.06</td>	(1,458)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:10:LYS:H	6	0.06
(1,458)         1:A:9:ILE:HD12         1:A:10:LYS:H         14         0.06           (1,458)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:10:LYS:H         14         0.06           (1,458)         1:A:9:ILE:HD11         1:A:10:LYS:H         17         0.06           (1,458)         1:A:9:ILE:HD12         1:A:10:LYS:H         17         0.06           (1,458)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:10:LYS:H         17         0.06           (1,455)         1:A:8:LYS:H         1:A:9:ILE:HD11         6         0.06           (1,455)         1:A:8:LYS:H         1:A:9:ILE:HD12         6         0.06           (1,455)         1:A:8:LYS:H         1:A:9:ILE:HD13         6         0.06           (1,455)         1:A:8:LYS:H         1:A:9:ILE:HD12         6         0.06           (1,455)         1:A:8:S:YS:H         1:A:9:ILE:HD13         6         0.06           (1,453)         1:A:44:ASP:H         1:A:46:VAL:HG21         2         0.06           (1,453)         1:A:7:G:GU:H         1:A:49:VAL:HG23         2         0.06           (1,452)         1:A:76:GLU:H         1:A:90:VAL:HG21         10         0.06           (1,452)         1:A:76:GLU:H         1:A:90:VAL:HG23         10 <td< td=""><td>(1,458)</td><td>1:A:9:ILE:HD13</td><td>1:A:10:LYS:H</td><td>6</td><td>0.06</td></td<>	(1,458)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:10:LYS:H	6	0.06
(1,458)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:10:LYS:H         14         0.06           (1,458)         1:A:9:ILE:HD11         1:A:10:LYS:H         17         0.06           (1,458)         1:A:9:ILE:HD12         1:A:10:LYS:H         17         0.06           (1,458)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:10:LYS:H         17         0.06           (1,455)         1:A:8:LYS:H         1:A:9:ILE:HD11         6         0.06           (1,455)         1:A:8:LYS:H         1:A:9:ILE:HD13         6         0.06           (1,455)         1:A:8:LYS:H         1:A:9:ILE:HD13         6         0.06           (1,455)         1:A:44:ASP:H         1:A:46:VAL:HG21         2         0.06           (1,453)         1:A:44:ASP:H         1:A:46:VAL:HG22         2         0.06           (1,453)         1:A:44:ASP:H         1:A:46:VAL:HG23         2         0.06           (1,453)         1:A:76:GLU:H         1:A:90:VAL:HG21         10         0.06           (1,452)         1:A:76:GLU:H         1:A:90:VAL:HG22         10         0.06           (1,452)         1:A:76:GLU:H         1:A:90:VAL:HG22         10         0.06           (1,451)         1:A:75:VAL:HG11         1:A:91:ARG:H         7	(1,458)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:10:LYS:H	14	0.06
(1,458)         1:A:9:ILE:HD11         1:A:10:LYS:H         17         0.06           (1,458)         1:A:9:ILE:HD12         1:A:10:LYS:H         17         0.06           (1,458)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:10:LYS:H         17         0.06           (1,455)         1:A:8:LYS:H         1:A:9:ILE:HD11         6         0.06           (1,455)         1:A:8:LYS:H         1:A:9:ILE:HD12         6         0.06           (1,455)         1:A:8:LYS:H         1:A:9:ILE:HD13         6         0.06           (1,455)         1:A:44:ASP:H         1:A:46:VAL:HG21         2         0.06           (1,453)         1:A:44:ASP:H         1:A:46:VAL:HG22         2         0.06           (1,453)         1:A:44:ASP:H         1:A:46:VAL:HG23         2         0.06           (1,453)         1:A:76:GLU:H         1:A:49:VAL:HG21         10         0.06           (1,452)         1:A:76:GLU:H         1:A:90:VAL:HG22         10         0.06           (1,452)         1:A:76:GLU:H         1:A:90:VAL:HG23         10         0.06           (1,451)         1:A:75:VAL:HG11         1:A:91:ARG:H         7         0.06           (1,451)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD11         14	(1,458)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:10:LYS:H	14	0.06
(1,458)         1:A:9:ILE:HD12         1:A:10:LYS:H         17         0.06           (1,458)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:10:LYS:H         17         0.06           (1,455)         1:A:8:LYS:H         1:A:9:ILE:HD11         6         0.06           (1,455)         1:A:8:LYS:H         1:A:9:ILE:HD12         6         0.06           (1,455)         1:A:8:LYS:H         1:A:9:ILE:HD13         6         0.06           (1,453)         1:A:44:ASP:H         1:A:46:VAL:HG21         2         0.06           (1,453)         1:A:44:ASP:H         1:A:46:VAL:HG22         2         0.06           (1,453)         1:A:76:GLU:H         1:A:46:VAL:HG23         2         0.06           (1,453)         1:A:76:GLU:H         1:A:46:VAL:HG21         10         0.06           (1,453)         1:A:76:GLU:H         1:A:49:VAL:HG21         10         0.06           (1,452)         1:A:76:GLU:H         1:A:90:VAL:HG22         10         0.06           (1,452)         1:A:76:GLU:H         1:A:90:VAL:HG23         10         0.06           (1,451)         1:A:75:VAL:HG11         1:A:91:ARG:H         7         0.06           (1,451)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD11         14	(1,458)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:10:LYS:H	14	0.06
(1,458)         1:A:9:ILE:HD13         1:A:10:LYS:H         17         0.06           (1,455)         1:A:8:LYS:H         1:A:9:ILE:HD11         6         0.06           (1,455)         1:A:8:LYS:H         1:A:9:ILE:HD12         6         0.06           (1,455)         1:A:8:LYS:H         1:A:9:ILE:HD13         6         0.06           (1,453)         1:A:44:ASP:H         1:A:46:VAL:HG21         2         0.06           (1,453)         1:A:44:ASP:H         1:A:46:VAL:HG22         2         0.06           (1,453)         1:A:76:GLU:H         1:A:90:VAL:HG23         2         0.06           (1,452)         1:A:76:GLU:H         1:A:90:VAL:HG21         10         0.06           (1,452)         1:A:76:GLU:H         1:A:90:VAL:HG22         10         0.06           (1,452)         1:A:76:GLU:H         1:A:90:VAL:HG23         10         0.06           (1,451)         1:A:75:VAL:HG11         1:A:91:ARG:H         7         0.06           (1,451)         1:A:75:VAL:HG12         1:A:91:ARG:H         7         0.06           (1,451)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD11         14         0.06           (1,445)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD13         14	(1,458)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:10:LYS:H	17	0.06
(1,455)         1:A:8:LYS:H         1:A:9:ILE:HD11         6         0.06           (1,455)         1:A:8:LYS:H         1:A:9:ILE:HD12         6         0.06           (1,455)         1:A:8:LYS:H         1:A:9:ILE:HD13         6         0.06           (1,453)         1:A:44:ASP:H         1:A:46:VAL:HG21         2         0.06           (1,453)         1:A:44:ASP:H         1:A:46:VAL:HG22         2         0.06           (1,453)         1:A:76:GLU:H         1:A:90:VAL:HG23         2         0.06           (1,452)         1:A:76:GLU:H         1:A:90:VAL:HG22         10         0.06           (1,452)         1:A:76:GLU:H         1:A:90:VAL:HG23         10         0.06           (1,452)         1:A:76:GLU:H         1:A:90:VAL:HG23         10         0.06           (1,452)         1:A:76:GLU:H         1:A:90:VAL:HG23         10         0.06           (1,451)         1:A:75:VAL:HG11         1:A:91:ARG:H         7         0.06           (1,451)         1:A:75:VAL:HG12         1:A:91:ARG:H         7         0.06           (1,451)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD11         14         0.06           (1,452)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD12         14	(1,458)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:10:LYS:H	17	0.06
(1,455)         1:A:8:LYS:H         1:A:9:ILE:HD12         6         0.06           (1,455)         1:A:8:LYS:H         1:A:9:ILE:HD13         6         0.06           (1,453)         1:A:44:ASP:H         1:A:46:VAL:HG21         2         0.06           (1,453)         1:A:44:ASP:H         1:A:46:VAL:HG22         2         0.06           (1,453)         1:A:44:ASP:H         1:A:46:VAL:HG23         2         0.06           (1,452)         1:A:76:GLU:H         1:A:90:VAL:HG21         10         0.06           (1,452)         1:A:76:GLU:H         1:A:90:VAL:HG22         10         0.06           (1,452)         1:A:76:GLU:H         1:A:90:VAL:HG23         10         0.06           (1,452)         1:A:76:GLU:H         1:A:90:VAL:HG23         10         0.06           (1,451)         1:A:76:GLU:H         1:A:90:VAL:HG23         10         0.06           (1,451)         1:A:76:GLU:H         1:A:90:VAL:HG23         10         0.06           (1,451)         1:A:75:VAL:HG12         1:A:91:ARG:H         7         0.06           (1,451)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD11         14         0.06           (1,452)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD12         14	(1,458)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:10:LYS:H	17	0.06
(1,455)         1:A:8:LYS:H         1:A:9:ILE:HD13         6         0.06           (1,453)         1:A:44:ASP:H         1:A:46:VAL:HG21         2         0.06           (1,453)         1:A:44:ASP:H         1:A:46:VAL:HG22         2         0.06           (1,453)         1:A:44:ASP:H         1:A:46:VAL:HG23         2         0.06           (1,452)         1:A:76:GLU:H         1:A:90:VAL:HG21         10         0.06           (1,452)         1:A:76:GLU:H         1:A:90:VAL:HG22         10         0.06           (1,452)         1:A:76:GLU:H         1:A:90:VAL:HG23         10         0.06           (1,452)         1:A:76:GLU:H         1:A:90:VAL:HG23         10         0.06           (1,451)         1:A:76:GLU:H         1:A:90:VAL:HG23         10         0.06           (1,451)         1:A:76:GLU:H         1:A:90:VAL:HG23         10         0.06           (1,451)         1:A:75:VAL:HG11         1:A:90:VAL:HG23         10         0.06           (1,451)         1:A:79:LEU:HG12         1:A:91:ARG:H         7         0.06           (1,451)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD11         14         0.06           (1,452)         1:A:79:LEU:H         1:A:89:GLU:H         10 <td>(1,455)</td> <td>1:A:8:LYS:H</td> <td>1:A:9:ILE:HD11</td> <td>6</td> <td>0.06</td>	(1,455)	1:A:8:LYS:H	1:A:9:ILE:HD11	6	0.06
(1,453)         1:A:44:ASP:H         1:A:46:VAL:HG21         2         0.06           (1,453)         1:A:44:ASP:H         1:A:46:VAL:HG22         2         0.06           (1,453)         1:A:44:ASP:H         1:A:46:VAL:HG23         2         0.06           (1,452)         1:A:76:GLU:H         1:A:90:VAL:HG21         10         0.06           (1,452)         1:A:76:GLU:H         1:A:90:VAL:HG22         10         0.06           (1,452)         1:A:76:GLU:H         1:A:90:VAL:HG23         10         0.06           (1,451)         1:A:75:VAL:HG11         1:A:91:ARG:H         7         0.06           (1,451)         1:A:75:VAL:HG12         1:A:91:ARG:H         7         0.06           (1,451)         1:A:75:VAL:HG13         1:A:91:ARG:H         7         0.06           (1,451)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD11         14         0.06           (1,452)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD12         14         0.06           (1,451)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD13         14         0.06           (1,452)         1:A:79:LEU:HD11         1:A:89:GLU:H         10         0.06           (1,448)         1:A:79:LEU:HD13         1:A:89:GLU:H         20 </td <td>(1,455)</td> <td>1:A:8:LYS:H</td> <td>1:A:9:ILE:HD12</td> <td>6</td> <td>0.06</td>	(1,455)	1:A:8:LYS:H	1:A:9:ILE:HD12	6	0.06
(1,453)         1:A:44:ASP:H         1:A:46:VAL:HG22         2         0.06           (1,453)         1:A:44:ASP:H         1:A:46:VAL:HG23         2         0.06           (1,452)         1:A:76:GLU:H         1:A:90:VAL:HG21         10         0.06           (1,452)         1:A:76:GLU:H         1:A:90:VAL:HG22         10         0.06           (1,452)         1:A:76:GLU:H         1:A:90:VAL:HG23         10         0.06           (1,451)         1:A:75:VAL:HG11         1:A:91:ARG:H         7         0.06           (1,451)         1:A:75:VAL:HG12         1:A:91:ARG:H         7         0.06           (1,451)         1:A:75:VAL:HG13         1:A:91:ARG:H         7         0.06           (1,451)         1:A:75:VAL:HG13         1:A:79:LEU:HD11         14         0.06           (1,451)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD11         14         0.06           (1,452)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD12         14         0.06           (1,451)         1:A:79:LEU:HD11         1:A:89:GLU:H         10         0.06           (1,448)         1:A:79:LEU:HD11         1:A:89:GLU:H         10         0.06           (1,448)         1:A:79:LEU:HD13         1:A:89:GLU:H	(1,455)	1:A:8:LYS:H	1:A:9:ILE:HD13	6	0.06
(1,453)         1:A:44:ASP:H         1:A:46:VAL:HG23         2         0.06           (1,452)         1:A:76:GLU:H         1:A:90:VAL:HG21         10         0.06           (1,452)         1:A:76:GLU:H         1:A:90:VAL:HG22         10         0.06           (1,452)         1:A:76:GLU:H         1:A:90:VAL:HG23         10         0.06           (1,451)         1:A:76:VAL:HG11         1:A:91:ARG:H         7         0.06           (1,451)         1:A:75:VAL:HG12         1:A:91:ARG:H         7         0.06           (1,451)         1:A:75:VAL:HG13         1:A:91:ARG:H         7         0.06           (1,451)         1:A:75:VAL:HG13         1:A:91:ARG:H         7         0.06           (1,451)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD11         14         0.06           (1,45)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD12         14         0.06           (1,448)         1:A:79:LEU:HD11         1:A:89:GLU:H         10         0.06           (1,448)         1:A:79:LEU:HD13         1:A:89:GLU:H         10         0.06           (1,448)         1:A:79:LEU:HD11         1:A:89:GLU:H         20         0.06           (1,448)         1:A:79:LEU:HD13         1:A:89:GLU:H         20 </td <td>(1,453)</td> <td>1:A:44:ASP:H</td> <td>1:A:46:VAL:HG21</td> <td>2</td> <td>0.06</td>	(1,453)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG21	2	0.06
(1,452)         1:A:76:GLU:H         1:A:90:VAL:HG21         10         0.06           (1,452)         1:A:76:GLU:H         1:A:90:VAL:HG22         10         0.06           (1,452)         1:A:76:GLU:H         1:A:90:VAL:HG23         10         0.06           (1,451)         1:A:76:VAL:HG11         1:A:91:ARG:H         7         0.06           (1,451)         1:A:75:VAL:HG12         1:A:91:ARG:H         7         0.06           (1,451)         1:A:75:VAL:HG13         1:A:91:ARG:H         7         0.06           (1,451)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD11         14         0.06           (1,45)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD12         14         0.06           (1,45)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD13         14         0.06           (1,448)         1:A:79:LEU:HD11         1:A:89:GLU:H         10         0.06           (1,448)         1:A:79:LEU:HD13         1:A:89:GLU:H         10         0.06           (1,448)         1:A:79:LEU:HD11         1:A:89:GLU:H         20         0.06           (1,448)         1:A:79:LEU:HD13         1:A:89:GLU:H         20         0.06           (1,448)         1:A:79:LEU:HD13         1:A:89:GLU:H         20<	/	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG22	2	0.06
(1,452)         1:A:76:GLU:H         1:A:90:VAL:HG22         10         0.06           (1,452)         1:A:76:GLU:H         1:A:90:VAL:HG23         10         0.06           (1,451)         1:A:75:VAL:HG11         1:A:91:ARG:H         7         0.06           (1,451)         1:A:75:VAL:HG12         1:A:91:ARG:H         7         0.06           (1,451)         1:A:75:VAL:HG13         1:A:91:ARG:H         7         0.06           (1,45)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD11         14         0.06           (1,45)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD12         14         0.06           (1,45)         1:A:79:LEU:HD11         1:A:89:GLU:H         10         0.06           (1,448)         1:A:79:LEU:HD11         1:A:89:GLU:H         10         0.06           (1,448)         1:A:79:LEU:HD13         1:A:89:GLU:H         10         0.06           (1,448)         1:A:79:LEU:HD11         1:A:89:GLU:H         20         0.06           (1,448)         1:A:79:LEU:HD13         1:A:89:GLU:H         20         0.06           (1,448)         1:A:79:LEU:HD13         1:A:89:GLU:H         20         0.06           (1,448)         1:A:79:LEU:HD13         1:A:89:GLU:H         20 </td <td>(1,453)</td> <td>1:A:44:ASP:H</td> <td>1:A:46:VAL:HG23</td> <td>2</td> <td>0.06</td>	(1,453)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG23	2	0.06
(1,452)         1:A:76:GLU:H         1:A:90:VAL:HG23         10         0.06           (1,451)         1:A:75:VAL:HG11         1:A:91:ARG:H         7         0.06           (1,451)         1:A:75:VAL:HG12         1:A:91:ARG:H         7         0.06           (1,451)         1:A:75:VAL:HG13         1:A:91:ARG:H         7         0.06           (1,451)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD11         14         0.06           (1,45)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD12         14         0.06           (1,45)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD13         14         0.06           (1,448)         1:A:79:LEU:HD11         1:A:89:GLU:H         10         0.06           (1,448)         1:A:79:LEU:HD12         1:A:89:GLU:H         10         0.06           (1,448)         1:A:79:LEU:HD13         1:A:89:GLU:H         20         0.06           (1,448)         1:A:79:LEU:HD11         1:A:89:GLU:H         20         0.06           (1,448)         1:A:79:LEU:HD13         1:A:89:GLU:H         20         0.06           (1,448)         1:A:79:LEU:HD13         1:A:89:GLU:H         20         0.06           (1,448)         1:A:102:VAL:HG21         1:A:113:ARG:H         1	(1,452)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG21	10	0.06
(1,451)         1:A:75:VAL:HG11         1:A:91:ARG:H         7         0.06           (1,451)         1:A:75:VAL:HG12         1:A:91:ARG:H         7         0.06           (1,451)         1:A:75:VAL:HG13         1:A:91:ARG:H         7         0.06           (1,45)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD11         14         0.06           (1,45)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD12         14         0.06           (1,45)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD13         14         0.06           (1,448)         1:A:79:LEU:HD11         1:A:89:GLU:H         10         0.06           (1,448)         1:A:79:LEU:HD12         1:A:89:GLU:H         10         0.06           (1,448)         1:A:79:LEU:HD13         1:A:89:GLU:H         20         0.06           (1,448)         1:A:79:LEU:HD11         1:A:89:GLU:H         20         0.06           (1,448)         1:A:79:LEU:HD12         1:A:89:GLU:H         20         0.06           (1,448)         1:A:79:LEU:HD13         1:A:89:GLU:H         20         0.06           (1,448)         1:A:79:LEU:HD13         1:A:13:ARG:H         12         0.06           (1,445)         1:A:102:VAL:HG21         1:A:113:ARG:H         12	(1,452)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG22	10	0.06
(1,451)         1:A:75:VAL:HG12         1:A:91:ARG:H         7         0.06           (1,451)         1:A:75:VAL:HG13         1:A:91:ARG:H         7         0.06           (1,45)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD11         14         0.06           (1,45)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD12         14         0.06           (1,45)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD13         14         0.06           (1,448)         1:A:79:LEU:HD11         1:A:89:GLU:H         10         0.06           (1,448)         1:A:79:LEU:HD12         1:A:89:GLU:H         10         0.06           (1,448)         1:A:79:LEU:HD13         1:A:89:GLU:H         20         0.06           (1,448)         1:A:79:LEU:HD11         1:A:89:GLU:H         20         0.06           (1,448)         1:A:79:LEU:HD12         1:A:89:GLU:H         20         0.06           (1,448)         1:A:79:LEU:HD13         1:A:89:GLU:H         20         0.06           (1,448)         1:A:79:LEU:HD13         1:A:89:GLU:H         20         0.06           (1,448)         1:A:102:VAL:HG21         1:A:113:ARG:H         12         0.06           (1,445)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:113:ARG:H <td< td=""><td>(1,452)</td><td>1:A:76:GLU:H</td><td>1:A:90:VAL:HG23</td><td>10</td><td>0.06</td></td<>	(1,452)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG23	10	0.06
(1,451)       1:A:75:VAL:HG13       1:A:91:ARG:H       7       0.06         (1,45)       1:A:79:LEU:H       1:A:79:LEU:HD11       14       0.06         (1,45)       1:A:79:LEU:H       1:A:79:LEU:HD12       14       0.06         (1,45)       1:A:79:LEU:H       1:A:79:LEU:HD13       14       0.06         (1,448)       1:A:79:LEU:HD11       1:A:89:GLU:H       10       0.06         (1,448)       1:A:79:LEU:HD12       1:A:89:GLU:H       10       0.06         (1,448)       1:A:79:LEU:HD13       1:A:89:GLU:H       10       0.06         (1,448)       1:A:79:LEU:HD11       1:A:89:GLU:H       20       0.06         (1,448)       1:A:79:LEU:HD12       1:A:89:GLU:H       20       0.06         (1,448)       1:A:79:LEU:HD13       1:A:89:GLU:H       20       0.06         (1,448)       1:A:79:LEU:HD13       1:A:89:GLU:H       20       0.06         (1,445)       1:A:102:VAL:HG21       1:A:113:ARG:H       12       0.06         (1,445)       1:A:102:VAL:HG22       1:A:113:ARG:H       12       0.06         (1,445)       1:A:102:VAL:HG21       1:A:113:ARG:H       19       0.06         (1,445)       1:A:102:VAL:HG22       1:A:113:ARG:	(1,451)	1:A:75:VAL:HG11	1:A:91:ARG:H	7	0.06
(1,45)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD11         14         0.06           (1,45)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD12         14         0.06           (1,45)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD13         14         0.06           (1,448)         1:A:79:LEU:HD11         1:A:89:GLU:H         10         0.06           (1,448)         1:A:79:LEU:HD12         1:A:89:GLU:H         10         0.06           (1,448)         1:A:79:LEU:HD13         1:A:89:GLU:H         20         0.06           (1,448)         1:A:79:LEU:HD11         1:A:89:GLU:H         20         0.06           (1,448)         1:A:79:LEU:HD12         1:A:89:GLU:H         20         0.06           (1,448)         1:A:79:LEU:HD13         1:A:89:GLU:H         20         0.06           (1,448)         1:A:79:LEU:HD13         1:A:89:GLU:H         20         0.06           (1,448)         1:A:79:LEU:HD13         1:A:89:GLU:H         20         0.06           (1,445)         1:A:102:VAL:HG21         1:A:113:ARG:H         12         0.06           (1,445)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:113:ARG:H         19         0.06           (1,445)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:113:ARG:H	(1,451)	1:A:75:VAL:HG12	1:A:91:ARG:H	7	0.06
(1,45)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD12         14         0.06           (1,45)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD13         14         0.06           (1,448)         1:A:79:LEU:HD11         1:A:89:GLU:H         10         0.06           (1,448)         1:A:79:LEU:HD12         1:A:89:GLU:H         10         0.06           (1,448)         1:A:79:LEU:HD13         1:A:89:GLU:H         20         0.06           (1,448)         1:A:79:LEU:HD11         1:A:89:GLU:H         20         0.06           (1,448)         1:A:79:LEU:HD12         1:A:89:GLU:H         20         0.06           (1,448)         1:A:79:LEU:HD13         1:A:89:GLU:H         20         0.06           (1,448)         1:A:79:LEU:HD13         1:A:89:GLU:H         20         0.06           (1,448)         1:A:79:LEU:HD13         1:A:89:GLU:H         20         0.06           (1,448)         1:A:102:VAL:HG21         1:A:113:ARG:H         12         0.06           (1,445)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:113:ARG:H         19         0.06           (1,445)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:113:ARG:H         19         0.06           (1,445)         1:A:71:ILE:H         1:A:75:VAL:HG11	(1,451)	1:A:75:VAL:HG13	1:A:91:ARG:H	7	0.06
(1,45)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD13         14         0.06           (1,448)         1:A:79:LEU:HD11         1:A:89:GLU:H         10         0.06           (1,448)         1:A:79:LEU:HD12         1:A:89:GLU:H         10         0.06           (1,448)         1:A:79:LEU:HD13         1:A:89:GLU:H         20         0.06           (1,448)         1:A:79:LEU:HD11         1:A:89:GLU:H         20         0.06           (1,448)         1:A:79:LEU:HD12         1:A:89:GLU:H         20         0.06           (1,448)         1:A:79:LEU:HD13         1:A:89:GLU:H         20         0.06           (1,448)         1:A:102:VAL:HG21         1:A:113:ARG:H         12         0.06           (1,445)         1:A:102:VAL:HG22         1:A:113:ARG:H         12         0.06           (1,445)         1:A:102:VAL:HG21         1:A:113:ARG:H         19         0.06           (1,445)         1:A:102:VAL:HG22         1:A:113:ARG:H         19         0.06           (1,445)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:113:ARG:H         19         0.06           (1,445)         1:A:71:ILE:H         1:A:75:VAL:HG11         13         0.06	(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD11	14	0.06
(1,448)       1:A:79:LEU:HD11       1:A:89:GLU:H       10       0.06         (1,448)       1:A:79:LEU:HD12       1:A:89:GLU:H       10       0.06         (1,448)       1:A:79:LEU:HD13       1:A:89:GLU:H       10       0.06         (1,448)       1:A:79:LEU:HD11       1:A:89:GLU:H       20       0.06         (1,448)       1:A:79:LEU:HD12       1:A:89:GLU:H       20       0.06         (1,448)       1:A:79:LEU:HD13       1:A:89:GLU:H       20       0.06         (1,448)       1:A:79:LEU:HD13       1:A:89:GLU:H       20       0.06         (1,445)       1:A:102:VAL:HG21       1:A:113:ARG:H       12       0.06         (1,445)       1:A:102:VAL:HG22       1:A:113:ARG:H       12       0.06         (1,445)       1:A:102:VAL:HG21       1:A:113:ARG:H       19       0.06         (1,445)       1:A:102:VAL:HG22       1:A:113:ARG:H       19       0.06         (1,445)       1:A:102:VAL:HG23       1:A:113:ARG:H       19       0.06         (1,445)       1:A:71:ILE:H       1:A:75:VAL:HG11       13       0.06	(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD12	14	0.06
(1,448)       1:A:79:LEU:HD12       1:A:89:GLU:H       10       0.06         (1,448)       1:A:79:LEU:HD13       1:A:89:GLU:H       10       0.06         (1,448)       1:A:79:LEU:HD11       1:A:89:GLU:H       20       0.06         (1,448)       1:A:79:LEU:HD12       1:A:89:GLU:H       20       0.06         (1,448)       1:A:79:LEU:HD13       1:A:89:GLU:H       20       0.06         (1,448)       1:A:79:LEU:HD13       1:A:89:GLU:H       20       0.06         (1,445)       1:A:102:VAL:HG21       1:A:113:ARG:H       12       0.06         (1,445)       1:A:102:VAL:HG22       1:A:113:ARG:H       12       0.06         (1,445)       1:A:102:VAL:HG23       1:A:113:ARG:H       19       0.06         (1,445)       1:A:102:VAL:HG22       1:A:113:ARG:H       19       0.06         (1,445)       1:A:102:VAL:HG23       1:A:113:ARG:H       19       0.06         (1,445)       1:A:71:ILE:H       1:A:75:VAL:HG11       13       0.06	(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD13	14	0.06
(1,448)       1:A:79:LEU:HD12       1:A:89:GLU:H       10       0.06         (1,448)       1:A:79:LEU:HD13       1:A:89:GLU:H       10       0.06         (1,448)       1:A:79:LEU:HD11       1:A:89:GLU:H       20       0.06         (1,448)       1:A:79:LEU:HD12       1:A:89:GLU:H       20       0.06         (1,448)       1:A:79:LEU:HD13       1:A:89:GLU:H       20       0.06         (1,448)       1:A:79:LEU:HD13       1:A:89:GLU:H       20       0.06         (1,445)       1:A:102:VAL:HG21       1:A:113:ARG:H       12       0.06         (1,445)       1:A:102:VAL:HG22       1:A:113:ARG:H       12       0.06         (1,445)       1:A:102:VAL:HG23       1:A:113:ARG:H       19       0.06         (1,445)       1:A:102:VAL:HG22       1:A:113:ARG:H       19       0.06         (1,445)       1:A:102:VAL:HG23       1:A:113:ARG:H       19       0.06         (1,445)       1:A:71:ILE:H       1:A:75:VAL:HG11       13       0.06	(1,448)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:89:GLU:H	10	0.06
(1,448)       1:A:79:LEU:HD13       1:A:89:GLU:H       10       0.06         (1,448)       1:A:79:LEU:HD11       1:A:89:GLU:H       20       0.06         (1,448)       1:A:79:LEU:HD12       1:A:89:GLU:H       20       0.06         (1,448)       1:A:79:LEU:HD13       1:A:89:GLU:H       20       0.06         (1,445)       1:A:102:VAL:HG21       1:A:113:ARG:H       12       0.06         (1,445)       1:A:102:VAL:HG22       1:A:113:ARG:H       12       0.06         (1,445)       1:A:102:VAL:HG23       1:A:113:ARG:H       19       0.06         (1,445)       1:A:102:VAL:HG22       1:A:113:ARG:H       19       0.06         (1,445)       1:A:102:VAL:HG23       1:A:113:ARG:H       19       0.06         (1,445)       1:A:102:VAL:HG23       1:A:113:ARG:H       19       0.06         (1,442)       1:A:71:ILE:H       1:A:75:VAL:HG11       13       0.06	(1,448)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:89:GLU:H	10	0.06
(1,448)       1:A:79:LEU:HD12       1:A:89:GLU:H       20       0.06         (1,448)       1:A:79:LEU:HD13       1:A:89:GLU:H       20       0.06         (1,445)       1:A:102:VAL:HG21       1:A:113:ARG:H       12       0.06         (1,445)       1:A:102:VAL:HG22       1:A:113:ARG:H       12       0.06         (1,445)       1:A:102:VAL:HG23       1:A:113:ARG:H       12       0.06         (1,445)       1:A:102:VAL:HG21       1:A:113:ARG:H       19       0.06         (1,445)       1:A:102:VAL:HG22       1:A:113:ARG:H       19       0.06         (1,445)       1:A:102:VAL:HG23       1:A:113:ARG:H       19       0.06         (1,445)       1:A:71:ILE:H       1:A:75:VAL:HG11       13       0.06	(1,448)	1:A:79:LEU:HD13	1:A:89:GLU:H	10	0.06
(1,448)       1:A:79:LEU:HD12       1:A:89:GLU:H       20       0.06         (1,448)       1:A:79:LEU:HD13       1:A:89:GLU:H       20       0.06         (1,445)       1:A:102:VAL:HG21       1:A:113:ARG:H       12       0.06         (1,445)       1:A:102:VAL:HG22       1:A:113:ARG:H       12       0.06         (1,445)       1:A:102:VAL:HG23       1:A:113:ARG:H       12       0.06         (1,445)       1:A:102:VAL:HG21       1:A:113:ARG:H       19       0.06         (1,445)       1:A:102:VAL:HG22       1:A:113:ARG:H       19       0.06         (1,445)       1:A:102:VAL:HG23       1:A:113:ARG:H       19       0.06         (1,445)       1:A:71:ILE:H       1:A:75:VAL:HG11       13       0.06	/	1:A:79:LEU:HD11	1:A:89:GLU:H	20	0.06
(1,448)       1:A:79:LEU:HD13       1:A:89:GLU:H       20       0.06         (1,445)       1:A:102:VAL:HG21       1:A:113:ARG:H       12       0.06         (1,445)       1:A:102:VAL:HG22       1:A:113:ARG:H       12       0.06         (1,445)       1:A:102:VAL:HG23       1:A:113:ARG:H       12       0.06         (1,445)       1:A:102:VAL:HG21       1:A:113:ARG:H       19       0.06         (1,445)       1:A:102:VAL:HG22       1:A:113:ARG:H       19       0.06         (1,445)       1:A:102:VAL:HG23       1:A:113:ARG:H       19       0.06         (1,445)       1:A:71:ILE:H       1:A:75:VAL:HG11       13       0.06	, ,	1:A:79:LEU:HD12	1:A:89:GLU:H	20	0.06
(1,445)       1:A:102:VAL:HG21       1:A:113:ARG:H       12       0.06         (1,445)       1:A:102:VAL:HG22       1:A:113:ARG:H       12       0.06         (1,445)       1:A:102:VAL:HG23       1:A:113:ARG:H       12       0.06         (1,445)       1:A:102:VAL:HG21       1:A:113:ARG:H       19       0.06         (1,445)       1:A:102:VAL:HG22       1:A:113:ARG:H       19       0.06         (1,445)       1:A:102:VAL:HG23       1:A:113:ARG:H       19       0.06         (1,442)       1:A:71:ILE:H       1:A:75:VAL:HG11       13       0.06	_ ` '	1:A:79:LEU:HD13	1:A:89:GLU:H	20	0.06
(1,445)       1:A:102:VAL:HG22       1:A:113:ARG:H       12       0.06         (1,445)       1:A:102:VAL:HG23       1:A:113:ARG:H       12       0.06         (1,445)       1:A:102:VAL:HG21       1:A:113:ARG:H       19       0.06         (1,445)       1:A:102:VAL:HG22       1:A:113:ARG:H       19       0.06         (1,445)       1:A:102:VAL:HG23       1:A:113:ARG:H       19       0.06         (1,445)       1:A:71:ILE:H       1:A:75:VAL:HG11       13       0.06		1:A:102:VAL:HG21	1:A:113:ARG:H	12	0.06
(1,445)       1:A:102:VAL:HG23       1:A:113:ARG:H       12       0.06         (1,445)       1:A:102:VAL:HG21       1:A:113:ARG:H       19       0.06         (1,445)       1:A:102:VAL:HG22       1:A:113:ARG:H       19       0.06         (1,445)       1:A:102:VAL:HG23       1:A:113:ARG:H       19       0.06         (1,442)       1:A:71:ILE:H       1:A:75:VAL:HG11       13       0.06		1:A:102:VAL:HG22	1:A:113:ARG:H	12	0.06
(1,445)       1:A:102:VAL:HG21       1:A:113:ARG:H       19       0.06         (1,445)       1:A:102:VAL:HG22       1:A:113:ARG:H       19       0.06         (1,445)       1:A:102:VAL:HG23       1:A:113:ARG:H       19       0.06         (1,442)       1:A:71:ILE:H       1:A:75:VAL:HG11       13       0.06	_ , , ,	1:A:102:VAL:HG23	1:A:113:ARG:H	12	0.06
(1,445)       1:A:102:VAL:HG22       1:A:113:ARG:H       19       0.06         (1,445)       1:A:102:VAL:HG23       1:A:113:ARG:H       19       0.06         (1,442)       1:A:71:ILE:H       1:A:75:VAL:HG11       13       0.06	, ,	1:A:102:VAL:HG21	1:A:113:ARG:H	19	0.06
(1,445) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:113:ARG:H 19 0.06 (1,442) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG11 13 0.06	· · /	1:A:102:VAL:HG22	1:A:113:ARG:H	19	0.06
(1,442) 1:A:71:ILE:H 1:A:75:VAL:HG11 13 0.06	(1,445)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:113:ARG:H	19	0.06
	· · /	1:A:71:ILE:H	1:A:75:VAL:HG11	13	0.06
	(1,442)	1:A:71:ILE:H	1:A:75:VAL:HG12	13	0.06



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,442)	1:A:71:ILE:H	1:A:75:VAL:HG13	13	0.06
(1,441)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:124:VAL:H	15	0.06
(1,441)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:124:VAL:H	15	0.06
(1,441)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:124:VAL:H	15	0.06
(1,438)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:120:ALA:H	15	0.06
(1,438)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:120:ALA:H	15	0.06
(1,438)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:120:ALA:H	15	0.06
(1,435)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:26:GLU:H	9	0.06
(1,435)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:26:GLU:H	9	0.06
(1,435)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:26:GLU:H	9	0.06
(1,435)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:26:GLU:H	10	0.06
(1,435)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:26:GLU:H	10	0.06
(1,435)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:26:GLU:H	10	0.06
(1,431)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:103:PHE:H	11	0.06
(1,431)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:103:PHE:H	11	0.06
(1,431)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:103:PHE:H	11	0.06
(1,430)	1:A:46:VAL:HG11	1:A:47:SER:H	2	0.06
(1,430)	1:A:46:VAL:HG12	1:A:47:SER:H	2	0.06
(1,430)	1:A:46:VAL:HG13	1:A:47:SER:H	2	0.06
(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD21	7	0.06
(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD22	7	0.06
(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD23	7	0.06
(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD21	8	0.06
(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD22	8	0.06
(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD23	8	0.06
(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD21	13	0.06
(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD22	13	0.06
(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD23	13	0.06
(1,414)	1:A:12:LEU:H	1:A:12:LEU:HD21	20	0.06
(1,414)	1:A:12:LEU:H	1:A:12:LEU:HD22	20	0.06
(1,414)	1:A:12:LEU:H	1:A:12:LEU:HD23	20	0.06
(1,413)	1:A:51:LEU:HD11	1:A:121:LEU:HD11	16	0.06
(1,413)	1:A:51:LEU:HD11	1:A:121:LEU:HD12	16	0.06
(1,413)	1:A:51:LEU:HD11	1:A:121:LEU:HD13	16	0.06
(1,413)	1:A:51:LEU:HD12	1:A:121:LEU:HD11	16	0.06
(1,413)	1:A:51:LEU:HD12	1:A:121:LEU:HD12	16	0.06
(1,413)	1:A:51:LEU:HD12	1:A:121:LEU:HD13	16	0.06
(1,413)	1:A:51:LEU:HD13	1:A:121:LEU:HD11	16	0.06
(1,413)	1:A:51:LEU:HD13	1:A:121:LEU:HD12	16	0.06
(1,413)	1:A:51:LEU:HD13	1:A:121:LEU:HD13	16	0.06
(1,41)	1:A:45:ILE:H	1:A:46:VAL:HG21	1	0.06
1 1	1:A:45:ILE:H	1:A:46:VAL:HG22	1	0.06



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,41)	1:A:45:ILE:H	1:A:46:VAL:HG23	1	0.06
(1,41)	1:A:45:ILE:H	1:A:46:VAL:HG21	8	0.06
(1,41)	1:A:45:ILE:H	1:A:46:VAL:HG22	8	0.06
(1,41)	1:A:45:ILE:H	1:A:46:VAL:HG23	8	0.06
(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD11	1	0.06
(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD12	1	0.06
(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD13	1	0.06
(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD11	1	0.06
(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD12	1	0.06
(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD13	1	0.06
(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD11	1	0.06
(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD12	1	0.06
(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD13	1	0.06
(1,4)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:124:VAL:H	15	0.06
(1,4)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:H	15	0.06
(1,4)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:H	15	0.06
(1,393)	1:A:12:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HG11	10	0.06
(1,393)	1:A:12:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HG12	10	0.06
(1,393)	1:A:12:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HG13	10	0.06
(1,393)	1:A:12:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HG11	10	0.06
(1,393)	1:A:12:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HG12	10	0.06
(1,393)	1:A:12:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HG13	10	0.06
(1,393)	1:A:12:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HG11	10	0.06
(1,393)	1:A:12:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HG12	10	0.06
(1,393)	1:A:12:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HG13	10	0.06
(1,384)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:99:LEU:HD21	8	0.06
(1,384)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:99:LEU:HD22	8	0.06
(1,384)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:99:LEU:HD23	8	0.06
(1,384)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:99:LEU:HD21	8	0.06
(1,384)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:99:LEU:HD22	8	0.06
(1,384)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:99:LEU:HD23	8	0.06
(1,384)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:99:LEU:HD21	8	0.06
(1,384)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:99:LEU:HD22	8	0.06
(1,384)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:99:LEU:HD23	8	0.06
(1,384)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:99:LEU:HD21	12	0.06
(1,384)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:99:LEU:HD22	12	0.06
(1,384)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:99:LEU:HD23	12	0.06
(1,384)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:99:LEU:HD21	12	0.06
(1,384)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:99:LEU:HD22	12	0.06
(1,384)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:99:LEU:HD23	12	0.06
(1,384)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:99:LEU:HD21	12	0.06
(1,384)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:99:LEU:HD22	12	0.06



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,384)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:99:LEU:HD23	12	0.06
(1,375)	1:A:131:GLU:H	1:A:133:GLY:H	4	0.06
(1,375)	1:A:131:GLU:H	1:A:133:GLY:H	11	0.06
(1,368)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:H	4	0.06
(1,365)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:H	13	0.06
(1,357)	1:A:119:ALA:H	1:A:121:LEU:H	18	0.06
(1,355)	1:A:67:PHE:H	1:A:114:TYR:H	12	0.06
(1,353)	1:A:104:ASN:H	1:A:106:GLY:H	4	0.06
(1,351)	1:A:108:GLY:H	1:A:112:LEU:H	16	0.06
(1,351)	1:A:108:GLY:H	1:A:112:LEU:H	20	0.06
(1,345)	1:A:103:PHE:H	1:A:105:ASP:H	17	0.06
(1,345)	1:A:103:PHE:H	1:A:105:ASP:H	18	0.06
(1,341)	1:A:99:LEU:H	1:A:100:GLY:H	12	0.06
(1,339)	1:A:92:SER:H	1:A:98:HIS:H	9	0.06
(1,336)	1:A:90:VAL:H	1:A:101:HIS:H	17	0.06
(1,331)	1:A:80:ASP:H	1:A:88:THR:H	16	0.06
(1,329)	1:A:79:LEU:H	1:A:89:GLU:H	9	0.06
(1,32)	1:A:103:PHE:H	1:A:112:LEU:HD21	6	0.06
(1,32)	1:A:103:PHE:H	1:A:112:LEU:HD22	6	0.06
(1,32)	1:A:103:PHE:H	1:A:112:LEU:HD23	6	0.06
(1,317)	1:A:46:VAL:H	1:A:49:LYS:H	7	0.06
(1,312)	1:A:41:LEU:H	1:A:124:VAL:H	20	0.06
(1,308)	1:A:30:GLN:H	1:A:34:TRP:HE1	1	0.06
(1,308)	1:A:30:GLN:H	1:A:34:TRP:HE1	15	0.06
(1,305)	1:A:25:THR:H	1:A:26:GLU:H	1	0.06
(1,303)	1:A:18:GLU:H	1:A:20:THR:H	5	0.06
(1,303)	1:A:18:GLU:H	1:A:20:THR:H	13	0.06
(1,299)	1:A:15:MET:H	1:A:18:GLU:H	5	0.06
(1,299)	1:A:15:MET:H	1:A:18:GLU:H	8	0.06
(1,298)	1:A:14:ARG:H	1:A:17:TYR:H	15	0.06
(1,298)	1:A:14:ARG:H	1:A:17:TYR:H	18	0.06
(1,285)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:H	15	0.06
(1,284)	1:A:6:GLU:H	1:A:8:LYS:H	9	0.06
(1,281)	1:A:110:ASN:HD22	1:A:112:LEU:H	1	0.06
(1,267)	1:A:21:GLN:H	1:A:24:GLY:H	13	0.06
(1,267)	1:A:21:GLN:H	1:A:24:GLY:H	17	0.06
(1,266)	1:A:19:VAL:H	1:A:21:GLN:H	12	0.06
(1,260)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:99:LEU:HD21	18	0.06
(1,260)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:99:LEU:HD22	18	0.06
(1,260)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:99:LEU:HD23	18	0.06
(1,260)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:99:LEU:HD21	18	0.06
(1,260)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:99:LEU:HD22	18	0.06



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,260)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:99:LEU:HD23	18	0.06
(1,260)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:99:LEU:HD21	18	0.06
(1,260)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:99:LEU:HD22	18	0.06
(1,260)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:99:LEU:HD23	18	0.06
(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD11	18	0.06
(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD12	18	0.06
(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD13	18	0.06
(1,252)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:99:LEU:HD11	17	0.06
(1,252)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:99:LEU:HD12	17	0.06
(1,252)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:99:LEU:HD13	17	0.06
(1,252)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:99:LEU:HD11	17	0.06
(1,252)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:99:LEU:HD12	17	0.06
(1,252)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:99:LEU:HD13	17	0.06
(1,252)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:99:LEU:HD11	17	0.06
(1,252)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:99:LEU:HD12	17	0.06
(1,252)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:99:LEU:HD13	17	0.06
(1,24)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:134:TYR:H	5	0.06
(1,24)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:134:TYR:H	5	0.06
(1,24)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:134:TYR:H	5	0.06
(1,225)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:71:ILE:HD11	5	0.06
(1,225)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:71:ILE:HD12	5	0.06
(1,225)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:71:ILE:HD13	5	0.06
(1,225)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:71:ILE:HD11	5	0.06
(1,225)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:71:ILE:HD12	5	0.06
(1,225)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:71:ILE:HD13	5	0.06
(1,225)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:71:ILE:HD11	5	0.06
(1,225)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:71:ILE:HD12	5	0.06
(1,225)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:71:ILE:HD13	5	0.06
(1,225)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:71:ILE:HD11	20	0.06
(1,225)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:71:ILE:HD12	20	0.06
(1,225)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:71:ILE:HD13	20	0.06
(1,225)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:71:ILE:HD11	20	0.06
(1,225)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:71:ILE:HD12	20	0.06
(1,225)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:71:ILE:HD13	20	0.06
(1,225)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:71:ILE:HD11	20	0.06
(1,225)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:71:ILE:HD12	20	0.06
(1,225)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:71:ILE:HD13	20	0.06
(1,2)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:114:TYR:H	12	0.06
(1,2)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:114:TYR:H	12	0.06
(1,2)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:114:TYR:H	12	0.06
(1,195)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:124:VAL:HG21	12	0.06
(1,195)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:124:VAL:HG22	12	0.06



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,195)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:124:VAL:HG23	12	0.06
(1,195)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:124:VAL:HG21	12	0.06
(1,195)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:124:VAL:HG22	12	0.06
(1,195)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:124:VAL:HG23	12	0.06
(1,195)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:124:VAL:HG21	12	0.06
(1,195)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:124:VAL:HG22	12	0.06
(1,195)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:124:VAL:HG23	12	0.06
(1,19)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:127:HIS:H	12	0.06
(1,19)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:127:HIS:H	12	0.06
(1,19)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:127:HIS:H	12	0.06
(1,184)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:112:LEU:HD11	7	0.06
(1,184)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:112:LEU:HD12	7	0.06
(1,184)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:112:LEU:HD13	7	0.06
(1,184)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:112:LEU:HD11	7	0.06
(1,184)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:112:LEU:HD12	7	0.06
(1,184)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:112:LEU:HD13	7	0.06
(1,184)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:112:LEU:HD11	7	0.06
(1,184)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:112:LEU:HD12	7	0.06
(1,184)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:112:LEU:HD13	7	0.06
(1,184)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:112:LEU:HD11	17	0.06
(1,184)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:112:LEU:HD12	17	0.06
(1,184)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:112:LEU:HD13	17	0.06
(1,184)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:112:LEU:HD11	17	0.06
(1,184)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:112:LEU:HD12	17	0.06
(1,184)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:112:LEU:HD13	17	0.06
(1,184)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:112:LEU:HD11	17	0.06
(1,184)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:112:LEU:HD12	17	0.06
(1,184)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:112:LEU:HD13	17	0.06
(1,183)	1:A:90:VAL:HG21	1:A:102:VAL:HG21	11	0.06
(1,183)	1:A:90:VAL:HG21	1:A:102:VAL:HG22	11	0.06
(1,183)	1:A:90:VAL:HG21	1:A:102:VAL:HG23	11	0.06
(1,183)	1:A:90:VAL:HG22	1:A:102:VAL:HG21	11	0.06
(1,183)	1:A:90:VAL:HG22	1:A:102:VAL:HG22	11	0.06
(1,183)	1:A:90:VAL:HG22	1:A:102:VAL:HG23	11	0.06
(1,183)	1:A:90:VAL:HG23	1:A:102:VAL:HG21	11	0.06
(1,183)	1:A:90:VAL:HG23	1:A:102:VAL:HG22	11	0.06
(1,183)	1:A:90:VAL:HG23	1:A:102:VAL:HG23	11	0.06
(1,18)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:128:LYS:H	1	0.06
(1,18)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:128:LYS:H	1	0.06
(1,18)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:128:LYS:H	1	0.06
(1,171)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG11	14	0.06
(1,171)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG12	14	0.06



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

(1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG11 18 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG11 18 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG12 18 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG13 18 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG13 18 0.06 (1,171) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 1 0.06 (1,171) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 1 0.06 (1,171) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 1 0.06 (1,171) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 1 0.06 (1,171) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 20 0.06 (1,171) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 20 0.06 (1,151) 1:A:78:LYS:H 1:A:129:VAL:HG12 2 0.06 (1,151) 1:A:78:LYS:H 1:A:102:VAL:HG11 2 0.06 (1,151) 1:A:78:LYS:H 1:A:102:VAL:HG12 2 0.06 (1,151) 1:A:78:LYS:H 1:A:102:VAL:HG13 2 0.06 (1,148) 1:A:44:ASP:H 1:A:122:ARG:H 5 0.06 (1,148) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD21 13 0.06 (1,144) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD21 13 0.06 (1,144) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD21 13 0.06 (1,144) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD22 17 0.06 (1,144) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD23 13 0.06 (1,144) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD23 17 0.06 (1,144) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD21 17 0.06 (1,144) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD21 17 0.06 (1,147) 1:A:44:LEU:HD21 1:A:140:LEU:HD21 17 0.06 (1,1271) 1:A:44:LEU:HD21 1:A:140:LEU:HD21 1 0.06 (1,1271) 1:A:44:LEU:HD21 1:A:140:LEU:HD11 1 0.06 (1,1271) 1:A:44:LEU:HD21 1:A:140:LEU:HD11 1 0.06 (1,1271) 1:A:44:LEU:HD22 1:A:140:LEU:HD11 1 0.06 (1,1271) 1:A:44:LEU:HD22 1:A:140:LEU:HD11 1 0.06 (1,1271) 1:A:44:LEU:HD22 1:A:140:LEU:HD11 1 0.06 (1,1271) 1:A:44:LEU:HD23 1:A:140:LEU:HD13 1 0.06 (1,1270) 1:A:44:LEU:HD23 1:A:140:LEU:HD13 1 0.06 (1,1270) 1:A:44:LEU:HD23 1:A:140:LEU:HD11 1 0.06 (1,1270) 1:A:44:LEU:HD12 1:A:140:LEU:HD11 1 0.06 (1,1270) 1:A:44:LEU:HD12 1:A:140:LEU:HD13 1 0.06 (1,1270) 1:A:44:LEU:HD12 1:A:140:LEU:HD11 1 0.06 (1,1270) 1:A:44:LEU:	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG12 18 0.06 (1,171) 1:A:76:GLU:H 1:A:90:VAL:HG13 18 0.06 (1,171) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 1 0.06 (1,171) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 1 0.06 (1,171) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 1 0.06 (1,171) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 1 0.06 (1,171) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 1 0.06 (1,171) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 20 0.06 (1,171) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 20 0.06 (1,171) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 20 0.06 (1,151) 1:A:78:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 20 0.06 (1,151) 1:A:78:LYS:H 1:A:102:VAL:HG11 2 0.06 (1,151) 1:A:78:LYS:H 1:A:102:VAL:HG12 2 0.06 (1,151) 1:A:78:LYS:H 1:A:102:VAL:HG12 2 0.06 (1,151) 1:A:78:LYS:H 1:A:102:VAL:HG13 2 0.06 (1,148) 1:A:44:ASP:H 1:A:122:ARG:H 5 0.06 (1,148) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD21 13 0.06 (1,144) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD21 13 0.06 (1,144) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD22 13 0.06 (1,144) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD22 13 0.06 (1,144) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD22 17 0.06 (1,144) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD21 17 0.06 (1,144) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD21 17 0.06 (1,144) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD21 17 0.06 (1,141) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD21 17 0.06 (1,1271) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:140:LEU:HD21 17 0.06 (1,1271) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:140:LEU:HD21 17 0.06 (1,1271) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:140:LEU:HD11 1 0.06 (1,1271) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:140:LEU:HD11 1 0.06 (1,1271) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:140:LEU:HD11 1 0.06 (1,1271) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:140:LEU:HD11 1 0.06 (1,1270) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:140:LEU:HD11 1 0.06 (1,1270) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:140:LEU:HD11 1 0.06 (1,1270) 1:A:41:LEU:HD12 1 1:A:140:LEU:HD11 1 0.06 (1,1270) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:140:LEU:HD11 1 0.06 (1,1270)	(1,171)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG13	14	0.06
(1,171)         1:A:126:LYS:H         1:A:129:LEU:HD21         1         0.06           (1,17)         1:A:126:LYS:H         1:A:129:LEU:HD22         1         0.06           (1,17)         1:A:126:LYS:H         1:A:129:LEU:HD22         1         0.06           (1,17)         1:A:126:LYS:H         1:A:129:LEU:HD23         1         0.06           (1,17)         1:A:126:LYS:H         1:A:129:LEU:HD22         20         0.06           (1,17)         1:A:126:LYS:H         1:A:129:LEU:HD23         20         0.06           (1,17)         1:A:126:LYS:H         1:A:129:LEU:HD23         20         0.06           (1,15)         1:A:78:LYS:H         1:A:102:VAL:HG11         2         0.06           (1,15)         1:A:78:LYS:H         1:A:102:VAL:HG13         2         0.06           (1,14)         1:A:123:LEU:HSH         1:A:122:LEU:HD21         13         0.06           (1,144)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD23	(1,171)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG11	18	0.06
(1,17)	(1,171)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG12	18	0.06
(1,17) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 1 0.06 (1,17) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 1 0.06 (1,17) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 20 0.06 (1,17) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 20 0.06 (1,17) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 20 0.06 (1,17) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 20 0.06 (1,15) 1:A:78:LYS:H 1:A:102:VAL:HG11 2 0.06 (1,15) 1:A:78:LYS:H 1:A:102:VAL:HG11 2 0.06 (1,15) 1:A:78:LYS:H 1:A:102:VAL:HG12 2 0.06 (1,15) 1:A:78:LYS:H 1:A:102:VAL:HG13 2 0.06 (1,148) 1:A:44:ASP:H 1:A:129:LEU:HD21 13 0.06 (1,149) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD21 13 0.06 (1,141) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD21 13 0.06 (1,141) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD21 13 0.06 (1,141) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD21 17 0.06 (1,141) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD21 17 0.06 (1,141) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD21 17 0.06 (1,141) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD22 17 0.06 (1,141) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD21 17 0.06 (1,131) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:140:LEU:HD11 1 0.06 (1,1271) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:140:LEU:HD11 1 0.06 (1,1271) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:140:LEU:HD11 1 0.06 (1,1271) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:140:LEU:HD11 1 0.06 (1,1271) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:140:LEU:HD13 1 0.06 (1,1271) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:140:LEU:HD13 1 0.06 (1,1271) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:140:LEU:HD13 1 0.06 (1,1271) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:140:LEU:HD13 1 0.06 (1,1271) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:140:LEU:HD13 1 0.06 (1,1270) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:140:LEU:HD13 1 0.06 (1,1270) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:140:LEU:HD13 1 0.06	(1,171)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG13	18	0.06
(1,17) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 1 0.06 (1,17) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 20 0.06 (1,17) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 20 0.06 (1,17) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 20 0.06 (1,17) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 20 0.06 (1,15) 1:A:78:LYS:H 1:A:102:VAL:HG11 2 0.06 (1,15) 1:A:78:LYS:H 1:A:102:VAL:HG12 2 0.06 (1,15) 1:A:78:LYS:H 1:A:102:VAL:HG13 2 0.06 (1,15) 1:A:78:LYS:H 1:A:102:VAL:HG13 2 0.06 (1,148) 1:A:44:ASP:H 1:A:129:LEU:HD21 13 0.06 (1,144) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD21 13 0.06 (1,144) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD22 13 0.06 (1,144) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD23 13 0.06 (1,144) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD23 13 0.06 (1,144) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD23 17 0.06 (1,144) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD21 17 0.06 (1,144) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD23 17 0.06 (1,141) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD21 17 0.06 (1,141) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD21 17 0.06 (1,142) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:140:LEU:HD12 17 0.06 (1,1271) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:140:LEU:HD11 1 0.06 (1,1271) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:140:LEU:HD11 1 0.06 (1,1271) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:140:LEU:HD11 1 0.06 (1,1271) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:140:LEU:HD11 1 0.06 (1,1271) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:140:LEU:HD11 1 0.06 (1,1271) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:140:LEU:HD11 1 0.06 (1,1270) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:140:LEU:HD11 1 0	(1,17)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD21	1	0.06
(1,17) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 20 0.06 (1,17) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 20 0.06 (1,17) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 20 0.06 (1,15) 1:A:78:LYS:H 1:A:102:VAL:HG11 2 0.06 (1,15) 1:A:78:LYS:H 1:A:102:VAL:HG11 2 0.06 (1,15) 1:A:78:LYS:H 1:A:102:VAL:HG12 2 0.06 (1,15) 1:A:78:LYS:H 1:A:102:VAL:HG13 2 0.06 (1,15) 1:A:78:LYS:H 1:A:102:VAL:HG13 2 0.06 (1,148) 1:A:4:ASP:H 1:A:129:LEU:HD21 13 0.06 (1,141) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD21 13 0.06 (1,141) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD22 13 0.06 (1,141) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD23 13 0.06 (1,141) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD23 17 0.06 (1,131) 1:A:17:TYR:H 1:A:129:LEU:HD23 17 0.06 (1,1271) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:140:LEU:HD11 1 0.06 (1,1271) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:140:LEU:HD11 1 0.06 (1,1271) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:140:LEU:HD11 1 0.06 (1,1271) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:140:LEU:HD13 1 0.06 (1,1271) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:140:LEU:HD13 1 0.06 (1,1271) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:140:LEU:HD13 1 0.06 (1,1271) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:140:LEU:HD11 1 0.06 (1,1271) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:140:LEU:HD11 1 0.06 (1,1270) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:140:LEU:HD11 1 0.06 (1,1270) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:140:LEU:HD11 1 0.06 (1,1270) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:140:LEU:HD11 1 1 0.06 (1,1270) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:140:LE	(1,17)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD22	1	0.06
(1,17) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD22 20 0.06 (1,17) 1:A:126:LYS:H 1:A:129:LEU:HD23 20 0.06 (1,15) 1:A:78:LYS:H 1:A:102:VAL:HG11 2 0.06 (1,15) 1:A:78:LYS:H 1:A:102:VAL:HG12 2 0.06 (1,15) 1:A:78:LYS:H 1:A:102:VAL:HG12 2 0.06 (1,15) 1:A:78:LYS:H 1:A:102:VAL:HG13 2 0.06 (1,148) 1:A:78:LYS:H 1:A:129:LEU:HD21 2 0.06 (1,148) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD21 13 0.06 (1,141) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD21 13 0.06 (1,142) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD22 13 0.06 (1,143) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD22 13 0.06 (1,144) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD23 13 0.06 (1,144) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD21 17 0.06 (1,144) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD21 17 0.06 (1,144) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD21 17 0.06 (1,141) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD21 17 0.06 (1,141) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD22 17 0.06 (1,141) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD21 17 0.06 (1,141) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD21 17 0.06 (1,127) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:140:LEU:HD12 17 0.06 (1,1271) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:140:LEU:HD11 1 0.06 (1,1271) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:140:LEU:HD11 1 0.06 (1,1271) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:140:LEU:HD12 1 0.06 (1,1271) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:140:LEU:HD11 1 0.06 (1,1271) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:140:LEU:HD11 1 0.06 (1,1271) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:140:LEU:HD11 1 0.06 (1,1271) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:140:LEU:HD11 1 0.06 (1,1270) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:140:LEU:HD11 1 0.06 (1,1270) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:140:LEU:HD11	(1,17)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD23	1	0.06
(1,17)	(1,17)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD21	20	0.06
(1,15)         1:A:78:LYS:H         1:A:102:VAL:HG11         2         0.06           (1,15)         1:A:78:LYS:H         1:A:102:VAL:HG12         2         0.06           (1,15)         1:A:78:LYS:H         1:A:102:VAL:HG13         2         0.06           (1,14)         1:A:44:ASP:H         1:A:122:ARG:H         5         0.06           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD21         13         0.06           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD22         13         0.06           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD23         13         0.06           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD21         17         0.06           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD22         17         0.06           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD22         17         0.06           (1,14)         1:A:17:TYR:H         1:A:19:VAL:H         9         0.06           (1,131)         1:A:17:TYR:H         1:A:19:VAL:H         9         0.06           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD13         1         0.06           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:HD13 <th< td=""><td>(1,17)</td><td>1:A:126:LYS:H</td><td>1:A:129:LEU:HD22</td><td>20</td><td>0.06</td></th<>	(1,17)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD22	20	0.06
(1,15)         1:A:78:LYS:H         1:A:102:VAL:HG12         2         0.06           (1,15)         1:A:78:LYS:H         1:A:102:VAL:HG13         2         0.06           (1,148)         1:A:44:ASP:H         1:A:122:LARG:H         5         0.06           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD21         13         0.06           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD22         13         0.06           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD23         13         0.06           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD21         17         0.06           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD22         17         0.06           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD22         17         0.06           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD22         17         0.06           (1,141)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD22         17         0.06           (1,141)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD22         17         0.06           (1,141)         1:A:141:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD23         17         0.06           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD1	(1,17)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD23	20	0.06
(1,15)         1:A:78:LYS:H         1:A:102:VAL:HG13         2         0.06           (1,148)         1:A:44:ASP:H         1:A:122:ARG:H         5         0.06           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD21         13         0.06           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD22         13         0.06           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD23         13         0.06           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD21         17         0.06           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD22         17         0.06           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD23         17         0.06           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD11         1         0.06           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD13         1         0.06           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD	(1,15)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG11	2	0.06
(1,148)         1:A:44:ASP:H         1:A:122:ARG:H         5         0.06           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD21         13         0.06           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD22         13         0.06           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD23         13         0.06           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD21         17         0.06           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD22         17         0.06           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD22         17         0.06           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD22         17         0.06           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:VAL:H         9         0.06           (1,131)         1:A:147:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD23         17         0.06           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD12         1         0.06           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD13         1         0.06           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:HD13         1         0.06           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:L	(1,15)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG12	2	0.06
(1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD21         13         0.06           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD22         13         0.06           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD23         13         0.06           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD21         17         0.06           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD22         17         0.06           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD23         17         0.06           (1,14)         1:A:17:TYR:H         1:A:19:VAL:H         9         0.06           (1,131)         1:A:17:TYR:H         1:A:19:VAL:H         9         0.06           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD11         1         0.06           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD13         1         0.06           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:HD11         1         0.06           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:HD12         1         0.06           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:HD13         1         0.06           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LE	(1,15)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG13	2	0.06
(1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD22         13         0.06           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD23         13         0.06           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD21         17         0.06           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD22         17         0.06           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD23         17         0.06           (1,131)         1:A:17:TYR:H         1:A:19:VAL:H         9         0.06           (1,1271)         1:A:441:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD11         1         0.06           (1,1271)         1:A:441:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD12         1         0.06           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:HD11         1         0.06           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:HD13         1         0.06           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:HD13         1         0.06           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD11         1         0.06           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD13         1         0.06           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD13	(1,148)	1:A:44:ASP:H	1:A:122:ARG:H	5	0.06
(1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD23         13         0.06           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD21         17         0.06           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD22         17         0.06           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD23         17         0.06           (1,131)         1:A:17:TYR:H         1:A:19:VAL:H         9         0.06           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD11         1         0.06           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD12         1         0.06           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD13         1         0.06           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:HD12         1         0.06           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:HD13         1         0.06           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD13         1         0.06           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD13         1         0.06           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD13         1         0.06           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD13	(1,14)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD21	13	0.06
(1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD21         17         0.06           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD22         17         0.06           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD23         17         0.06           (1,131)         1:A:17:TYR:H         1:A:19:VAL:H         9         0.06           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD11         1         0.06           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD12         1         0.06           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD13         1         0.06           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:HD11         1         0.06           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:HD12         1         0.06           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD13         1         0.06           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD12         1         0.06           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD13         1         0.06           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD13         1         0.06           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD11	(1,14)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD22	13	0.06
(1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD22         17         0.06           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:19:VAL:H         9         0.06           (1,131)         1:A:17:TYR:H         1:A:19:VAL:H         9         0.06           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD11         1         0.06           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD12         1         0.06           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD13         1         0.06           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:HD11         1         0.06           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:HD12         1         0.06           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:HD13         1         0.06           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD11         1         0.06           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD12         1         0.06           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD13         1         0.06           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:140:LEU:HD11         13         0.06           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD12	(1,14)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD23	13	0.06
(1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD23         17         0.06           (1,131)         1:A:17:TYR:H         1:A:19:VAL:H         9         0.06           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD11         1         0.06           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD12         1         0.06           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD13         1         0.06           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:HD11         1         0.06           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:HD12         1         0.06           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:HD13         1         0.06           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD11         1         0.06           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD12         1         0.06           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD13         1         0.06           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:140:LEU:HD13         1         0.06           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:140:LEU:HD13         13         0.06           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD12 <td>· · /</td> <td>1:A:127:HIS:H</td> <td>1:A:129:LEU:HD21</td> <td>17</td> <td>0.06</td>	· · /	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD21	17	0.06
(1,131)         1:A:17:TYR:H         1:A:19:VAL:H         9         0.06           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD11         1         0.06           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD12         1         0.06           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD13         1         0.06           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:HD11         1         0.06           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:HD12         1         0.06           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:HD13         1         0.06           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD11         1         0.06           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD12         1         0.06           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD13         1         0.06           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD13         1         0.06           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:140:LEU:HD11         13         0.06           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:140:LEU:HD13         13         0.06           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD1	(1,14)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD22	17	0.06
(1,1271)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD12         1         0.06           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD12         1         0.06           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD13         1         0.06           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:HD11         1         0.06           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:HD12         1         0.06           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:HD13         1         0.06           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD11         1         0.06           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD12         1         0.06           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD13         1         0.06           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD13         1         0.06           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:140:LEU:HD11         13         0.06           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:140:LEU:HD13         13         0.06           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:140:LEU:HD13         13         0.06           (1,1270)         1:A:4	(1,14)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD23	17	0.06
(1,1271)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD12         1         0.06           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD13         1         0.06           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:HD11         1         0.06           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:HD12         1         0.06           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:HD13         1         0.06           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD11         1         0.06           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD12         1         0.06           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD13         1         0.06           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD13         1         0.06           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:140:LEU:HD11         13         0.06           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:140:LEU:HD13         13         0.06           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:140:LEU:HD11         13         0.06           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:140:LEU:HD13         13         0.06           (1,1270)         1:A:	(1,131)	1:A:17:TYR:H	1:A:19:VAL:H	9	0.06
(1,1271)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD13         1         0.06           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:HD11         1         0.06           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:HD12         1         0.06           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:HD13         1         0.06           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD11         1         0.06           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD12         1         0.06           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD13         1         0.06           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD13         1         0.06           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:140:LEU:HD13         1         0.06           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:140:LEU:HD13         13         0.06           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:140:LEU:HD13         13         0.06           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:140:LEU:HD13         13         0.06           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:140:LEU:HD13         13         0.06           (1,1270)         1:A:	(1,1271)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:140:LEU:HD11	1	0.06
(1,1271)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:HD11         1         0.06           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:HD12         1         0.06           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:HD13         1         0.06           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD11         1         0.06           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD12         1         0.06           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD13         1         0.06           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:140:LEU:HD11         13         0.06           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:140:LEU:HD13         13         0.06           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:140:LEU:HD11         13         0.06           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:140:LEU:HD13         13         0.06           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:140:LEU:HD13         13         0.06           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:140:LEU:HD13         13         0.06           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:140:LEU:HD13         13         0.06           (1,1270)         1	(1,1271)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:140:LEU:HD12	1	0.06
(1,1271)       1:A:41:LEU:HD22       1:A:140:LEU:HD12       1       0.06         (1,1271)       1:A:41:LEU:HD22       1:A:140:LEU:HD13       1       0.06         (1,1271)       1:A:41:LEU:HD23       1:A:140:LEU:HD11       1       0.06         (1,1271)       1:A:41:LEU:HD23       1:A:140:LEU:HD12       1       0.06         (1,1271)       1:A:41:LEU:HD23       1:A:140:LEU:HD13       1       0.06         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD23       1:A:140:LEU:HD13       1       0.06         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:140:LEU:HD11       13       0.06         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:140:LEU:HD13       13       0.06         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD11       13       0.06         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD13       13       0.06         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD13       13       0.06         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD11       13       0.06         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD13       13       0.06         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD13       13       0.06         (1,12	(1,1271)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:140:LEU:HD13	1	0.06
(1,1271)       1:A:41:LEU:HD22       1:A:140:LEU:HD13       1       0.06         (1,1271)       1:A:41:LEU:HD23       1:A:140:LEU:HD11       1       0.06         (1,1271)       1:A:41:LEU:HD23       1:A:140:LEU:HD12       1       0.06         (1,1271)       1:A:41:LEU:HD23       1:A:140:LEU:HD13       1       0.06         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:140:LEU:HD11       13       0.06         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:140:LEU:HD12       13       0.06         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:140:LEU:HD13       13       0.06         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD11       13       0.06         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD13       13       0.06         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD13       13       0.06         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD12       13       0.06         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD12       13       0.06         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD12       13       0.06         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD13       13       0.06         (1,	(1,1271)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:140:LEU:HD11	1	0.06
(1,1271)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD11         1         0.06           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD12         1         0.06           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD13         1         0.06           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:140:LEU:HD11         13         0.06           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:140:LEU:HD12         13         0.06           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:140:LEU:HD13         13         0.06           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:140:LEU:HD12         13         0.06           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:140:LEU:HD13         13         0.06           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:140:LEU:HD13         13         0.06           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:140:LEU:HD12         13         0.06           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:140:LEU:HD12         13         0.06           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:140:LEU:HD12         13         0.06           (1,1270)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:140:LEU:HD13         13         0.06           (1,1270) <t< td=""><td>(1,1271)</td><td>1:A:41:LEU:HD22</td><td>1:A:140:LEU:HD12</td><td>1</td><td>0.06</td></t<>	(1,1271)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:140:LEU:HD12	1	0.06
(1,1271)       1:A:41:LEU:HD23       1:A:140:LEU:HD12       1       0.06         (1,1271)       1:A:41:LEU:HD23       1:A:140:LEU:HD13       1       0.06         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:140:LEU:HD11       13       0.06         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:140:LEU:HD12       13       0.06         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD13       13       0.06         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD12       13       0.06         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD13       13       0.06         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD13       13       0.06         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD11       13       0.06         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD12       13       0.06         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD13       13       0.06         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD13       13       0.06         (1,1270)       1:A:60:LE:HD11       1:A:23:ASN:H       4       0.06         (1,1267)       1:A:86:ILE:HD11       1:A:80:ASP:H       18       0.06	(1,1271)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:140:LEU:HD13	1	0.06
(1,1271)       1:A:41:LEU:HD23       1:A:140:LEU:HD13       1       0.06         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:140:LEU:HD11       13       0.06         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:140:LEU:HD12       13       0.06         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:140:LEU:HD13       13       0.06         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD12       13       0.06         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD13       13       0.06         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD13       13       0.06         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD12       13       0.06         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD12       13       0.06         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD13       13       0.06         (1,1270)       1:A:21:GLN:H       1:A:23:ASN:H       4       0.06         (1,1267)       1:A:86:ILE:HD11       1:A:80:ASP:H       18       0.06	(1,1271)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:140:LEU:HD11	1	0.06
(1,1270)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:140:LEU:HD11       13       0.06         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:140:LEU:HD12       13       0.06         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:140:LEU:HD13       13       0.06         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD11       13       0.06         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD12       13       0.06         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD13       13       0.06         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD11       13       0.06         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD12       13       0.06         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD13       13       0.06         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD13       13       0.06         (1,1270)       1:A:21:GLN:H       1:A:23:ASN:H       4       0.06         (1,1267)       1:A:86:ILE:HD11       1:A:80:ASP:H       18       0.06	(1,1271)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:140:LEU:HD12	1	0.06
(1,1270)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:140:LEU:HD12       13       0.06         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:140:LEU:HD13       13       0.06         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD11       13       0.06         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD12       13       0.06         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD13       13       0.06         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD11       13       0.06         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD12       13       0.06         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD13       13       0.06         (1,1270)       1:A:21:GLN:H       1:A:23:ASN:H       4       0.06         (1,1267)       1:A:86:ILE:HD11       1:A:80:ASP:H       18       0.06	(1,1271)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:140:LEU:HD13	1	0.06
(1,1270)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:140:LEU:HD13       13       0.06         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD11       13       0.06         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD12       13       0.06         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD13       13       0.06         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD11       13       0.06         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD12       13       0.06         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD13       13       0.06         (1,1270)       1:A:21:GLN:H       1:A:23:ASN:H       4       0.06         (1,1267)       1:A:86:ILE:HD11       1:A:80:ASP:H       18       0.06	(1,1270)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:140:LEU:HD11	13	0.06
(1,1270)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD11       13       0.06         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD12       13       0.06         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD13       13       0.06         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD11       13       0.06         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD12       13       0.06         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD13       13       0.06         (1,127)       1:A:21:GLN:H       1:A:23:ASN:H       4       0.06         (1,1267)       1:A:86:ILE:HD11       1:A:80:ASP:H       18       0.06	(1,1270)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:140:LEU:HD12	13	0.06
(1,1270)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD12       13       0.06         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD13       13       0.06         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD11       13       0.06         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD12       13       0.06         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD13       13       0.06         (1,127)       1:A:21:GLN:H       1:A:23:ASN:H       4       0.06         (1,1267)       1:A:86:ILE:HD11       1:A:80:ASP:H       18       0.06	· · /	1:A:41:LEU:HD11	1:A:140:LEU:HD13	13	0.06
(1,1270)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD12       13       0.06         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD13       13       0.06         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD11       13       0.06         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD12       13       0.06         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD13       13       0.06         (1,127)       1:A:21:GLN:H       1:A:23:ASN:H       4       0.06         (1,1267)       1:A:86:ILE:HD11       1:A:80:ASP:H       18       0.06	(1,1270)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:140:LEU:HD11	13	0.06
(1,1270)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD13       13       0.06         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD11       13       0.06         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD12       13       0.06         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD13       13       0.06         (1,127)       1:A:21:GLN:H       1:A:23:ASN:H       4       0.06         (1,1267)       1:A:86:ILE:HD11       1:A:80:ASP:H       18       0.06	· · /	1:A:41:LEU:HD12	1:A:140:LEU:HD12	13	0.06
(1,1270)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD11       13       0.06         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD12       13       0.06         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD13       13       0.06         (1,127)       1:A:21:GLN:H       1:A:23:ASN:H       4       0.06         (1,1267)       1:A:86:ILE:HD11       1:A:80:ASP:H       18       0.06		1:A:41:LEU:HD12	1:A:140:LEU:HD13		
(1,1270)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD12       13       0.06         (1,1270)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD13       13       0.06         (1,127)       1:A:21:GLN:H       1:A:23:ASN:H       4       0.06         (1,1267)       1:A:86:ILE:HD11       1:A:80:ASP:H       18       0.06	· · /	1:A:41:LEU:HD13	1:A:140:LEU:HD11		
(1,1270)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:140:LEU:HD13       13       0.06         (1,127)       1:A:21:GLN:H       1:A:23:ASN:H       4       0.06         (1,1267)       1:A:86:ILE:HD11       1:A:80:ASP:H       18       0.06		1:A:41:LEU:HD13		13	0.06
(1,127) 1:A:21:GLN:H 1:A:23:ASN:H 4 0.06 (1,1267) 1:A:86:ILE:HD11 1:A:80:ASP:H 18 0.06	( '				
(1,1267) 1:A:86:ILE:HD11 1:A:80:ASP:H 18 0.06	` ′	1:A:21:GLN:H	1:A:23:ASN:H	4	0.06
	· · /	1:A:86:ILE:HD11	1:A:80:ASP:H		
	(1,1267)	1:A:86:ILE:HD12			



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1267)	1:A:86:ILE:HD13	1:A:80:ASP:H	18	0.06
(1,1257)	1:A:102:VAL:H	1:A:88:THR:H	3	0.06
(1,1256)	1:A:100:GLY:H	1:A:90:VAL:H	18	0.06
(1,1245)	1:A:142:ASN:H	1:A:142:ASN:HD21	14	0.06
(1,124)	1:A:5:LYS:H	1:A:7:GLU:H	7	0.06
(1,1229)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD11	9	0.06
(1,1229)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD12	9	0.06
(1,1229)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD13	9	0.06
(1,1228)	1:A:90:VAL:H	1:A:102:VAL:HG21	5	0.06
(1,1228)	1:A:90:VAL:H	1:A:102:VAL:HG22	5	0.06
(1,1228)	1:A:90:VAL:H	1:A:102:VAL:HG23	5	0.06
(1,1226)	1:A:102:VAL:HG11	1:A:113:ARG:H	11	0.06
(1,1226)	1:A:102:VAL:HG12	1:A:113:ARG:H	11	0.06
(1,1226)	1:A:102:VAL:HG13	1:A:113:ARG:H	11	0.06
(1,1225)	1:A:112:LEU:HD21	1:A:113:ARG:H	18	0.06
(1,1225)	1:A:112:LEU:HD22	1:A:113:ARG:H	18	0.06
(1,1225)	1:A:112:LEU:HD23	1:A:113:ARG:H	18	0.06
(1,1222)	1:A:111:GLY:H	1:A:112:LEU:HD21	11	0.06
(1,1222)	1:A:111:GLY:H	1:A:112:LEU:HD22	11	0.06
(1,1222)	1:A:111:GLY:H	1:A:112:LEU:HD23	11	0.06
(1,1220)	1:A:144:LEU:HD21	1:A:145:GLU:H	15	0.06
(1,1220)	1:A:144:LEU:HD22	1:A:145:GLU:H	15	0.06
(1,1220)	1:A:144:LEU:HD23	1:A:145:GLU:H	15	0.06
(1,1216)	1:A:140:LEU:HD11	1:A:141:PHE:H	7	0.06
(1,1216)	1:A:140:LEU:HD12	1:A:141:PHE:H	7	0.06
(1,1216)	1:A:140:LEU:HD13	1:A:141:PHE:H	7	0.06
(1,1216)	1:A:140:LEU:HD11	1:A:141:PHE:H	12	0.06
(1,1216)	1:A:140:LEU:HD12	1:A:141:PHE:H	12	0.06
(1,1216)	1:A:140:LEU:HD13	1:A:141:PHE:H	12	0.06
(1,1215)	1:A:140:LEU:H	1:A:140:LEU:HD21	6	0.06
(1,1215)	1:A:140:LEU:H	1:A:140:LEU:HD22	6	0.06
(1,1215)	1:A:140:LEU:H	1:A:140:LEU:HD23	6	0.06
(1,1210)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:H	6	0.06
(1,1210)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:H	6	0.06
(1,1210)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:H	6	0.06
(1,1209)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:137:TYR:H	20	0.06
(1,1209)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:137:TYR:H	20	0.06
(1,1209)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:137:TYR:H	20	0.06
(1,1207)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD21	7	0.06
(1,1207)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD22	7	0.06
(1,1207)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD23	7	0.06
(1,1207)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD21	15	0.06



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1207)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD22	15	0.06
(1,1207)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD23	15	0.06
(1,1201)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD11	3	0.06
(1,1201)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD12	3	0.06
(1,1201)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD13	3	0.06
(1,1195)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG21	9	0.06
(1,1195)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG22	9	0.06
(1,1195)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG23	9	0.06
(1,1194)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD21	4	0.06
(1,1194)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD22	4	0.06
(1,1194)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD23	4	0.06
(1,1194)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD21	16	0.06
(1,1194)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD22	16	0.06
(1,1194)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD23	16	0.06
(1,1193)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD11	12	0.06
(1,1193)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD12	12	0.06
(1,1193)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD13	12	0.06
(1,1189)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:120:ALA:H	19	0.06
(1,1189)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:120:ALA:H	19	0.06
(1,1189)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:120:ALA:H	19	0.06
(1,1187)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD21	3	0.06
(1,1187)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD22	3	0.06
(1,1187)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD23	3	0.06
(1,1187)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD21	9	0.06
(1,1187)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD22	9	0.06
(1,1187)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD23	9	0.06
(1,1181)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:102:VAL:H	7	0.06
(1,1181)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:102:VAL:H	7	0.06
(1,1181)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:102:VAL:H	7	0.06
(1,1161)	1:A:89:GLU:H	1:A:90:VAL:HG11	1	0.06
(1,1161)	1:A:89:GLU:H	1:A:90:VAL:HG12	1	0.06
(1,1161)	1:A:89:GLU:H	1:A:90:VAL:HG13	1	0.06
(1,1158)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:87:ARG:H	4	0.06
(1,1158)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:87:ARG:H	4	0.06
(1,1158)	1:A:79:LEU:HD13	1:A:87:ARG:H	4	0.06
(1,1157)	1:A:79:LEU:HD21	1:A:87:ARG:H	1	0.06
(1,1157)	1:A:79:LEU:HD22	1:A:87:ARG:H	1	0.06
(1,1157)	1:A:79:LEU:HD23	1:A:87:ARG:H	1	0.06
(1,1152)	1:A:75:VAL:HG11	1:A:77:GLU:H	8	0.06
(1,1152)	1:A:75:VAL:HG12	1:A:77:GLU:H	8	0.06
(1,1152)	1:A:75:VAL:HG13	1:A:77:GLU:H	8	0.06
(1,1150)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:76:GLU:H	18	0.06



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1150)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:76:GLU:H	18	0.06
(1,1150)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:76:GLU:H	18	0.06
(1,115)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:H	4	0.06
(1,115)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:H	7	0.06
(1,1148)	1:A:76:GLU:H	1:A:99:LEU:HD21	20	0.06
(1,1148)	1:A:76:GLU:H	1:A:99:LEU:HD22	20	0.06
(1,1148)	1:A:76:GLU:H	1:A:99:LEU:HD23	20	0.06
(1,1144)	1:A:71:ILE:H	1:A:71:ILE:HD11	5	0.06
(1,1144)	1:A:71:ILE:H	1:A:71:ILE:HD12	5	0.06
(1,1144)	1:A:71:ILE:H	1:A:71:ILE:HD13	5	0.06
(1,1142)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:H	8	0.06
(1,1142)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:H	8	0.06
(1,1142)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:H	8	0.06
(1,1142)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:H	13	0.06
(1,1142)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:H	13	0.06
(1,1142)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:H	13	0.06
(1,1141)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:54:SER:H	3	0.06
(1,1141)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:54:SER:H	3	0.06
(1,1141)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:54:SER:H	3	0.06
(1,1138)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:52:PHE:H	10	0.06
(1,1138)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:52:PHE:H	10	0.06
(1,1138)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:52:PHE:H	10	0.06
(1,1136)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:52:PHE:H	19	0.06
(1,1136)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:52:PHE:H	19	0.06
(1,1136)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:52:PHE:H	19	0.06
(1,1133)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:51:LEU:H	3	0.06
(1,1133)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:51:LEU:H	3	0.06
(1,1133)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:51:LEU:H	3	0.06
(1,1128)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:49:LYS:H	20	0.06
(1,1128)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:49:LYS:H	20	0.06
(1,1128)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:49:LYS:H	20	0.06
(1,1118)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD11	15	0.06
(1,1118)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD12	15	0.06
(1,1118)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD13	15	0.06
(1,1118)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD11	16	0.06
(1,1118)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD12	16	0.06
(1,1118)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD13	16	0.06
(1,1113)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:23:ASN:H	14	0.06
(1,1113)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:23:ASN:H	14	0.06
(1,1113)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:23:ASN:H	14	0.06
(1,1110)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG11	14	0.06
(1,1110)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG12	14	0.06



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1110)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG13	14	0.06
(1,1109)	1:A:16:GLN:H	1:A:46:VAL:HG11	16	0.06
(1,1109)	1:A:16:GLN:H	1:A:46:VAL:HG12	16	0.06
(1,1109)	1:A:16:GLN:H	1:A:46:VAL:HG13	16	0.06
(1,1103)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:10:LYS:H	6	0.06
(1,1103)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:10:LYS:H	6	0.06
(1,1103)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:10:LYS:H	6	0.06
(1,1103)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:10:LYS:H	14	0.06
(1,1103)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:10:LYS:H	14	0.06
(1,1103)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:10:LYS:H	14	0.06
(1,1103)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:10:LYS:H	17	0.06
(1,1103)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:10:LYS:H	17	0.06
(1,1103)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:10:LYS:H	17	0.06
(1,1100)	1:A:8:LYS:H	1:A:9:ILE:HD11	6	0.06
(1,1100)	1:A:8:LYS:H	1:A:9:ILE:HD12	6	0.06
(1,1100)	1:A:8:LYS:H	1:A:9:ILE:HD13	6	0.06
(1,1098)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG21	2	0.06
(1,1098)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG22	2	0.06
(1,1098)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG23	2	0.06
(1,1097)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG21	10	0.06
(1,1097)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG22	10	0.06
(1,1097)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG23	10	0.06
(1,1096)	1:A:75:VAL:HG11	1:A:91:ARG:H	7	0.06
(1,1096)	1:A:75:VAL:HG12	1:A:91:ARG:H	7	0.06
(1,1096)	1:A:75:VAL:HG13	1:A:91:ARG:H	7	0.06
(1,1093)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:89:GLU:H	10	0.06
(1,1093)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:89:GLU:H	10	0.06
(1,1093)	1:A:79:LEU:HD13	1:A:89:GLU:H	10	0.06
(1,1093)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:89:GLU:H	20	0.06
(1,1093)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:89:GLU:H	20	0.06
(1,1093)	1:A:79:LEU:HD13	1:A:89:GLU:H	20	0.06
(1,1090)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:113:ARG:H	12	0.06
(1,1090)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:113:ARG:H	12	0.06
(1,1090)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:113:ARG:H	12	0.06
(1,1090)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:113:ARG:H	19	0.06
(1,1090)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:113:ARG:H	19	0.06
(1,1090)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:113:ARG:H	19	0.06
(1,1087)	1:A:71:ILE:H	1:A:75:VAL:HG11	13	0.06
(1,1087)	1:A:71:ILE:H	1:A:75:VAL:HG12	13	0.06
(1,1087)	1:A:71:ILE:H	1:A:75:VAL:HG13	13	0.06
(1,1086)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:124:VAL:H	15	0.06
(1,1086)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:124:VAL:H	15	0.06



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1086)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:124:VAL:H	15	0.06
(1,1083)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:120:ALA:H	15	0.06
(1,1083)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:120:ALA:H	15	0.06
(1,1083)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:120:ALA:H	15	0.06
(1,1080)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:26:GLU:H	9	0.06
(1,1080)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:26:GLU:H	9	0.06
(1,1080)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:26:GLU:H	9	0.06
(1,1080)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:26:GLU:H	10	0.06
(1,1080)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:26:GLU:H	10	0.06
(1,1080)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:26:GLU:H	10	0.06
(1,1076)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:103:PHE:H	11	0.06
(1,1076)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:103:PHE:H	11	0.06
(1,1076)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:103:PHE:H	11	0.06
(1,1075)	1:A:46:VAL:HG11	1:A:47:SER:H	2	0.06
(1,1075)	1:A:46:VAL:HG12	1:A:47:SER:H	2	0.06
(1,1075)	1:A:46:VAL:HG13	1:A:47:SER:H	2	0.06
(1,1060)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD21	7	0.06
(1,1060)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD22	7	0.06
(1,1060)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD23	7	0.06
(1,1060)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD21	8	0.06
(1,1060)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD22	8	0.06
(1,1060)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD23	8	0.06
(1,1060)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD21	13	0.06
(1,1060)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD22	13	0.06
(1,1060)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD23	13	0.06
(1,1059)	1:A:12:LEU:H	1:A:12:LEU:HD21	20	0.06
(1,1059)	1:A:12:LEU:H	1:A:12:LEU:HD22	20	0.06
(1,1059)	1:A:12:LEU:H	1:A:12:LEU:HD23	20	0.06
(1,1058)	1:A:51:LEU:HD11	1:A:121:LEU:HD11	16	0.06
(1,1058)	1:A:51:LEU:HD11	1:A:121:LEU:HD12	16	0.06
(1,1058)	1:A:51:LEU:HD11	1:A:121:LEU:HD13	16	0.06
(1,1058)	1:A:51:LEU:HD12	1:A:121:LEU:HD11	16	0.06
(1,1058)	1:A:51:LEU:HD12	1:A:121:LEU:HD12	16	0.06
(1,1058)	1:A:51:LEU:HD12	1:A:121:LEU:HD13	16	0.06
(1,1058)	1:A:51:LEU:HD13	1:A:121:LEU:HD11	16	0.06
(1,1058)	1:A:51:LEU:HD13	1:A:121:LEU:HD12	16	0.06
(1,1058)	1:A:51:LEU:HD13	1:A:121:LEU:HD13	16	0.06
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD11	1	0.06
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD12	1	0.06
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD13	1	0.06
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD11	1	0.06
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD12	1	0.06



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD13	1	0.06
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD11	1	0.06
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD12	1	0.06
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD13	1	0.06
(1,1038)	1:A:12:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HG11	10	0.06
(1,1038)	1:A:12:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HG12	10	0.06
(1,1038)	1:A:12:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HG13	10	0.06
(1,1038)	1:A:12:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HG11	10	0.06
(1,1038)	1:A:12:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HG12	10	0.06
(1,1038)	1:A:12:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HG13	10	0.06
(1,1038)	1:A:12:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HG11	10	0.06
(1,1038)	1:A:12:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HG12	10	0.06
(1,1038)	1:A:12:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HG13	10	0.06
(1,1029)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:99:LEU:HD21	8	0.06
(1,1029)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:99:LEU:HD22	8	0.06
(1,1029)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:99:LEU:HD23	8	0.06
(1,1029)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:99:LEU:HD21	8	0.06
(1,1029)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:99:LEU:HD22	8	0.06
(1,1029)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:99:LEU:HD23	8	0.06
(1,1029)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:99:LEU:HD21	8	0.06
(1,1029)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:99:LEU:HD22	8	0.06
(1,1029)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:99:LEU:HD23	8	0.06
(1,1029)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:99:LEU:HD21	12	0.06
(1,1029)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:99:LEU:HD22	12	0.06
(1,1029)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:99:LEU:HD23	12	0.06
(1,1029)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:99:LEU:HD21	12	0.06
(1,1029)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:99:LEU:HD22	12	0.06
(1,1029)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:99:LEU:HD23	12	0.06
(1,1029)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:99:LEU:HD21	12	0.06
(1,1029)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:99:LEU:HD22	12	0.06
(1,1029)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:99:LEU:HD23	12	0.06
(1,1020)	1:A:131:GLU:H	1:A:133:GLY:H	4	0.06
(1,1020)	1:A:131:GLU:H	1:A:133:GLY:H	11	0.06
(1,1013)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:H	4	0.06
(1,1010)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:H	13	0.06
(1,1002)	1:A:119:ALA:H	1:A:121:LEU:H	18	0.06
(1,1000)	1:A:67:PHE:H	1:A:114:TYR:H	12	0.06
(1,982)	1:A:76:GLU:H	1:A:91:ARG:H	12	0.05
(1,982)	1:A:76:GLU:H	1:A:91:ARG:H	13	0.05
(1,982)	1:A:76:GLU:H	1:A:91:ARG:H	18	0.05
(1,977)	1:A:85:MET:H	1:A:86:ILE:H	19	0.05
(1,976)	1:A:80:ASP:H	1:A:88:THR:H	14	0.05



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,974)	1:A:79:LEU:H	1:A:89:GLU:H	12	0.05
(1,972)	1:A:78:LYS:H	1:A:89:GLU:H	2	0.05
(1,957)	1:A:41:LEU:H	1:A:124:VAL:H	4	0.05
(1,954)	1:A:33:TYR:H	1:A:36:HIS:H	12	0.05
(1,952)	1:A:32:GLU:H	1:A:34:TRP:H	8	0.05
(1,952)	1:A:32:GLU:H	1:A:34:TRP:H	11	0.05
(1,951)	1:A:31:ASN:H	1:A:32:GLU:H	20	0.05
(1,944)	1:A:15:MET:H	1:A:18:GLU:H	20	0.05
(1,930)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:H	6	0.05
(1,924)	1:A:26:GLU:H	1:A:64:TRP:HE1	5	0.05
(1,912)	1:A:21:GLN:H	1:A:24:GLY:H	12	0.05
(1,912)	1:A:21:GLN:H	1:A:24:GLY:H	15	0.05
(1,911)	1:A:19:VAL:H	1:A:21:GLN:H	8	0.05
(1,911)	1:A:19:VAL:H	1:A:21:GLN:H	11	0.05
(1,911)	1:A:19:VAL:H	1:A:21:GLN:H	15	0.05
(1,911)	1:A:19:VAL:H	1:A:21:GLN:H	18	0.05
(1,906)	1:A:99:LEU:HD21	1:A:116:ILE:HD11	18	0.05
(1,906)	1:A:99:LEU:HD21	1:A:116:ILE:HD12	18	0.05
(1,906)	1:A:99:LEU:HD21	1:A:116:ILE:HD13	18	0.05
(1,906)	1:A:99:LEU:HD22	1:A:116:ILE:HD11	18	0.05
(1,906)	1:A:99:LEU:HD22	1:A:116:ILE:HD12	18	0.05
(1,906)	1:A:99:LEU:HD22	1:A:116:ILE:HD13	18	0.05
(1,906)	1:A:99:LEU:HD23	1:A:116:ILE:HD11	18	0.05
(1,906)	1:A:99:LEU:HD23	1:A:116:ILE:HD12	18	0.05
(1,906)	1:A:99:LEU:HD23	1:A:116:ILE:HD13	18	0.05
(1,904)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD11	4	0.05
(1,904)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD12	4	0.05
(1,904)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD13	4	0.05
(1,904)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD11	4	0.05
(1,904)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD12	4	0.05
(1,904)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD13	4	0.05
(1,904)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD11	4	0.05
(1,904)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD12	4	0.05
(1,904)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD13	4	0.05
(1,89)	1:A:55:LYS:H	1:A:57:LYS:H	6	0.05
(1,89)	1:A:55:LYS:H	1:A:57:LYS:H	12	0.05
(1,89)	1:A:55:LYS:H	1:A:57:LYS:H	16	0.05
(1,889)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:130:LYS:H	19	0.05
(1,889)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:130:LYS:H	19	0.05
(1,889)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:130:LYS:H	19	0.05
(1,889)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:130:LYS:H	20	0.05
(1,889)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:130:LYS:H	20	0.05



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,889)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:130:LYS:H	20	0.05
(1,856)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:138:LEU:HD11	9	0.05
(1,856)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:138:LEU:HD12	9	0.05
(1,856)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:138:LEU:HD13	9	0.05
(1,856)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:138:LEU:HD11	9	0.05
(1,856)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:138:LEU:HD12	9	0.05
(1,856)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:138:LEU:HD13	9	0.05
(1,856)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:138:LEU:HD11	9	0.05
(1,856)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:138:LEU:HD12	9	0.05
(1,856)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:138:LEU:HD13	9	0.05
(1,838)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:HD22	13	0.05
(1,838)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:HD22	13	0.05
(1,838)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:HD22	13	0.05
(1,829)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:112:LEU:HD11	2	0.05
(1,829)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:112:LEU:HD12	2	0.05
(1,829)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:112:LEU:HD13	2	0.05
(1,829)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:112:LEU:HD11	2	0.05
(1,829)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:112:LEU:HD12	2	0.05
(1,829)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:112:LEU:HD13	2	0.05
(1,829)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:112:LEU:HD11	2	0.05
(1,829)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:112:LEU:HD12	2	0.05
(1,829)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:112:LEU:HD13	2	0.05
(1,825)	1:A:90:VAL:HG21	1:A:91:ARG:H	14	0.05
(1,825)	1:A:90:VAL:HG22	1:A:91:ARG:H	14	0.05
(1,825)	1:A:90:VAL:HG23	1:A:91:ARG:H	14	0.05
(1,816)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG11	2	0.05
(1,816)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG12	2	0.05
(1,816)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG13	2	0.05
(1,816)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG11	6	0.05
(1,816)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG12	6	0.05
(1,816)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG13	6	0.05
(1,816)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG11	7	0.05
(1,816)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG12	7	0.05
(1,816)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG13	7	0.05
(1,811)	1:A:40:GLY:H	1:A:54:SER:H	15	0.05
(1,81)	1:A:47:SER:H	1:A:48:GLY:H	1	0.05
(1,809)	1:A:76:GLU:H	1:A:77:GLU:H	4	0.05
(1,808)	1:A:15:MET:H	1:A:17:TYR:H	6	0.05
(1,808)	1:A:15:MET:H	1:A:17:TYR:H	16	0.05
(1,806)	1:A:133:GLY:H	1:A:135:GLU:H	2	0.05
(1,806)	1:A:133:GLY:H	1:A:135:GLU:H	3	0.05
(1,8)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:42:TYR:H	7	0.05



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,8)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:42:TYR:H	7	0.05
(1,8)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:42:TYR:H	7	0.05
(1,8)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:42:TYR:H	13	0.05
(1,8)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:42:TYR:H	13	0.05
(1,8)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:42:TYR:H	13	0.05
(1,795)	1:A:81:THR:H	1:A:82:SER:H	2	0.05
(1,793)	1:A:44:ASP:H	1:A:122:ARG:H	10	0.05
(1,793)	1:A:44:ASP:H	1:A:122:ARG:H	19	0.05
(1,792)	1:A:130:LYS:H	1:A:134:TYR:H	5	0.05
(1,791)	1:A:130:LYS:H	1:A:132:GLU:H	5	0.05
(1,791)	1:A:130:LYS:H	1:A:132:GLU:H	9	0.05
(1,790)	1:A:128:LYS:H	1:A:130:LYS:H	8	0.05
(1,784)	1:A:46:VAL:H	1:A:48:GLY:H	2	0.05
(1,78)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:H	8	0.05
(1,764)	1:A:88:THR:H	1:A:102:VAL:H	16	0.05
(1,759)	1:A:29:PHE:H	1:A:31:ASN:H	20	0.05
(1,734)	1:A:55:LYS:H	1:A:57:LYS:H	6	0.05
(1,734)	1:A:55:LYS:H	1:A:57:LYS:H	12	0.05
(1,734)	1:A:55:LYS:H	1:A:57:LYS:H	16	0.05
(1,726)	1:A:47:SER:H	1:A:48:GLY:H	1	0.05
(1,723)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:H	8	0.05
(1,715)	1:A:16:GLN:HE21	1:A:46:VAL:H	3	0.05
(1,715)	1:A:16:GLN:HE21	1:A:46:VAL:H	13	0.05
(1,713)	1:A:34:TRP:H	1:A:36:HIS:H	12	0.05
(1,70)	1:A:16:GLN:HE21	1:A:46:VAL:H	3	0.05
(1,70)	1:A:16:GLN:HE21	1:A:46:VAL:H	13	0.05
(1,698)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD21	5	0.05
(1,698)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD22	5	0.05
(1,698)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD23	5	0.05
(1,693)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:88:THR:H	20	0.05
(1,693)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:88:THR:H	20	0.05
(1,693)	1:A:79:LEU:HD13	1:A:88:THR:H	20	0.05
(1,690)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD11	1	0.05
(1,690)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD12	1	0.05
(1,690)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD13	1	0.05
(1,689)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:48:GLY:H	6	0.05
(1,689)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:48:GLY:H	6	0.05
(1,689)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:48:GLY:H	6	0.05
(1,689)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:48:GLY:H	9	0.05
(1,689)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:48:GLY:H	9	0.05
(1,689)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:48:GLY:H	9	0.05
(1,689)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:48:GLY:H	20	0.05



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,689)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:48:GLY:H	20	0.05
(1,689)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:48:GLY:H	20	0.05
(1,686)	1:A:45:ILE:H	1:A:46:VAL:HG21	5	0.05
(1,686)	1:A:45:ILE:H	1:A:46:VAL:HG22	5	0.05
(1,686)	1:A:45:ILE:H	1:A:46:VAL:HG23	5	0.05
(1,685)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:97:SER:H	14	0.05
(1,685)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:97:SER:H	14	0.05
(1,685)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:97:SER:H	14	0.05
(1,68)	1:A:34:TRP:H	1:A:36:HIS:H	12	0.05
(1,677)	1:A:103:PHE:H	1:A:112:LEU:HD21	10	0.05
(1,677)	1:A:103:PHE:H	1:A:112:LEU:HD22	10	0.05
(1,677)	1:A:103:PHE:H	1:A:112:LEU:HD23	10	0.05
(1,676)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:49:LYS:H	19	0.05
(1,676)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:49:LYS:H	19	0.05
(1,676)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:49:LYS:H	19	0.05
(1,675)	1:A:106:GLY:H	1:A:112:LEU:HD21	11	0.05
(1,675)	1:A:106:GLY:H	1:A:112:LEU:HD22	11	0.05
(1,675)	1:A:106:GLY:H	1:A:112:LEU:HD23	11	0.05
(1,671)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD11	12	0.05
(1,671)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD12	12	0.05
(1,671)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD13	12	0.05
(1,670)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:123:PHE:H	17	0.05
(1,670)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:123:PHE:H	17	0.05
(1,670)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:123:PHE:H	17	0.05
(1,669)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:134:TYR:H	2	0.05
(1,669)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:134:TYR:H	2	0.05
(1,669)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:134:TYR:H	2	0.05
(1,669)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:134:TYR:H	13	0.05
(1,669)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:134:TYR:H	13	0.05
(1,669)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:134:TYR:H	13	0.05
(1,664)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:127:HIS:H	6	0.05
(1,664)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:127:HIS:H	6	0.05
(1,664)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:127:HIS:H	6	0.05
(1,661)	1:A:102:VAL:H	1:A:102:VAL:HG11	2	0.05
(1,661)	1:A:102:VAL:H	1:A:102:VAL:HG12	2	0.05
(1,661)	1:A:102:VAL:H	1:A:102:VAL:HG13	2	0.05
(1,661)	1:A:102:VAL:H	1:A:102:VAL:HG11	4	0.05
(1,661)	1:A:102:VAL:H	1:A:102:VAL:HG12	4	0.05
(1,661)	1:A:102:VAL:H	1:A:102:VAL:HG13	4	0.05
(1,661)	1:A:102:VAL:H	1:A:102:VAL:HG11	7	0.05
(1,661)	1:A:102:VAL:H	1:A:102:VAL:HG12	7	0.05
(1,661)	1:A:102:VAL:H	1:A:102:VAL:HG13	7	0.05



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,661)	1:A:102:VAL:H	1:A:102:VAL:HG11	13	0.05
(1,661)	1:A:102:VAL:H	1:A:102:VAL:HG12	13	0.05
(1,661)	1:A:102:VAL:H	1:A:102:VAL:HG13	13	0.05
(1,659)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD21	2	0.05
(1,659)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD22	2	0.05
(1,659)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD23	2	0.05
(1,659)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD21	4	0.05
(1,659)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD22	4	0.05
(1,659)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD23	4	0.05
(1,658)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:131:GLU:H	3	0.05
(1,658)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:131:GLU:H	3	0.05
(1,658)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:131:GLU:H	3	0.05
(1,656)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD21	10	0.05
(1,656)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD22	10	0.05
(1,656)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD23	10	0.05
(1,656)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD21	18	0.05
(1,656)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD22	18	0.05
(1,656)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD23	18	0.05
(1,653)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:42:TYR:H	7	0.05
(1,653)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:42:TYR:H	7	0.05
(1,653)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:42:TYR:H	7	0.05
(1,653)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:42:TYR:H	13	0.05
(1,653)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:42:TYR:H	13	0.05
(1,653)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:42:TYR:H	13	0.05
(1,647)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:114:TYR:H	13	0.05
(1,647)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:114:TYR:H	13	0.05
(1,647)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:114:TYR:H	13	0.05
(1,644)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD11	2	0.05
(1,644)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD12	2	0.05
(1,644)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD13	2	0.05
(1,644)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD11	15	0.05
(1,644)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD12	15	0.05
(1,644)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD13	15	0.05
(1,626)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:140:LEU:HD11	3	0.05
(1,626)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:140:LEU:HD12	3	0.05
(1,626)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:140:LEU:HD13	3	0.05
(1,626)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:140:LEU:HD11	3	0.05
(1,626)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:140:LEU:HD12	3	0.05
(1,626)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:140:LEU:HD13	3	0.05
(1,626)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:140:LEU:HD11	3	0.05
(1,626)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:140:LEU:HD12	3	0.05
(1,626)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:140:LEU:HD13	3	0.05



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,623)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:71:ILE:HD11	19	0.05
(1,623)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:71:ILE:HD12	19	0.05
(1,623)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:71:ILE:HD13	19	0.05
(1,623)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:71:ILE:HD11	19	0.05
(1,623)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:71:ILE:HD12	19	0.05
(1,623)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:71:ILE:HD13	19	0.05
(1,623)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:71:ILE:HD11	19	0.05
(1,623)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:71:ILE:HD12	19	0.05
(1,623)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:71:ILE:HD13	19	0.05
(1,621)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:51:LEU:H	2	0.05
(1,621)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:51:LEU:H	2	0.05
(1,621)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:51:LEU:H	2	0.05
(1,613)	1:A:115:CYS:H	1:A:101:HIS:H	2	0.05
(1,613)	1:A:115:CYS:H	1:A:101:HIS:H	19	0.05
(1,611)	1:A:100:GLY:H	1:A:90:VAL:H	6	0.05
(1,611)	1:A:100:GLY:H	1:A:90:VAL:H	7	0.05
(1,600)	1:A:142:ASN:H	1:A:142:ASN:HD21	6	0.05
(1,599)	1:A:117:ASN:H	1:A:117:ASN:HD21	12	0.05
(1,581)	1:A:102:VAL:HG11	1:A:113:ARG:H	5	0.05
(1,581)	1:A:102:VAL:HG12	1:A:113:ARG:H	5	0.05
(1,581)	1:A:102:VAL:HG13	1:A:113:ARG:H	5	0.05
(1,575)	1:A:144:LEU:HD21	1:A:145:GLU:H	12	0.05
(1,575)	1:A:144:LEU:HD22	1:A:145:GLU:H	12	0.05
(1,575)	1:A:144:LEU:HD23	1:A:145:GLU:H	12	0.05
(1,572)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:141:PHE:H	18	0.05
(1,572)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:141:PHE:H	18	0.05
(1,572)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:141:PHE:H	18	0.05
(1,571)	1:A:140:LEU:HD11	1:A:141:PHE:H	4	0.05
(1,571)	1:A:140:LEU:HD12	1:A:141:PHE:H	4	0.05
(1,571)	1:A:140:LEU:HD13	1:A:141:PHE:H	4	0.05
(1,571)	1:A:140:LEU:HD11	1:A:141:PHE:H	11	0.05
(1,571)	1:A:140:LEU:HD12	1:A:141:PHE:H	11	0.05
(1,571)	1:A:140:LEU:HD13	1:A:141:PHE:H	11	0.05
(1,570)	1:A:140:LEU:H	1:A:140:LEU:HD21	8	0.05
(1,570)	1:A:140:LEU:H	1:A:140:LEU:HD22	8	0.05
(1,570)	1:A:140:LEU:H	1:A:140:LEU:HD23	8	0.05
(1,565)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:H	13	0.05
(1,565)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:H	13	0.05
(1,565)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:H	13	0.05
(1,561)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:134:TYR:H	11	0.05
(1,561)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:134:TYR:H	11	0.05
(1,561)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:134:TYR:H	11	0.05



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,558)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:132:GLU:H	8	0.05
(1,558)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:132:GLU:H	8	0.05
(1,558)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:132:GLU:H	8	0.05
(1,551)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD11	10	0.05
(1,551)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD12	10	0.05
(1,551)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD13	10	0.05
(1,550)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG21	8	0.05
(1,550)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG22	8	0.05
(1,550)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG23	8	0.05
(1,548)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD11	3	0.05
(1,548)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD12	3	0.05
(1,548)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD13	3	0.05
(1,542)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD21	2	0.05
(1,542)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD22	2	0.05
(1,542)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD23	2	0.05
(1,536)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:102:VAL:H	1	0.05
(1,536)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:102:VAL:H	1	0.05
(1,536)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:102:VAL:H	1	0.05
(1,535)	1:A:101:HIS:H	1:A:116:ILE:HD11	17	0.05
(1,535)	1:A:101:HIS:H	1:A:116:ILE:HD12	17	0.05
(1,535)	1:A:101:HIS:H	1:A:116:ILE:HD13	17	0.05
(1,53)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD21	5	0.05
(1,53)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD22	5	0.05
(1,53)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD23	5	0.05
(1,512)	1:A:79:LEU:HD21	1:A:87:ARG:H	10	0.05
(1,512)	1:A:79:LEU:HD22	1:A:87:ARG:H	10	0.05
(1,512)	1:A:79:LEU:HD23	1:A:87:ARG:H	10	0.05
(1,511)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:122:ARG:H	2	0.05
(1,511)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:122:ARG:H	2	0.05
(1,511)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:122:ARG:H	2	0.05
(1,505)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:76:GLU:H	14	0.05
(1,505)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:76:GLU:H	14	0.05
(1,505)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:76:GLU:H	14	0.05
(1,505)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:76:GLU:H	15	0.05
(1,505)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:76:GLU:H	15	0.05
(1,505)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:76:GLU:H	15	0.05
(1,501)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG21	6	0.05
(1,501)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG22	6	0.05
(1,501)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG23	6	0.05
(1,499)	1:A:71:ILE:H	1:A:71:ILE:HD11	4	0.05
(1,499)	1:A:71:ILE:H	1:A:71:ILE:HD12	4	0.05
(1,499)	1:A:71:ILE:H	1:A:71:ILE:HD13	4	0.05



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,499)	1:A:71:ILE:H	1:A:71:ILE:HD11	14	0.05
(1,499)	1:A:71:ILE:H	1:A:71:ILE:HD12	14	0.05
(1,499)	1:A:71:ILE:H	1:A:71:ILE:HD13	14	0.05
(1,496)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:54:SER:H	9	0.05
(1,496)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:54:SER:H	9	0.05
(1,496)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:54:SER:H	9	0.05
(1,488)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:51:LEU:H	19	0.05
(1,488)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:51:LEU:H	19	0.05
(1,488)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:51:LEU:H	19	0.05
(1,48)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:88:THR:H	20	0.05
(1,48)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:88:THR:H	20	0.05
(1,48)	1:A:79:LEU:HD13	1:A:88:THR:H	20	0.05
(1,473)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD11	5	0.05
(1,473)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD12	5	0.05
(1,473)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD13	5	0.05
(1,464)	1:A:16:GLN:H	1:A:46:VAL:HG11	13	0.05
(1,464)	1:A:16:GLN:H	1:A:46:VAL:HG12	13	0.05
(1,464)	1:A:16:GLN:H	1:A:46:VAL:HG13	13	0.05
(1,462)	1:A:45:ILE:HD11	1:A:46:VAL:H	1	0.05
(1,462)	1:A:45:ILE:HD12	1:A:46:VAL:H	1	0.05
(1,462)	1:A:45:ILE:HD13	1:A:46:VAL:H	1	0.05
(1,458)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:10:LYS:H	5	0.05
(1,458)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:10:LYS:H	5	0.05
(1,458)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:10:LYS:H	5	0.05
(1,456)	1:A:9:ILE:H	1:A:12:LEU:HD21	1	0.05
(1,456)	1:A:9:ILE:H	1:A:12:LEU:HD22	1	0.05
(1,456)	1:A:9:ILE:H	1:A:12:LEU:HD23	1	0.05
(1,455)	1:A:8:LYS:H	1:A:9:ILE:HD11	10	0.05
(1,455)	1:A:8:LYS:H	1:A:9:ILE:HD12	10	0.05
(1,455)	1:A:8:LYS:H	1:A:9:ILE:HD13	10	0.05
(1,454)	1:A:134:TYR:H	1:A:138:LEU:HD21	10	0.05
(1,454)	1:A:134:TYR:H	1:A:138:LEU:HD22	10	0.05
(1,454)	1:A:134:TYR:H	1:A:138:LEU:HD23	10	0.05
(1,451)	1:A:75:VAL:HG11	1:A:91:ARG:H	20	0.05
(1,451)	1:A:75:VAL:HG12	1:A:91:ARG:H	20	0.05
(1,451)	1:A:75:VAL:HG13	1:A:91:ARG:H	20	0.05
(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD11	1	0.05
(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD12	1	0.05
(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD13	1	0.05
(1,448)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:89:GLU:H	3	0.05
(1,448)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:89:GLU:H	3	0.05
		t .		



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,445)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:113:ARG:H	2	0.05
(1,445)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:113:ARG:H	2	0.05
(1,445)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:113:ARG:H	2	0.05
(1,445)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:113:ARG:H	17	0.05
(1,445)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:113:ARG:H	17	0.05
(1,445)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:113:ARG:H	17	0.05
(1,443)	1:A:90:VAL:HG21	1:A:101:HIS:H	1	0.05
(1,443)	1:A:90:VAL:HG22	1:A:101:HIS:H	1	0.05
(1,443)	1:A:90:VAL:HG23	1:A:101:HIS:H	1	0.05
(1,443)	1:A:90:VAL:HG21	1:A:101:HIS:H	8	0.05
(1,443)	1:A:90:VAL:HG22	1:A:101:HIS:H	8	0.05
(1,443)	1:A:90:VAL:HG23	1:A:101:HIS:H	8	0.05
(1,443)	1:A:90:VAL:HG21	1:A:101:HIS:H	9	0.05
(1,443)	1:A:90:VAL:HG22	1:A:101:HIS:H	9	0.05
(1,443)	1:A:90:VAL:HG23	1:A:101:HIS:H	9	0.05
(1,440)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:100:GLY:H	7	0.05
(1,440)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:100:GLY:H	7	0.05
(1,440)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:100:GLY:H	7	0.05
(1,44)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:48:GLY:H	6	0.05
(1,44)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:48:GLY:H	6	0.05
(1,44)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:48:GLY:H	6	0.05
(1,44)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:48:GLY:H	9	0.05
(1,44)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:48:GLY:H	9	0.05
(1,44)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:48:GLY:H	9	0.05
(1,44)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:48:GLY:H	20	0.05
(1,44)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:48:GLY:H	20	0.05
(1,44)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:48:GLY:H	20	0.05
(1,438)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:120:ALA:H	3	0.05
(1,438)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:120:ALA:H	3	0.05
(1,438)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:120:ALA:H	3	0.05
(1,436)	1:A:13:ASN:HD22	1:A:46:VAL:HG11	12	0.05
(1,436)	1:A:13:ASN:HD22	1:A:46:VAL:HG12	12	0.05
(1,436)	1:A:13:ASN:HD22	1:A:46:VAL:HG13	12	0.05
(1,435)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:26:GLU:H	15	0.05
(1,435)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:26:GLU:H	15	0.05
(1,435)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:26:GLU:H	15	0.05
(1,424)	1:A:90:VAL:HG21	1:A:115:CYS:H	7	0.05
(1,424)	1:A:90:VAL:HG22	1:A:115:CYS:H	7	0.05
(1,424)	1:A:90:VAL:HG23	1:A:115:CYS:H	7	0.05
(1,421)	1:A:43:VAL:H	1:A:43:VAL:HG11	19	0.05
(1,421)	1:A:43:VAL:H	1:A:43:VAL:HG12	19	0.05
(1,421)	1:A:43:VAL:H	1:A:43:VAL:HG13	19	0.05



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD21	2	0.05
(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD22	2	0.05
(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD23	2	0.05
(1,416)	1:A:86:ILE:H	1:A:86:ILE:HD11	17	0.05
(1,416)	1:A:86:ILE:H	1:A:86:ILE:HD12	17	0.05
(1,416)	1:A:86:ILE:H	1:A:86:ILE:HD13	17	0.05
(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD21	1	0.05
(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD22	1	0.05
(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD23	1	0.05
(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD21	4	0.05
(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD22	4	0.05
(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD23	4	0.05
(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD21	5	0.05
(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD22	5	0.05
(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD23	5	0.05
(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD21	14	0.05
(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD22	14	0.05
(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD23	14	0.05
(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD21	20	0.05
(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD22	20	0.05
(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD23	20	0.05
(1,41)	1:A:45:ILE:H	1:A:46:VAL:HG21	5	0.05
(1,41)	1:A:45:ILE:H	1:A:46:VAL:HG22	5	0.05
(1,41)	1:A:45:ILE:H	1:A:46:VAL:HG23	5	0.05
(1,40)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:97:SER:H	14	0.05
(1,40)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:97:SER:H	14	0.05
(1,40)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:97:SER:H	14	0.05
(1,387)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:90:VAL:HG21	5	0.05
(1,387)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:90:VAL:HG22	5	0.05
(1,387)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:90:VAL:HG23	5	0.05
(1,387)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:90:VAL:HG21	5	0.05
(1,387)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:90:VAL:HG22	5	0.05
(1,387)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:90:VAL:HG23	5	0.05
(1,387)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG21	5	0.05
(1,387)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG22	5	0.05
(1,387)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG23	5	0.05
(1,387)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:90:VAL:HG21	13	0.05
(1,387)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:90:VAL:HG22	13	0.05
(1,387)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:90:VAL:HG23	13	0.05
(1,387)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:90:VAL:HG21	13	0.05
(1,387)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:90:VAL:HG22	13	0.05
(1,387)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:90:VAL:HG23	13	0.05



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,387)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG21	13	0.05
(1,387)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG22	13	0.05
(1,387)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG23	13	0.05
(1,377)	1:A:134:TYR:H	1:A:135:GLU:H	6	0.05
(1,370)	1:A:129:LEU:H	1:A:130:LYS:H	17	0.05
(1,361)	1:A:45:ILE:H	1:A:122:ARG:H	11	0.05
(1,355)	1:A:67:PHE:H	1:A:114:TYR:H	15	0.05
(1,355)	1:A:67:PHE:H	1:A:114:TYR:H	20	0.05
(1,337)	1:A:76:GLU:H	1:A:91:ARG:H	12	0.05
(1,337)	1:A:76:GLU:H	1:A:91:ARG:H	13	0.05
(1,337)	1:A:76:GLU:H	1:A:91:ARG:H	18	0.05
(1,332)	1:A:85:MET:H	1:A:86:ILE:H	19	0.05
(1,331)	1:A:80:ASP:H	1:A:88:THR:H	14	0.05
(1,329)	1:A:79:LEU:H	1:A:89:GLU:H	12	0.05
(1,327)	1:A:78:LYS:H	1:A:89:GLU:H	2	0.05
(1,32)	1:A:103:PHE:H	1:A:112:LEU:HD21	10	0.05
(1,32)	1:A:103:PHE:H	1:A:112:LEU:HD22	10	0.05
(1,32)	1:A:103:PHE:H	1:A:112:LEU:HD23	10	0.05
(1,312)	1:A:41:LEU:H	1:A:124:VAL:H	4	0.05
(1,31)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:49:LYS:H	19	0.05
(1,31)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:49:LYS:H	19	0.05
(1,31)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:49:LYS:H	19	0.05
(1,309)	1:A:33:TYR:H	1:A:36:HIS:H	12	0.05
(1,307)	1:A:32:GLU:H	1:A:34:TRP:H	8	0.05
(1,307)	1:A:32:GLU:H	1:A:34:TRP:H	11	0.05
(1,306)	1:A:31:ASN:H	1:A:32:GLU:H	20	0.05
(1,30)	1:A:106:GLY:H	1:A:112:LEU:HD21	11	0.05
(1,30)	1:A:106:GLY:H	1:A:112:LEU:HD22	11	0.05
(1,30)	1:A:106:GLY:H	1:A:112:LEU:HD23	11	0.05
(1,299)	1:A:15:MET:H	1:A:18:GLU:H	20	0.05
(1,285)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:H	6	0.05
(1,279)	1:A:26:GLU:H	1:A:64:TRP:HE1	5	0.05
(1,267)	1:A:21:GLN:H	1:A:24:GLY:H	12	0.05
(1,267)	1:A:21:GLN:H	1:A:24:GLY:H	15	0.05
(1,266)	1:A:19:VAL:H	1:A:21:GLN:H	8	0.05
(1,266)	1:A:19:VAL:H	1:A:21:GLN:H	11	0.05
(1,266)	1:A:19:VAL:H	1:A:21:GLN:H	15	0.05
(1,266)	1:A:19:VAL:H	1:A:21:GLN:H	18	0.05
(1,261)	1:A:99:LEU:HD21	1:A:116:ILE:HD11	18	0.05
(1,261)	1:A:99:LEU:HD21	1:A:116:ILE:HD12	18	0.05
(1,261)	1:A:99:LEU:HD21	1:A:116:ILE:HD13	18	0.05
(1,261)	1:A:99:LEU:HD22	1:A:116:ILE:HD11	18	0.05



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,261)	1:A:99:LEU:HD22	1:A:116:ILE:HD12	18	0.05
(1,261)	1:A:99:LEU:HD22	1:A:116:ILE:HD13	18	0.05
(1,261)	1:A:99:LEU:HD23	1:A:116:ILE:HD11	18	0.05
(1,261)	1:A:99:LEU:HD23	1:A:116:ILE:HD12	18	0.05
(1,261)	1:A:99:LEU:HD23	1:A:116:ILE:HD13	18	0.05
(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD11	12	0.05
(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD12	12	0.05
(1,26)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD13	12	0.05
(1,259)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD11	4	0.05
(1,259)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD12	4	0.05
(1,259)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD13	4	0.05
(1,259)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD11	4	0.05
(1,259)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD12	4	0.05
(1,259)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD13	4	0.05
(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD11	4	0.05
(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD12	4	0.05
(1,259)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD13	4	0.05
(1,25)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:123:PHE:H	17	0.05
(1,25)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:123:PHE:H	17	0.05
(1,25)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:123:PHE:H	17	0.05
(1,244)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:130:LYS:H	19	0.05
(1,244)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:130:LYS:H	19	0.05
(1,244)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:130:LYS:H	19	0.05
(1,244)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:130:LYS:H	20	0.05
(1,244)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:130:LYS:H	20	0.05
(1,244)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:130:LYS:H	20	0.05
(1,24)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:134:TYR:H	2	0.05
(1,24)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:134:TYR:H	2	0.05
(1,24)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:134:TYR:H	2	0.05
(1,24)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:134:TYR:H	13	0.05
(1,24)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:134:TYR:H	13	0.05
(1,24)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:134:TYR:H	13	0.05
(1,211)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:138:LEU:HD11	9	0.05
(1,211)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:138:LEU:HD12	9	0.05
(1,211)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:138:LEU:HD13	9	0.05
(1,211)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:138:LEU:HD11	9	0.05
(1,211)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:138:LEU:HD12	9	0.05
(1,211)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:138:LEU:HD13	9	0.05
(1,211)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:138:LEU:HD11	9	0.05
(1,211)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:138:LEU:HD12	9	0.05
(1,211)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:138:LEU:HD13	9	0.05
(1,2)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:114:TYR:H	13	0.05



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,2)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:114:TYR:H	13	0.05
(1,2)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:114:TYR:H	13	0.05
(1,193)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:HD22	13	0.05
(1,193)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:HD22	13	0.05
(1,193)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:HD22	13	0.05
(1,19)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:127:HIS:H	6	0.05
(1,19)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:127:HIS:H	6	0.05
(1,19)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:127:HIS:H	6	0.05
(1,184)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:112:LEU:HD11	2	0.05
(1,184)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:112:LEU:HD12	2	0.05
(1,184)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:112:LEU:HD13	2	0.05
(1,184)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:112:LEU:HD11	2	0.05
(1,184)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:112:LEU:HD12	2	0.05
(1,184)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:112:LEU:HD13	2	0.05
(1,184)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:112:LEU:HD11	2	0.05
(1,184)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:112:LEU:HD12	2	0.05
(1,184)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:112:LEU:HD13	2	0.05
(1,180)	1:A:90:VAL:HG21	1:A:91:ARG:H	14	0.05
(1,180)	1:A:90:VAL:HG22	1:A:91:ARG:H	14	0.05
(1,180)	1:A:90:VAL:HG23	1:A:91:ARG:H	14	0.05
(1,171)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG11	2	0.05
(1,171)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG12	2	0.05
(1,171)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG13	2	0.05
(1,171)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG11	6	0.05
(1,171)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG12	6	0.05
(1,171)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG13	6	0.05
(1,171)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG11	7	0.05
(1,171)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG12	7	0.05
(1,171)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG13	7	0.05
(1,166)	1:A:40:GLY:H	1:A:54:SER:H	15	0.05
(1,164)	1:A:76:GLU:H	1:A:77:GLU:H	4	0.05
(1,163)	1:A:15:MET:H	1:A:17:TYR:H	6	0.05
(1,163)	1:A:15:MET:H	1:A:17:TYR:H	16	0.05
(1,161)	1:A:133:GLY:H	1:A:135:GLU:H	2	0.05
(1,161)	1:A:133:GLY:H	1:A:135:GLU:H	3	0.05
(1,16)	1:A:102:VAL:H	1:A:102:VAL:HG11	2	0.05
(1,16)	1:A:102:VAL:H	1:A:102:VAL:HG12	2	0.05
(1,16)	1:A:102:VAL:H	1:A:102:VAL:HG13	2	0.05
(1,16)	1:A:102:VAL:H	1:A:102:VAL:HG11	4	0.05
(1,16)	1:A:102:VAL:H	1:A:102:VAL:HG12	4	0.05
(1,16)	1:A:102:VAL:H	1:A:102:VAL:HG13	4	0.05
(1,16)	1:A:102:VAL:H	1:A:102:VAL:HG11	7	0.05



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

(1,16) 1:A:102:VAL:H 1:A:102:VAL:HG13 7 0.05 (1,16) 1:A:102:VAL:H 1:A:102:VAL:HG13 7 0.05 (1,16) 1:A:102:VAL:H 1:A:102:VAL:HG11 13 0.05 (1,16) 1:A:102:VAL:H 1:A:102:VAL:HG12 13 0.05 (1,16) 1:A:102:VAL:H 1:A:102:VAL:HG12 13 0.05 (1,16) 1:A:102:VAL:H 1:A:102:VAL:HG13 13 0.05 (1,16) 1:A:102:VAL:H 1:A:102:VAL:HG13 13 0.05 (1,150) 1:A:81:THR:H 1:A:12:VAL:HG13 13 0.05 (1,148) 1:A:44:ASP:H 1:A:122:ARG:H 10 0.05 (1,148) 1:A:44:ASP:H 1:A:122:ARG:H 10 0.05 (1,148) 1:A:44:ASP:H 1:A:122:ARG:H 19 0.05 (1,147) 1:A:130:LYS:H 1:A:132:CHU:H 5 0.05 (1,146) 1:A:130:LYS:H 1:A:132:CHU:H 5 0.05 (1,146) 1:A:130:LYS:H 1:A:132:CHU:H 5 0.05 (1,146) 1:A:130:LYS:H 1:A:130:LYS:H 8 0.05 (1,147) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD21 2 0.05 (1,148) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD22 2 0.05 (1,140) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD22 2 0.05 (1,141) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD23 2 0.05 (1,142) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD23 2 0.05 (1,144) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD23 4 0.05 (1,145) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:131:GLU:H 3 0.05 (1,130) 1:A:46:VAL:H 1:A:129:LEU:HD23 4 0.05 (1,131) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:131:GLU:H 3 0.05 (1,131) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:131:GLU:H 3 0.05 (1,1329) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 2 0.05 (1,1289) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 2 0.05 (1,1289) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 2 0.05 (1,1289) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 1 5 0.05 (1,1289) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 3 0.05 (1,1271) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:140:LEU:HD13 3 0.05 (1,1271) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:140:LEU:HD13 3 0.05 (1,1271) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:140:LEU:HD13 3 0.05 (1,1271) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:140:LEU:HD11 3 0.05 (1,1271) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:140:LEU:HD11 3 0.05 (1,1271) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:140:LEU:HD11 3 0.05 (1,1271) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:140:LEU:HD13 3 0.05 (1,1271) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:140:LEU:HD13 3 0.05 (1,1271) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:140:LEU:HD13 3 0.05 (1,1271) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:140:LEU:HD11 3 0.05 (1,1268) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:140:LEU:HD13 3 0.05 (1,1268) 1:A:41:L	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,16) 1:A:102:VAL:H 1:A:102:VAL:HG11 13 0.05 (1,16) 1:A:102:VAL:H 1:A:102:VAL:HG12 13 0.05 (1,16) 1:A:102:VAL:H 1:A:102:VAL:HG13 13 0.05 (1,150) 1:A:81:THR:H 1:A:102:VAL:HG13 13 0.05 (1,150) 1:A:81:THR:H 1:A:122:ARG:H 10 0.05 (1,148) 1:A:44:ASP:H 1:A:122:ARG:H 10 0.05 (1,148) 1:A:44:ASP:H 1:A:122:ARG:H 19 0.05 (1,147) 1:A:130:LYS:H 1:A:134:TYR:H 5 0.05 (1,147) 1:A:130:LYS:H 1:A:134:TYR:H 5 0.05 (1,146) 1:A:130:LYS:H 1:A:132:GLU:H 5 0.05 (1,146) 1:A:130:LYS:H 1:A:132:GLU:H 5 0.05 (1,146) 1:A:128:LYS:H 1:A:132:GLU:H 9 0.05 (1,144) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD21 2 0.05 (1,144) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD21 2 0.05 (1,144) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD22 2 0.05 (1,144) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD23 2 0.05 (1,144) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD23 2 0.05 (1,144) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD23 4 0.05 (1,143) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:131:GLU:H 3 0.05 (1,133) 1:A:46:VAL:H 1:A:131:GLU:H 3 0.05 (1,133) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:131:GLU:H 3 0.05 (1,133) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:131:GLU:H 3 0.05 (1,133) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:131:GLU:H 3 0.05 (1,1289) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 2 0.05 (1,1289) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 2 0.05 (1,1289) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 2 0.05 (1,1289) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 3 0.05 (1,1289) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 3 0.05 (1,1271) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:140:LEU:HD11 3 0.05 (1,1271) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:140:LEU:HD11 3 0.05 (1,1271) 1:A:41:LEU:HD	(1,16)	1:A:102:VAL:H	1:A:102:VAL:HG12	7	0.05
(1,16)	(1,16)	1:A:102:VAL:H	1:A:102:VAL:HG13	7	0.05
(1,16)	(1,16)	1:A:102:VAL:H	1:A:102:VAL:HG11	13	0.05
(1,150) 1:A:81:THR:H 1:A:82:SER:H 2 0.05 (1,148) 1:A:44:ASP:H 1:A:122:ARG:H 10 0.05 (1,147) 1:A:130:LYS:H 1:A:132:ARG:H 19 0.05 (1,146) 1:A:130:LYS:H 1:A:132:GLU:H 5 0.05 (1,146) 1:A:130:LYS:H 1:A:132:GLU:H 5 0.05 (1,146) 1:A:130:LYS:H 1:A:132:GLU:H 9 0.05 (1,145) 1:A:128:LYS:H 1:A:130:LYS:H 8 0.05 (1,144) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD21 2 0.05 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD22 2 0.05 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD22 2 0.05 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD23 2 0.05 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD23 4 0.05 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD23 4 0.05 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD23 4 0.05 (1,14) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:131:GLU:H 3 0.05 (1,130) 1:A:46:VAL:H 1:A:131:GLU:H 3 0.05 (1,131) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:131:GLU:H 3 0.05 (1,132) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:131:GLU:H 3 0.05 (1,1289) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 2 0.05 (1,1289) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 2 0.05 (1,1289) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 2 0.05 (1,1289) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 2 0.05 (1,1289) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 15 0.05 (1,1289) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 15 0.05 (1,1271) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:140:LEU:HD11 3 0.05 (1,1271) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:140:LEU:HD11 3 0.05 (1,1271) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:140:LEU:HD11 3 0.05 (1,1271) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:140:LEU:HD11 3 0.05 (1,1268) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:140:LEU:HD11 3 0.05 (1,1268) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:140:LEU:HD11 19 0.05	(1,16)	1:A:102:VAL:H	1:A:102:VAL:HG12	13	0.05
(1,148)         1:A:44:ASP:H         1:A:122:ARG:H         10         0.05           (1,148)         1:A:44:ASP:H         1:A:122:ARG:H         19         0.05           (1,147)         1:A:130:LYS:H         1:A:132:TYR:H         5         0.05           (1,146)         1:A:130:LYS:H         1:A:132:GLU:H         5         0.05           (1,146)         1:A:130:LYS:H         1:A:130:LYS:H         9         0.05           (1,146)         1:A:128:LYS:H         1:A:130:LYS:H         8         0.05           (1,145)         1:A:128:LYS:H         1:A:130:LYS:H         8         0.05           (1,144)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD21         2         0.05           (1,144)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD23         2         0.05           (1,144)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD21         4         0.05           (1,144)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD23         4         0.05           (1,144)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD23         4         0.05           (1,139)         1:A:46:VAL:H         1:A:129:LEU:HD23         4         0.05           (1,133)         1:A:129:LEU:HD21         1:A:131:GLU:H         3 <td>(1,16)</td> <td>1:A:102:VAL:H</td> <td>1:A:102:VAL:HG13</td> <td>13</td> <td>0.05</td>	(1,16)	1:A:102:VAL:H	1:A:102:VAL:HG13	13	0.05
(1,148) 1:A:44:ASP:H 1:A:122:ARG:H 19 0.05 (1,147) 1:A:130:LYS:H 1:A:134:TYR:H 5 0.05 (1,146) 1:A:130:LYS:H 1:A:132:GLU:H 5 0.05 (1,145) 1:A:128:LYS:H 1:A:132:GLU:H 9 0.05 (1,145) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD21 2 0.05 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD22 2 0.05 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD22 2 0.05 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD23 2 0.05 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD23 2 0.05 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD23 2 0.05 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD21 4 0.05 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD22 4 0.05 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD23 4 0.05 (1,13) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:131:GLU:H 3 0.05 (1,13) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:131:GLU:H 3 0.05 (1,13) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:131:GLU:H 3 0.05 (1,13) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:131:GLU:H 3 0.05 (1,1289) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 2 0.05 (1,1289) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD12 2 0.05 (1,1289) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 2 0.05 (1,1289) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 2 0.05 (1,1289) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 2 0.05 (1,1289) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 3 0.05 (1,1289) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 3 0.05 (1,1289) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 3 0.05 (1,1271) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:140:LEU:HD11 3 0.05 (1,1271) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:140:LEU:HD11 3 0.05 (1,1271) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:140:LEU:HD11 3 0.05 (1,1271) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:140:LEU:HD11 3 0.05 (1,1268) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:140:LEU:HD11 3 0.05 (1,1268) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:171:ILE:HD11 19 0.05 (1,1268) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:71:ILE:HD11 19 0.05	(1,150)	1:A:81:THR:H	1:A:82:SER:H	2	0.05
(1,147)         1:A:130:LYS:H         1:A:132:TYR:H         5         0.05           (1,146)         1:A:130:LYS:H         1:A:132:GLU:H         5         0.05           (1,146)         1:A:130:LYS:H         1:A:132:GLU:H         9         0.05           (1,146)         1:A:129:LS:HS:H         1:A:130:LYS:H         8         0.05           (1,145)         1:A:129:LS:HS:H         1:A:129:LEU:HD21         2         0.05           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD22         2         0.05           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD23         2         0.05           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD22         4         0.05           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD23         4         0.05           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD23         4         0.05           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD23         4         0.05           (1,13)         1:A:129:LEU:HD21         1:A:131:GLU:H         3         0.05           (1,139)         1:A:14:129:LEU:HD21         1:A:131:GLU:H         3         0.05           (1,131)         1:A:129:LEU:HD22         1:A:131:GLU:H	(1,148)	1:A:44:ASP:H	1:A:122:ARG:H	10	0.05
(1,146) 1:A:130:LYS:H 1:A:132:GLU:H 5 0.05 (1,146) 1:A:130:LYS:H 1:A:132:GLU:H 9 0.05 (1,145) 1:A:128:LYS:H 1:A:130:LYS:H 8 0.05 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD21 2 0.05 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD22 2 0.05 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD22 2 0.05 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD23 2 0.05 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD23 4 0.05 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD22 4 0.05 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD22 4 0.05 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD23 4 0.05 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD23 4 0.05 (1,139) 1:A:46:VAL:H 1:A:48:GLY:H 2 0.05 (1,13) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:131:GLU:H 3 0.05 (1,13) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:131:GLU:H 3 0.05 (1,13) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:131:GLU:H 3 0.05 (1,1289) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 2 0.05 (1,1289) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD12 2 0.05 (1,1289) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD12 2 0.05 (1,1289) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 2 0.05 (1,1289) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 15 0.05 (1,1289) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 15 0.05 (1,1271) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:140:LEU:HD11 3 0.05 (1,1271) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:140:LEU:HD11 3 0.05 (1,1271) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:140:LEU:HD11 3 0.05 (1,1271) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:140:LEU:HD11 3 0.05 (1,1271) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:140:LEU:HD11 3 0.05 (1,1268) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:71:ILE:HD11 19 0.05 (1,1268) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:71:ILE:HD11 19 0.05	(1,148)	1:A:44:ASP:H	1:A:122:ARG:H	19	0.05
(1,146) 1:A:130:LYS:H 1:A:132:GLU:H 9 0.05 (1,145) 1:A:128:LYS:H 1:A:130:LYS:H 8 0.05 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD21 2 0.05 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD22 2 0.05 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD23 2 0.05 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD21 4 0.05 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD22 4 0.05 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD22 4 0.05 (1,14) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD23 4 0.05 (1,13) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:131:GLU:H 2 0.05 (1,13) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:131:GLU:H 3 0.05 (1,13) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:131:GLU:H 3 0.05 (1,13) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:131:GLU:H 3 0.05 (1,13) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:131:GLU:H 3 0.05 (1,1289) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 2 0.05 (1,1289) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD12 2 0.05 (1,1289) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD12 2 0.05 (1,1289) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 2 0.05 (1,1289) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD13 15 0.05 (1,1289) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 15 0.05 (1,1289) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 15 0.05 (1,1289) 1:A:17:TYR:H 1:A:12:LEU:HD11 15 0.05 (1,1271) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:140:LEU:HD11 3 0.05 (1,1271) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:140:LEU:HD11 3 0.05 (1,1271) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:140:LEU:HD11 3 0.05 (1,1271) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:140:LEU:HD11 3 0.05 (1,1271) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:140:LEU:HD11 3 0.05 (1,1271) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:140:LEU:HD11 3 0.05 (1,1271) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:140:LEU:HD11 3 0.05 (1,1268) 1:A:41:LEU:HD23 1:A:140:LEU:HD11 3 0.05 (1,1268) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:71:ILE:HD11 19 0.05	(1,147)	1:A:130:LYS:H	1:A:134:TYR:H	5	0.05
(1,145)         1:A:128:LYS:H         1:A:130:LYS:H         8         0.05           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD21         2         0.05           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD22         2         0.05           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD23         2         0.05           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD21         4         0.05           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD22         4         0.05           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD22         4         0.05           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD23         4         0.05           (1,139)         1:A:46:VAL:H         1:A:129:LEU:HD23         4         0.05           (1,139)         1:A:129:LEU:HD21         1:A:131:GLU:H         3         0.05           (1,13)         1:A:129:LEU:HD22         1:A:131:GLU:H         3         0.05           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD11         2         0.05           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD13         2         0.05           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD11 <t< td=""><td>(1,146)</td><td>1:A:130:LYS:H</td><td>1:A:132:GLU:H</td><td>5</td><td>0.05</td></t<>	(1,146)	1:A:130:LYS:H	1:A:132:GLU:H	5	0.05
(1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD21         2         0.05           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD22         2         0.05           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD23         2         0.05           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD21         4         0.05           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD22         4         0.05           (1,14)         1:A:129:HIS:H         1:A:129:LEU:HD23         4         0.05           (1,13)         1:A:46:VAL:H         1:A:48:GLY:H         2         0.05           (1,13)         1:A:129:LEU:HD21         1:A:131:GLU:H         3         0.05           (1,13)         1:A:129:LEU:HD22         1:A:131:GLU:H         3         0.05           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:13:I:GLU:H         3         0.05           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD11         2         0.05           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD12         2         0.05           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:140:LEU:HD12         15         0.05           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD13         <	(1,146)	1:A:130:LYS:H	1:A:132:GLU:H	9	0.05
(1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD22         2         0.05           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD23         2         0.05           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD21         4         0.05           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD22         4         0.05           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD23         4         0.05           (1,139)         1:A:46:VAL:H         1:A:48:GLY:H         2         0.05           (1,139)         1:A:46:VAL:H         1:A:48:GLY:H         2         0.05           (1,13)         1:A:129:LEU:HD21         1:A:131:GLU:H         3         0.05           (1,13)         1:A:129:LEU:HD22         1:A:131:GLU:H         3         0.05           (1,130)         1:A:17:TYR:H         1:A:131:GLU:H         3         0.05           (1,131)         1:A:17:TYR:H         1:A:131:GLU:H         3         0.05           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD11         2         0.05           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD11         15         0.05           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD11         15	(1,145)	1:A:128:LYS:H	1:A:130:LYS:H	8	0.05
(1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD23         2         0.05           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD21         4         0.05           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD22         4         0.05           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD23         4         0.05           (1,13)         1:A:46:VAL:H         1:A:48:GLY:H         2         0.05           (1,13)         1:A:129:LEU:HD21         1:A:131:GLU:H         3         0.05           (1,13)         1:A:129:LEU:HD22         1:A:131:GLU:H         3         0.05           (1,13)         1:A:17:TYR:H         1:A:131:GLU:H         3         0.05           (1,13)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD11         2         0.05           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD12         2         0.05           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD13         2         0.05           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD12         15         0.05           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD13         15         0.05           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD13 <t< td=""><td>(1,14)</td><td>1:A:127:HIS:H</td><td>1:A:129:LEU:HD21</td><td>2</td><td>0.05</td></t<>	(1,14)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD21	2	0.05
(1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD23         2         0.05           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD21         4         0.05           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD22         4         0.05           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD23         4         0.05           (1,13)         1:A:46:VAL:H         1:A:48:GLY:H         2         0.05           (1,13)         1:A:129:LEU:HD21         1:A:131:GLU:H         3         0.05           (1,13)         1:A:129:LEU:HD22         1:A:131:GLU:H         3         0.05           (1,13)         1:A:179:LEU:HD23         1:A:131:GLU:H         3         0.05           (1,13)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD11         2         0.05           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD12         2         0.05           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD13         2         0.05           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD13         15         0.05           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD13         15         0.05           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD13	(1,14)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD22	2	0.05
(1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD22         4         0.05           (1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD23         4         0.05           (1,139)         1:A:46:VAL:H         1:A:48:GLY:H         2         0.05           (1,13)         1:A:129:LEU:HD21         1:A:131:GLU:H         3         0.05           (1,13)         1:A:129:LEU:HD22         1:A:131:GLU:H         3         0.05           (1,13)         1:A:17:TYR:H         1:A:131:GLU:H         3         0.05           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD11         2         0.05           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD12         2         0.05           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD13         2         0.05           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD12         15         0.05           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD13         15         0.05           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:140:LEU:HD13         15         0.05           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD13         3         0.05           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD13	(1,14)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD23	2	0.05
(1,14)         1:A:127:HIS:H         1:A:129:LEU:HD23         4         0.05           (1,139)         1:A:46:VAL:H         1:A:48:GLY:H         2         0.05           (1,13)         1:A:129:LEU:HD21         1:A:131:GLU:H         3         0.05           (1,13)         1:A:129:LEU:HD22         1:A:131:GLU:H         3         0.05           (1,13)         1:A:17:TYR:H         1:A:131:GLU:H         3         0.05           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD11         2         0.05           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD12         2         0.05           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD13         2         0.05           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD12         15         0.05           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD12         15         0.05           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:140:LEU:HD13         15         0.05           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD11         3         0.05           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD13         3         0.05           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:HD13	(1,14)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD21	4	0.05
(1,139)         1:A:46:VAL:H         1:A:48:GLY:H         2         0.05           (1,13)         1:A:129:LEU:HD21         1:A:131:GLU:H         3         0.05           (1,13)         1:A:129:LEU:HD22         1:A:131:GLU:H         3         0.05           (1,13)         1:A:129:LEU:HD23         1:A:131:GLU:H         3         0.05           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD11         2         0.05           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD12         2         0.05           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD13         2         0.05           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD11         15         0.05           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD12         15         0.05           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD12         15         0.05           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD13         15         0.05           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD13         3         0.05           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:HD13         3         0.05           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD13 <td>(1,14)</td> <td>1:A:127:HIS:H</td> <td>1:A:129:LEU:HD22</td> <td>4</td> <td>0.05</td>	(1,14)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD22	4	0.05
(1,13)         1:A:129:LEU:HD21         1:A:131:GLU:H         3         0.05           (1,13)         1:A:129:LEU:HD22         1:A:131:GLU:H         3         0.05           (1,13)         1:A:129:LEU:HD23         1:A:131:GLU:H         3         0.05           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD11         2         0.05           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD12         2         0.05           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD13         2         0.05           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD12         15         0.05           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD12         15         0.05           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD13         15         0.05           (1,1289)         1:A:14:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD13         3         0.05           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD12         3         0.05           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:HD13         3         0.05           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:HD13         3         0.05           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:	_ ` '	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD23	4	0.05
(1,13)         1:A:129:LEU:HD22         1:A:131:GLU:H         3         0.05           (1,13)         1:A:129:LEU:HD23         1:A:131:GLU:H         3         0.05           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD11         2         0.05           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD12         2         0.05           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD13         2         0.05           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD11         15         0.05           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD12         15         0.05           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD13         15         0.05           (1,1289)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD11         3         0.05           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD12         3         0.05           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:HD11         3         0.05           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:HD13         3         0.05           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD11         3         0.05           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:	(1,139)	1:A:46:VAL:H	1:A:48:GLY:H	2	0.05
(1,13)         1:A:129:LEU:HD23         1:A:131:GLU:H         3         0.05           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD11         2         0.05           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD12         2         0.05           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD13         2         0.05           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD11         15         0.05           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD12         15         0.05           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:140:LEU:HD13         15         0.05           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:140:LEU:HD11         3         0.05           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD12         3         0.05           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD13         3         0.05           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:HD11         3         0.05           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD13         3         0.05           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD11         3         0.05           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD23         1:	(1,13)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:131:GLU:H	3	0.05
(1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD11         2         0.05           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD12         2         0.05           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD13         2         0.05           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD11         15         0.05           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD12         15         0.05           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD13         15         0.05           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD11         3         0.05           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD13         3         0.05           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:HD11         3         0.05           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:HD12         3         0.05           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD13         3         0.05           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD11         3         0.05           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD13         3         0.05           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD23	(1,13)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:131:GLU:H	3	0.05
(1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD12         2         0.05           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD13         2         0.05           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD11         15         0.05           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD12         15         0.05           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD13         15         0.05           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD11         3         0.05           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD13         3         0.05           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:HD13         3         0.05           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:HD12         3         0.05           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:HD13         3         0.05           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD11         3         0.05           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD12         3         0.05           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD12         3         0.05           (1,1268)         1:A:41:LEU:HD11	(1,13)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:131:GLU:H	3	0.05
(1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD13         2         0.05           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD11         15         0.05           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD12         15         0.05           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD13         15         0.05           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD11         3         0.05           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD13         3         0.05           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:HD11         3         0.05           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:HD12         3         0.05           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:HD13         3         0.05           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD11         3         0.05           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD12         3         0.05           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD13         3         0.05           (1,1268)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:71:ILE:HD13         9         0.05           (1,1268)         1:A:41:LEU:HD11	(1,1289)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD11	2	0.05
(1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD11         15         0.05           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD12         15         0.05           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD13         15         0.05           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD11         3         0.05           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD12         3         0.05           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:HD13         3         0.05           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:HD12         3         0.05           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:HD13         3         0.05           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD11         3         0.05           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD12         3         0.05           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD13         3         0.05           (1,1268)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:71:ILE:HD11         19         0.05           (1,1268)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:71:ILE:HD13         19         0.05           (1,1268)         1:A:41:LEU:HD12 </td <td>(1,1289)</td> <td>1:A:17:TYR:H</td> <td>1:A:12:LEU:HD12</td> <td>2</td> <td>0.05</td>	(1,1289)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD12	2	0.05
(1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD12         15         0.05           (1,1289)         1:A:17:TYR:H         1:A:12:LEU:HD13         15         0.05           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD11         3         0.05           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD12         3         0.05           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:140:LEU:HD13         3         0.05           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:HD12         3         0.05           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD22         1:A:140:LEU:HD13         3         0.05           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD11         3         0.05           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD12         3         0.05           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD12         3         0.05           (1,1271)         1:A:41:LEU:HD23         1:A:140:LEU:HD13         3         0.05           (1,1268)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:71:ILE:HD11         19         0.05           (1,1268)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:71:ILE:HD13         19         0.05           (1,1268)         1:A:41:LEU:HD1	(1,1289)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD13	2	0.05
(1,1289)       1:A:17:TYR:H       1:A:12:LEU:HD13       15       0.05         (1,1271)       1:A:41:LEU:HD21       1:A:140:LEU:HD11       3       0.05         (1,1271)       1:A:41:LEU:HD21       1:A:140:LEU:HD12       3       0.05         (1,1271)       1:A:41:LEU:HD21       1:A:140:LEU:HD13       3       0.05         (1,1271)       1:A:41:LEU:HD22       1:A:140:LEU:HD11       3       0.05         (1,1271)       1:A:41:LEU:HD22       1:A:140:LEU:HD13       3       0.05         (1,1271)       1:A:41:LEU:HD23       1:A:140:LEU:HD11       3       0.05         (1,1271)       1:A:41:LEU:HD23       1:A:140:LEU:HD12       3       0.05         (1,1271)       1:A:41:LEU:HD23       1:A:140:LEU:HD12       3       0.05         (1,1271)       1:A:41:LEU:HD23       1:A:140:LEU:HD13       3       0.05         (1,1268)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:71:ILE:HD11       19       0.05         (1,1268)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:71:ILE:HD13       19       0.05         (1,1268)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:71:ILE:HD13       19       0.05         (1,1268)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:71:ILE:HD11       19       0.05	(1,1289)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD11	15	0.05
(1,1271)       1:A:41:LEU:HD21       1:A:140:LEU:HD11       3       0.05         (1,1271)       1:A:41:LEU:HD21       1:A:140:LEU:HD12       3       0.05         (1,1271)       1:A:41:LEU:HD21       1:A:140:LEU:HD13       3       0.05         (1,1271)       1:A:41:LEU:HD22       1:A:140:LEU:HD11       3       0.05         (1,1271)       1:A:41:LEU:HD22       1:A:140:LEU:HD13       3       0.05         (1,1271)       1:A:41:LEU:HD23       1:A:140:LEU:HD11       3       0.05         (1,1271)       1:A:41:LEU:HD23       1:A:140:LEU:HD12       3       0.05         (1,1271)       1:A:41:LEU:HD23       1:A:140:LEU:HD13       3       0.05         (1,1271)       1:A:41:LEU:HD23       1:A:140:LEU:HD13       3       0.05         (1,1268)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:71:ILE:HD11       19       0.05         (1,1268)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:71:ILE:HD13       19       0.05         (1,1268)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:71:ILE:HD11       19       0.05         (1,1268)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:71:ILE:HD11       19       0.05	(1,1289)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD12	15	0.05
(1,1271)       1:A:41:LEU:HD21       1:A:140:LEU:HD12       3       0.05         (1,1271)       1:A:41:LEU:HD21       1:A:140:LEU:HD13       3       0.05         (1,1271)       1:A:41:LEU:HD22       1:A:140:LEU:HD11       3       0.05         (1,1271)       1:A:41:LEU:HD22       1:A:140:LEU:HD12       3       0.05         (1,1271)       1:A:41:LEU:HD23       1:A:140:LEU:HD11       3       0.05         (1,1271)       1:A:41:LEU:HD23       1:A:140:LEU:HD12       3       0.05         (1,1271)       1:A:41:LEU:HD23       1:A:140:LEU:HD13       3       0.05         (1,1271)       1:A:41:LEU:HD23       1:A:140:LEU:HD13       3       0.05         (1,1268)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:71:ILE:HD11       19       0.05         (1,1268)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:71:ILE:HD13       19       0.05         (1,1268)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:71:ILE:HD13       19       0.05         (1,1268)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:71:ILE:HD11       19       0.05	(1,1289)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD13	15	0.05
(1,1271)       1:A:41:LEU:HD21       1:A:140:LEU:HD13       3       0.05         (1,1271)       1:A:41:LEU:HD22       1:A:140:LEU:HD11       3       0.05         (1,1271)       1:A:41:LEU:HD22       1:A:140:LEU:HD12       3       0.05         (1,1271)       1:A:41:LEU:HD22       1:A:140:LEU:HD13       3       0.05         (1,1271)       1:A:41:LEU:HD23       1:A:140:LEU:HD11       3       0.05         (1,1271)       1:A:41:LEU:HD23       1:A:140:LEU:HD12       3       0.05         (1,1271)       1:A:41:LEU:HD23       1:A:140:LEU:HD13       3       0.05         (1,1268)       1:A:41:LEU:HD23       1:A:71:ILE:HD11       19       0.05         (1,1268)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:71:ILE:HD12       19       0.05         (1,1268)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:71:ILE:HD13       19       0.05         (1,1268)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:71:ILE:HD11       19       0.05	(1,1271)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:140:LEU:HD11	3	0.05
(1,1271)       1:A:41:LEU:HD22       1:A:140:LEU:HD11       3       0.05         (1,1271)       1:A:41:LEU:HD22       1:A:140:LEU:HD12       3       0.05         (1,1271)       1:A:41:LEU:HD22       1:A:140:LEU:HD13       3       0.05         (1,1271)       1:A:41:LEU:HD23       1:A:140:LEU:HD11       3       0.05         (1,1271)       1:A:41:LEU:HD23       1:A:140:LEU:HD12       3       0.05         (1,1271)       1:A:41:LEU:HD23       1:A:140:LEU:HD13       3       0.05         (1,1268)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:71:ILE:HD11       19       0.05         (1,1268)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:71:ILE:HD13       19       0.05         (1,1268)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:71:ILE:HD13       19       0.05         (1,1268)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:71:ILE:HD11       19       0.05	(1,1271)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:140:LEU:HD12	3	0.05
(1,1271)       1:A:41:LEU:HD22       1:A:140:LEU:HD12       3       0.05         (1,1271)       1:A:41:LEU:HD22       1:A:140:LEU:HD13       3       0.05         (1,1271)       1:A:41:LEU:HD23       1:A:140:LEU:HD11       3       0.05         (1,1271)       1:A:41:LEU:HD23       1:A:140:LEU:HD12       3       0.05         (1,1271)       1:A:41:LEU:HD23       1:A:140:LEU:HD13       3       0.05         (1,1268)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:71:ILE:HD11       19       0.05         (1,1268)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:71:ILE:HD13       19       0.05         (1,1268)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:71:ILE:HD13       19       0.05         (1,1268)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:71:ILE:HD11       19       0.05	(1,1271)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:140:LEU:HD13	3	0.05
(1,1271)       1:A:41:LEU:HD22       1:A:140:LEU:HD13       3       0.05         (1,1271)       1:A:41:LEU:HD23       1:A:140:LEU:HD11       3       0.05         (1,1271)       1:A:41:LEU:HD23       1:A:140:LEU:HD12       3       0.05         (1,1271)       1:A:41:LEU:HD23       1:A:140:LEU:HD13       3       0.05         (1,1268)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:71:ILE:HD11       19       0.05         (1,1268)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:71:ILE:HD13       19       0.05         (1,1268)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:71:ILE:HD11       19       0.05         (1,1268)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:71:ILE:HD11       19       0.05	(1,1271)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:140:LEU:HD11	3	0.05
(1,1271)       1:A:41:LEU:HD23       1:A:140:LEU:HD11       3       0.05         (1,1271)       1:A:41:LEU:HD23       1:A:140:LEU:HD12       3       0.05         (1,1271)       1:A:41:LEU:HD23       1:A:140:LEU:HD13       3       0.05         (1,1268)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:71:ILE:HD11       19       0.05         (1,1268)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:71:ILE:HD12       19       0.05         (1,1268)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:71:ILE:HD13       19       0.05         (1,1268)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:71:ILE:HD11       19       0.05	(1,1271)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:140:LEU:HD12	3	0.05
(1,1271)       1:A:41:LEU:HD23       1:A:140:LEU:HD11       3       0.05         (1,1271)       1:A:41:LEU:HD23       1:A:140:LEU:HD12       3       0.05         (1,1271)       1:A:41:LEU:HD23       1:A:140:LEU:HD13       3       0.05         (1,1268)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:71:ILE:HD11       19       0.05         (1,1268)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:71:ILE:HD12       19       0.05         (1,1268)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:71:ILE:HD13       19       0.05         (1,1268)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:71:ILE:HD11       19       0.05	· · /	1:A:41:LEU:HD22	1:A:140:LEU:HD13	3	0.05
(1,1271)       1:A:41:LEU:HD23       1:A:140:LEU:HD12       3       0.05         (1,1271)       1:A:41:LEU:HD23       1:A:140:LEU:HD13       3       0.05         (1,1268)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:71:ILE:HD11       19       0.05         (1,1268)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:71:ILE:HD12       19       0.05         (1,1268)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:71:ILE:HD13       19       0.05         (1,1268)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:71:ILE:HD11       19       0.05	· · /	1:A:41:LEU:HD23	1:A:140:LEU:HD11	3	0.05
(1,1271)       1:A:41:LEU:HD23       1:A:140:LEU:HD13       3       0.05         (1,1268)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:71:ILE:HD11       19       0.05         (1,1268)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:71:ILE:HD12       19       0.05         (1,1268)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:71:ILE:HD13       19       0.05         (1,1268)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:71:ILE:HD11       19       0.05	, ,	1:A:41:LEU:HD23	1:A:140:LEU:HD12	3	0.05
(1,1268)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:71:ILE:HD11       19       0.05         (1,1268)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:71:ILE:HD12       19       0.05         (1,1268)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:71:ILE:HD13       19       0.05         (1,1268)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:71:ILE:HD11       19       0.05	· · /	1:A:41:LEU:HD23	1:A:140:LEU:HD13	3	0.05
(1,1268)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:71:ILE:HD12       19       0.05         (1,1268)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:71:ILE:HD13       19       0.05         (1,1268)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:71:ILE:HD11       19       0.05		1:A:41:LEU:HD11	1:A:71:ILE:HD11	19	0.05
(1,1268)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:71:ILE:HD13       19       0.05         (1,1268)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:71:ILE:HD11       19       0.05		1:A:41:LEU:HD11	1:A:71:ILE:HD12	19	0.05
(1,1268) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:71:ILE:HD11 19 0.05	(1,1268)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:71:ILE:HD13	19	0.05
	· · /	1:A:41:LEU:HD12	1:A:71:ILE:HD11	19	0.05
	(1,1268)			19	



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1268)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:71:ILE:HD13	19	0.05
(1,1268)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:71:ILE:HD11	19	0.05
(1,1268)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:71:ILE:HD12	19	0.05
(1,1268)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:71:ILE:HD13	19	0.05
(1,1266)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:51:LEU:H	2	0.05
(1,1266)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:51:LEU:H	2	0.05
(1,1266)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:51:LEU:H	2	0.05
(1,1258)	1:A:115:CYS:H	1:A:101:HIS:H	2	0.05
(1,1258)	1:A:115:CYS:H	1:A:101:HIS:H	19	0.05
(1,1256)	1:A:100:GLY:H	1:A:90:VAL:H	6	0.05
(1,1256)	1:A:100:GLY:H	1:A:90:VAL:H	7	0.05
(1,1245)	1:A:142:ASN:H	1:A:142:ASN:HD21	6	0.05
(1,1244)	1:A:117:ASN:H	1:A:117:ASN:HD21	12	0.05
(1,1226)	1:A:102:VAL:HG11	1:A:113:ARG:H	5	0.05
(1,1226)	1:A:102:VAL:HG12	1:A:113:ARG:H	5	0.05
(1,1226)	1:A:102:VAL:HG13	1:A:113:ARG:H	5	0.05
(1,1220)	1:A:144:LEU:HD21	1:A:145:GLU:H	12	0.05
(1,1220)	1:A:144:LEU:HD22	1:A:145:GLU:H	12	0.05
(1,1220)	1:A:144:LEU:HD23	1:A:145:GLU:H	12	0.05
(1,1217)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:141:PHE:H	18	0.05
(1,1217)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:141:PHE:H	18	0.05
(1,1217)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:141:PHE:H	18	0.05
(1,1216)	1:A:140:LEU:HD11	1:A:141:PHE:H	4	0.05
(1,1216)	1:A:140:LEU:HD12	1:A:141:PHE:H	4	0.05
(1,1216)	1:A:140:LEU:HD13	1:A:141:PHE:H	4	0.05
(1,1216)	1:A:140:LEU:HD11	1:A:141:PHE:H	11	0.05
(1,1216)	1:A:140:LEU:HD12	1:A:141:PHE:H	11	0.05
(1,1216)	1:A:140:LEU:HD13	1:A:141:PHE:H	11	0.05
(1,1215)	1:A:140:LEU:H	1:A:140:LEU:HD21	8	0.05
(1,1215)	1:A:140:LEU:H	1:A:140:LEU:HD22	8	0.05
(1,1215)	1:A:140:LEU:H	1:A:140:LEU:HD23	8	0.05
(1,1210)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:H	13	0.05
(1,1210)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:H	13	0.05
(1,1210)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:H	13	0.05
(1,1206)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:134:TYR:H	11	0.05
(1,1206)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:134:TYR:H	11	0.05
(1,1206)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:134:TYR:H	11	0.05
(1,1203)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:132:GLU:H	8	0.05
(1,1203)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:132:GLU:H	8	0.05
(1,1203)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:132:GLU:H	8	0.05
(1,1196)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD11	10	0.05
(1,1196)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD12	10	0.05



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1196)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD13	10	0.05
(1,1195)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG21	8	0.05
(1,1195)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG22	8	0.05
(1,1195)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG23	8	0.05
(1,1193)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD11	3	0.05
(1,1193)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD12	3	0.05
(1,1193)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD13	3	0.05
(1,119)	1:A:88:THR:H	1:A:102:VAL:H	16	0.05
(1,1187)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD21	2	0.05
(1,1187)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD22	2	0.05
(1,1187)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD23	2	0.05
(1,1181)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:102:VAL:H	1	0.05
(1,1181)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:102:VAL:H	1	0.05
(1,1181)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:102:VAL:H	1	0.05
(1,1180)	1:A:101:HIS:H	1:A:116:ILE:HD11	17	0.05
(1,1180)	1:A:101:HIS:H	1:A:116:ILE:HD12	17	0.05
(1,1180)	1:A:101:HIS:H	1:A:116:ILE:HD13	17	0.05
(1,1157)	1:A:79:LEU:HD21	1:A:87:ARG:H	10	0.05
(1,1157)	1:A:79:LEU:HD22	1:A:87:ARG:H	10	0.05
(1,1157)	1:A:79:LEU:HD23	1:A:87:ARG:H	10	0.05
(1,1156)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:122:ARG:H	2	0.05
(1,1156)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:122:ARG:H	2	0.05
(1,1156)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:122:ARG:H	2	0.05
(1,1150)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:76:GLU:H	14	0.05
(1,1150)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:76:GLU:H	14	0.05
(1,1150)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:76:GLU:H	14	0.05
(1,1150)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:76:GLU:H	15	0.05
(1,1150)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:76:GLU:H	15	0.05
(1,1150)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:76:GLU:H	15	0.05
(1,1146)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG21	6	0.05
(1,1146)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG22	6	0.05
(1,1146)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG23	6	0.05
(1,1144)	1:A:71:ILE:H	1:A:71:ILE:HD11	4	0.05
(1,1144)	1:A:71:ILE:H	1:A:71:ILE:HD12	4	0.05
(1,1144)	1:A:71:ILE:H	1:A:71:ILE:HD13	4	0.05
(1,1144)	1:A:71:ILE:H	1:A:71:ILE:HD11	14	0.05
(1,1144)	1:A:71:ILE:H	1:A:71:ILE:HD12	14	0.05
(1,1144)	1:A:71:ILE:H	1:A:71:ILE:HD13	14	0.05
(1,1141)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:54:SER:H	9	0.05
(1,1141)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:54:SER:H	9	0.05
(1,1141)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:54:SER:H	9	0.05
(1,114)	1:A:29:PHE:H	1:A:31:ASN:H	20	0.05



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1133)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:51:LEU:H	19	0.05
(1,1133)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:51:LEU:H	19	0.05
(1,1133)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:51:LEU:H	19	0.05
(1,1118)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD11	5	0.05
(1,1118)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD12	5	0.05
(1,1118)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD13	5	0.05
(1,1109)	1:A:16:GLN:H	1:A:46:VAL:HG11	13	0.05
(1,1109)	1:A:16:GLN:H	1:A:46:VAL:HG12	13	0.05
(1,1109)	1:A:16:GLN:H	1:A:46:VAL:HG13	13	0.05
(1,1107)	1:A:45:ILE:HD11	1:A:46:VAL:H	1	0.05
(1,1107)	1:A:45:ILE:HD12	1:A:46:VAL:H	1	0.05
(1,1107)	1:A:45:ILE:HD13	1:A:46:VAL:H	1	0.05
(1,1103)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:10:LYS:H	5	0.05
(1,1103)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:10:LYS:H	5	0.05
(1,1103)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:10:LYS:H	5	0.05
(1,1101)	1:A:9:ILE:H	1:A:12:LEU:HD21	1	0.05
(1,1101)	1:A:9:ILE:H	1:A:12:LEU:HD22	1	0.05
(1,1101)	1:A:9:ILE:H	1:A:12:LEU:HD23	1	0.05
(1,1100)	1:A:8:LYS:H	1:A:9:ILE:HD11	10	0.05
(1,1100)	1:A:8:LYS:H	1:A:9:ILE:HD12	10	0.05
(1,1100)	1:A:8:LYS:H	1:A:9:ILE:HD13	10	0.05
(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD21	10	0.05
(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD22	10	0.05
(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD23	10	0.05
(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD21	18	0.05
(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD22	18	0.05
(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD23	18	0.05
(1,1099)	1:A:134:TYR:H	1:A:138:LEU:HD21	10	0.05
(1,1099)	1:A:134:TYR:H	1:A:138:LEU:HD22	10	0.05
(1,1099)	1:A:134:TYR:H	1:A:138:LEU:HD23	10	0.05
(1,1096)	1:A:75:VAL:HG11	1:A:91:ARG:H	20	0.05
(1,1096)	1:A:75:VAL:HG12	1:A:91:ARG:H	20	0.05
(1,1096)	1:A:75:VAL:HG13	1:A:91:ARG:H	20	0.05
(1,1093)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:89:GLU:H	3	0.05
(1,1093)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:89:GLU:H	3	0.05
(1,1093)	1:A:79:LEU:HD13	1:A:89:GLU:H	3	0.05
(1,1090)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:113:ARG:H	2	0.05
(1,1090)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:113:ARG:H	2	0.05
(1,1090)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:113:ARG:H	2	0.05
(1,1090)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:113:ARG:H	17	0.05
(1,1090)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:113:ARG:H	17	0.05
(1,1090)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:113:ARG:H	17	0.05



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1088)	1:A:90:VAL:HG21	1:A:101:HIS:H	1	0.05
	1:A:90:VAL:HG22	1:A:101:HIS:H	1	0.05
(1,1088)	1:A:90:VAL:HG23	1:A:101:HIS:H	1	0.05
(1,1088)	1:A:90:VAL:HG21	1:A:101:HIS:H	8	0.05
(1,1088)	1:A:90:VAL:HG22	1:A:101:HIS:H	8	0.05
(1,1088)	1:A:90:VAL:HG23	1:A:101:HIS:H	8	0.05
(1,1088)	1:A:90:VAL:HG21	1:A:101:HIS:H	9	0.05
(1,1088)	1:A:90:VAL:HG22	1:A:101:HIS:H	9	0.05
(1,1088)	1:A:90:VAL:HG23	1:A:101:HIS:H	9	0.05
(1,1085)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:100:GLY:H	7	0.05
(1,1085)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:100:GLY:H	7	0.05
(1,1085)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:100:GLY:H	7	0.05
(1,1083)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:120:ALA:H	3	0.05
(1,1083)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:120:ALA:H	3	0.05
(1,1083)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:120:ALA:H	3	0.05
(1,1081)	1:A:13:ASN:HD22	1:A:46:VAL:HG11	12	0.05
(1,1081)	1:A:13:ASN:HD22	1:A:46:VAL:HG12	12	0.05
(1,1081)	1:A:13:ASN:HD22	1:A:46:VAL:HG13	12	0.05
(1,1080)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:26:GLU:H	15	0.05
(1,1080)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:26:GLU:H	15	0.05
(1,1080)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:26:GLU:H	15	0.05
(1,1069)	1:A:90:VAL:HG21	1:A:115:CYS:H	7	0.05
(1,1069)	1:A:90:VAL:HG22	1:A:115:CYS:H	7	0.05
(1,1069)	1:A:90:VAL:HG23	1:A:115:CYS:H	7	0.05
(1,1066)	1:A:43:VAL:H	1:A:43:VAL:HG11	19	0.05
(1,1066)	1:A:43:VAL:H	1:A:43:VAL:HG12	19	0.05
(1,1066)	1:A:43:VAL:H	1:A:43:VAL:HG13	19	0.05
(1,1064)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD21	2	0.05
(1,1064)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD22	2	0.05
(1,1064)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD23	2	0.05
(1,1061)	1:A:86:ILE:H	1:A:86:ILE:HD11	17	0.05
(1,1061)	1:A:86:ILE:H	1:A:86:ILE:HD12	17	0.05
(1,1061)	1:A:86:ILE:H	1:A:86:ILE:HD13	17	0.05
(1,1060)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD21	1	0.05
(1,1060)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD22	1	0.05
(1,1060)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD23	1	0.05
(1,1060)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD21	4	0.05
(1,1060)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD22	4	0.05
(1,1060)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD23	4	0.05
(1,1060)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD21	5	0.05
(1,1060)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD22	5	0.05
(1,1060)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD23	5	0.05



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1060)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD21	14	0.05
(1,1060)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD22	14	0.05
(1,1060)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD23	14	0.05
(1,1060)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD21	20	0.05
(1,1060)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD22	20	0.05
(1,1060)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD23	20	0.05
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:90:VAL:HG21	5	0.05
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:90:VAL:HG22	5	0.05
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:90:VAL:HG23	5	0.05
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:90:VAL:HG21	5	0.05
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:90:VAL:HG22	5	0.05
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:90:VAL:HG23	5	0.05
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG21	5	0.05
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG22	5	0.05
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG23	5	0.05
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:90:VAL:HG21	13	0.05
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:90:VAL:HG22	13	0.05
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:90:VAL:HG23	13	0.05
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:90:VAL:HG21	13	0.05
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:90:VAL:HG22	13	0.05
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:90:VAL:HG23	13	0.05
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG21	13	0.05
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG22	13	0.05
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG23	13	0.05
(1,1022)	1:A:134:TYR:H	1:A:135:GLU:H	6	0.05
(1,1015)	1:A:129:LEU:H	1:A:130:LYS:H	17	0.05
(1,1006)	1:A:45:ILE:H	1:A:122:ARG:H	11	0.05
(1,1000)	1:A:67:PHE:H	1:A:114:TYR:H	15	0.05
(1,1000)	1:A:67:PHE:H	1:A:114:TYR:H	20	0.05
(1,996)	1:A:108:GLY:H	1:A:112:LEU:H	19	0.04
(1,99)	1:A:20:THR:H	1:A:23:ASN:H	16	0.04
(1,982)	1:A:76:GLU:H	1:A:91:ARG:H	9	0.04
(1,98)	1:A:31:ASN:H	1:A:34:TRP:H	20	0.04
(1,977)	1:A:85:MET:H	1:A:86:ILE:H	1	0.04
(1,967)	1:A:54:SER:H	1:A:57:LYS:H	15	0.04
(1,957)	1:A:41:LEU:H	1:A:124:VAL:H	10	0.04
(1,953)	1:A:30:GLN:H	1:A:34:TRP:HE1	11	0.04
(1,952)	1:A:32:GLU:H	1:A:34:TRP:H	13	0.04
(1,950)	1:A:25:THR:H	1:A:26:GLU:H	15	0.04
(1,948)	1:A:18:GLU:H	1:A:20:THR:H	3	0.04
(1,944)	1:A:15:MET:H	1:A:18:GLU:H	2	0.04
(1,926)	1:A:110:ASN:HD22	1:A:112:LEU:H	13	0.04



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,919)	1:A:80:ASP:H	1:A:89:GLU:H	11	0.04
(1,915)	1:A:42:TYR:H	1:A:54:SER:H	7	0.04
(1,914)	1:A:22:ASN:HD22	1:A:24:GLY:H	3	0.04
(1,914)	1:A:22:ASN:HD22	1:A:24:GLY:H	5	0.04
(1,914)	1:A:22:ASN:HD22	1:A:24:GLY:H	15	0.04
(1,912)	1:A:21:GLN:H	1:A:24:GLY:H	5	0.04
(1,906)	1:A:99:LEU:HD21	1:A:116:ILE:HD11	3	0.04
(1,906)	1:A:99:LEU:HD21	1:A:116:ILE:HD12	3	0.04
(1,906)	1:A:99:LEU:HD21	1:A:116:ILE:HD13	3	0.04
(1,906)	1:A:99:LEU:HD22	1:A:116:ILE:HD11	3	0.04
(1,906)	1:A:99:LEU:HD22	1:A:116:ILE:HD12	3	0.04
(1,906)	1:A:99:LEU:HD22	1:A:116:ILE:HD13	3	0.04
(1,906)	1:A:99:LEU:HD23	1:A:116:ILE:HD11	3	0.04
(1,906)	1:A:99:LEU:HD23	1:A:116:ILE:HD12	3	0.04
(1,906)	1:A:99:LEU:HD23	1:A:116:ILE:HD13	3	0.04
(1,904)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD11	2	0.04
(1,904)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD12	2	0.04
(1,904)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD13	2	0.04
(1,904)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD11	2	0.04
(1,904)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD12	2	0.04
(1,904)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD13	2	0.04
(1,904)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD11	2	0.04
(1,904)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD12	2	0.04
(1,904)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD13	2	0.04
(1,904)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD11	15	0.04
(1,904)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD12	15	0.04
(1,904)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD13	15	0.04
(1,904)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD11	15	0.04
(1,904)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD12	15	0.04
(1,904)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD13	15	0.04
(1,904)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD11	15	0.04
(1,904)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD12	15	0.04
(1,904)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD13	15	0.04
(1,90)	1:A:63:GLY:H	1:A:64:TRP:H	18	0.04
(1,897)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:99:LEU:HD11	14	0.04
(1,897)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:99:LEU:HD12	14	0.04
(1,897)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:99:LEU:HD13	14	0.04
(1,897)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:99:LEU:HD11	14	0.04
(1,897)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:99:LEU:HD12	14	0.04
(1,897)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:99:LEU:HD13	14	0.04
(1,897)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:99:LEU:HD11	14	0.04
(1,897)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:99:LEU:HD12	14	0.04



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,897)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:99:LEU:HD13	14	0.04
(1,895)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:25:THR:H	2	0.04
(1,895)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:25:THR:H	2	0.04
(1,895)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:25:THR:H	2	0.04
(1,893)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD11	19	0.04
(1,893)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD12	19	0.04
(1,893)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD13	19	0.04
(1,871)	1:A:92:SER:H	1:A:99:LEU:HD21	12	0.04
(1,871)	1:A:92:SER:H	1:A:99:LEU:HD22	12	0.04
(1,871)	1:A:92:SER:H	1:A:99:LEU:HD23	12	0.04
(1,87)	1:A:31:ASN:H	1:A:34:TRP:HE1	14	0.04
(1,866)	1:A:71:ILE:HD11	1:A:140:LEU:HD11	6	0.04
(1,866)	1:A:71:ILE:HD11	1:A:140:LEU:HD12	6	0.04
(1,866)	1:A:71:ILE:HD11	1:A:140:LEU:HD13	6	0.04
(1,866)	1:A:71:ILE:HD12	1:A:140:LEU:HD11	6	0.04
(1,866)	1:A:71:ILE:HD12	1:A:140:LEU:HD12	6	0.04
(1,866)	1:A:71:ILE:HD12	1:A:140:LEU:HD13	6	0.04
(1,866)	1:A:71:ILE:HD13	1:A:140:LEU:HD11	6	0.04
(1,866)	1:A:71:ILE:HD13	1:A:140:LEU:HD12	6	0.04
(1,866)	1:A:71:ILE:HD13	1:A:140:LEU:HD13	6	0.04
(1,859)	1:A:16:GLN:HE22	1:A:45:ILE:HD11	6	0.04
(1,859)	1:A:16:GLN:HE22	1:A:45:ILE:HD12	6	0.04
(1,859)	1:A:16:GLN:HE22	1:A:45:ILE:HD13	6	0.04
(1,857)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:129:LEU:HD11	8	0.04
(1,857)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:129:LEU:HD12	8	0.04
(1,857)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:129:LEU:HD13	8	0.04
(1,857)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:129:LEU:HD11	8	0.04
(1,857)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:129:LEU:HD12	8	0.04
(1,857)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:129:LEU:HD13	8	0.04
(1,857)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:129:LEU:HD11	8	0.04
(1,857)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:129:LEU:HD12	8	0.04
(1,857)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:129:LEU:HD13	8	0.04
(1,856)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:138:LEU:HD11	10	0.04
(1,856)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:138:LEU:HD12	10	0.04
(1,856)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:138:LEU:HD13	10	0.04
(1,856)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:138:LEU:HD11	10	0.04
(1,856)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:138:LEU:HD12	10	0.04
(1,856)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:138:LEU:HD13	10	0.04
(1,856)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:138:LEU:HD11	10	0.04
(1,856)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:138:LEU:HD12	10	0.04
(1,856)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:138:LEU:HD13	10	0.04
(1,852)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:124:VAL:HG11	2	0.04



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

(1,852)         1:A:43:VAL:HG11         1:A:124:VAL:HG13         2         0.04           (1,852)         1:A:43:VAL:HG12         1:A:124:VAL:HG13         2         0.04           (1,852)         1:A:43:VAL:HG12         1:A:124:VAL:HG12         0.04           (1,852)         1:A:43:VAL:HG12         1:A:124:VAL:HG13         2         0.04           (1,852)         1:A:43:VAL:HG13         1:A:124:VAL:HG12         2         0.04           (1,851)         1:A:44:LEU:HD11         1:A:124:VAL:HG13         1         0.04           (1,851)         1:A:44:LEU:HD11         1:A:124:VAL:HG13         11         0.04           (1,851)         1:A:44:LEU:HD12         1:A:124:VAL:HG13         11         0.04           (1,851)         1:A:44:LEU:HD13         1:A:124:VAL:HG13         11         0.04           (1,851)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:124:VAL:HG13         11         0.04           (1,851)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,852)         1:A:43:VAL:HG12         1:A:124:VAL:HG12         2         0.04           (1,852)         1:A:43:VAL:HG12         1:A:124:VAL:HG13         2         0.04           (1,852)         1:A:43:VAL:HG13         1:A:124:VAL:HG13         2         0.04           (1,852)         1:A:43:VAL:HG13         1:A:124:VAL:HG11         2         0.04           (1,852)         1:A:43:VAL:HG13         1:A:124:VAL:HG13         2         0.04           (1,852)         1:A:43:VAL:HG13         1:A:124:VAL:HG13         2         0.04           (1,851)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:124:VAL:HG11         11         0.04           (1,851)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:124:VAL:HG12         11         0.04           (1,851)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:124:VAL:HG11         11         0.04           (1,851)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:124:VAL:HG12         11         0.04           (1,851)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:124:VAL:HG13         11         0.04           (1,851)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:124:VAL:HG13         11         0.04           (1,851)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:124:VAL:HG13         11         0.04           (1,851)         1:A:41:LEU:HD13	(1,852)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:124:VAL:HG12	2	0.04
(1,852) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:124:VAL:HG13 2 0.04 (1,852) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:124:VAL:HG11 2 0.04 (1,852) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:124:VAL:HG11 2 0.04 (1,852) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:124:VAL:HG11 2 0.04 (1,852) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:124:VAL:HG13 2 0.04 (1,852) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:124:VAL:HG13 2 0.04 (1,851) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:124:VAL:HG13 2 0.04 (1,851) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:124:VAL:HG13 1 0.04 (1,851) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:124:VAL:HG13 11 0.04 (1,851) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:124:VAL:HG13 11 0.04 (1,851) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:124:VAL:HG13 11 0.04 (1,851) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:HG13 11 0.04 (1,866) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:HG12 11 0.04 (1,846) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:HG11 4 0.04 (1,846) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:HG11 4 0.04 (1,846) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:HG13 4 0.04 (1,846) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:HG13 9 0.04 (1,846) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:HG13 9 0.04 (1,846) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:124:VAL:HG13 9 0.04 (1,846) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:124:VAL:HG12 5 0.04 (1,840) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:124:VAL:HG22 5 0.04 (1,840) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:124:VAL:HG23 5 0.04 (1,840) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:124:VAL:HG23 5 0.04 (1,840) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:124:VAL:HG23 5 0.04 (1,840) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:124:VAL:	(1,852)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:124:VAL:HG13	2	0.04
(1,852) 1:A:43:VAL:HG12 1:A:124:VAL:HG13 2 0.04 (1,852) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:124:VAL:HG11 2 0.04 (1,852) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:124:VAL:HG12 2 0.04 (1,852) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:124:VAL:HG13 2 0.04 (1,852) 1:A:44:VAL:HG13 1:A:124:VAL:HG13 2 0.04 (1,851) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:124:VAL:HG13 11 0.04 (1,851) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:124:VAL:HG11 11 0.04 (1,851) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:124:VAL:HG13 11 0.04 (1,851) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:124:VAL:HG13 11 0.04 (1,851) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:HG13 11 0.04 (1,846) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:HG13 11 0.04 (1,846) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:HG13 11 0.04 (1,846) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:HG11 4 0.04 (1,846) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:HG13 4 0.04 (1,846) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:HG13 9 0.04 (1,846) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:HG13 9 0.04 (1,846) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:124:VAL:HG22 5 0.04 (1,840) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:124:VAL:HG22 5 0.04 (1,840) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:124:VAL:HG22 5 0.04 (1,840) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:124:VAL:HG23 5 0.04 (1,840) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:124:VAL:HG23 5 0.04 (1,840) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:124:VAL:HG23 5 0.04 (1,840) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:124:V	(1,852)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:124:VAL:HG11	2	0.04
(1,852) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:124:VAL:HG11 2 0.04 (1,852) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:124:VAL:HG13 2 0.04 (1,852) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:124:VAL:HG13 2 0.04 (1,851) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:124:VAL:HG13 1 1 0.04 (1,851) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:124:VAL:HG12 11 0.04 (1,851) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:124:VAL:HG13 11 0.04 (1,851) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:124:VAL:HG13 11 0.04 (1,851) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:124:VAL:HG13 11 0.04 (1,851) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:HG13 11 0.04 (1,866) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:HG13 11 0.04 (1,846) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:HG13 14 0.04 (1,846) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:HG13 14 0.04 (1,846) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:HG13 4 0.04 (1,846) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:HG13 9 0.04 (1,846) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:HG13 9 0.04 (1,846) 1:A:88:THR:H 1:A:102:VAL:HG13 9 0.04 (1,846) 1:A:48:THR:H 1:A:102:VAL:HG13 9 0.04 (1,846) 1:A:48:THR:H 1:A:102:VAL:HG12 9 0.04 (1,846) 1:A:48:VAL:HG11 1:A:124:VAL:HG12 5 0.04 (1,840) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:124:VAL:HG21 5 0.04 (1,840) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:124:VAL:HG22 5 0.04 (1,840) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:124:VAL:HG21 5 0.04 (1,840) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:124:VAL:HG21 5 0.04 (1,840) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:124:VAL:HG22 5 0.04 (1,840) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:124:VAL:HG23 5 0.04 (1,840) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:124:VAL:HG23 5 0.04 (1,840) 1:A:43:VAL:HG11 1:A:124:VAL:HG22 5 0.04 (1,840) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:124:VAL:HG23 5 0.04 (1,840) 1:A:43:VAL:HG13 1:A:124:VAL:HG2	(1,852)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:124:VAL:HG12	2	0.04
(1,852)         1:A:43:VAL:HG13         1:A:124:VAL:HG13         2         0.04           (1,852)         1:A:43:VAL:HG13         1:A:124:VAL:HG13         2         0.04           (1,851)         1:A:44:LEU:HD11         1:A:124:VAL:HG11         11         0.04           (1,851)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:124:VAL:HG12         11         0.04           (1,851)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:124:VAL:HG13         11         0.04           (1,851)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:124:VAL:HG11         11         0.04           (1,851)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:124:VAL:HG12         11         0.04           (1,851)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:124:VAL:HG13         11         0.04           (1,846)         1:A:88:THR:H         1:A:102:VAL:HG13         11         0.04           (1,846)         1:A:88:THR:H         1:A:102:VAL:HG12         4         0.04           (1,846)         1:A:48:THR:H	(1,852)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:124:VAL:HG13	2	0.04
(1,852)         1:A:43:VAL:HG13         1:A:124:VAL:HG13         2         0.04           (1,851)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:124:VAL:HG11         11         0.04           (1,851)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:124:VAL:HG12         11         0.04           (1,851)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:124:VAL:HG13         11         0.04           (1,851)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:124:VAL:HG12         11         0.04           (1,851)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:124:VAL:HG13         11         0.04           (1,851)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:124:VAL:HG13         11         0.04           (1,851)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:124:VAL:HG11         11         0.04           (1,851)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:124:VAL:HG13         11         0.04           (1,851)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:124:VAL:HG13         11         0.04           (1,851)         1:A:48:LEW:HD13         1:A:124:VAL:HG13         11         0.04           (1,851)         1:A:48:FHR:H         1:A:102:VAL:HG13         1         0.04           (1,846)         1:A:88:THR:H         1:A:102:VAL:HG19         9         0.04           (1,846)         1:A:88:THR:H	(1,852)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:124:VAL:HG11	2	0.04
(1,851)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:124:VAL:HG11         11         0.04           (1,851)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:124:VAL:HG12         11         0.04           (1,851)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:124:VAL:HG13         11         0.04           (1,851)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:124:VAL:HG11         11         0.04           (1,851)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:124:VAL:HG13         11         0.04           (1,851)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:124:VAL:HG11         11         0.04           (1,851)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:124:VAL:HG11         11         0.04           (1,851)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:124:VAL:HG13         11         0.04           (1,851)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:124:VAL:HG13         11         0.04           (1,851)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:124:VAL:HG13         11         0.04           (1,846)         1:A:88:THR:H         1:A:102:VAL:HG13         11         0.04           (1,846)         1:A:88:THR:H         1:A:102:VAL:HG13         4         0.04           (1,846)         1:A:88:THR:H         1:A:102:VAL:HG13         9         0.04           (1,846)         1:A:38:THR:H	(1,852)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:124:VAL:HG12	2	0.04
(1,851)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:124:VAL:HG12         11         0.04           (1,851)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:124:VAL:HG13         11         0.04           (1,851)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:124:VAL:HG11         11         0.04           (1,851)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:124:VAL:HG13         11         0.04           (1,851)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:124:VAL:HG13         11         0.04           (1,851)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:124:VAL:HG13         11         0.04           (1,851)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:124:VAL:HG12         11         0.04           (1,851)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:124:VAL:HG13         11         0.04           (1,846)         1:A:88:THR:H         1:A:102:VAL:HG13         4         0.04           (1,846)         1:A:88:THR:H         1:A:102:VAL:HG13         9         0.04           (1,846)         1:A:38:THR:H	(1,852)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:124:VAL:HG13	2	0.04
(1,851)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:124:VAL:HG13         11         0.04           (1,851)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:124:VAL:HG11         11         0.04           (1,851)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:124:VAL:HG12         11         0.04           (1,851)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:124:VAL:HG13         11         0.04           (1,851)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:124:VAL:HG12         11         0.04           (1,851)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:124:VAL:HG13         11         0.04           (1,846)         1:A:88:THR:H         1:A:102:VAL:HG13         1         0.04           (1,846)         1:A:88:THR:H         1:A:102:VAL:HG12         4         0.04           (1,846)         1:A:88:THR:H         1:A:102:VAL:HG13         4         0.04           (1,846)         1:A:88:THR:H         1:A:102:VAL:HG11         9         0.04           (1,846)         1:A:88:THR:H         1:A:102:VAL:HG12         9         0.04           (1,840)         1:A:43:VAL:HG11         1:A:124:VAL:HG21         5         0.04           (1,840)         1:A:43:VAL:HG11         1:A:124:VAL:HG23         5         0.04           (1,840)         1:A:43:VAL:HG12 <t< td=""><td>(1,851)</td><td>1:A:41:LEU:HD11</td><td>1:A:124:VAL:HG11</td><td>11</td><td>0.04</td></t<>	(1,851)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:124:VAL:HG11	11	0.04
(1,851)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:124:VAL:HG11         11         0.04           (1,851)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:124:VAL:HG12         11         0.04           (1,851)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:124:VAL:HG13         11         0.04           (1,851)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:124:VAL:HG11         11         0.04           (1,851)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:124:VAL:HG13         11         0.04           (1,846)         1:A:88:THR:H         1:A:102:VAL:HG13         1         0.04           (1,846)         1:A:88:THR:H         1:A:102:VAL:HG12         4         0.04           (1,846)         1:A:88:THR:H         1:A:102:VAL:HG13         4         0.04           (1,846)         1:A:88:THR:H         1:A:102:VAL:HG11         9         0.04           (1,846)         1:A:88:THR:H         1:A:102:VAL:HG12         9         0.04           (1,846)         1:A:88:THR:H         1:A:102:VAL:HG13         9         0.04           (1,840)         1:A:43:VAL:HG11         1:A:124:VAL:HG21         5         0.04           (1,840)         1:A:43:VAL:HG11         1:A:124:VAL:HG23         5         0.04           (1,840)         1:A:43:VAL:HG12         1:	(1,851)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:124:VAL:HG12	11	0.04
(1,851)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:124:VAL:HG12         11         0.04           (1,851)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:124:VAL:HG13         11         0.04           (1,851)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:124:VAL:HG11         11         0.04           (1,851)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:124:VAL:HG12         11         0.04           (1,851)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:124:VAL:HG13         11         0.04           (1,846)         1:A:88:THR:H         1:A:102:VAL:HG11         4         0.04           (1,846)         1:A:88:THR:H         1:A:102:VAL:HG13         4         0.04           (1,846)         1:A:88:THR:H         1:A:102:VAL:HG11         9         0.04           (1,846)         1:A:88:THR:H         1:A:102:VAL:HG12         9         0.04           (1,846)         1:A:88:THR:H         1:A:102:VAL:HG13         9         0.04           (1,846)         1:A:88:THR:H         1:A:102:VAL:HG13         9         0.04           (1,846)         1:A:38:VAL:HG11         1:A:124:VAL:HG22         5         0.04           (1,840)         1:A:43:VAL:HG11         1:A:124:VAL:HG23         5         0.04           (1,840)         1:A:43:VAL:HG12         1:	(1,851)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:124:VAL:HG13	11	0.04
(1,851)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:124:VAL:HG13         11         0.04           (1,851)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:124:VAL:HG11         11         0.04           (1,851)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:124:VAL:HG12         11         0.04           (1,851)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:124:VAL:HG13         11         0.04           (1,846)         1:A:88:THR:H         1:A:102:VAL:HG11         4         0.04           (1,846)         1:A:88:THR:H         1:A:102:VAL:HG13         4         0.04           (1,846)         1:A:88:THR:H         1:A:102:VAL:HG11         9         0.04           (1,846)         1:A:88:THR:H         1:A:102:VAL:HG12         9         0.04           (1,846)         1:A:88:THR:H         1:A:102:VAL:HG12         9         0.04           (1,846)         1:A:88:THR:H         1:A:102:VAL:HG13         9         0.04           (1,846)         1:A:38:VAL:HG11         1:A:124:VAL:HG21         5         0.04           (1,840)         1:A:43:VAL:HG11         1:A:124:VAL:HG23         5         0.04           (1,840)         1:A:43:VAL:HG12         1:A:124:VAL:HG21         5         0.04           (1,840)         1:A:43:VAL:HG13         1:A	(1,851)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:HG11	11	0.04
(1,851)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:124:VAL:HG11         11         0.04           (1,851)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:124:VAL:HG12         11         0.04           (1,851)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:124:VAL:HG13         11         0.04           (1,846)         1:A:88:THR:H         1:A:102:VAL:HG11         4         0.04           (1,846)         1:A:88:THR:H         1:A:102:VAL:HG13         4         0.04           (1,846)         1:A:88:THR:H         1:A:102:VAL:HG11         9         0.04           (1,846)         1:A:88:THR:H         1:A:102:VAL:HG12         9         0.04           (1,846)         1:A:88:THR:H         1:A:102:VAL:HG12         9         0.04           (1,846)         1:A:88:THR:H         1:A:102:VAL:HG13         9         0.04           (1,846)         1:A:43:VAL:HG11         1:A:102:VAL:HG13         9         0.04           (1,840)         1:A:43:VAL:HG11         1:A:124:VAL:HG21         5         0.04           (1,840)         1:A:43:VAL:HG11         1:A:124:VAL:HG23         5         0.04           (1,840)         1:A:43:VAL:HG12         1:A:124:VAL:HG23         5         0.04           (1,840)         1:A:43:VAL:HG13         1:A:	(1,851)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:HG12	11	0.04
(1,851)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:124:VAL:HG12         11         0.04           (1,851)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:124:VAL:HG13         11         0.04           (1,846)         1:A:88:THR:H         1:A:102:VAL:HG11         4         0.04           (1,846)         1:A:88:THR:H         1:A:102:VAL:HG12         4         0.04           (1,846)         1:A:88:THR:H         1:A:102:VAL:HG13         4         0.04           (1,846)         1:A:88:THR:H         1:A:102:VAL:HG11         9         0.04           (1,846)         1:A:88:THR:H         1:A:102:VAL:HG12         9         0.04           (1,846)         1:A:88:THR:H         1:A:102:VAL:HG12         9         0.04           (1,846)         1:A:88:THR:H         1:A:102:VAL:HG13         9         0.04           (1,840)         1:A:43:VAL:HG11         1:A:102:VAL:HG13         9         0.04           (1,840)         1:A:43:VAL:HG11         1:A:124:VAL:HG22         5         0.04           (1,840)         1:A:43:VAL:HG12         1:A:124:VAL:HG23         5         0.04           (1,840)         1:A:43:VAL:HG13         1:A:124:VAL:HG23         5         0.04           (1,840)         1:A:43:VAL:HG13         1:A:124:	(1,851)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:HG13	11	0.04
(1,851)         1:A:441:LEU:HD13         1:A:124:VAL:HG13         11         0.04           (1,846)         1:A:88:THR:H         1:A:102:VAL:HG11         4         0.04           (1,846)         1:A:88:THR:H         1:A:102:VAL:HG12         4         0.04           (1,846)         1:A:88:THR:H         1:A:102:VAL:HG13         4         0.04           (1,846)         1:A:88:THR:H         1:A:102:VAL:HG11         9         0.04           (1,846)         1:A:88:THR:H         1:A:102:VAL:HG12         9         0.04           (1,846)         1:A:88:THR:H         1:A:102:VAL:HG13         9         0.04           (1,846)         1:A:88:THR:H         1:A:102:VAL:HG13         9         0.04           (1,840)         1:A:43:VAL:HG11         1:A:124:VAL:HG23         5         0.04           (1,840)         1:A:43:VAL:HG11         1:A:124:VAL:HG23         5         0.04           (1,840)         1:A:43:VAL:HG12         1:A:124:VAL:HG21         5         0.04           (1,840)         1:A:43:VAL:HG13         1:A:124:VAL:HG23         5         0.04           (1,840)         1:A:43:VAL:HG13         1:A:124:VAL:HG21         5         0.04           (1,840)         1:A:43:VAL:HG13         1:A:124:	(1,851)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:HG11	11	0.04
(1,851)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:124:VAL:HG13         11         0.04           (1,846)         1:A:88:THR:H         1:A:102:VAL:HG11         4         0.04           (1,846)         1:A:88:THR:H         1:A:102:VAL:HG12         4         0.04           (1,846)         1:A:88:THR:H         1:A:102:VAL:HG13         4         0.04           (1,846)         1:A:88:THR:H         1:A:102:VAL:HG11         9         0.04           (1,846)         1:A:88:THR:H         1:A:102:VAL:HG12         9         0.04           (1,846)         1:A:88:THR:H         1:A:102:VAL:HG13         9         0.04           (1,846)         1:A:88:THR:H         1:A:102:VAL:HG13         9         0.04           (1,840)         1:A:43:VAL:HG11         1:A:124:VAL:HG22         5         0.04           (1,840)         1:A:43:VAL:HG11         1:A:124:VAL:HG23         5         0.04           (1,840)         1:A:43:VAL:HG12         1:A:124:VAL:HG21         5         0.04           (1,840)         1:A:43:VAL:HG13         1:A:124:VAL:HG23         5         0.04           (1,840)         1:A:43:VAL:HG13         1:A:124:VAL:HG21         5         0.04           (1,840)         1:A:43:VAL:HG13         1:A:124:V	,	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:HG12	11	0.04
(1,846)         1:A:88:THR:H         1:A:102:VAL:HG11         4         0.04           (1,846)         1:A:88:THR:H         1:A:102:VAL:HG12         4         0.04           (1,846)         1:A:88:THR:H         1:A:102:VAL:HG13         4         0.04           (1,846)         1:A:88:THR:H         1:A:102:VAL:HG11         9         0.04           (1,846)         1:A:88:THR:H         1:A:102:VAL:HG12         9         0.04           (1,846)         1:A:88:THR:H         1:A:102:VAL:HG12         9         0.04           (1,846)         1:A:88:THR:H         1:A:102:VAL:HG12         9         0.04           (1,846)         1:A:88:THR:H         1:A:102:VAL:HG13         9         0.04           (1,840)         1:A:43:VAL:HG11         1:A:124:VAL:HG21         5         0.04           (1,840)         1:A:43:VAL:HG11         1:A:124:VAL:HG23         5         0.04           (1,840)         1:A:43:VAL:HG12         1:A:124:VAL:HG22         5         0.04           (1,840)         1:A:43:VAL:HG13         1:A:124:VAL:HG23         5         0.04           (1,840)         1:A:43:VAL:HG13         1:A:124:VAL:HG22         5         0.04           (1,840)         1:A:43:VAL:HG13         1:A:124:VAL:H	( ' /	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:HG13	11	0.04
(1,846)         1:A:88:THR:H         1:A:102:VAL:HG12         4         0.04           (1,846)         1:A:88:THR:H         1:A:102:VAL:HG13         4         0.04           (1,846)         1:A:88:THR:H         1:A:102:VAL:HG11         9         0.04           (1,846)         1:A:88:THR:H         1:A:102:VAL:HG12         9         0.04           (1,846)         1:A:88:THR:H         1:A:102:VAL:HG13         9         0.04           (1,840)         1:A:43:VAL:HG11         1:A:124:VAL:HG21         5         0.04           (1,840)         1:A:43:VAL:HG11         1:A:124:VAL:HG22         5         0.04           (1,840)         1:A:43:VAL:HG12         1:A:124:VAL:HG23         5         0.04           (1,840)         1:A:43:VAL:HG12         1:A:124:VAL:HG22         5         0.04           (1,840)         1:A:43:VAL:HG12         1:A:124:VAL:HG23         5         0.04           (1,840)         1:A:43:VAL:HG13         1:A:124:VAL:HG23         5         0.04           (1,840)         1:A:43:VAL:HG13         1:A:124:VAL:HG22         5         0.04           (1,840)         1:A:43:VAL:HG13         1:A:124:VAL:HG23         5         0.04           (1,840)         1:A:43:VAL:HG13         1:A:	( ' /	1:A:88:THR:H	1:A:102:VAL:HG11	4	
(1,846)         1:A:88:THR:H         1:A:102:VAL:HG13         4         0.04           (1,846)         1:A:88:THR:H         1:A:102:VAL:HG11         9         0.04           (1,846)         1:A:88:THR:H         1:A:102:VAL:HG12         9         0.04           (1,846)         1:A:88:THR:H         1:A:102:VAL:HG13         9         0.04           (1,840)         1:A:43:VAL:HG11         1:A:124:VAL:HG21         5         0.04           (1,840)         1:A:43:VAL:HG11         1:A:124:VAL:HG22         5         0.04           (1,840)         1:A:43:VAL:HG11         1:A:124:VAL:HG23         5         0.04           (1,840)         1:A:43:VAL:HG12         1:A:124:VAL:HG22         5         0.04           (1,840)         1:A:43:VAL:HG12         1:A:124:VAL:HG23         5         0.04           (1,840)         1:A:43:VAL:HG13         1:A:124:VAL:HG21         5         0.04           (1,840)         1:A:43:VAL:HG13         1:A:124:VAL:HG22         5         0.04           (1,840)         1:A:43:VAL:HG13         1:A:124:VAL:HG22         5         0.04           (1,840)         1:A:43:VAL:HG13         1:A:124:VAL:HG23         5         0.04           (1,840)         1:A:43:VAL:HG13         1	( ' /	1:A:88:THR:H	1:A:102:VAL:HG12	4	0.04
(1,846)         1:A:88:THR:H         1:A:102:VAL:HG11         9         0.04           (1,846)         1:A:88:THR:H         1:A:102:VAL:HG12         9         0.04           (1,846)         1:A:88:THR:H         1:A:102:VAL:HG13         9         0.04           (1,840)         1:A:43:VAL:HG11         1:A:124:VAL:HG21         5         0.04           (1,840)         1:A:43:VAL:HG11         1:A:124:VAL:HG22         5         0.04           (1,840)         1:A:43:VAL:HG12         1:A:124:VAL:HG23         5         0.04           (1,840)         1:A:43:VAL:HG12         1:A:124:VAL:HG22         5         0.04           (1,840)         1:A:43:VAL:HG12         1:A:124:VAL:HG23         5         0.04           (1,840)         1:A:43:VAL:HG13         1:A:124:VAL:HG21         5         0.04           (1,840)         1:A:43:VAL:HG13         1:A:124:VAL:HG22         5         0.04           (1,840)         1:A:43:VAL:HG13         1:A:124:VAL:HG23         5         0.04           (1,840)         1:A:43:VAL:HG13         1:A:124:VAL:HG22         5         0.04           (1,841)         1:A:10:LYS:H         1:A:124:VAL:HG23         5         0.04           (1,842)         1:A:41:LEU:HD11         1	· ' '	1:A:88:THR:H	1:A:102:VAL:HG13	4	0.04
(1,846)         1:A:88:THR:H         1:A:102:VAL:HG12         9         0.04           (1,846)         1:A:88:THR:H         1:A:102:VAL:HG13         9         0.04           (1,840)         1:A:43:VAL:HG11         1:A:124:VAL:HG21         5         0.04           (1,840)         1:A:43:VAL:HG11         1:A:124:VAL:HG22         5         0.04           (1,840)         1:A:43:VAL:HG11         1:A:124:VAL:HG23         5         0.04           (1,840)         1:A:43:VAL:HG12         1:A:124:VAL:HG21         5         0.04           (1,840)         1:A:43:VAL:HG12         1:A:124:VAL:HG23         5         0.04           (1,840)         1:A:43:VAL:HG13         1:A:124:VAL:HG21         5         0.04           (1,840)         1:A:43:VAL:HG13         1:A:124:VAL:HG22         5         0.04           (1,840)         1:A:43:VAL:HG13         1:A:124:VAL:HG23         5         0.04           (1,840)         1:A:43:VAL:HG13         1:A:124:VAL:HG23         5         0.04           (1,84)         1:A:10:LYS:H         1:A:12:LEU:H         7         0.04           (1,84)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:124:VAL:HG21         17         0.04           (1,834)         1:A:41:LEU:HD11         1:A	(1,846)	1:A:88:THR:H	1:A:102:VAL:HG11	9	0.04
(1,846)         1:A:88:THR:H         1:A:102:VAL:HG13         9         0.04           (1,840)         1:A:43:VAL:HG11         1:A:124:VAL:HG21         5         0.04           (1,840)         1:A:43:VAL:HG11         1:A:124:VAL:HG22         5         0.04           (1,840)         1:A:43:VAL:HG11         1:A:124:VAL:HG23         5         0.04           (1,840)         1:A:43:VAL:HG12         1:A:124:VAL:HG21         5         0.04           (1,840)         1:A:43:VAL:HG12         1:A:124:VAL:HG23         5         0.04           (1,840)         1:A:43:VAL:HG13         1:A:124:VAL:HG21         5         0.04           (1,840)         1:A:43:VAL:HG13         1:A:124:VAL:HG22         5         0.04           (1,840)         1:A:43:VAL:HG13         1:A:124:VAL:HG23         5         0.04           (1,840)         1:A:43:VAL:HG13         1:A:124:VAL:HG23         5         0.04           (1,84)         1:A:10:LYS:H         1:A:12:LEU:H         1         0.04           (1,84)         1:A:10:LYS:H         1:A:12:LEU:H         7         0.04           (1,834)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:124:VAL:HG21         17         0.04           (1,834)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:124	(1,846)	1:A:88:THR:H	1:A:102:VAL:HG12	9	0.04
(1,840)       1:A:43:VAL:HG11       1:A:124:VAL:HG22       5       0.04         (1,840)       1:A:43:VAL:HG11       1:A:124:VAL:HG23       5       0.04         (1,840)       1:A:43:VAL:HG12       1:A:124:VAL:HG21       5       0.04         (1,840)       1:A:43:VAL:HG12       1:A:124:VAL:HG22       5       0.04         (1,840)       1:A:43:VAL:HG12       1:A:124:VAL:HG23       5       0.04         (1,840)       1:A:43:VAL:HG13       1:A:124:VAL:HG21       5       0.04         (1,840)       1:A:43:VAL:HG13       1:A:124:VAL:HG22       5       0.04         (1,840)       1:A:43:VAL:HG13       1:A:124:VAL:HG23       5       0.04         (1,840)       1:A:40:LYS:H       1:A:12:LEU:H       1       0.04         (1,84)       1:A:10:LYS:H       1:A:12:LEU:H       7       0.04         (1,834)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:124:VAL:HG21       17       0.04         (1,834)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:124:VAL:HG23       17       0.04         (1,834)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:124:VAL:HG21       17       0.04         (1,834)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:124:VAL:HG23       17       0.04         (1,834)       1:A:41:LEU:HD12	( ' /	1:A:88:THR:H	1:A:102:VAL:HG13	9	0.04
(1,840)       1:A:43:VAL:HG11       1:A:124:VAL:HG22       5       0.04         (1,840)       1:A:43:VAL:HG11       1:A:124:VAL:HG23       5       0.04         (1,840)       1:A:43:VAL:HG12       1:A:124:VAL:HG21       5       0.04         (1,840)       1:A:43:VAL:HG12       1:A:124:VAL:HG22       5       0.04         (1,840)       1:A:43:VAL:HG12       1:A:124:VAL:HG23       5       0.04         (1,840)       1:A:43:VAL:HG13       1:A:124:VAL:HG21       5       0.04         (1,840)       1:A:43:VAL:HG13       1:A:124:VAL:HG22       5       0.04         (1,840)       1:A:43:VAL:HG13       1:A:124:VAL:HG23       5       0.04         (1,84)       1:A:10:LYS:H       1:A:12:LEU:H       1       0.04         (1,84)       1:A:10:LYS:H       1:A:12:LEU:H       7       0.04         (1,834)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:124:VAL:HG21       17       0.04         (1,834)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:124:VAL:HG23       17       0.04         (1,834)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:124:VAL:HG21       17       0.04         (1,834)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:124:VAL:HG23       17       0.04         (1,834)       1:A:41:LEU:HD12<	( ' /	1:A:43:VAL:HG11	1:A:124:VAL:HG21	5	0.04
(1,840)         1:A:43:VAL:HG12         1:A:124:VAL:HG21         5         0.04           (1,840)         1:A:43:VAL:HG12         1:A:124:VAL:HG22         5         0.04           (1,840)         1:A:43:VAL:HG12         1:A:124:VAL:HG23         5         0.04           (1,840)         1:A:43:VAL:HG13         1:A:124:VAL:HG21         5         0.04           (1,840)         1:A:43:VAL:HG13         1:A:124:VAL:HG22         5         0.04           (1,840)         1:A:43:VAL:HG13         1:A:124:VAL:HG23         5         0.04           (1,840)         1:A:40:LYS:H         1:A:12:LEU:H         1         0.04           (1,84)         1:A:10:LYS:H         1:A:12:LEU:H         7         0.04           (1,84)         1:A:10:LYS:H         1:A:12:LEU:H         7         0.04           (1,834)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:124:VAL:HG21         17         0.04           (1,834)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:124:VAL:HG23         17         0.04           (1,834)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:124:VAL:HG23         17         0.04           (1,834)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:124:VAL:HG23         17         0.04           (1,834)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:124:	( ' /	1:A:43:VAL:HG11	1:A:124:VAL:HG22	5	0.04
(1,840)       1:A:43:VAL:HG12       1:A:124:VAL:HG22       5       0.04         (1,840)       1:A:43:VAL:HG12       1:A:124:VAL:HG23       5       0.04         (1,840)       1:A:43:VAL:HG13       1:A:124:VAL:HG21       5       0.04         (1,840)       1:A:43:VAL:HG13       1:A:124:VAL:HG22       5       0.04         (1,840)       1:A:43:VAL:HG13       1:A:124:VAL:HG23       5       0.04         (1,84)       1:A:10:LYS:H       1:A:12:LEU:H       1       0.04         (1,84)       1:A:10:LYS:H       1:A:12:LEU:H       7       0.04         (1,84)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:124:VAL:HG21       17       0.04         (1,834)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:124:VAL:HG22       17       0.04         (1,834)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:124:VAL:HG21       17       0.04         (1,834)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:124:VAL:HG22       17       0.04         (1,834)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:124:VAL:HG23       17       0.04         (1,834)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:124:VAL:HG23       17       0.04         (1,834)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:124:VAL:HG21       17       0.04	(1,840)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:124:VAL:HG23	5	0.04
(1,840)       1:A:43:VAL:HG12       1:A:124:VAL:HG23       5       0.04         (1,840)       1:A:43:VAL:HG13       1:A:124:VAL:HG21       5       0.04         (1,840)       1:A:43:VAL:HG13       1:A:124:VAL:HG22       5       0.04         (1,840)       1:A:43:VAL:HG13       1:A:124:VAL:HG23       5       0.04         (1,840)       1:A:410:LYS:H       1:A:12:LEU:H       1       0.04         (1,84)       1:A:10:LYS:H       1:A:12:LEU:H       7       0.04         (1,84)       1:A:10:LYS:H       1:A:12:LEU:H       7       0.04         (1,834)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:124:VAL:HG21       17       0.04         (1,834)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:124:VAL:HG23       17       0.04         (1,834)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:124:VAL:HG21       17       0.04         (1,834)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:124:VAL:HG23       17       0.04         (1,834)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:124:VAL:HG23       17       0.04         (1,834)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:124:VAL:HG21       17       0.04         (1,834)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:124:VAL:HG21       17       0.04	( ' /	1:A:43:VAL:HG12	1:A:124:VAL:HG21	5	0.04
(1,840)       1:A:43:VAL:HG13       1:A:124:VAL:HG21       5       0.04         (1,840)       1:A:43:VAL:HG13       1:A:124:VAL:HG22       5       0.04         (1,840)       1:A:43:VAL:HG13       1:A:124:VAL:HG23       5       0.04         (1,84)       1:A:10:LYS:H       1:A:12:LEU:H       1       0.04         (1,84)       1:A:10:LYS:H       1:A:12:LEU:H       7       0.04         (1,84)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:124:VAL:HG21       17       0.04         (1,834)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:124:VAL:HG22       17       0.04         (1,834)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:124:VAL:HG23       17       0.04         (1,834)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:124:VAL:HG21       17       0.04         (1,834)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:124:VAL:HG23       17       0.04         (1,834)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:124:VAL:HG23       17       0.04         (1,834)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:124:VAL:HG21       17       0.04         (1,834)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:124:VAL:HG21       17       0.04	(1,840)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:124:VAL:HG22	5	0.04
(1,840)       1:A:43:VAL:HG13       1:A:124:VAL:HG22       5       0.04         (1,840)       1:A:43:VAL:HG13       1:A:124:VAL:HG23       5       0.04         (1,84)       1:A:10:LYS:H       1:A:12:LEU:H       1       0.04         (1,84)       1:A:10:LYS:H       1:A:12:LEU:H       7       0.04         (1,834)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:124:VAL:HG21       17       0.04         (1,834)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:124:VAL:HG23       17       0.04         (1,834)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:124:VAL:HG21       17       0.04         (1,834)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:124:VAL:HG22       17       0.04         (1,834)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:124:VAL:HG23       17       0.04         (1,834)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:124:VAL:HG23       17       0.04         (1,834)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:124:VAL:HG21       17       0.04	(1,840)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:124:VAL:HG23	5	0.04
(1,840)       1:A:43:VAL:HG13       1:A:124:VAL:HG23       5       0.04         (1,84)       1:A:10:LYS:H       1:A:12:LEU:H       1       0.04         (1,84)       1:A:10:LYS:H       1:A:12:LEU:H       7       0.04         (1,834)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:124:VAL:HG21       17       0.04         (1,834)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:124:VAL:HG22       17       0.04         (1,834)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:124:VAL:HG23       17       0.04         (1,834)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:124:VAL:HG21       17       0.04         (1,834)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:124:VAL:HG23       17       0.04         (1,834)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:124:VAL:HG23       17       0.04         (1,834)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:124:VAL:HG21       17       0.04	(1,840)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:124:VAL:HG21	5	0.04
(1,84)       1:A:10:LYS:H       1:A:12:LEU:H       1       0.04         (1,84)       1:A:10:LYS:H       1:A:12:LEU:H       7       0.04         (1,834)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:124:VAL:HG21       17       0.04         (1,834)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:124:VAL:HG22       17       0.04         (1,834)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:124:VAL:HG23       17       0.04         (1,834)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:124:VAL:HG21       17       0.04         (1,834)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:124:VAL:HG23       17       0.04         (1,834)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:124:VAL:HG23       17       0.04         (1,834)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:124:VAL:HG21       17       0.04	(1,840)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:124:VAL:HG22	5	0.04
(1,84)       1:A:10:LYS:H       1:A:12:LEU:H       1       0.04         (1,84)       1:A:10:LYS:H       1:A:12:LEU:H       7       0.04         (1,834)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:124:VAL:HG21       17       0.04         (1,834)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:124:VAL:HG22       17       0.04         (1,834)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:124:VAL:HG23       17       0.04         (1,834)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:124:VAL:HG21       17       0.04         (1,834)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:124:VAL:HG23       17       0.04         (1,834)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:124:VAL:HG23       17       0.04         (1,834)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:124:VAL:HG21       17       0.04	· · /	1:A:43:VAL:HG13	1:A:124:VAL:HG23	5	0.04
(1,84)       1:A:10:LYS:H       1:A:12:LEU:H       7       0.04         (1,834)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:124:VAL:HG21       17       0.04         (1,834)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:124:VAL:HG22       17       0.04         (1,834)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:124:VAL:HG23       17       0.04         (1,834)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:124:VAL:HG21       17       0.04         (1,834)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:124:VAL:HG22       17       0.04         (1,834)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:124:VAL:HG23       17       0.04         (1,834)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:124:VAL:HG21       17       0.04	, , ,	1:A:10:LYS:H	1:A:12:LEU:H	1	0.04
(1,834)     1:A:41:LEU:HD11     1:A:124:VAL:HG21     17     0.04       (1,834)     1:A:41:LEU:HD11     1:A:124:VAL:HG22     17     0.04       (1,834)     1:A:41:LEU:HD11     1:A:124:VAL:HG23     17     0.04       (1,834)     1:A:41:LEU:HD12     1:A:124:VAL:HG21     17     0.04       (1,834)     1:A:41:LEU:HD12     1:A:124:VAL:HG22     17     0.04       (1,834)     1:A:41:LEU:HD12     1:A:124:VAL:HG23     17     0.04       (1,834)     1:A:41:LEU:HD13     1:A:124:VAL:HG21     17     0.04	, ,	1:A:10:LYS:H	1:A:12:LEU:H		
(1,834)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:124:VAL:HG22       17       0.04         (1,834)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:124:VAL:HG23       17       0.04         (1,834)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:124:VAL:HG21       17       0.04         (1,834)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:124:VAL:HG22       17       0.04         (1,834)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:124:VAL:HG23       17       0.04         (1,834)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:124:VAL:HG21       17       0.04		1:A:41:LEU:HD11	1:A:124:VAL:HG21	17	
(1,834)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:124:VAL:HG23       17       0.04         (1,834)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:124:VAL:HG21       17       0.04         (1,834)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:124:VAL:HG22       17       0.04         (1,834)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:124:VAL:HG23       17       0.04         (1,834)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:124:VAL:HG21       17       0.04	( ' /	1:A:41:LEU:HD11	1:A:124:VAL:HG22	17	
(1,834)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:124:VAL:HG21       17       0.04         (1,834)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:124:VAL:HG22       17       0.04         (1,834)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:124:VAL:HG23       17       0.04         (1,834)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:124:VAL:HG21       17       0.04         (1,834)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:124:VAL:HG21       17       0.04	· · /	1:A:41:LEU:HD11	1:A:124:VAL:HG23		
(1,834)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:124:VAL:HG22       17       0.04         (1,834)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:124:VAL:HG23       17       0.04         (1,834)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:124:VAL:HG21       17       0.04	· · /	1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:HG21	17	0.04
(1,834)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:124:VAL:HG23       17       0.04         (1,834)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:124:VAL:HG21       17       0.04	· · /	1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:HG22		
(1,834) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:HG21 17 0.04	· · /	1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:HG23	17	0.04
	· · /	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:HG21		
· , , , ,	(1,834)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:HG22	17	0.04



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

(1,834) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:HG23 17 0.04 (1,832) 1:A:42:TYR:H 1:A:124:VAL:HG21 9 0.04 (1,832) 1:A:42:TYR:H 1:A:124:VAL:HG22 9 0.04 (1,831) 1:A:42:TYR:H 1:A:124:VAL:HG23 9 0.04 (1,831) 1:A:43:VAL:H 1:A:124:VAL:HG21 20 0.04 (1,831) 1:A:43:VAL:H 1:A:124:VAL:HG21 20 0.04 (1,831) 1:A:43:VAL:H 1:A:124:VAL:HG22 20 0.04 (1,831) 1:A:43:VAL:H 1:A:124:VAL:HG23 20 0.04 (1,831) 1:A:9:ILE:H 1:A:124:VAL:HG23 20 0.04 (1,831) 1:A:9:ILE:H 1:A:124:VAL:HG23 20 0.04 (1,831) 1:A:9:ILE:H 1:A:12:LEU:H 10 0.04 (1,83) 1:A:9:ILE:H 1:A:12:LEU:H 10 0.04 (1,83) 1:A:9:ILE:H 1:A:12:LEU:H 10 0.04 (1,83) 1:A:9:ILE:H 1:A:12:LEU:H 10 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD11 10 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD12 10 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD13 10 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD11 10 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD11 10 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD11 10 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD11 10 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD13 10 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD13 10 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD11 13 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD11 13 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD11 13 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD11 13 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD11 13 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD11 13 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD11 14 0.04 (1,821) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD11 14 0.04 (1,821) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD11 14 0.04 (1,821) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD11 14 0.04 (1,821) 1:A:13:VAL:HG23 1:A:14:LE:HD11 4 0.04 (1,821) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,832) 1:A:42:TYR:H 1:A:124:VAL:HG22 9 0.04 (1,832) 1:A:42:TYR:H 1:A:124:VAL:HG23 9 0.04 (1,831) 1:A:43:VAL:H 1:A:124:VAL:HG21 20 0.04 (1,831) 1:A:43:VAL:H 1:A:124:VAL:HG21 20 0.04 (1,831) 1:A:43:VAL:H 1:A:124:VAL:HG22 20 0.04 (1,831) 1:A:43:VAL:H 1:A:124:VAL:HG23 20 0.04 (1,83) 1:A:9:ILE:H 1:A:124:VAL:HG23 20 0.04 (1,83) 1:A:9:ILE:H 1:A:124:LEU:H 10 0.04 (1,83) 1:A:9:ILE:H 1:A:12:LEU:H 11 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD11 10 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD11 10 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD13 10 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD11 10 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD11 10 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD12 10 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD11 13 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD13 10 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD11 13 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD11 13 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD11 13 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD11 13 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD11 14 0.04 (1,821) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD11 14 0.04 (1,821) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD11 14 0.04 (1,821) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD11 14 0.04 (1,821) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD11 4 0.04 (1,821) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD11 4 0.04 (1,821) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:ILE:HD11 4 0.04 (1,821	(1,834)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:HG23	17	0.04
(1,832)         1:A:42:TYR:H         1:A:124:VAL:HG21         20         0.04           (1,831)         1:A:43:VAL:H         1:A:124:VAL:HG21         20         0.04           (1,831)         1:A:43:VAL:H         1:A:124:VAL:HG22         0.04           (1,831)         1:A:102:VAL:HG21         1:A:112:LEU:HD11         10         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG21         1:A:112:LEU:HD12         10         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG22         1:A:112:LEU:HD13         10         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG22         1:A:112:LEU:HD13         10         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD13         10         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD13         10         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LE	(1,832)	1:A:42:TYR:H	1:A:124:VAL:HG21	9	0.04
(1,831) 1:A:43:VAL:H 1:A:124:VAL:HG21 20 0.04 (1,831) 1:A:43:VAL:H 1:A:124:VAL:HG22 20 0.04 (1,831) 1:A:43:VAL:H 1:A:124:VAL:HG22 20 0.04 (1,831) 1:A:43:VAL:H 1:A:124:VAL:HG23 20 0.04 (1,83) 1:A:9:ILE:H 1:A:124:VAL:HG23 20 0.04 (1,83) 1:A:9:ILE:H 1:A:124:EU:H 10 0.04 (1,83) 1:A:9:ILE:H 1:A:125:EU:H 14 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD11 10 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD12 10 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD13 10 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD13 10 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD13 10 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD11 10 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD11 10 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD13 10 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD13 10 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD11 10 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD13 10 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD13 10 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD13 10 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD13 10 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD13 13 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD11 13 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD13 13 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD13 13 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD13 13 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD11 13 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD11 13 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD11 13 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD11 13 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD11 13 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD11 14 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD11 14 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD11 14 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD12 14 0.04 (1,821) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD11 4 0.04 (1,821) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD11 4 0.04 (1,821) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD11 4 0.04 (1,821) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD11 4 0.04 (1,821) 1	(1,832)	1:A:42:TYR:H	1:A:124:VAL:HG22	9	0.04
(1,831) 1:A:43:VAL:H 1:A:124:VAL:HG22 20 0.04 (1,831) 1:A:43:VAL:H 1:A:124:VAL:HG23 20 0.04 (1,831) 1:A:9:ILE:H 1:A:12:LEU:H 10 0.04 (1,83) 1:A:9:ILE:H 1:A:12:LEU:H 10 0.04 (1,839) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD11 10 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD11 10 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD11 10 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD13 10 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD11 10 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD11 10 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD11 10 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD12 10 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD13 10 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD13 10 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD11 10 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD11 10 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD13 10 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD11 13 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD13 13 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD13 13 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD11 13 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD13 13 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD11 13 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD11 13 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD13 13 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD13 13 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD11 13 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD14 14 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD14 14 0.04 (1,821) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD11 4 0.04 (1,821) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD11 4 0.04 (1,821) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD11 4 0.04 (1,821) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD11 4	(1,832)	1:A:42:TYR:H	1:A:124:VAL:HG23	9	0.04
(1,831)         1:A:43:VAL:H         1:A:124:VAL:HG23         20         0.04           (1,83)         1:A:9:ILE:H         1:A:12:LEU:H         10         0.04           (1,83)         1:A:9:ILE:H         1:A:12:LEU:H         10         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG21         1:A:112:LEU:HD11         10         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG21         1:A:112:LEU:HD13         10         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG22         1:A:112:LEU:HD11         10         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG22         1:A:112:LEU:HD11         10         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG22         1:A:112:LEU:HD11         10         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG22         1:A:112:LEU:HD13         10         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD13         10         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD13         10         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD13         10         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG21         1:A:112:LEU:HD13         13         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG22 <td>(1,831)</td> <td>1:A:43:VAL:H</td> <td>1:A:124:VAL:HG21</td> <td>20</td> <td>0.04</td>	(1,831)	1:A:43:VAL:H	1:A:124:VAL:HG21	20	0.04
(1,83) 1:A:9:ILE:H 1:A:12:LEU:H 10 0.04 (1,83) 1:A:9:ILE:H 1:A:12:LEU:H 14 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD11 10 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD12 10 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD13 10 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD11 10 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD11 10 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD11 10 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD13 10 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD13 10 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD13 10 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD11 10 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD11 10 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD11 10 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD13 10 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD11 13 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD11 13 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD11 13 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD11 13 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD11 14 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD11 14 0.04 (1,821) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD11 4 0.04 (1,821) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD11 4 0.04 (1,82	(1,831)	1:A:43:VAL:H	1:A:124:VAL:HG22	20	0.04
(1,83) 1:A:9:ILE:H 1:A:12:LEU:H 14 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD11 10 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD12 10 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD13 10 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD11 10 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD11 10 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD11 10 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD13 10 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD13 10 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD13 10 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD11 10 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD11 10 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD11 10 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD13 10 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD13 10 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD11 13 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD11 13 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD11 13 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD11 13 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD11 14 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD11 14 0.04 (1,821) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:ILE:HD11 4 0.04 (1,821) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:ILE:HD11 4 0.04 (	(1,831)	1:A:43:VAL:H	1:A:124:VAL:HG23	20	0.04
(1,829) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD11 10 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD12 10 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD13 10 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD11 10 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD11 10 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD12 10 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD13 10 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD11 10 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD11 10 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD11 10 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD13 10 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD13 10 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD11 13 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD11 13 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD12 13 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD13 13 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD11 13 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD11 14 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD11 14 0.04 (1,821) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:43:VAL:HG21 1:A:41:LE:HD11 4 0.04 (1,821) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:LE:HD11 4 0.04 (1,821) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:LE:HD11 4 0.04 (1,821) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:LE:HD11 4 0.04 (1,821) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:LE:HD11 4 0.04 (1,821) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:LE:HD11 4 0.04 (1,821) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:LE:HD11 4 0.04 (1,821) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:LE:HD11 4 0.04 (1,821) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:LE:HD11 4 0.04 (1,821) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:LE:HD11 4 0.04 (1,821) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:LE:HD11 4 0.04 (1,821) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:LE:HD	(1,83)	1:A:9:ILE:H	1:A:12:LEU:H	10	0.04
(1,829) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD12 10 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD11 10 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD11 10 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD12 10 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD13 10 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD13 10 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD11 10 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD11 10 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD12 10 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD13 10 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD13 10 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD11 13 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD11 13 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD13 13 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD13 13 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD11 13 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD13 13 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD13 13 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD11 13 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD11 13 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD11 14 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD11 14 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD13 13 0.04 (1,829) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD13 14 0.04 (1,821) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:LE:HD11 4 0.04 (1,821) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:LE:HD11 4 0.04 (1,821) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:45:LE:HD11 4 0.04 (1,821) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:45:LE:HD11 4 0.04 (1,821) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:LE:HD11 4 0.04 (1,821) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:LE:HD11 4 0.04 (1,821) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:45:LE:HD11 4 0.04 (1,821	(1,83)	1:A:9:ILE:H	1:A:12:LEU:H	14	0.04
(1,829)         1:A:102:VAL:HG21         1:A:112:LEU:HD13         10         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG22         1:A:112:LEU:HD11         10         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG22         1:A:112:LEU:HD12         10         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD13         10         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD11         10         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD13         10         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG21         1:A:112:LEU:HD13         10         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG21         1:A:112:LEU:HD11         13         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG21         1:A:112:LEU:HD12         13         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG21         1:A:112:LEU:HD13         13         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG22         1:A:112:LEU:HD12         13         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG22         1:A:112:LEU:HD13         13         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD13         13         0.04           (1,829)	(1,829)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:112:LEU:HD11	10	0.04
(1,829)         1:A:102:VAL:HG22         1:A:112:LEU:HD11         10         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG22         1:A:112:LEU:HD12         10         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG22         1:A:112:LEU:HD13         10         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD11         10         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD12         10         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD13         10         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG21         1:A:112:LEU:HD13         10         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG21         1:A:112:LEU:HD12         13         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG21         1:A:112:LEU:HD13         13         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG22         1:A:112:LEU:HD11         13         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG22         1:A:112:LEU:HD11         13         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD13         13         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD13         13         0.04           (1,829)	(1,829)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:112:LEU:HD12	10	0.04
(1,829)         1:A:102:VAL:HG22         1:A:112:LEU:HD12         10         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG22         1:A:112:LEU:HD13         10         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD11         10         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD12         10         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD13         10         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG21         1:A:112:LEU:HD11         13         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG21         1:A:112:LEU:HD12         13         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG21         1:A:112:LEU:HD13         13         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG22         1:A:112:LEU:HD11         13         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG22         1:A:112:LEU:HD12         13         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD13         13         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD13         13         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD13         13         0.04           (1,829)	(1,829)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:112:LEU:HD13	10	0.04
(1,829)         1:A:102:VAL:HG22         1:A:112:LEU:HD13         10         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD11         10         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD12         10         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD13         10         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG21         1:A:112:LEU:HD11         13         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG21         1:A:112:LEU:HD12         13         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG21         1:A:112:LEU:HD13         13         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG22         1:A:112:LEU:HD11         13         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG22         1:A:112:LEU:HD12         13         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG22         1:A:112:LEU:HD13         13         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD13         13         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD13         13         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD13         13         0.04           (1,829)	(1,829)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:112:LEU:HD11	10	0.04
(1,829)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD11         10         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD12         10         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD13         10         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG21         1:A:112:LEU:HD11         13         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG21         1:A:112:LEU:HD12         13         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG21         1:A:112:LEU:HD13         13         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG22         1:A:112:LEU:HD11         13         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG22         1:A:112:LEU:HD12         13         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG22         1:A:112:LEU:HD13         13         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD11         13         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD13         13         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD13         13         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD13         13         0.04           (1,829)	(1,829)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:112:LEU:HD12	10	0.04
(1,829)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD12         10         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD13         10         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG21         1:A:112:LEU:HD11         13         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG21         1:A:112:LEU:HD12         13         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG22         1:A:112:LEU:HD13         13         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG22         1:A:112:LEU:HD11         13         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG22         1:A:112:LEU:HD12         13         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD13         13         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD11         13         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD12         13         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD13         13         0.04           (1,829)         1:A:109:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD13         13         0.04           (1,825)         1:A:90:VAL:HG21         1:A:491:ARG:H         6         0.04           (1,821)         1	(1,829)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:112:LEU:HD13	10	0.04
(1,829)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD13         10         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG21         1:A:112:LEU:HD11         13         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG21         1:A:112:LEU:HD12         13         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG21         1:A:112:LEU:HD13         13         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG22         1:A:112:LEU:HD11         13         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG22         1:A:112:LEU:HD12         13         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG22         1:A:112:LEU:HD13         13         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD11         13         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD11         13         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD12         13         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD13         13         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD13         13         0.04           (1,825)         1:A:90:VAL:HG21         1:A:91:ARG:H         6         0.04           (1,825)         1:	(1,829)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:112:LEU:HD11	10	0.04
(1,829)         1:A:102:VAL:HG21         1:A:112:LEU:HD11         13         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG21         1:A:112:LEU:HD12         13         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG21         1:A:112:LEU:HD13         13         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG22         1:A:112:LEU:HD11         13         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG22         1:A:112:LEU:HD12         13         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD13         13         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD11         13         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD13         13         0.04           (1,825)         1:A:90:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD13         13         0.04           (1,825)         1:A:90:VAL:HG23         1:A:91:ARG:H         6         0.04           (1,821)         1:A	(1,829)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:112:LEU:HD12	10	0.04
(1,829)         1:A:102:VAL:HG21         1:A:112:LEU:HD12         13         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG21         1:A:112:LEU:HD13         13         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG22         1:A:112:LEU:HD11         13         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG22         1:A:112:LEU:HD12         13         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG22         1:A:112:LEU:HD13         13         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD11         13         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD12         13         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD13         13         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD13         13         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:91:ARG:H         6         0.04           (1,825)         1:A:90:VAL:HG21         1:A:91:ARG:H         6         0.04           (1,825)         1:A:90:VAL:HG23         1:A:491:ARG:H         6         0.04           (1,821)         1:A:43:VAL:HG21         1:A:45:ILE:HD11         4         0.04           (1,821)         1:A:43:VAL:HG22	· · /	1:A:102:VAL:HG23	1:A:112:LEU:HD13	10	0.04
(1,829)         1:A:102:VAL:HG21         1:A:112:LEU:HD13         13         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG22         1:A:112:LEU:HD11         13         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG22         1:A:112:LEU:HD12         13         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG22         1:A:112:LEU:HD13         13         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD11         13         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD12         13         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD13         13         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD13         13         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD13         13         0.04           (1,825)         1:A:90:VAL:HG21         1:A:49:IARG:H         6         0.04           (1,825)         1:A:90:VAL:HG22         1:A:49:IARG:H         6         0.04           (1,821)         1:A:43:VAL:HG21         1:A:45:ILE:HD11         4         0.04           (1,821)         1:A:43:VAL:HG22         1:A:45:ILE:HD12         4         0.04           (1,821)         1:A:43:VAL:H	(1,829)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:112:LEU:HD11	13	0.04
(1,829)         1:A:102:VAL:HG22         1:A:112:LEU:HD11         13         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG22         1:A:112:LEU:HD12         13         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG22         1:A:112:LEU:HD13         13         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD11         13         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD12         13         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD13         13         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD13         13         0.04           (1,829)         1:A:90:VAL:HG21         1:A:91:ARG:H         6         0.04           (1,825)         1:A:90:VAL:HG22         1:A:91:ARG:H         6         0.04           (1,825)         1:A:90:VAL:HG23         1:A:49:LE:HD11         4         0.04           (1,821)         1:A:43:VAL:HG21         1:A:45:LE:HD12         4         0.04           (1,821)         1:A:43:VAL:HG21         1:A:45:LE:HD13         4         0.04           (1,821)         1:A:43:VAL:HG22         1:A:45:LE:HD12         4         0.04           (1,821)         1:A:43:VAL:HG23	(1,829)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:112:LEU:HD12	13	0.04
(1,829)         1:A:102:VAL:HG22         1:A:112:LEU:HD12         13         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG22         1:A:112:LEU:HD13         13         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD11         13         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD12         13         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD13         13         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD13         13         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG21         1:A:91:ARG:H         6         0.04           (1,825)         1:A:90:VAL:HG22         1:A:91:ARG:H         6         0.04           (1,825)         1:A:90:VAL:HG23         1:A:91:ARG:H         6         0.04           (1,821)         1:A:43:VAL:HG21         1:A:45:ILE:HD11         4         0.04           (1,821)         1:A:43:VAL:HG21         1:A:45:ILE:HD13         4         0.04           (1,821)         1:A:43:VAL:HG22         1:A:45:ILE:HD11         4         0.04           (1,821)         1:A:43:VAL:HG23         1:A:45:ILE:HD13         4         0.04           (1,821)         1:A:43:VAL:HG23	(1,829)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:112:LEU:HD13	13	0.04
(1,829)         1:A:102:VAL:HG22         1:A:112:LEU:HD13         13         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD11         13         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD12         13         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD13         13         0.04           (1,829)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD13         13         0.04           (1,825)         1:A:90:VAL:HG21         1:A:91:ARG:H         6         0.04           (1,825)         1:A:90:VAL:HG22         1:A:91:ARG:H         6         0.04           (1,825)         1:A:90:VAL:HG23         1:A:91:ARG:H         6         0.04           (1,821)         1:A:43:VAL:HG21         1:A:45:ILE:HD11         4         0.04           (1,821)         1:A:43:VAL:HG21         1:A:45:ILE:HD13         4         0.04           (1,821)         1:A:43:VAL:HG22         1:A:45:ILE:HD12         4         0.04           (1,821)         1:A:43:VAL:HG23         1:A:45:ILE:HD13         4         0.04           (1,821)         1:A:43:VAL:HG23         1:A:45:ILE:HD11         4         0.04           (1,821)         1:A:43:VAL:HG23	(1,829)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:112:LEU:HD11	13	0.04
(1,829)       1:A:102:VAL:HG23       1:A:112:LEU:HD11       13       0.04         (1,829)       1:A:102:VAL:HG23       1:A:112:LEU:HD12       13       0.04         (1,829)       1:A:102:VAL:HG23       1:A:112:LEU:HD13       13       0.04         (1,829)       1:A:102:VAL:HG23       1:A:112:LEU:HD13       13       0.04         (1,825)       1:A:90:VAL:HG21       1:A:91:ARG:H       6       0.04         (1,825)       1:A:90:VAL:HG23       1:A:91:ARG:H       6       0.04         (1,821)       1:A:43:VAL:HG21       1:A:45:ILE:HD11       4       0.04         (1,821)       1:A:43:VAL:HG21       1:A:45:ILE:HD12       4       0.04         (1,821)       1:A:43:VAL:HG21       1:A:45:ILE:HD13       4       0.04         (1,821)       1:A:43:VAL:HG22       1:A:45:ILE:HD12       4       0.04         (1,821)       1:A:43:VAL:HG22       1:A:45:ILE:HD13       4       0.04         (1,821)       1:A:43:VAL:HG23       1:A:45:ILE:HD11       4       0.04         (1,821)       1:A:43:VAL:HG23       1:A:45:ILE:HD11       4       0.04         (1,821)       1:A:43:VAL:HG23       1:A:45:ILE:HD13       4       0.04         (1,821)       1:A:43:VAL:H	(1,829)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:112:LEU:HD12	13	0.04
(1,829)       1:A:102:VAL:HG23       1:A:112:LEU:HD12       13       0.04         (1,829)       1:A:102:VAL:HG23       1:A:112:LEU:HD13       13       0.04         (1,825)       1:A:90:VAL:HG21       1:A:91:ARG:H       6       0.04         (1,825)       1:A:90:VAL:HG22       1:A:91:ARG:H       6       0.04         (1,825)       1:A:90:VAL:HG23       1:A:91:ARG:H       6       0.04         (1,821)       1:A:43:VAL:HG21       1:A:45:ILE:HD11       4       0.04         (1,821)       1:A:43:VAL:HG21       1:A:45:ILE:HD12       4       0.04         (1,821)       1:A:43:VAL:HG21       1:A:45:ILE:HD13       4       0.04         (1,821)       1:A:43:VAL:HG22       1:A:45:ILE:HD11       4       0.04         (1,821)       1:A:43:VAL:HG22       1:A:45:ILE:HD12       4       0.04         (1,821)       1:A:43:VAL:HG23       1:A:45:ILE:HD13       4       0.04         (1,821)       1:A:43:VAL:HG23       1:A:45:ILE:HD11       4       0.04         (1,821)       1:A:43:VAL:HG23       1:A:45:ILE:HD13       4       0.04         (1,821)       1:A:43:VAL:HG23       1:A:45:ILE:HD13       4       0.04         (1,821)       1:A:43:VAL:HG23	(1,829)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:112:LEU:HD13	13	0.04
(1,829)       1:A:102:VAL:HG23       1:A:112:LEU:HD13       13       0.04         (1,825)       1:A:90:VAL:HG21       1:A:91:ARG:H       6       0.04         (1,825)       1:A:90:VAL:HG22       1:A:91:ARG:H       6       0.04         (1,825)       1:A:90:VAL:HG23       1:A:91:ARG:H       6       0.04         (1,821)       1:A:43:VAL:HG21       1:A:45:ILE:HD11       4       0.04         (1,821)       1:A:43:VAL:HG21       1:A:45:ILE:HD12       4       0.04         (1,821)       1:A:43:VAL:HG21       1:A:45:ILE:HD13       4       0.04         (1,821)       1:A:43:VAL:HG22       1:A:45:ILE:HD11       4       0.04         (1,821)       1:A:43:VAL:HG22       1:A:45:ILE:HD12       4       0.04         (1,821)       1:A:43:VAL:HG23       1:A:45:ILE:HD13       4       0.04         (1,821)       1:A:43:VAL:HG23       1:A:45:ILE:HD11       4       0.04         (1,821)       1:A:43:VAL:HG23       1:A:45:ILE:HD12       4       0.04         (1,821)       1:A:43:VAL:HG23       1:A:45:ILE:HD13       4       0.04         (1,821)       1:A:43:VAL:HG23       1:A:45:ILE:HD13       4       0.04         (1,817)       1:A:19:VAL:HG21	(1,829)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:112:LEU:HD11	13	0.04
(1,825)         1:A:90:VAL:HG21         1:A:91:ARG:H         6         0.04           (1,825)         1:A:90:VAL:HG22         1:A:91:ARG:H         6         0.04           (1,825)         1:A:90:VAL:HG23         1:A:91:ARG:H         6         0.04           (1,821)         1:A:43:VAL:HG21         1:A:45:ILE:HD11         4         0.04           (1,821)         1:A:43:VAL:HG21         1:A:45:ILE:HD12         4         0.04           (1,821)         1:A:43:VAL:HG21         1:A:45:ILE:HD13         4         0.04           (1,821)         1:A:43:VAL:HG22         1:A:45:ILE:HD11         4         0.04           (1,821)         1:A:43:VAL:HG22         1:A:45:ILE:HD12         4         0.04           (1,821)         1:A:43:VAL:HG23         1:A:45:ILE:HD13         4         0.04           (1,821)         1:A:43:VAL:HG23         1:A:45:ILE:HD12         4         0.04           (1,821)         1:A:43:VAL:HG23         1:A:45:ILE:HD13         4         0.04           (1,821)         1:A:43:VAL:HG23         1:A:45:ILE:HD13         4         0.04           (1,821)         1:A:43:VAL:HG23         1:A:45:ILE:HD13         4         0.04           (1,821)         1:A:43:VAL:HG23         1:A:20:THR:	(1,829)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:112:LEU:HD12	13	0.04
(1,825)       1:A:90:VAL:HG22       1:A:91:ARG:H       6       0.04         (1,825)       1:A:90:VAL:HG23       1:A:91:ARG:H       6       0.04         (1,821)       1:A:43:VAL:HG21       1:A:45:ILE:HD11       4       0.04         (1,821)       1:A:43:VAL:HG21       1:A:45:ILE:HD12       4       0.04         (1,821)       1:A:43:VAL:HG21       1:A:45:ILE:HD13       4       0.04         (1,821)       1:A:43:VAL:HG22       1:A:45:ILE:HD11       4       0.04         (1,821)       1:A:43:VAL:HG22       1:A:45:ILE:HD12       4       0.04         (1,821)       1:A:43:VAL:HG22       1:A:45:ILE:HD13       4       0.04         (1,821)       1:A:43:VAL:HG23       1:A:45:ILE:HD11       4       0.04         (1,821)       1:A:43:VAL:HG23       1:A:45:ILE:HD12       4       0.04         (1,821)       1:A:43:VAL:HG23       1:A:45:ILE:HD13       4       0.04         (1,821)       1:A:43:VAL:HG23       1:A:45:ILE:HD13       4       0.04         (1,817)       1:A:19:VAL:HG21       1:A:20:THR:H       9       0.04         (1,817)       1:A:19:VAL:HG22       1:A:20:THR:H       9       0.04	(1,829)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:112:LEU:HD13	13	0.04
(1,825)       1:A:90:VAL:HG23       1:A:91:ARG:H       6       0.04         (1,821)       1:A:43:VAL:HG21       1:A:45:ILE:HD11       4       0.04         (1,821)       1:A:43:VAL:HG21       1:A:45:ILE:HD12       4       0.04         (1,821)       1:A:43:VAL:HG21       1:A:45:ILE:HD13       4       0.04         (1,821)       1:A:43:VAL:HG22       1:A:45:ILE:HD11       4       0.04         (1,821)       1:A:43:VAL:HG22       1:A:45:ILE:HD12       4       0.04         (1,821)       1:A:43:VAL:HG23       1:A:45:ILE:HD13       4       0.04         (1,821)       1:A:43:VAL:HG23       1:A:45:ILE:HD11       4       0.04         (1,821)       1:A:43:VAL:HG23       1:A:45:ILE:HD12       4       0.04         (1,821)       1:A:43:VAL:HG23       1:A:45:ILE:HD13       4       0.04         (1,821)       1:A:43:VAL:HG23       1:A:45:ILE:HD13       4       0.04         (1,817)       1:A:19:VAL:HG21       1:A:20:THR:H       9       0.04         (1,817)       1:A:19:VAL:HG22       1:A:20:THR:H       9       0.04	(1,825)	1:A:90:VAL:HG21	1:A:91:ARG:H	6	0.04
(1,821)       1:A:43:VAL:HG21       1:A:45:ILE:HD11       4       0.04         (1,821)       1:A:43:VAL:HG21       1:A:45:ILE:HD12       4       0.04         (1,821)       1:A:43:VAL:HG21       1:A:45:ILE:HD13       4       0.04         (1,821)       1:A:43:VAL:HG22       1:A:45:ILE:HD11       4       0.04         (1,821)       1:A:43:VAL:HG22       1:A:45:ILE:HD12       4       0.04         (1,821)       1:A:43:VAL:HG22       1:A:45:ILE:HD13       4       0.04         (1,821)       1:A:43:VAL:HG23       1:A:45:ILE:HD11       4       0.04         (1,821)       1:A:43:VAL:HG23       1:A:45:ILE:HD12       4       0.04         (1,821)       1:A:43:VAL:HG23       1:A:45:ILE:HD13       4       0.04         (1,821)       1:A:43:VAL:HG23       1:A:45:ILE:HD13       4       0.04         (1,821)       1:A:43:VAL:HG23       1:A:45:ILE:HD13       4       0.04         (1,817)       1:A:19:VAL:HG21       1:A:20:THR:H       9       0.04         (1,817)       1:A:19:VAL:HG22       1:A:20:THR:H       9       0.04	(1,825)	1:A:90:VAL:HG22	1:A:91:ARG:H	6	0.04
(1,821)       1:A:43:VAL:HG21       1:A:45:ILE:HD12       4       0.04         (1,821)       1:A:43:VAL:HG21       1:A:45:ILE:HD13       4       0.04         (1,821)       1:A:43:VAL:HG22       1:A:45:ILE:HD11       4       0.04         (1,821)       1:A:43:VAL:HG22       1:A:45:ILE:HD12       4       0.04         (1,821)       1:A:43:VAL:HG22       1:A:45:ILE:HD13       4       0.04         (1,821)       1:A:43:VAL:HG23       1:A:45:ILE:HD11       4       0.04         (1,821)       1:A:43:VAL:HG23       1:A:45:ILE:HD12       4       0.04         (1,821)       1:A:43:VAL:HG23       1:A:45:ILE:HD13       4       0.04         (1,821)       1:A:43:VAL:HG23       1:A:45:ILE:HD13       4       0.04         (1,817)       1:A:19:VAL:HG21       1:A:20:THR:H       9       0.04         (1,817)       1:A:19:VAL:HG22       1:A:20:THR:H       9       0.04	(1,825)	1:A:90:VAL:HG23	1:A:91:ARG:H	6	0.04
(1,821)       1:A:43:VAL:HG21       1:A:45:ILE:HD13       4       0.04         (1,821)       1:A:43:VAL:HG22       1:A:45:ILE:HD11       4       0.04         (1,821)       1:A:43:VAL:HG22       1:A:45:ILE:HD12       4       0.04         (1,821)       1:A:43:VAL:HG22       1:A:45:ILE:HD13       4       0.04         (1,821)       1:A:43:VAL:HG23       1:A:45:ILE:HD11       4       0.04         (1,821)       1:A:43:VAL:HG23       1:A:45:ILE:HD12       4       0.04         (1,821)       1:A:43:VAL:HG23       1:A:45:ILE:HD13       4       0.04         (1,821)       1:A:43:VAL:HG23       1:A:45:ILE:HD13       4       0.04         (1,817)       1:A:19:VAL:HG21       1:A:20:THR:H       9       0.04         (1,817)       1:A:19:VAL:HG22       1:A:20:THR:H       9       0.04	(1,821)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:45:ILE:HD11	4	0.04
(1,821)       1:A:43:VAL:HG22       1:A:45:ILE:HD11       4       0.04         (1,821)       1:A:43:VAL:HG22       1:A:45:ILE:HD12       4       0.04         (1,821)       1:A:43:VAL:HG22       1:A:45:ILE:HD13       4       0.04         (1,821)       1:A:43:VAL:HG23       1:A:45:ILE:HD11       4       0.04         (1,821)       1:A:43:VAL:HG23       1:A:45:ILE:HD12       4       0.04         (1,821)       1:A:43:VAL:HG23       1:A:45:ILE:HD13       4       0.04         (1,817)       1:A:19:VAL:HG21       1:A:20:THR:H       9       0.04         (1,817)       1:A:19:VAL:HG22       1:A:20:THR:H       9       0.04	(1,821)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:45:ILE:HD12	4	0.04
(1,821)       1:A:43:VAL:HG22       1:A:45:ILE:HD12       4       0.04         (1,821)       1:A:43:VAL:HG22       1:A:45:ILE:HD13       4       0.04         (1,821)       1:A:43:VAL:HG23       1:A:45:ILE:HD11       4       0.04         (1,821)       1:A:43:VAL:HG23       1:A:45:ILE:HD12       4       0.04         (1,821)       1:A:43:VAL:HG23       1:A:45:ILE:HD13       4       0.04         (1,821)       1:A:43:VAL:HG23       1:A:45:ILE:HD13       4       0.04         (1,817)       1:A:19:VAL:HG21       1:A:20:THR:H       9       0.04         (1,817)       1:A:19:VAL:HG22       1:A:20:THR:H       9       0.04	(1,821)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:45:ILE:HD13	4	0.04
(1,821)       1:A:43:VAL:HG22       1:A:45:ILE:HD12       4       0.04         (1,821)       1:A:43:VAL:HG22       1:A:45:ILE:HD13       4       0.04         (1,821)       1:A:43:VAL:HG23       1:A:45:ILE:HD11       4       0.04         (1,821)       1:A:43:VAL:HG23       1:A:45:ILE:HD12       4       0.04         (1,821)       1:A:43:VAL:HG23       1:A:45:ILE:HD13       4       0.04         (1,817)       1:A:19:VAL:HG21       1:A:20:THR:H       9       0.04         (1,817)       1:A:19:VAL:HG22       1:A:20:THR:H       9       0.04		1:A:43:VAL:HG22	1:A:45:ILE:HD11	4	0.04
(1,821)       1:A:43:VAL:HG23       1:A:45:ILE:HD11       4       0.04         (1,821)       1:A:43:VAL:HG23       1:A:45:ILE:HD12       4       0.04         (1,821)       1:A:43:VAL:HG23       1:A:45:ILE:HD13       4       0.04         (1,817)       1:A:19:VAL:HG21       1:A:20:THR:H       9       0.04         (1,817)       1:A:19:VAL:HG22       1:A:20:THR:H       9       0.04		1:A:43:VAL:HG22	1:A:45:ILE:HD12	4	0.04
(1,821)       1:A:43:VAL:HG23       1:A:45:ILE:HD11       4       0.04         (1,821)       1:A:43:VAL:HG23       1:A:45:ILE:HD12       4       0.04         (1,821)       1:A:43:VAL:HG23       1:A:45:ILE:HD13       4       0.04         (1,817)       1:A:19:VAL:HG21       1:A:20:THR:H       9       0.04         (1,817)       1:A:19:VAL:HG22       1:A:20:THR:H       9       0.04	(1,821)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:45:ILE:HD13	4	0.04
(1,821)       1:A:43:VAL:HG23       1:A:45:ILE:HD12       4       0.04         (1,821)       1:A:43:VAL:HG23       1:A:45:ILE:HD13       4       0.04         (1,817)       1:A:19:VAL:HG21       1:A:20:THR:H       9       0.04         (1,817)       1:A:19:VAL:HG22       1:A:20:THR:H       9       0.04		1:A:43:VAL:HG23	1:A:45:ILE:HD11	4	0.04
(1,821)       1:A:43:VAL:HG23       1:A:45:ILE:HD13       4       0.04         (1,817)       1:A:19:VAL:HG21       1:A:20:THR:H       9       0.04         (1,817)       1:A:19:VAL:HG22       1:A:20:THR:H       9       0.04		1:A:43:VAL:HG23	1:A:45:ILE:HD12	4	0.04
(1,817)       1:A:19:VAL:HG21       1:A:20:THR:H       9       0.04         (1,817)       1:A:19:VAL:HG22       1:A:20:THR:H       9       0.04		1:A:43:VAL:HG23	1:A:45:ILE:HD13	4	0.04
(1,817) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:20:THR:H 9 0.04	(1,817)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:20:THR:H	9	0.04
	· · /	1:A:19:VAL:HG22	1:A:20:THR:H	9	0.04
	(1,817)			9	0.04



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,816)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG11	4	0.04
(1,816)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG12	4	0.04
(1,816)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG13	4	0.04
(1,816)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG11	12	0.04
(1,816)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG12	12	0.04
(1,816)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG13	12	0.04
(1,808)	1:A:15:MET:H	1:A:17:TYR:H	20	0.04
(1,803)	1:A:77:GLU:H	1:A:78:LYS:H	13	0.04
(1,8)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:42:TYR:H	8	0.04
(1,8)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:42:TYR:H	8	0.04
(1,8)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:42:TYR:H	8	0.04
(1,793)	1:A:44:ASP:H	1:A:122:ARG:H	8	0.04
(1,793)	1:A:44:ASP:H	1:A:122:ARG:H	17	0.04
(1,791)	1:A:130:LYS:H	1:A:132:GLU:H	7	0.04
(1,791)	1:A:130:LYS:H	1:A:132:GLU:H	8	0.04
(1,791)	1:A:130:LYS:H	1:A:132:GLU:H	18	0.04
(1,790)	1:A:128:LYS:H	1:A:130:LYS:H	4	0.04
(1,78)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:H	17	0.04
(1,776)	1:A:17:TYR:H	1:A:19:VAL:H	5	0.04
(1,776)	1:A:17:TYR:H	1:A:19:VAL:H	7	0.04
(1,776)	1:A:17:TYR:H	1:A:19:VAL:H	19	0.04
(1,755)	1:A:95:ALA:H	1:A:96:ASP:H	13	0.04
(1,749)	1:A:73:GLU:H	1:A:75:VAL:H	12	0.04
(1,744)	1:A:20:THR:H	1:A:23:ASN:H	16	0.04
(1,743)	1:A:31:ASN:H	1:A:34:TRP:H	20	0.04
(1,735)	1:A:63:GLY:H	1:A:64:TRP:H	18	0.04
(1,732)	1:A:31:ASN:H	1:A:34:TRP:HE1	14	0.04
(1,729)	1:A:10:LYS:H	1:A:12:LEU:H	1	0.04
(1,729)	1:A:10:LYS:H	1:A:12:LEU:H	7	0.04
(1,728)	1:A:9:ILE:H	1:A:12:LEU:H	10	0.04
(1,728)	1:A:9:ILE:H	1:A:12:LEU:H	14	0.04
(1,723)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:H	17	0.04
(1,708)	1:A:54:SER:HG	1:A:57:LYS:H	3	0.04
(1,708)	1:A:54:SER:HG	1:A:57:LYS:H	19	0.04
(1,7)	1:A:41:LEU:H	1:A:41:LEU:HD11	8	0.04
(1,7)	1:A:41:LEU:H	1:A:41:LEU:HD12	8	0.04
(1,7)	1:A:41:LEU:H	1:A:41:LEU:HD13	8	0.04
(1,7)	1:A:41:LEU:H	1:A:41:LEU:HD11	10	0.04
(1,7)	1:A:41:LEU:H	1:A:41:LEU:HD12	10	0.04
(1,7)	1:A:41:LEU:H	1:A:41:LEU:HD13	10	0.04
(1,694)	1:A:78:LYS:H	1:A:90:VAL:HG11	20	0.04
(1,694)	1:A:78:LYS:H	1:A:90:VAL:HG12	20	0.04



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

(1,692)       1:A:90:VAL:HG11       1:A:115:CYS:H       16       0.0         (1,692)       1:A:90:VAL:HG12       1:A:115:CYS:H       16       0.0         (1,692)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:115:CYS:H       16       0.0         (1,690)       1:A:79:LEU:H       1:A:79:LEU:HD11       18       0.0         (1,690)       1:A:79:LEU:H       1:A:79:LEU:HD12       18       0.0         (1,690)       1:A:79:LEU:H       1:A:79:LEU:HD13       18       0.0         (1,689)       1:A:46:VAL:HG21       1:A:48:GLY:H       16       0.0	.04 .04 .04 .04 .04 .04 .04 .04 .04 .04
(1,692)       1:A:90:VAL:HG12       1:A:115:CYS:H       16       0.0         (1,692)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:115:CYS:H       16       0.0         (1,690)       1:A:79:LEU:H       1:A:79:LEU:HD11       18       0.0         (1,690)       1:A:79:LEU:H       1:A:79:LEU:HD12       18       0.0         (1,690)       1:A:79:LEU:H       1:A:79:LEU:HD13       18       0.0         (1,689)       1:A:46:VAL:HG21       1:A:48:GLY:H       16       0.0	.04 .04 .04 .04 .04 .04 .04 .04
(1,692)       1:A:90:VAL:HG13       1:A:115:CYS:H       16       0.4         (1,690)       1:A:79:LEU:H       1:A:79:LEU:HD11       18       0.4         (1,690)       1:A:79:LEU:H       1:A:79:LEU:HD12       18       0.4         (1,690)       1:A:79:LEU:H       1:A:79:LEU:HD13       18       0.4         (1,689)       1:A:46:VAL:HG21       1:A:48:GLY:H       16       0.4	.04 .04 .04 .04 .04 .04 .04
(1,690)       1:A:79:LEU:H       1:A:79:LEU:HD11       18       0.         (1,690)       1:A:79:LEU:H       1:A:79:LEU:HD12       18       0.         (1,690)       1:A:79:LEU:H       1:A:79:LEU:HD13       18       0.         (1,689)       1:A:46:VAL:HG21       1:A:48:GLY:H       16       0.	.04 .04 .04 .04 .04 .04
(1,690)       1:A:79:LEU:H       1:A:79:LEU:HD12       18       0.0         (1,690)       1:A:79:LEU:H       1:A:79:LEU:HD13       18       0.0         (1,689)       1:A:46:VAL:HG21       1:A:48:GLY:H       16       0.0	.04 .04 .04 .04
(1,690)       1:A:79:LEU:H       1:A:79:LEU:HD13       18       0.0         (1,689)       1:A:46:VAL:HG21       1:A:48:GLY:H       16       0.0	.04 .04 .04 .04
(1,689) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:48:GLY:H 16 0.4	.04 .04 .04
( ) )	.04
(1,689) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:48:GLY:H 16 0.4	.04
(1,689) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:48:GLY:H 16 0.	04
(1,687) 1:A:15:MET:H 1:A:19:VAL:HG21 1 0.	
(1,687) 1:A:15:MET:H 1:A:19:VAL:HG22 1 0.	.04
(1,687) 1:A:15:MET:H 1:A:19:VAL:HG23 1 0.	.04
(1,684) 1:A:140:LEU:H 1:A:140:LEU:HD11 12 0.	.04
(1,684) 1:A:140:LEU:H 1:A:140:LEU:HD12 12 0.	.04
(1,684) 1:A:140:LEU:H 1:A:140:LEU:HD13 12 0.0	.04
(1,684) 1:A:140:LEU:H 1:A:140:LEU:HD11 18 0.	.04
(1,684) 1:A:140:LEU:H 1:A:140:LEU:HD12 18 0.	.04
(1,684) 1:A:140:LEU:H 1:A:140:LEU:HD13 18 0.	.04
(1,677) 1:A:103:PHE:H 1:A:112:LEU:HD21 4 0.	.04
(1,677) 1:A:103:PHE:H 1:A:112:LEU:HD22 4 0.	.04
(1,677) 1:A:103:PHE:H 1:A:112:LEU:HD23 4 0.	.04
(1,677) 1:A:103:PHE:H 1:A:112:LEU:HD21 5 0.	.04
(1,677) 1:A:103:PHE:H 1:A:112:LEU:HD22 5 0.	.04
(1,677) 1:A:103:PHE:H 1:A:112:LEU:HD23 5 0.	.04
(1,676) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:49:LYS:H 15 0.	.04
(1,676) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:49:LYS:H 15 0.	.04
(1,676) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:49:LYS:H 15 0.	.04
(1,674) 1:A:78:LYS:H 1:A:90:VAL:HG21 13 0.	.04
(1,674) 1:A:78:LYS:H 1:A:90:VAL:HG22 13 0.	.04
(1,674) 1:A:78:LYS:H 1:A:90:VAL:HG23 13 0.	.04
(1,671) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD11 3 0.	.04
(1,671) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD12 3 0.	.04
(1,671) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD13 3 0.	.04
	.04
(1,670) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:123:PHE:H 2 0.	.04
(1,670) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:123:PHE:H 2 0.4	.04
(1,669) 1:A:129:LEU:HD11 1:A:134:TYR:H 16 0.	.04
(1,669) 1:A:129:LEU:HD12 1:A:134:TYR:H 16 0.4	.04
(1,669) 1:A:129:LEU:HD13 1:A:134:TYR:H 16 0.	.04
(1,666) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD11 6 0.	.04
(1,666) 1:A:127:HIS:H 1:A:129:LEU:HD12 6 0.	.04



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,666)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD13	6	0.04
(1,666)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD11	18	0.04
(1,666)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD12	18	0.04
(1,666)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD13	18	0.04
(1,660)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG11	14	0.04
(1,660)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG12	14	0.04
(1,660)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG13	14	0.04
(1,656)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD21	4	0.04
(1,656)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD22	4	0.04
(1,656)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD23	4	0.04
(1,653)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:42:TYR:H	8	0.04
(1,653)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:42:TYR:H	8	0.04
(1,653)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:42:TYR:H	8	0.04
(1,652)	1:A:41:LEU:H	1:A:41:LEU:HD11	8	0.04
(1,652)	1:A:41:LEU:H	1:A:41:LEU:HD12	8	0.04
(1,652)	1:A:41:LEU:H	1:A:41:LEU:HD13	8	0.04
(1,652)	1:A:41:LEU:H	1:A:41:LEU:HD11	10	0.04
(1,652)	1:A:41:LEU:H	1:A:41:LEU:HD12	10	0.04
(1,652)	1:A:41:LEU:H	1:A:41:LEU:HD13	10	0.04
(1,649)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:124:VAL:H	3	0.04
(1,649)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:H	3	0.04
(1,649)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:H	3	0.04
(1,649)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:124:VAL:H	9	0.04
(1,649)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:H	9	0.04
(1,649)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:H	9	0.04
(1,634)	1:A:71:ILE:HD11	1:A:140:LEU:HD11	6	0.04
(1,634)	1:A:71:ILE:HD11	1:A:140:LEU:HD12	6	0.04
(1,634)	1:A:71:ILE:HD11	1:A:140:LEU:HD13	6	0.04
(1,634)	1:A:71:ILE:HD12	1:A:140:LEU:HD11	6	0.04
(1,634)	1:A:71:ILE:HD12	1:A:140:LEU:HD12	6	0.04
(1,634)	1:A:71:ILE:HD12	1:A:140:LEU:HD13	6	0.04
(1,634)	1:A:71:ILE:HD13	1:A:140:LEU:HD11	6	0.04
(1,634)	1:A:71:ILE:HD13	1:A:140:LEU:HD12	6	0.04
(1,634)	1:A:71:ILE:HD13	1:A:140:LEU:HD13	6	0.04
(1,63)	1:A:54:SER:HG	1:A:57:LYS:H	3	0.04
(1,63)	1:A:54:SER:HG	1:A:57:LYS:H	19	0.04
(1,626)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:140:LEU:HD11	2	0.04
(1,626)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:140:LEU:HD12	2	0.04
(1,626)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:140:LEU:HD13	2	0.04
(1,626)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:140:LEU:HD11	2	0.04
(1,626)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:140:LEU:HD12	2	0.04
(1,626)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:140:LEU:HD13	2	0.04



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,626)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:140:LEU:HD11	2	0.04
(1,626)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:140:LEU:HD12	2	0.04
(1,626)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:140:LEU:HD13	2	0.04
(1,621)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:51:LEU:H	20	0.04
(1,621)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:51:LEU:H	20	0.04
(1,621)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:51:LEU:H	20	0.04
(1,613)	1:A:115:CYS:H	1:A:101:HIS:H	15	0.04
(1,612)	1:A:102:VAL:H	1:A:88:THR:H	18	0.04
(1,611)	1:A:100:GLY:H	1:A:90:VAL:H	5	0.04
(1,611)	1:A:100:GLY:H	1:A:90:VAL:H	16	0.04
(1,595)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD11	10	0.04
(1,595)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD12	10	0.04
(1,595)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD13	10	0.04
(1,592)	1:A:22:ASN:H	1:A:22:ASN:HD21	16	0.04
(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG11	15	0.04
(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG12	15	0.04
(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG13	15	0.04
(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG11	20	0.04
(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG12	20	0.04
(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG13	20	0.04
(1,583)	1:A:90:VAL:H	1:A:102:VAL:HG21	17	0.04
(1,583)	1:A:90:VAL:H	1:A:102:VAL:HG22	17	0.04
(1,583)	1:A:90:VAL:H	1:A:102:VAL:HG23	17	0.04
(1,581)	1:A:102:VAL:HG11	1:A:113:ARG:H	17	0.04
(1,581)	1:A:102:VAL:HG12	1:A:113:ARG:H	17	0.04
(1,581)	1:A:102:VAL:HG13	1:A:113:ARG:H	17	0.04
(1,565)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:H	20	0.04
(1,565)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:H	20	0.04
(1,565)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:H	20	0.04
(1,564)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:137:TYR:H	17	0.04
(1,564)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:137:TYR:H	17	0.04
(1,564)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:137:TYR:H	17	0.04
(1,559)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:132:GLU:H	2	0.04
(1,559)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:132:GLU:H	2	0.04
(1,559)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:132:GLU:H	2	0.04
(1,558)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:132:GLU:H	17	0.04
(1,558)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:132:GLU:H	17	0.04
(1,558)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:132:GLU:H	17	0.04
(1,556)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD11	10	0.04
(1,556)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD12	10	0.04
(1,556)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD13	10	0.04
(1,550)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG21	17	0.04



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,550)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG22	17	0.04
(1,550)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG23	17	0.04
(1,536)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:102:VAL:H	12	0.04
(1,536)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:102:VAL:H	12	0.04
(1,536)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:102:VAL:H	12	0.04
(1,536)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:102:VAL:H	15	0.04
(1,536)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:102:VAL:H	15	0.04
(1,536)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:102:VAL:H	15	0.04
(1,535)	1:A:101:HIS:H	1:A:116:ILE:HD11	2	0.04
(1,535)	1:A:101:HIS:H	1:A:116:ILE:HD12	2	0.04
(1,535)	1:A:101:HIS:H	1:A:116:ILE:HD13	2	0.04
(1,534)	1:A:101:HIS:H	1:A:102:VAL:HG11	15	0.04
(1,534)	1:A:101:HIS:H	1:A:102:VAL:HG12	15	0.04
(1,534)	1:A:101:HIS:H	1:A:102:VAL:HG13	15	0.04
(1,518)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD11	2	0.04
(1,518)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD12	2	0.04
(1,518)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD13	2	0.04
(1,518)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD11	6	0.04
(1,518)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD12	6	0.04
(1,518)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD13	6	0.04
(1,518)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD11	14	0.04
(1,518)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD12	14	0.04
(1,518)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD13	14	0.04
(1,518)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD11	15	0.04
(1,518)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD12	15	0.04
(1,518)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD13	15	0.04
(1,518)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD11	18	0.04
(1,518)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD12	18	0.04
(1,518)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD13	18	0.04
(1,512)	1:A:79:LEU:HD21	1:A:87:ARG:H	8	0.04
(1,512)	1:A:79:LEU:HD22	1:A:87:ARG:H	8	0.04
(1,512)	1:A:79:LEU:HD23	1:A:87:ARG:H	8	0.04
(1,507)	1:A:75:VAL:HG11	1:A:77:GLU:H	6	0.04
(1,507)	1:A:75:VAL:HG12	1:A:77:GLU:H	6	0.04
(1,507)	1:A:75:VAL:HG13	1:A:77:GLU:H	6	0.04
(1,507)	1:A:75:VAL:HG11	1:A:77:GLU:H	13	0.04
(1,507)	1:A:75:VAL:HG12	1:A:77:GLU:H	13	0.04
(1,507)	1:A:75:VAL:HG13	1:A:77:GLU:H	13	0.04
(1,497)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:H	10	0.04
(1,497)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:H	10	0.04
(1,497)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:H	10	0.04
(1,496)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:54:SER:H	10	0.04



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

	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,496)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:54:SER:H	10	0.04
(1,496)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:54:SER:H	10	0.04
(1,496)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:54:SER:H	18	0.04
(1,496)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:54:SER:H	18	0.04
(1,496)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:54:SER:H	18	0.04
(1,494)	1:A:52:PHE:H	1:A:71:ILE:HD11	10	0.04
(1,494)	1:A:52:PHE:H	1:A:71:ILE:HD12	10	0.04
(1,494)	1:A:52:PHE:H	1:A:71:ILE:HD13	10	0.04
(1,493)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:52:PHE:H	8	0.04
(1,493)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:52:PHE:H	8	0.04
(1,493)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:52:PHE:H	8	0.04
(1,49)	1:A:78:LYS:H	1:A:90:VAL:HG11	20	0.04
(1,49)	1:A:78:LYS:H	1:A:90:VAL:HG12	20	0.04
(1,49)	1:A:78:LYS:H	1:A:90:VAL:HG13	20	0.04
(1,476)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:44:ASP:H	15	0.04
(1,476)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:44:ASP:H	15	0.04
(1,476)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:44:ASP:H	15	0.04
(1,473)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD11	4	0.04
(1,473)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD12	4	0.04
(1,473)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD13	4	0.04
(1,473)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD11	12	0.04
(1,473)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD12	12	0.04
(1,473)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD13	12	0.04
(1,473)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD11	13	0.04
(1,473)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD12	13	0.04
(1,473)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD13	13	0.04
(1,472)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:42:TYR:H	6	0.04
(1,472)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:42:TYR:H	6	0.04
(1,472)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:42:TYR:H	6	0.04
(1,471)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:25:THR:H	1	0.04
(1,471)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:25:THR:H	1	0.04
(1,471)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:25:THR:H	1	0.04
(1,47)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:115:CYS:H	16	0.04
(1,47)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:115:CYS:H	16	0.04
(1,47)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:115:CYS:H	16	0.04
(1,469)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:24:GLY:H	15	0.04
(1,469)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:24:GLY:H	15	0.04
(1,469)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:24:GLY:H	15	0.04
(1,468)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:23:ASN:H	1	0.04
(1,468)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:23:ASN:H	1	0.04
(1,468)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:23:ASN:H	1	0.04
(1,462)	1:A:45:ILE:HD11	1:A:46:VAL:H	2	0.04



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,462)	1:A:45:ILE:HD12	1:A:46:VAL:H	2	0.04
(1,462)	1:A:45:ILE:HD13	1:A:46:VAL:H	2	0.04
(1,462)	1:A:45:ILE:HD11	1:A:46:VAL:H	9	0.04
(1,462)	1:A:45:ILE:HD12	1:A:46:VAL:H	9	0.04
(1,462)	1:A:45:ILE:HD13	1:A:46:VAL:H	9	0.04
(1,458)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:10:LYS:H	1	0.04
(1,458)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:10:LYS:H	1	0.04
(1,458)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:10:LYS:H	1	0.04
(1,458)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:10:LYS:H	2	0.04
(1,458)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:10:LYS:H	2	0.04
(1,458)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:10:LYS:H	2	0.04
(1,456)	1:A:9:ILE:H	1:A:12:LEU:HD21	5	0.04
(1,456)	1:A:9:ILE:H	1:A:12:LEU:HD22	5	0.04
(1,456)	1:A:9:ILE:H	1:A:12:LEU:HD23	5	0.04
(1,455)	1:A:8:LYS:H	1:A:9:ILE:HD11	16	0.04
(1,455)	1:A:8:LYS:H	1:A:9:ILE:HD12	16	0.04
(1,455)	1:A:8:LYS:H	1:A:9:ILE:HD13	16	0.04
(1,452)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG21	2	0.04
(1,452)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG22	2	0.04
(1,452)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG23	2	0.04
(1,452)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG21	8	0.04
(1,452)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG22	8	0.04
(1,452)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG23	8	0.04
(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD11	18	0.04
(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD12	18	0.04
(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD13	18	0.04
(1,447)	1:A:41:LEU:H	1:A:124:VAL:HG21	13	0.04
(1,447)	1:A:41:LEU:H	1:A:124:VAL:HG22	13	0.04
(1,447)	1:A:41:LEU:H	1:A:124:VAL:HG23	13	0.04
(1,446)	1:A:45:ILE:H	1:A:121:LEU:HD21	12	0.04
(1,446)	1:A:45:ILE:H	1:A:121:LEU:HD22	12	0.04
(1,446)	1:A:45:ILE:H	1:A:121:LEU:HD23	12	0.04
(1,446)	1:A:45:ILE:H	1:A:121:LEU:HD21	15	0.04
(1,446)	1:A:45:ILE:H	1:A:121:LEU:HD22	15	0.04
(1,446)	1:A:45:ILE:H	1:A:121:LEU:HD23	15	0.04
(1,443)	1:A:90:VAL:HG21	1:A:101:HIS:H	16	0.04
(1,443)	1:A:90:VAL:HG22	1:A:101:HIS:H	16	0.04
(1,443)	1:A:90:VAL:HG23	1:A:101:HIS:H	16	0.04
(1,440)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:100:GLY:H	6	0.04
(1,440)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:100:GLY:H	6	0.04
(1,440)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:100:GLY:H	6	0.04
(1,44)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:48:GLY:H	16	0.04
/	<u> </u>	1		d on nort nage



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

(1,44) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:48:GLY:H 16 0.04 (1,44) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:48:GLY:H 16 0.04 (1,438) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:120:ALA:H 17 0.04 (1,438) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:120:ALA:H 17 0.04 (1,438) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:120:ALA:H 17 0.04 (1,437) 1:A:46:VAL:HG11 1:A:48:GLY:H 2 0.04 (1,437) 1:A:46:VAL:HG12 1:A:48:GLY:H 2 0.04 (1,437) 1:A:46:VAL:HG13 1:A:48:GLY:H 4 0.04 (1,437) 1:A:46:VAL:HG13 1:A:48:GLY:H 4 0.04 (1,437) 1:A:46:VAL:HG12 1:A:48:GLY:H 4 0.04 (1,437) 1:A:46:VAL:HG13 1:A:48:GLY:H 4 0.04 (1,437) 1:A:46:VAL:HG13 1:A:48:GLY:H 4 0.04 (1,437) 1:A:46:VAL:HG13 1:A:48:GLY:H 4 0.04 (1,431) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:103:PHE:H 16 0.04 (1,431) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:103:PHE:H 16 0.04 (1,431) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:103:PHE:H 16 0.04 (1,426) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:13:ASN:H 7 0.04 (1,426) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:13:ASN:H 7 0.04 (1,426) 1:A:12:LEU:HD23 1:A:13:ASN:H 7 0.04 (1,426) 1:A:12:LEU:HD23 1:A:43:VAL:HG15 5 0.04 (1,421) 1:A:43:VAL:H 1:A:43:VAL:HG15 5 0.04 (1,421) 1:A:43:VAL:H 1:A:43:VAL:HG15 5 0.04 (1,421) 1:A:43:VAL:H 1:A:43:VAL:HG11 5 0.04 (1,420) 1:A:19:VAL:H 1:A:19:VAL:HG13 1 0.04 (1,420) 1:A:19:VAL:H 1:A:19:VAL:HG13 1 0.04 (1,420) 1:A:19:VAL:H 1:A:19:VAL:HG13 1 0.04 (1,420) 1:A:19:VAL:H 1:A:19:VAL:HG12 1 0.04 (1,421) 1:A:43:VAL:H 1:A:19:VAL:HG12 1 0.04 (1,422) 1:A:15:MET:H 1:A:19:VAL:HG13 1 0.04 (1,421) 1:A:43:VAL:H 1:A:19:VAL:HG12 1 0.04 (1,421) 1:A:43:VAL:H 1:A:19:VAL:HG13 1 0.04 (1,420) 1:A:19:VAL:H 1:A:19:VAL:HG13 1 0.04 (1,421) 1:A:43:VAL:H 1:A:19:VAL:HG13 1 0.04 (1,420) 1:A:19:VAL:H 1:A:19:VAL:HG13 1 0.04 (1,421) 1:A:43:VAL:H 1:A:19:VAL:HG13 1 0.04 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:H 12 0.04 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:H 12 0.04 (1,415) 1:A:79:LEU:H 1:A:79:LEU:H 12 0.04 (1,415) 1:A:49:LEU:H 11 1:A:19:VAL:H 3 0.04 (1,415) 1:A:49:LEU:H 11 1:A:19:VAL:H 3 0.04 (1,415) 1:	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,438)         1:A:19:VAL:HG21         1:A:120:ALA:H         17         0.04           (1,438)         1:A:19:VAL:HG22         1:A:120:ALA:H         17         0.04           (1,438)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:120:ALA:H         17         0.04           (1,437)         1:A:46:VAL:HG11         1:A:48:GLY:H         2         0.04           (1,437)         1:A:46:VAL:HG13         1:A:48:GLY:H         2         0.04           (1,437)         1:A:46:VAL:HG13         1:A:48:GLY:H         4         0.04           (1,437)         1:A:46:VAL:HG12         1:A:48:GLY:H         4         0.04           (1,431)         1:A:10:20:VAL:HG21         1:A:10:3:PHE:H         16         0.04           (1,431)         1:A:10:VAL:HG22         1:A:13:A:NB:H <t< td=""><td>(1,44)</td><td>1:A:46:VAL:HG22</td><td>1:A:48:GLY:H</td><td>16</td><td>0.04</td></t<>	(1,44)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:48:GLY:H	16	0.04
(1,438)         1:A:19:VAL:HG22         1:A:120:ALA:H         17         0.04           (1,438)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:120:ALA:H         17         0.04           (1,437)         1:A:46:VAL:HG11         1:A:48:GLY:H         2         0.04           (1,437)         1:A:46:VAL:HG12         1:A:48:GLY:H         2         0.04           (1,437)         1:A:46:VAL:HG13         1:A:48:GLY:H         4         0.04           (1,437)         1:A:46:VAL:HG12         1:A:48:GLY:H         4         0.04           (1,437)         1:A:46:VAL:HG13         1:A:48:GLY:H         4         0.04           (1,431)         1:A:102:VAL:HG21         1:A:103:PHE:H         16         0.04           (1,431)         1:A:102:VAL:HG22         1:A:103:PHE:H         16         0.04           (1,431)         1:A:12:LEU:HD21         1:A:13:ASN:H         7         0.04           (1,426)         1:A:12:LEU:HD22         1:A:13:ASN:H         7	(1,44)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:48:GLY:H	16	0.04
(1,438) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:120:ALA:H 17 0.04 (1,437) 1:A:46:VAL:HG11 1:A:48:GLY:H 2 0.04 (1,437) 1:A:46:VAL:HG12 1:A:48:GLY:H 2 0.04 (1,437) 1:A:46:VAL:HG13 1:A:48:GLY:H 2 0.04 (1,437) 1:A:46:VAL:HG13 1:A:48:GLY:H 2 0.04 (1,437) 1:A:46:VAL:HG13 1:A:48:GLY:H 4 0.04 (1,437) 1:A:46:VAL:HG12 1:A:48:GLY:H 4 0.04 (1,437) 1:A:46:VAL:HG12 1:A:48:GLY:H 4 0.04 (1,437) 1:A:46:VAL:HG13 1:A:48:GLY:H 4 0.04 (1,437) 1:A:46:VAL:HG13 1:A:48:GLY:H 4 0.04 (1,437) 1:A:40:VAL:HG21 1:A:103:PHE:H 16 0.04 (1,431) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:103:PHE:H 16 0.04 (1,431) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:103:PHE:H 16 0.04 (1,431) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:103:PHE:H 16 0.04 (1,426) 1:A:12:LEU:HD21 1:A:13:ASN:H 7 0.04 (1,426) 1:A:12:LEU:HD22 1:A:13:ASN:H 7 0.04 (1,426) 1:A:12:LEU:HD23 1:A:13:ASN:H 7 0.04 (1,426) 1:A:12:LEU:HD23 1:A:13:ASN:H 7 0.04 (1,421) 1:A:43:VAL:H 1:A:43:VAL:HG11 5 0.04 (1,421) 1:A:43:VAL:H 1:A:43:VAL:HG12 5 0.04 (1,421) 1:A:43:VAL:H 1:A:43:VAL:HG13 5 0.04 (1,421) 1:A:19:VAL:H 1:A:43:VAL:HG13 5 0.04 (1,420) 1:A:19:VAL:H 1:A:19:VAL:HG13 1 0.04 (1,420) 1:A:19:VAL:H 1:A:19:VAL:HG11 1 0.04 (1,420) 1:A:19:VAL:H 1 1:A:19:VAL:HG11 1 0.04 (1,420)	(1,438)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:120:ALA:H	17	0.04
(1,437)         1:A:46:VAL:HG11         1:A:48:GLY:H         2         0.04           (1,437)         1:A:46:VAL:HG12         1:A:48:GLY:H         2         0.04           (1,437)         1:A:46:VAL:HG13         1:A:48:GLY:H         2         0.04           (1,437)         1:A:46:VAL:HG11         1:A:48:GLY:H         4         0.04           (1,437)         1:A:46:VAL:HG12         1:A:48:GLY:H         4         0.04           (1,437)         1:A:46:VAL:HG13         1:A:48:GLY:H         4         0.04           (1,437)         1:A:6:VAL:HG13         1:A:10:VAL:HG13         16         0.04           (1,431)         1:A:10:VAL:HG23         1:A:13:ASN:H         7         0.04           (1,426)         1:A:12:VAL:HD23         1:A:13:ASN:H         7	(1,438)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:120:ALA:H	17	0.04
(1,437)         1:A:46:VAL:HG12         1:A:48:GLY:H         2         0.04           (1,437)         1:A:46:VAL:HG13         1:A:48:GLY:H         2         0.04           (1,437)         1:A:46:VAL:HG11         1:A:48:GLY:H         4         0.04           (1,437)         1:A:46:VAL:HG11         1:A:48:GLY:H         4         0.04           (1,437)         1:A:46:VAL:HG12         1:A:48:GLY:H         4         0.04           (1,431)         1:A:40:VAL:HG21         1:A:103:PHE:H         16         0.04           (1,431)         1:A:102:VAL:HG22         1:A:103:PHE:H         16         0.04           (1,426)         1:A:12:LEU:HD23         1:A:13:ASN:H         7         0.04           (1,426)         1:A:12:LEU:HD23         1:A:13:ASN:H         7         0.04           (1,421)         1:A:43:VAL:H         1:A:43:VAL:HG11         5         0.04           (1,421)         1:A:43:VAL:H         1:A:43:VAL:HG13         5	(1,438)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:120:ALA:H	17	0.04
(1,437)         1:A:46:VAL:HG11         1:A:48:GLY:H         2         0.04           (1,437)         1:A:46:VAL:HG11         1:A:48:GLY:H         4         0.04           (1,437)         1:A:46:VAL:HG12         1:A:48:GLY:H         4         0.04           (1,437)         1:A:46:VAL:HG13         1:A:48:GLY:H         4         0.04           (1,431)         1:A:102:VAL:HG21         1:A:103:PHE:H         16         0.04           (1,431)         1:A:102:VAL:HG22         1:A:103:PHE:H         16         0.04           (1,431)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:103:PHE:H         16         0.04           (1,431)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:103:PHE:H         16         0.04           (1,426)         1:A:12:LEU:HD22         1:A:13:ASN:H         7         0.04           (1,426)         1:A:12:LEU:HD22         1:A:13:ASN:H         7         0.04           (1,426)         1:A:12:LEU:HD23         1:A:13:ASN:H         7         0.04           (1,426)         1:A:43:VAL:H         1:A:43:VAL:HG11         5         0.04           (1,421)         1:A:43:VAL:H         1:A:43:VAL:HG12         5         0.04           (1,421)         1:A:19:VAL:H         1:A:19:VAL:HG13 <th< td=""><td>(1,437)</td><td>1:A:46:VAL:HG11</td><td>1:A:48:GLY:H</td><td>2</td><td>0.04</td></th<>	(1,437)	1:A:46:VAL:HG11	1:A:48:GLY:H	2	0.04
(1,437)         1:A:46:VAL:HG11         1:A:48:GLY:H         4         0.04           (1,437)         1:A:46:VAL:HG12         1:A:48:GLY:H         4         0.04           (1,437)         1:A:46:VAL:HG13         1:A:48:GLY:H         4         0.04           (1,431)         1:A:102:VAL:HG21         1:A:103:PHE:H         16         0.04           (1,431)         1:A:102:VAL:HG22         1:A:103:PHE:H         16         0.04           (1,431)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:103:PHE:H         16         0.04           (1,431)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:103:PHE:H         16         0.04           (1,426)         1:A:12:LEU:HD21         1:A:13:ASN:H         7         0.04           (1,426)         1:A:12:LEU:HD22         1:A:13:ASN:H         7         0.04           (1,426)         1:A:12:LEU:HD23         1:A:13:ASN:H         7         0.04           (1,426)         1:A:12:LEU:HD23         1:A:13:ASN:H         7         0.04           (1,421)         1:A:43:VAL:H         1:A:43:VAL:HG11         5         0.04           (1,421)         1:A:43:VAL:H         1:A:43:VAL:HG13         5         0.04           (1,420)         1:A:19:VAL:H         1:A:19:VAL:HG13 <th< td=""><td>(1,437)</td><td>1:A:46:VAL:HG12</td><td>1:A:48:GLY:H</td><td>2</td><td>0.04</td></th<>	(1,437)	1:A:46:VAL:HG12	1:A:48:GLY:H	2	0.04
(1,437)         1:A:46:VAL:HG12         1:A:48:GLY:H         4         0.04           (1,437)         1:A:46:VAL:HG13         1:A:48:GLY:H         4         0.04           (1,431)         1:A:102:VAL:HG21         1:A:103:PHE:H         16         0.04           (1,431)         1:A:102:VAL:HG22         1:A:103:PHE:H         16         0.04           (1,431)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:103:PHE:H         16         0.04           (1,426)         1:A:12:LEU:HD21         1:A:13:ASN:H         7         0.04           (1,426)         1:A:12:LEU:HD22         1:A:13:ASN:H         7         0.04           (1,426)         1:A:12:LEU:HD23         1:A:13:ASN:H         7         0.04           (1,426)         1:A:12:LEU:HD23         1:A:13:ASN:H         7         0.04           (1,426)         1:A:12:LEU:HD23         1:A:13:ASN:H         7         0.04           (1,426)         1:A:143:VAL:H         1:A:43:VAL:HG11         5         0.04           (1,421)         1:A:43:VAL:H         1:A:43:VAL:HG12         5         0.04           (1,421)         1:A:19:VAL:H         1:A:19:VAL:HG11         1         0.04           (1,420)         1:A:19:VAL:H         1:A:19:VAL:HG13         1	(1,437)	1:A:46:VAL:HG13	1:A:48:GLY:H	2	0.04
(1,437)         1:A:46:VAL:HG13         1:A:48:GLY:H         4         0.04           (1,431)         1:A:102:VAL:HG21         1:A:103:PHE:H         16         0.04           (1,431)         1:A:102:VAL:HG22         1:A:103:PHE:H         16         0.04           (1,431)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:103:PHE:H         16         0.04           (1,426)         1:A:12:LEU:HD21         1:A:13:ASN:H         7         0.04           (1,426)         1:A:12:LEU:HD22         1:A:13:ASN:H         7         0.04           (1,426)         1:A:43:VAL:H         1:A:43:VAL:HG11         5         0.04           (1,420)         1:A:43:VAL:H         1:A:43:VAL:HG12         5         0.04           (1,421)         1:A:43:VAL:H         1:A:43:VAL:HG13         5         0.04           (1,421)         1:A:43:VAL:H         1:A:43:VAL:HG13         5         0.04           (1,420)         1:A:19:VAL:H         1:A:19:VAL:HG11         1         0.04           (1,420)         1:A:19:VAL:H         1:A:19:VAL:HG13         1         0.04           (1,420)         1:A:19:VAL:H         1:A:19:VAL:HG21         1         0.04           (1,42)         1:A:15:MET:H         1:A:19:VAL:HG23         1 </td <td>(1,437)</td> <td>1:A:46:VAL:HG11</td> <td>1:A:48:GLY:H</td> <td>4</td> <td>0.04</td>	(1,437)	1:A:46:VAL:HG11	1:A:48:GLY:H	4	0.04
(1,431)         1:A:102:VAL:HG21         1:A:103:PHE:H         16         0.04           (1,431)         1:A:102:VAL:HG22         1:A:103:PHE:H         16         0.04           (1,431)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:103:PHE:H         16         0.04           (1,426)         1:A:12:LEU:HD21         1:A:13:ASN:H         7         0.04           (1,426)         1:A:12:LEU:HD22         1:A:13:ASN:H         7         0.04           (1,426)         1:A:12:LEU:HD23         1:A:13:ASN:H         7         0.04           (1,421)         1:A:43:VAL:H         1:A:43:VAL:HG11         5         0.04           (1,421)         1:A:43:VAL:H         1:A:43:VAL:HG12         5         0.04           (1,421)         1:A:43:VAL:H         1:A:43:VAL:HG13         5         0.04           (1,421)         1:A:19:VAL:H         1:A:19:VAL:HG11         1         0.04           (1,420)         1:A:19:VAL:H         1:A:19:VAL:HG12         1         0.04           (1,420)         1:A:15:MET:H         1:A:19:VAL:HG21         1         0.04           (1,422)         1:A:15:MET:H         1:A:19:VAL:HG22         1         0.04           (1,422)         1:A:15:MET:H         1:A:19:VAL:HG23         1<	(1,437)	1:A:46:VAL:HG12	1:A:48:GLY:H	4	0.04
(1,431)         1:A:102:VAL:HG22         1:A:103:PHE:H         16         0.04           (1,431)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:103:PHE:H         16         0.04           (1,426)         1:A:12:LEU:HD21         1:A:13:ASN:H         7         0.04           (1,426)         1:A:12:LEU:HD22         1:A:13:ASN:H         7         0.04           (1,426)         1:A:12:LEU:HD23         1:A:13:ASN:H         7         0.04           (1,421)         1:A:43:VAL:H         1:A:43:VAL:HG11         5         0.04           (1,421)         1:A:43:VAL:H         1:A:43:VAL:HG12         5         0.04           (1,421)         1:A:43:VAL:H         1:A:43:VAL:HG13         5         0.04           (1,421)         1:A:43:VAL:H         1:A:19:VAL:HG13         5         0.04           (1,420)         1:A:19:VAL:H         1:A:19:VAL:HG12         1         0.04           (1,420)         1:A:19:VAL:H         1:A:19:VAL:HG13         1         0.04           (1,420)         1:A:15:MET:H         1:A:19:VAL:HG21         1         0.04           (1,422)         1:A:15:MET:H         1:A:19:VAL:HG21         1         0.04           (1,422)         1:A:15:MET:H         1:A:19:VAL:HG22         1 <td>(1,437)</td> <td>1:A:46:VAL:HG13</td> <td>1:A:48:GLY:H</td> <td>4</td> <td>0.04</td>	(1,437)	1:A:46:VAL:HG13	1:A:48:GLY:H	4	0.04
(1,431)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:103:PHE:H         16         0.04           (1,426)         1:A:12:LEU:HD21         1:A:13:ASN:H         7         0.04           (1,426)         1:A:12:LEU:HD22         1:A:13:ASN:H         7         0.04           (1,426)         1:A:12:LEU:HD23         1:A:13:ASN:H         7         0.04           (1,421)         1:A:43:VAL:H         1:A:43:VAL:HG11         5         0.04           (1,421)         1:A:43:VAL:H         1:A:43:VAL:HG12         5         0.04           (1,421)         1:A:43:VAL:H         1:A:43:VAL:HG13         5         0.04           (1,420)         1:A:19:VAL:H         1:A:19:VAL:HG11         1         0.04           (1,420)         1:A:19:VAL:H         1:A:19:VAL:HG12         1         0.04           (1,420)         1:A:19:VAL:H         1:A:19:VAL:HG21         1         0.04           (1,420)         1:A:15:MET:H         1:A:19:VAL:HG21         1         0.04           (1,42)         1:A:15:MET:H         1:A:19:VAL:HG22         1         0.04           (1,42)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD22         2         0.04           (1,415)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD22         2	(1,431)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:103:PHE:H	16	0.04
(1,426)         1:A:12:LEU:HD21         1:A:13:ASN:H         7         0.04           (1,426)         1:A:12:LEU:HD22         1:A:13:ASN:H         7         0.04           (1,426)         1:A:12:LEU:HD23         1:A:13:ASN:H         7         0.04           (1,421)         1:A:43:VAL:H         1:A:43:VAL:HG11         5         0.04           (1,421)         1:A:43:VAL:H         1:A:43:VAL:HG12         5         0.04           (1,421)         1:A:43:VAL:H         1:A:43:VAL:HG13         5         0.04           (1,420)         1:A:19:VAL:H         1:A:19:VAL:HG11         1         0.04           (1,420)         1:A:19:VAL:H         1:A:19:VAL:HG12         1         0.04           (1,420)         1:A:19:VAL:H         1:A:19:VAL:HG13         1         0.04           (1,420)         1:A:19:VAL:H         1:A:19:VAL:HG21         1         0.04           (1,42)         1:A:15:MET:H         1:A:19:VAL:HG21         1         0.04           (1,42)         1:A:15:MET:H         1:A:19:VAL:HG22         1         0.04           (1,42)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD23         1         0.04           (1,415)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD22         2	(1,431)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:103:PHE:H	16	0.04
(1,426)         1:A:12:LEU:HD22         1:A:13:ASN:H         7         0.04           (1,426)         1:A:12:LEU:HD23         1:A:13:ASN:H         7         0.04           (1,421)         1:A:43:VAL:H         1:A:43:VAL:HG11         5         0.04           (1,421)         1:A:43:VAL:H         1:A:43:VAL:HG12         5         0.04           (1,421)         1:A:43:VAL:H         1:A:43:VAL:HG13         5         0.04           (1,420)         1:A:19:VAL:H         1:A:19:VAL:HG11         1         0.04           (1,420)         1:A:19:VAL:H         1:A:19:VAL:HG12         1         0.04           (1,420)         1:A:19:VAL:H         1:A:19:VAL:HG13         1         0.04           (1,420)         1:A:19:VAL:H         1:A:19:VAL:HG21         1         0.04           (1,420)         1:A:15:MET:H         1:A:19:VAL:HG21         1         0.04           (1,422)         1:A:15:MET:H         1:A:19:VAL:HG22         1         0.04           (1,422)         1:A:15:MET:H         1:A:19:VAL:HG23         1         0.04           (1,421)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD23         2         0.04           (1,415)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD23         2	(1,431)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:103:PHE:H	16	0.04
(1,426)         1:A:12:LEU:HD23         1:A:13:ASN:H         7         0.04           (1,421)         1:A:43:VAL:H         1:A:43:VAL:HG11         5         0.04           (1,421)         1:A:43:VAL:H         1:A:43:VAL:HG12         5         0.04           (1,421)         1:A:43:VAL:H         1:A:43:VAL:HG13         5         0.04           (1,420)         1:A:19:VAL:H         1:A:19:VAL:HG11         1         0.04           (1,420)         1:A:19:VAL:H         1         0.04         1           (1,420)         1:A:19:VAL:H         1         0.04           (1,420)         1:A:19:VAL:HG13         1         0.04           (1,420)         1:A:19:VAL:HG13         1         0.04           (1,42)         1:A:15:MET:H         1:A:19:VAL:HG21         1         0.04           (1,42)         1:A:15:MET:H         1:A:19:VAL:HG22         1         0.04           (1,42)         1:A:15:MET:H         1:A:19:VAL:HG22         1         0.04           (1,42)         1:A:15:MET:H         1:A:19:VAL:HG23         1         0.04           (1,42)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD22         2         0.04           (1,415)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:L	(1,426)	1:A:12:LEU:HD21	1:A:13:ASN:H	7	0.04
(1,426)         1:A:12:LEU:HD23         1:A:13:ASN:H         7         0.04           (1,421)         1:A:43:VAL:H         1:A:43:VAL:HG11         5         0.04           (1,421)         1:A:43:VAL:H         1:A:43:VAL:HG12         5         0.04           (1,421)         1:A:43:VAL:H         1:A:43:VAL:HG13         5         0.04           (1,420)         1:A:19:VAL:H         1:A:19:VAL:HG11         1         0.04           (1,420)         1:A:19:VAL:H         1:A:19:VAL:HG12         1         0.04           (1,420)         1:A:19:VAL:H         1:A:19:VAL:HG21         1         0.04           (1,420)         1:A:15:MET:H         1:A:19:VAL:HG21         1         0.04           (1,42)         1:A:15:MET:H         1:A:19:VAL:HG22         1         0.04           (1,42)         1:A:15:MET:H         1:A:19:VAL:HG22         1         0.04           (1,42)         1:A:15:MET:H         1:A:19:VAL:HG23         1         0.04           (1,42)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD21         2         0.04           (1,415)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD22         2         0.04           (1,415)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD21         10	(1,426)	1:A:12:LEU:HD22	1:A:13:ASN:H	7	0.04
(1,421)         1:A:43:VAL:H         1:A:43:VAL:HG12         5         0.04           (1,421)         1:A:43:VAL:H         1:A:43:VAL:HG13         5         0.04           (1,420)         1:A:19:VAL:H         1:A:19:VAL:HG11         1         0.04           (1,420)         1:A:19:VAL:H         1:A:19:VAL:HG12         1         0.04           (1,420)         1:A:19:VAL:H         1:A:19:VAL:HG13         1         0.04           (1,42)         1:A:15:MET:H         1:A:19:VAL:HG21         1         0.04           (1,42)         1:A:15:MET:H         1:A:19:VAL:HG22         1         0.04           (1,42)         1:A:15:MET:H         1:A:19:VAL:HG23         1         0.04           (1,42)         1:A:15:MET:H         1:A:19:VAL:HG23         1         0.04           (1,42)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD21         2         0.04           (1,415)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD22         2         0.04           (1,415)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD23         2         0.04           (1,415)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD21         10         0.04           (1,45)         1:A:79:LEU:H         1:A:124:VAL:H         3 <th< td=""><td>_ `</td><td>1:A:12:LEU:HD23</td><td>1:A:13:ASN:H</td><td>7</td><td>0.04</td></th<>	_ `	1:A:12:LEU:HD23	1:A:13:ASN:H	7	0.04
(1,421)         1:A:43:VAL:H         1:A:43:VAL:HG13         5         0.04           (1,420)         1:A:19:VAL:H         1:A:19:VAL:HG11         1         0.04           (1,420)         1:A:19:VAL:H         1:A:19:VAL:HG12         1         0.04           (1,420)         1:A:19:VAL:H         1:A:19:VAL:HG13         1         0.04           (1,42)         1:A:15:MET:H         1:A:19:VAL:HG21         1         0.04           (1,42)         1:A:15:MET:H         1:A:19:VAL:HG22         1         0.04           (1,42)         1:A:15:MET:H         1:A:19:VAL:HG23         1         0.04           (1,42)         1:A:15:MET:H         1:A:19:VAL:HG23         1         0.04           (1,42)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD21         2         0.04           (1,415)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD22         2         0.04           (1,415)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD23         2         0.04           (1,415)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD22         10         0.04           (1,415)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD23         10         0.04           (1,415)         1:A:79:LEU:H         1:A:124:VAL:H         3         <	· · /	1:A:43:VAL:H	1:A:43:VAL:HG11	5	0.04
(1,420)         1:A:19:VAL:H         1:A:19:VAL:HG11         1         0.04           (1,420)         1:A:19:VAL:H         1:A:19:VAL:HG12         1         0.04           (1,420)         1:A:19:VAL:H         1:A:19:VAL:HG13         1         0.04           (1,42)         1:A:15:MET:H         1:A:19:VAL:HG21         1         0.04           (1,42)         1:A:15:MET:H         1:A:19:VAL:HG22         1         0.04           (1,42)         1:A:15:MET:H         1:A:19:VAL:HG23         1         0.04           (1,42)         1:A:15:MET:H         1:A:19:VAL:HG23         1         0.04           (1,42)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD21         2         0.04           (1,42)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD22         2         0.04           (1,415)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD23         2         0.04           (1,415)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD22         10         0.04           (1,415)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD23         10         0.04           (1,415)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD23         10         0.04           (1,4)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:124:VAL:H         3	(1,421)	1:A:43:VAL:H	1:A:43:VAL:HG12	5	0.04
(1,420)         1:A:19:VAL:H         1:A:19:VAL:HG12         1         0.04           (1,420)         1:A:19:VAL:H         1:A:19:VAL:HG13         1         0.04           (1,42)         1:A:15:MET:H         1:A:19:VAL:HG21         1         0.04           (1,42)         1:A:15:MET:H         1:A:19:VAL:HG22         1         0.04           (1,42)         1:A:15:MET:H         1:A:19:VAL:HG23         1         0.04           (1,415)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD22         2         0.04           (1,415)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD21         10         0.04           (1,415)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD22         10         0.04           (1,415)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD23         10         0.04           (1,415)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:124:VAL:H         3	(1,421)	1:A:43:VAL:H	1:A:43:VAL:HG13	5	0.04
(1,420)         1:A:19:VAL:H         1:A:19:VAL:HG13         1         0.04           (1,42)         1:A:15:MET:H         1:A:19:VAL:HG21         1         0.04           (1,42)         1:A:15:MET:H         1:A:19:VAL:HG22         1         0.04           (1,42)         1:A:15:MET:H         1:A:19:VAL:HG23         1         0.04           (1,42)         1:A:75:LEU:H         1:A:79:LEU:HD21         2         0.04           (1,415)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD22         2         0.04           (1,415)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD23         2         0.04           (1,415)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD21         10         0.04           (1,415)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD22         10         0.04           (1,415)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD22         10         0.04           (1,415)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD23         10         0.04           (1,415)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD23         10         0.04           (1,42)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:124:VAL:H         3         0.04           (1,4)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:124:VAL:H         9	(1,420)	1:A:19:VAL:H	1:A:19:VAL:HG11	1	0.04
(1,42)         1:A:15:MET:H         1:A:19:VAL:HG21         1         0.04           (1,42)         1:A:15:MET:H         1:A:19:VAL:HG22         1         0.04           (1,42)         1:A:15:MET:H         1:A:19:VAL:HG23         1         0.04           (1,42)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD21         2         0.04           (1,415)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD22         2         0.04           (1,415)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD23         2         0.04           (1,415)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD21         10         0.04           (1,415)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD22         10         0.04           (1,415)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD23         10         0.04           (1,415)         1:A:79:LEU:H         1:A:124:VAL:H         3         0.04           (1,415)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:124:VAL:H         3         0.04           (1,4)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:124:VAL:H         3         0.04           (1,4)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:124:VAL:H         9         0.04           (1,4)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:124:VAL:H         9         <	(1,420)	1:A:19:VAL:H	1:A:19:VAL:HG12	1	0.04
(1,42)         1:A:15:MET:H         1:A:19:VAL:HG22         1         0.04           (1,42)         1:A:15:MET:H         1:A:19:VAL:HG23         1         0.04           (1,415)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD21         2         0.04           (1,415)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD22         2         0.04           (1,415)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD23         2         0.04           (1,415)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD21         10         0.04           (1,415)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD22         10         0.04           (1,45)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD23         10         0.04           (1,45)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD23         10         0.04           (1,4)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:124:VAL:H         3         0.04           (1,4)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:124:VAL:H         3         0.04           (1,4)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:124:VAL:H         9         0.04           (1,4)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:124:VAL:H         9         0.04           (1,4)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:124:VAL:H         9         <	(1,420)	1:A:19:VAL:H	1:A:19:VAL:HG13	1	0.04
(1,42)         1:A:15:MET:H         1:A:19:VAL:HG23         1         0.04           (1,415)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD21         2         0.04           (1,415)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD22         2         0.04           (1,415)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD23         2         0.04           (1,415)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD21         10         0.04           (1,415)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD22         10         0.04           (1,415)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD23         10         0.04           (1,45)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:124:VAL:H         3         0.04           (1,4)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:124:VAL:H         3         0.04           (1,4)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:124:VAL:H         9         0.04           (1,4)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:124:VAL:H         9         0.04           (1,4)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:124:VAL:H         9         0.04           (1,4)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:124:VAL:H         9         0.04           (1,399)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:129:LEU:HD21         17	(1,42)	1:A:15:MET:H	1:A:19:VAL:HG21	1	0.04
(1,415)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD21         2         0.04           (1,415)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD22         2         0.04           (1,415)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD23         2         0.04           (1,415)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD21         10         0.04           (1,415)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD22         10         0.04           (1,415)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD23         10         0.04           (1,415)         1:A:47:LEU:HD11         1:A:124:VAL:H         3         0.04           (1,4)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:124:VAL:H         3         0.04           (1,4)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:124:VAL:H         9         0.04           (1,4)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:124:VAL:H         9         0.04           (1,4)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:124:VAL:H         9         0.04           (1,4)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:124:VAL:H         9         0.04           (1,399)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:129:LEU:HD21         17         0.04	(1,42)	1:A:15:MET:H	1:A:19:VAL:HG22	1	0.04
(1,415)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD21         2         0.04           (1,415)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD22         2         0.04           (1,415)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD23         2         0.04           (1,415)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD21         10         0.04           (1,415)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD22         10         0.04           (1,415)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD23         10         0.04           (1,415)         1:A:79:LEU:H         1:A:124:VAL:H         3         0.04           (1,4)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:124:VAL:H         3         0.04           (1,4)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:124:VAL:H         9         0.04           (1,4)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:124:VAL:H         9         0.04           (1,4)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:124:VAL:H         9         0.04           (1,4)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:124:VAL:H         9         0.04           (1,399)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:129:LEU:HD21         17         0.04	(1,42)	1:A:15:MET:H	1:A:19:VAL:HG23	1	0.04
(1,415)       1:A:79:LEU:H       1:A:79:LEU:HD23       2       0.04         (1,415)       1:A:79:LEU:H       1:A:79:LEU:HD21       10       0.04         (1,415)       1:A:79:LEU:H       1:A:79:LEU:HD22       10       0.04         (1,415)       1:A:79:LEU:H       1:A:79:LEU:HD23       10       0.04         (1,4)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:124:VAL:H       3       0.04         (1,4)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:124:VAL:H       3       0.04         (1,4)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:124:VAL:H       9       0.04         (1,4)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:124:VAL:H       9       0.04         (1,4)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:124:VAL:H       9       0.04         (1,4)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:124:VAL:H       9       0.04         (1,4)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:124:VAL:H       9       0.04         (1,399)       1:A:41:LEU:HD21       1:A:129:LEU:HD21       17       0.04	(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD21	2	0.04
(1,415)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD21         10         0.04           (1,415)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD22         10         0.04           (1,415)         1:A:79:LEU:H         1:A:79:LEU:HD23         10         0.04           (1,4)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:124:VAL:H         3         0.04           (1,4)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:124:VAL:H         3         0.04           (1,4)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:124:VAL:H         9         0.04           (1,4)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:124:VAL:H         9         0.04           (1,4)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:124:VAL:H         9         0.04           (1,4)         1:A:41:LEU:HD13         1:A:124:VAL:H         9         0.04           (1,399)         1:A:41:LEU:HD21         1:A:129:LEU:HD21         17         0.04	(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD22	2	0.04
(1,415)       1:A:79:LEU:H       1:A:79:LEU:HD22       10       0.04         (1,415)       1:A:79:LEU:H       1:A:79:LEU:HD23       10       0.04         (1,4)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:124:VAL:H       3       0.04         (1,4)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:124:VAL:H       3       0.04         (1,4)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:124:VAL:H       3       0.04         (1,4)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:124:VAL:H       9       0.04         (1,4)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:124:VAL:H       9       0.04         (1,4)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:124:VAL:H       9       0.04         (1,399)       1:A:41:LEU:HD21       1:A:129:LEU:HD21       17       0.04	(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD23	2	0.04
(1,415)       1:A:79:LEU:H       1:A:79:LEU:HD23       10       0.04         (1,4)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:124:VAL:H       3       0.04         (1,4)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:124:VAL:H       3       0.04         (1,4)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:124:VAL:H       3       0.04         (1,4)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:124:VAL:H       9       0.04         (1,4)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:124:VAL:H       9       0.04         (1,4)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:124:VAL:H       9       0.04         (1,399)       1:A:41:LEU:HD21       1:A:129:LEU:HD21       17       0.04	(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD21	10	0.04
(1,4)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:124:VAL:H       3       0.04         (1,4)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:124:VAL:H       3       0.04         (1,4)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:124:VAL:H       3       0.04         (1,4)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:124:VAL:H       9       0.04         (1,4)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:124:VAL:H       9       0.04         (1,4)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:124:VAL:H       9       0.04         (1,399)       1:A:41:LEU:HD21       1:A:129:LEU:HD21       17       0.04		1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD22	10	0.04
(1,4)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:124:VAL:H       3       0.04         (1,4)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:124:VAL:H       3       0.04         (1,4)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:124:VAL:H       3       0.04         (1,4)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:124:VAL:H       9       0.04         (1,4)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:124:VAL:H       9       0.04         (1,4)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:124:VAL:H       9       0.04         (1,399)       1:A:41:LEU:HD21       1:A:129:LEU:HD21       17       0.04	(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD23	10	0.04
(1,4)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:124:VAL:H       3       0.04         (1,4)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:124:VAL:H       3       0.04         (1,4)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:124:VAL:H       9       0.04         (1,4)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:124:VAL:H       9       0.04         (1,4)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:124:VAL:H       9       0.04         (1,399)       1:A:41:LEU:HD21       1:A:129:LEU:HD21       17       0.04		1:A:41:LEU:HD11	1:A:124:VAL:H	3	0.04
(1,4)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:124:VAL:H       3       0.04         (1,4)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:124:VAL:H       9       0.04         (1,4)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:124:VAL:H       9       0.04         (1,4)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:124:VAL:H       9       0.04         (1,399)       1:A:41:LEU:HD21       1:A:129:LEU:HD21       17       0.04	1 1	1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:H		
(1,4)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:124:VAL:H       9       0.04         (1,4)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:124:VAL:H       9       0.04         (1,4)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:124:VAL:H       9       0.04         (1,399)       1:A:41:LEU:HD21       1:A:129:LEU:HD21       17       0.04	1 1				
(1,4)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:124:VAL:H       9       0.04         (1,4)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:124:VAL:H       9       0.04         (1,399)       1:A:41:LEU:HD21       1:A:129:LEU:HD21       17       0.04	- ; ;		1:A:124:VAL:H		
(1,4)       1:A:41:LEU:HD13       1:A:124:VAL:H       9       0.04         (1,399)       1:A:41:LEU:HD21       1:A:129:LEU:HD21       17       0.04	- : :				
(1,399) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:129:LEU:HD21 17 0.04		1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:H		
	` /				
( 1,000	(1,399)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:129:LEU:HD22	17	0.04
(1,399) 1:A:41:LEU:HD21 1:A:129:LEU:HD23 17 0.04	· · /				
(1,399) 1:A:41:LEU:HD22 1:A:129:LEU:HD21 17 0.04	· · /				



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

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



Continued from previous page...

(1,337) 1:A:76:GLU:H 1:A:91:ARG:H 9 0.04 (1,332) 1:A:85:MET:H 1:A:86:ILE:H 1 0.04 (1,322) 1:A:54:SER:H 1:A:57:IXS:H 15 0.04 (1,322) 1:A:103:PHE:H 1:A:112:LEU:HDD21 4 0.04 (1,32) 1:A:103:PHE:H 1:A:112:LEU:HDD22 4 0.04 (1,32) 1:A:103:PHE:H 1:A:112:LEU:HDD23 4 0.04 (1,32) 1:A:103:PHE:H 1:A:112:LEU:HDD23 4 0.04 (1,32) 1:A:103:PHE:H 1:A:112:LEU:HDD23 5 0.04 (1,32) 1:A:103:PHE:H 1:A:112:LEU:HDD21 5 0.04 (1,32) 1:A:103:PHE:H 1:A:112:LEU:HDD22 5 0.04 (1,32) 1:A:103:PHE:H 1:A:112:LEU:HDD23 5 0.04 (1,312) 1:A:41:LEU:H 1:A:12:LEU:HDD23 5 0.04 (1,312) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:49:LYS:H 15 0.04 (1,311) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:49:LYS:H 15 0.04 (1,311) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:49:LYS:H 15 0.04 (1,311) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:49:LYS:H 15 0.04 (1,311) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:49:LYS:H 15 0.04 (1,308) 1:A:30:GLN:H 1:A:34:TRP:HE1 11 0.04 (1,307) 1:A:32:GLU:H 1:A:34:TRP:HE1 11 0.04 (1,305) 1:A:25:THR:H 1:A:26:GLU:H 15 0.04 (1,305) 1:A:25:THR:H 1:A:26:GLU:H 15 0.04 (1,299) 1:A:15:MET:H 1:A:20:THR:H 3 0.04 (1,299) 1:A:78:LYS:H 1:A:90:VAL:HG22 13 0.04 (1,29) 1:A:78:LYS:H 1:A:90:VAL:HG21 13 0.04 (1,29) 1:A:78:LYS:H 1:A:90:VAL:HG21 13 0.04 (1,291) 1:A:78:LYS:H 1:A:90:VAL:HG21 13 0.04 (1,291) 1:A:78:LYS:H 1:A:90:VAL:HG21 13 0.04 (1,201) 1:A:22:ASN:HD22 1:A:112:LEU:H 13 0.04 (1,201) 1:A:22:SN:HD22 1:A:112:LEU:H 13 0.04 (1,201) 1:A:22:SN:HD22 1:A:112:LEU:H 13 0.04 (1,201) 1:A:22:ASN:HD22 1:A:112:LEU:H 13 0.04 (1,201) 1:A:22:ASN:HD22 1:A:116:LE:HD11 3 0.04 (1,261) 1:A:90:LEU:HD21 1:A:116:LE:HD11 3 0.04 (1,261) 1:A:90:LEU:HD21 1:A:116:LE:HD11 3 0.04 (1,261) 1:A:90:LEU:HD22 1:A:116:LE:HD11 3 0.04 (1,261)	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,322) 1:A:54:SER:H 1:A:57:LYS:H 15 0.04 (1,32) 1:A:103:PHE:H 1:A:112:LEU:HD21 4 0.04 (1,32) 1:A:103:PHE:H 1:A:112:LEU:HD22 4 0.04 (1,32) 1:A:103:PHE:H 1:A:112:LEU:HD23 4 0.04 (1,32) 1:A:103:PHE:H 1:A:112:LEU:HD23 5 0.04 (1,32) 1:A:103:PHE:H 1:A:112:LEU:HD22 5 0.04 (1,32) 1:A:103:PHE:H 1:A:112:LEU:HD22 5 0.04 (1,32) 1:A:103:PHE:H 1:A:112:LEU:HD23 5 0.04 (1,32) 1:A:103:PHE:H 1:A:112:LEU:HD23 5 0.04 (1,31) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:49:LYS:H 10 0.04 (1,31) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:49:LYS:H 15 0.04 (1,31) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:49:LYS:H 15 0.04 (1,31) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:49:LYS:H 15 0.04 (1,308) 1:A:30:GLN:H 1:A:34:TRP:HE1 11 0.04 (1,307) 1:A:32:GLU:H 1:A:34:TRP:HE1 11 0.04 (1,307) 1:A:32:GLU:H 1:A:43:TRP:HE1 11 0.04 (1,303) 1:A:18:GLU:H 1:A:20:THR:H 3 0.04 (1,299) 1:A:15:MET:H 1:A:18:GLU:H 2 0.04 (1,299) 1:A:78:LYS:H 1:A:90:VAL:HG22 13 0.04 (1,29) 1:A:78:LYS:H 1:A:90:VAL:HG22 13 0.04 (1,29) 1:A:78:LYS:H 1:A:90:VAL:HG22 13 0.04 (1,29) 1:A:78:LYS:H 1:A:90:VAL:HG22 13 0.04 (1,274) 1:A:80:ASP:H 1:A:39:VAL:HG22 13 0.04 (1,269) 1:A:22:ASN:HD22 1:A:112:LEU:H 13 0.04 (1,269) 1:A:22:ASN:HD22 1:A:112:LEU:H 13 0.04 (1,269) 1:A:22:ASN:HD22 1:A:24:GLY:H 3 0.04 (1,269) 1:A:22:ASN:HD22 1:A:24:GLY:H 3 0.04 (1,261) 1:A:99:LEU:HD21 1:A:16:ILE:HD11 3 0.04 (1,261) 1:A:99:LEU:HD22 1:A:116:ILE:HD11 3 0	(1,337)	1:A:76:GLU:H	1:A:91:ARG:H	9	0.04
(1,32) 1:A:103:PHE:H 1:A:112:LEU:HD21 4 0.04 (1,32) 1:A:103:PHE:H 1:A:112:LEU:HD22 4 0.04 (1,32) 1:A:103:PHE:H 1:A:112:LEU:HD23 5 0.04 (1,32) 1:A:103:PHE:H 1:A:112:LEU:HD21 5 0.04 (1,32) 1:A:103:PHE:H 1:A:112:LEU:HD21 5 0.04 (1,32) 1:A:103:PHE:H 1:A:112:LEU:HD23 5 0.04 (1,32) 1:A:103:PHE:H 1:A:112:LEU:HD23 5 0.04 (1,31) 1:A:41:LEU:H 1:A:12:LEU:HD23 5 0.04 (1,31) 1:A:41:LEU:H 1:A:124:VAL:H 10 0.04 (1,31) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:49:LYS:H 15 0.04 (1,31) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:49:LYS:H 15 0.04 (1,30) 1:A:30:GLN:H 1:A:34:TRP:HE1 11 0.04 (1,308) 1:A:30:GLN:H 1:A:34:TRP:HE1 11 0.04 (1,307) 1:A:32:GLU:H 1:A:34:TRP:H 13 0.04 (1,303) 1:A:25:THR:H 1:A:26:GLU:H 15 0.04 (1,299) 1:A:78:LYS:H 15 0.04 (1,299) 1:A:78:LYS:H 1:A:90:VAL:HG21 13 0.04 (1,299) 1:A:78:LYS:H 1:A:90:VAL:HG21 13 0.04 (1,29) 1:A:78:LYS:H 1:A:90:VAL:HG22 13 0.04 (1,29) 1:A:78:LYS:H 1:A:90:VAL:HG23 13 0.04 (1,274) 1:A:80:ASP:H 1:A:89:GLU:H 13 0.04 (1,274) 1:A:80:ASP:H 1:A:89:CLU:H 13 0.04 (1,269) 1:A:22:ASN:HD22 1:A:412:LEU:H 13 0.04 (1,269) 1:A:22:ASN:HD22 1:A:24:GLY:H 3 0.04 (1,261) 1:A:99:LEU:HD21 1:A:116:ILE:HD11 3 0.04 (1,261) 1:A:99:LEU:HD22 1:A:116:ILE:HD11 3 0.04 (1,261) 1:	(1,332)	1:A:85:MET:H	1:A:86:ILE:H	1	0.04
(1,32) 1:A:103:PHE:H 1:A:112:LEU:HD22 4 0.04 (1,32) 1:A:103:PHE:H 1:A:112:LEU:HD23 4 0.04 (1,32) 1:A:103:PHE:H 1:A:112:LEU:HD21 5 0.04 (1,32) 1:A:103:PHE:H 1:A:112:LEU:HD22 5 0.04 (1,32) 1:A:103:PHE:H 1:A:112:LEU:HD22 5 0.04 (1,32) 1:A:103:PHE:H 1:A:112:LEU:HD23 5 0.04 (1,312) 1:A:41:LEU:H 1:A:112:LEU:HD23 5 0.04 (1,312) 1:A:44:LEU:H 1:A:124:VAL:H 10 0.04 (1,311) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:49:LYS:H 15 0.04 (1,311) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:49:LYS:H 15 0.04 (1,311) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:49:LYS:H 15 0.04 (1,301) 1:A:30:GLN:H 1:A:34:TRP:HE1 11 0.04 (1,307) 1:A:32:GLU:H 1:A:34:TRP:HE1 11 0.04 (1,307) 1:A:32:GLU:H 1:A:34:TRP:H 13 0.04 (1,305) 1:A:25:THR:H 1:A:26:GLU:H 15 0.04 (1,299) 1:A:15:MET:H 1:A:36:GLU:H 2 0.04 (1,299) 1:A:15:MET:H 1:A:90:VAL:HG21 13 0.04 (1,299) 1:A:78:LYS:H 1:A:90:VAL:HG21 13 0.04 (1,299) 1:A:78:LYS:H 1:A:90:VAL:HG22 13 0.04 (1,299) 1:A:78:LYS:H 1:A:90:VAL:HG21 13 0.04 (1,209) 1:A:22:ASN:HD22 1:A:112:LEU:H 13 0.04 (1,260) 1:A:22:ASN:HD22 1:A:112:LEU:H 13 0.04 (1,270) 1:A:42:TYR:H 1:A:54:SER:H 7 0.04 (1,260) 1:A:22:ASN:HD22 1:A:112:LEU:H 13 0.04 (1,260) 1:A:22:ASN:HD22 1:A:16:ILE:HD11 3 0.04 (1,261) 1:A:99:LEU:HD21 1:A:16:ILE:HD11 3 0.04 (1,261) 1:A:99:LEU:HD21 1:A:116:ILE:HD11 3 0.04 (1,261) 1:A:99:LEU:HD22 1:A:116:ILE:HD	(1,322)	1:A:54:SER:H	1:A:57:LYS:H	15	0.04
(1,32) 1:A:103:PHE:H 1:A:112:LEU:HD23 4 0.04 (1,32) 1:A:103:PHE:H 1:A:112:LEU:HD21 5 0.04 (1,32) 1:A:103:PHE:H 1:A:112:LEU:HD22 5 0.04 (1,32) 1:A:103:PHE:H 1:A:112:LEU:HD23 5 0.04 (1,31) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:124:VAL:H 10 0.04 (1,31) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:49:LYS:H 15 0.04 (1,31) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:49:LYS:H 15 0.04 (1,31) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:49:LYS:H 15 0.04 (1,31) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:49:LYS:H 15 0.04 (1,31) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:49:LYS:H 15 0.04 (1,30) 1:A:32:GLU:H 1:A:34:TRP:HE1 11 0.04 (1,307) 1:A:32:GLU:H 1:A:34:TRP:H 13 0.04 (1,303) 1:A:32:GLU:H 1:A:34:TRP:H 13 0.04 (1,303) 1:A:18:GLU:H 1:A:20:THR:H 3 0.04 (1,299) 1:A:15:MET:H 1:A:20:THR:H 3 0.04 (1,299) 1:A:78:LYS:H 1:A:90:VAL:HG21 13 0.04 (1,299) 1:A:78:LYS:H 1:A:90:VAL:HG21 13 0.04 (1,29) 1:A:78:LYS:H 1:A:90:VAL:HG21 13 0.04 (1,274) 1:A:80:ASP:H 1:A:90:VAL:HG21 13 0.04 (1,269) 1:A:22:ASN:HD22 1:A:112:LEU:H 13 0.04 (1,269) 1:A:22:ASN:HD22 1:A:12:LEU:H 13 0.04 (1,269) 1:A:22:ASN:HD22 1:A:12:LEU:H 13 0.04 (1,260) 1:A:22:ASN:HD22 1:A:12:LEU:H 13 0.04 (1,260) 1:A:22:ASN:HD22 1:A:12:LEU:H 13 0.04 (1,260) 1:A:22:ASN:HD22 1:A:12:LEU:H 13 0.04 (1,261) 1:A:99:LEU:HD21 1:A:16:ILE:HD11 3 0.04 (1,261) 1:A:99:LEU:HD21 1:A:16:ILE:HD11 3 0.04 (1,261) 1:A:99:LEU:HD21 1:A:116:ILE:HD11 3 0.04 (1,261) 1:A:99:LEU:HD21 1:A:116:ILE:HD11 3 0.04 (1,261) 1:A:99:LEU:HD22 1:A:116:ILE:HD11 3 0.04	(1,32)	1:A:103:PHE:H	1:A:112:LEU:HD21	4	0.04
(1,32) 1:A:103:PHE:H 1:A:112:LEU:HD21 5 0.04 (1,32) 1:A:103:PHE:H 1:A:112:LEU:HD22 5 0.04 (1,32) 1:A:41:LEU:H 1:A:112:LEU:HD23 5 0.04 (1,312) 1:A:41:LEU:H 1:A:112:LEU:HD23 5 0.04 (1,312) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:49:LYS:H 15 0.04 (1,311) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:49:LYS:H 15 0.04 (1,311) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:49:LYS:H 15 0.04 (1,311) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:49:LYS:H 15 0.04 (1,308) 1:A:30:GLN:H 1:A:34:TRP:HE1 11 0.04 (1,308) 1:A:32:GLU:H 1:A:34:TRP:HE1 11 0.04 (1,307) 1:A:32:GLU:H 1:A:34:TRP:H 13 0.04 (1,303) 1:A:25:THR:H 1:A:26:GLU:H 15 0.04 (1,299) 1:A:15:MET:H 1:A:18:GLU:H 2 0.04 (1,299) 1:A:78:LYS:H 1:A:90:VAL:HG21 13 0.04 (1,299) 1:A:78:LYS:H 1:A:90:VAL:HG22 13 0.04 (1,299) 1:A:78:LYS:H 1:A:90:VAL:HG23 13 0.04 (1,281) 1:A:110:ASN:HD22 1:A:112:LEU:H 13 0.04 (1,270) 1:A:42:TYR:H 1:A:89:GLU:H 11 0.04 (1,270) 1:A:42:TYR:H 1:A:26:GLU:H 15 0.04 (1,269) 1:A:22:ASN:HD22 1:A:12:LEU:H 13 0.04 (1,269) 1:A:22:ASN:HD22 1:A:14:LEU:H 13 0.04 (1,269) 1:A:22:ASN:HD22 1:A:24:GLY:H 5 0.04 (1,269) 1:A:22:ASN:HD22 1:A:14:LEU:H 13 0.04 (1,261) 1:A:99:LEU:HD21 1:A:24:GLY:H 5 0.04 (1,261) 1:A:99:LEU:HD21 1:A:16:ILE:HD11 3 0.04 (1,261) 1:A:99:LEU:HD21 1:A:16:ILE:HD11 3 0.04 (1,261) 1:A:99:LEU:HD21 1:A:16:ILE:HD11 3 0.04 (1,261) 1:A:99:LEU:HD22 1:A:116:ILE:HD11 3 0.04 (1,261) 1:A:99:LEU:HD22 1:A:	(1,32)	1:A:103:PHE:H	1:A:112:LEU:HD22	4	0.04
(1,32) 1:A:103:PHE:H 1:A:112:LEU:HD22 5 0.04 (1,32) 1:A:103:PHE:H 1:A:112:LEU:HD23 5 0.04 (1,312) 1:A:41:LEU:H 1:A:112:LEU:HD23 5 0.04 (1,312) 1:A:41:LEU:H 1:A:112:LEU:HD23 5 0.04 (1,312) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:49:LYS:H 15 0.04 (1,31) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:49:LYS:H 15 0.04 (1,31) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:49:LYS:H 15 0.04 (1,308) 1:A:30:GLN:H 1:A:34:TRP:HE1 11 0.04 (1,307) 1:A:32:GLU:H 1:A:34:TRP:HE1 11 0.04 (1,307) 1:A:32:GLU:H 1:A:34:TRP:H 13 0.04 (1,303) 1:A:18:GLU:H 1:A:26:GLU:H 15 0.04 (1,303) 1:A:18:GLU:H 1:A:20:THR:H 3 0.04 (1,299) 1:A:78:LYS:H 1:A:90:VAL:HG21 13 0.04 (1,299) 1:A:78:LYS:H 1:A:90:VAL:HG21 13 0.04 (1,29) 1:A:78:LYS:H 1:A:90:VAL:HG21 13 0.04 (1,29) 1:A:78:LYS:H 1:A:90:VAL:HG22 13 0.04 (1,29) 1:A:78:LYS:H 1:A:90:VAL:HG23 13 0.04 (1,291) 1:A:78:LYS:H 1:A:90:VAL:HG21 13 0.04 (1,291) 1:A:78:LYS:H 1:A:90:VAL:HG21 13 0.04 (1,291) 1:A:22:ASN:HD22 1:A:112:LEU:H 13 0.04 (1,270) 1:A:42:TYR:H 1:A:89:GLU:H 11 0.04 (1,270) 1:A:42:TYR:H 1:A:44:GLY:H 3 0.04 (1,269) 1:A:22:ASN:HD22 1:A:24:GLY:H 3 0.04 (1,269) 1:A:22:ASN:HD22 1:A:24:GLY:H 5 0.04 (1,260) 1:A:22:ASN:HD22 1:A:24:GLY:H 5 0.04 (1,261) 1:A:99:LEU:HD21 1:A:16:ILE:HD11 3 0.04 (1,261) 1:A:99:LEU:HD21 1:A:116:ILE:HD11 3 0.04 (1,261) 1:A:99:LEU:HD22 1:A:116:ILE:HD11 3 0.04 (1,261) 1:A:99:LEU:HD21 1:A:116:ILE:HD11 3 0.04 (1,261) 1:A:99:LEU:HD21 1:A:116:ILE:HD11 3 0.04 (1,261) 1:A:99:LEU:HD21 1:A:116:ILE:HD11 3 0.04 (1,261) 1:A:99:LEU:HD22 1:A:116:ILE:HD11 3 0.04 (1,261) 1:A:99:LEU:HD21 1:A:116:ILE:HD11 3 0.04 (1,261) 1:A:99:LEU:HD22 1:A:116:ILE:HD11 3 0.04 (1,261) 1:A:99:LEU:HD23 1:A:116:ILE:HD11 3 0.04 (1,261) 1:A:99:LEU:HD23 1:A:116:ILE:HD11 3 0.04 (1,261) 1:A:99:LEU:HD23 1:A:116:ILE:	(1,32)	1:A:103:PHE:H	1:A:112:LEU:HD23	4	0.04
(1,32) 1:A:103:PHE:H 1:A:112:LEU:HD23 5 0.04 (1,312) 1:A:41:LEU:H 1:A:124:VAL:H 10 0.04 (1,31) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:49:LYS:H 15 0.04 (1,31) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:49:LYS:H 15 0.04 (1,31) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:49:LYS:H 15 0.04 (1,31) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:49:LYS:H 15 0.04 (1,308) 1:A:30:GLN:H 1:A:34:TRP:HE1 11 0.04 (1,307) 1:A:32:GLU:H 1:A:34:TRP:HE1 11 0.04 (1,305) 1:A:25:THR:H 1:A:26:GLU:H 15 0.04 (1,303) 1:A:18:GLU:H 1:A:20:THR:H 3 0.04 (1,299) 1:A:78:LYS:H 1:A:90:VAL:HG21 13 0.04 (1,299) 1:A:78:LYS:H 1:A:90:VAL:HG21 13 0.04 (1,29) 1:A:22:ASN:HD22 1:A:112:LEU:H 13 0.04 (1,270) 1:A:42:TYR:H 1:A:89:GLU:H 11 0.04 (1,270) 1:A:42:TYR:H 1:A:54:SER:H 7 0.04 (1,269) 1:A:22:ASN:HD22 1:A:24:GLY:H 3 0.04 (1,269) 1:A:22:ASN:HD22 1:A:24:GLY:H 5 0.04 (1,260) 1:A:22:ASN:HD22 1:A:24:GLY:H 5 0.04 (1,261) 1:A:99:LEU:HD21 1:A:116:ILE:HD11 3 0.04 (1,261) 1:A:99:LEU:HD21 1:A:116:ILE:HD11 3 0.04 (1,261) 1:A:99:LEU:HD21 1:A:116:ILE:HD11 3 0.04 (1,261) 1:A:99:LEU:HD22 1:A:116:ILE:HD11 3 0.04 (1,261) 1:A:99:LEU:HD23 1:A:116:ILE:HD13 3 0.04 (1,261) 1:A:199:LEU:HD23 1:A:116:ILE:	(1,32)	1:A:103:PHE:H	1:A:112:LEU:HD21	5	0.04
(1,312) 1:A:41:LEU:H 1:A:124:VAL:H 10 0.04 (1,31) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:49:LYS:H 15 0.04 (1,31) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:49:LYS:H 15 0.04 (1,31) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:49:LYS:H 15 0.04 (1,308) 1:A:30:GLN:H 1:A:34:TRP:HE1 11 0.04 (1,307) 1:A:32:GLU:H 1:A:34:TRP:HE1 11 0.04 (1,307) 1:A:32:GLU:H 1:A:34:TRP:H 13 0.04 (1,303) 1:A:18:GLU:H 1:A:26:GLU:H 15 0.04 (1,303) 1:A:18:GLU:H 1:A:20:THR:H 3 0.04 (1,299) 1:A:15:MET:H 1:A:18:GLU:H 2 0.04 (1,299) 1:A:78:LYS:H 1:A:90:VAL:HG21 13 0.04 (1,29) 1:A:78:LYS:H 1:A:90:VAL:HG22 13 0.04 (1,29) 1:A:78:LYS:H 1:A:90:VAL:HG22 13 0.04 (1,29) 1:A:78:LYS:H 1:A:90:VAL:HG23 13 0.04 (1,274) 1:A:80:ASP:H 1:A:80:SCLU:H 11 0.04 (1,274) 1:A:80:ASP:H 1:A:89:GLU:H 11 0.04 (1,270) 1:A:42:TYR:H 1:A:54:SER:H 7 0.04 (1,269) 1:A:22:ASN:HD22 1:A:24:GLY:H 3 0.04 (1,269) 1:A:22:ASN:HD22 1:A:24:GLY:H 3 0.04 (1,269) 1:A:22:ASN:HD22 1:A:24:GLY:H 5 0.04 (1,260) 1:A:22:ASN:HD22 1:A:24:GLY:H 5 0.04 (1,261) 1:A:99:LEU:HD21 1:A:116:ILE:HD11 3 0.04 (1,261) 1:A:99:LEU:HD22 1:A:116:ILE:HD11 3 0.04 (1,261) 1:A:99:LEU:HD21 1:A:116:ILE:HD11 3 0.04 (1,261) 1:A:99:LEU:HD22 1:A:116:ILE:HD11 3 0.04 (1,261) 1:A:99:LEU:HD22 1:A:116:ILE:HD11 3 0.04 (1,261) 1:A:99:LEU:HD21 1:A:116:ILE:HD11 3 0.04 (1,261) 1:A:99:LEU:HD22 1:A:116:ILE:HD13 3 0.04 (1,261) 1:A:99:LEU:HD23 1:A:116:ILE:HD13 3 0.04 (1,261) 1:A:199:LEU:HD23 1:A:116:ILE:HD11 3 0.04 (1,261) 1:A:199:LEU:HD23 1:A:116:ILE:HD13 3 0	(1,32)	1:A:103:PHE:H	1:A:112:LEU:HD22		0.04
(1,31) 1:A:43:VAL:HG21 1:A:49:LYS:H 15 0.04 (1,31) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:49:LYS:H 15 0.04 (1,31) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:49:LYS:H 15 0.04 (1,308) 1:A:30:GLN:H 1:A:34:TRP:HE1 11 0.04 (1,307) 1:A:32:GLU:H 1:A:34:TRP:HE1 11 0.04 (1,305) 1:A:25:THR:H 1:A:26:GLU:H 15 0.04 (1,303) 1:A:18:GLU:H 1:A:20:THR:H 3 0.04 (1,299) 1:A:15:MET:H 1:A:20:THR:H 3 0.04 (1,299) 1:A:78:LYS:H 1:A:90:VAL:HG21 13 0.04 (1,29) 1:A:78:LYS:H 1:A:90:VAL:HG21 13 0.04 (1,29) 1:A:78:LYS:H 1:A:90:VAL:HG21 13 0.04 (1,29) 1:A:78:LYS:H 1:A:90:VAL:HG22 13 0.04 (1,29) 1:A:78:LYS:H 1:A:90:VAL:HG23 13 0.04 (1,281) 1:A:110:ASN:HD22 1:A:112:LEU:H 13 0.04 (1,274) 1:A:80:ASP:H 1:A:89:GLU:H 11 0.04 (1,270) 1:A:42:TYR:H 1:A:54:SER:H 7 0.04 (1,269) 1:A:22:ASN:HD22 1:A:24:GLY:H 3 0.04 (1,269) 1:A:22:ASN:HD22 1:A:24:GLY:H 5 0.04 (1,269) 1:A:22:ASN:HD22 1:A:24:GLY:H 5 0.04 (1,260) 1:A:21:GLN:H 1:A:24:GLY:H 5 0.04 (1,261) 1:A:99:LEU:HD21 1:A:116:ILE:HD11 3 0.04 (1,261) 1:A:99:LEU:HD21 1:A:116:ILE:HD11 3 0.04 (1,261) 1:A:99:LEU:HD22 1:A:116:ILE:HD11 3 0.04 (1,261) 1:A:99:LEU:HD23 1:A:116:ILE:HD11 3 0.04 (1,261) 1:A:199:LEU:HD23 1:A:116:ILE:HD11 3 0.04 (1,261) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD13 3 0.04 (1,261) 1:A:128:LYS:H 1:A:1	(1,32)	1:A:103:PHE:H	1:A:112:LEU:HD23	5	0.04
(1,31) 1:A:43:VAL:HG22 1:A:49:LYS:H 15 0.04 (1,31) 1:A:43:VAL:HG23 1:A:49:LYS:H 15 0.04 (1,308) 1:A:30:GLN:H 1:A:34:TRP:HE1 11 0.04 (1,307) 1:A:32:GLU:H 1:A:34:TRP:H 13 0.04 (1,305) 1:A:25:THR:H 1:A:26:GLU:H 15 0.04 (1,303) 1:A:18:GLU:H 1:A:26:GLU:H 15 0.04 (1,299) 1:A:15:MET:H 1:A:26:GLU:H 2 0.04 (1,299) 1:A:78:LYS:H 1:A:90:VAL:HG21 13 0.04 (1,29) 1:A:78:LYS:H 1:A:90:VAL:HG21 13 0.04 (1,29) 1:A:78:LYS:H 1:A:90:VAL:HG22 13 0.04 (1,29) 1:A:78:LYS:H 1:A:90:VAL:HG23 13 0.04 (1,29) 1:A:78:LYS:H 1:A:90:VAL:HG23 13 0.04 (1,281) 1:A:110:ASN:HD22 1:A:112:LEU:H 13 0.04 (1,274) 1:A:80:ASP:H 1:A:89:GLU:H 11 0.04 (1,270) 1:A:42:TYR:H 1:A:54:SER:H 7 0.04 (1,269) 1:A:22:ASN:HD22 1:A:24:GLY:H 3 0.04 (1,269) 1:A:22:ASN:HD22 1:A:24:GLY:H 5 0.04 (1,269) 1:A:22:ASN:HD22 1:A:24:GLY:H 5 0.04 (1,261) 1:A:99:LEU:HD21 1:A:116:LE:HD11 3 0.04 (1,261) 1:A:99:LEU:HD21 1:A:116:LE:HD11 3 0.04 (1,261) 1:A:99:LEU:HD22 1:A:116:LE:HD11 3 0.04 (1,261) 1:A:99:LEU:HD23 1:A:116:LE:HD11 3 0.04 (1,261) 1:A:199:LEU:HD23 1:A:116:LE:HD11 3 0.04 (1,261) 1:A:199:LEU:HD23 1:A:116:LE:HD11 3 0.04 (1,261) 1:A:128:LYS:H 1:A:129:LEU:HD13 3	(1,312)	1:A:41:LEU:H	1:A:124:VAL:H	10	0.04
(1,31)         1:A:43:VAL:HG23         1:A:49:LYS:H         15         0.04           (1,308)         1:A:30:GLN:H         1:A:34:TRP:HE1         11         0.04           (1,307)         1:A:32:GLU:H         1:A:34:TRP:H         13         0.04           (1,305)         1:A:25:THR:H         1:A:26:GLU:H         15         0.04           (1,303)         1:A:18:GLU:H         1:A:20:THR:H         3         0.04           (1,299)         1:A:78:LYS:H         1:A:90:VAL:HG21         13         0.04           (1,29)         1:A:78:LYS:H         1:A:90:VAL:HG22         13         0.04           (1,29)         1:A:78:LYS:H         1:A:90:VAL:HG23         13         0.04           (1,291)         1:A:48:GLY:H         13         0.04           (1,274)         1:A:80:ASP:H         1:A:89:GLU:H         11         0.04           (1,269)         1:A:42:TYR:H         1:A:48:GLY:H         3         0.04	(1,31)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:49:LYS:H	15	0.04
(1,308)         1:A:30:GLN:H         1:A:34:TRP:HE1         11         0.04           (1,307)         1:A:32:GLU:H         1:A:34:TRP:H         13         0.04           (1,305)         1:A:25:THR:H         1:A:26:GLU:H         15         0.04           (1,303)         1:A:18:GLU:H         1:A:20:THR:H         3         0.04           (1,299)         1:A:75:LYS:H         1:A:90:VAL:HG21         13         0.04           (1,29)         1:A:78:LYS:H         1:A:90:VAL:HG22         13         0.04           (1,29)         1:A:78:LYS:H         1:A:90:VAL:HG23         13         0.04           (1,29)         1:A:110:ASN:HD22         1:A:112:LEU:H         13         0.04           (1,274)         1:A:80:ASP:H         1:A:89:GLU:H         1         0.04           (1,269)         1:A:22:ASN:HD22         1:A:24:GLY:H         5 <th< td=""><td>(1,31)</td><td>1:A:43:VAL:HG22</td><td>1:A:49:LYS:H</td><td>15</td><td>0.04</td></th<>	(1,31)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:49:LYS:H	15	0.04
(1,307)         1:A:32:GLU:H         1:A:34:TRP:H         13         0.04           (1,305)         1:A:25:THR:H         1:A:26:GLU:H         15         0.04           (1,303)         1:A:18:GLU:H         1:A:20:THR:H         3         0.04           (1,299)         1:A:78:LYS:H         1:A:18:GLU:H         2         0.04           (1,29)         1:A:78:LYS:H         1:A:90:VAL:HG21         13         0.04           (1,29)         1:A:78:LYS:H         1:A:90:VAL:HG22         13         0.04           (1,29)         1:A:78:LYS:H         1:A:90:VAL:HG23         13         0.04           (1,29)         1:A:74:LS:LY:H         13         0.04           (1,29)         1:A:42:SLY:H         13         0.04           (1,260)         1:A:42:TYR:H         1:A:24:GLY:H         11         0.04           (1,261)         1:	(1,31)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:49:LYS:H	15	0.04
(1,305)         1:A:25:THR:H         1:A:26:GLU:H         15         0.04           (1,303)         1:A:18:GLU:H         1:A:20:THR:H         3         0.04           (1,299)         1:A:15:MET:H         1:A:18:GLU:H         2         0.04           (1,29)         1:A:78:LYS:H         1:A:90:VAL:HG21         13         0.04           (1,29)         1:A:78:LYS:H         1:A:90:VAL:HG22         13         0.04           (1,29)         1:A:78:LYS:H         1:A:90:VAL:HG23         13         0.04           (1,281)         1:A:110:ASS:HD22         1:A:112:LEU:H         13         0.04           (1,281)         1:A:42:TYR:H         1:A:254:SER:H         7         0.04           (1,270)         1:A:42:TYR:H         1:A:254:SER:H         7         0.04           (1,269)         1:A:22:ASN:HD22         1:A:24:GLY:H         5         0.04           (1,269)         1:A:29:LEU:HD21         1:A:116:ILE:HD11         3         <	(1,308)	1:A:30:GLN:H	1:A:34:TRP:HE1	11	0.04
(1,303)         1:A:18:GLU:H         1:A:20:THR:H         3         0.04           (1,299)         1:A:15:MET:H         1:A:18:GLU:H         2         0.04           (1,29)         1:A:78:LYS:H         1:A:90:VAL:HG21         13         0.04           (1,29)         1:A:78:LYS:H         1:A:90:VAL:HG22         13         0.04           (1,29)         1:A:78:LYS:H         1:A:90:VAL:HG23         13         0.04           (1,281)         1:A:110:ASN:HD22         1:A:112:LEU:H         13         0.04           (1,274)         1:A:80:ASP:H         1:A:89:GLU:H         11         0.04           (1,270)         1:A:42:TYR:H         1:A:54:SER:H         7         0.04           (1,269)         1:A:22:ASN:HD22         1:A:24:GLY:H         3         0.04           (1,269)         1:A:22:ASN:HD22         1:A:24:GLY:H         5         0.04           (1,261)         1:A:99:LEU:HD21         1:A:116:ILE:HD11         3         0.04           (1,261)         1:A:99:LEU:HD21         1:A:116:ILE:HD12         3         0.04           (1,261)         1:A:99:LEU:HD22         1:A:116:ILE:HD13         3         0.04           (1,261)         1:A:99:LEU:HD22         1:A:116:ILE:HD13         3 </td <td>(1,307)</td> <td>1:A:32:GLU:H</td> <td>1:A:34:TRP:H</td> <td>13</td> <td>0.04</td>	(1,307)	1:A:32:GLU:H	1:A:34:TRP:H	13	0.04
(1,299)         1:A:15:MET:H         1:A:18:GLU:H         2         0.04           (1,29)         1:A:78:LYS:H         1:A:90:VAL:HG21         13         0.04           (1,29)         1:A:78:LYS:H         1:A:90:VAL:HG22         13         0.04           (1,29)         1:A:78:LYS:H         1:A:90:VAL:HG23         13         0.04           (1,281)         1:A:110:ASN:HD22         1:A:112:LEU:H         13         0.04           (1,274)         1:A:80:ASP:H         1:A:89:GLU:H         11         0.04           (1,270)         1:A:42:TYR:H         1:A:54:SER:H         7         0.04           (1,269)         1:A:22:ASN:HD22         1:A:24:GLY:H         3         0.04           (1,269)         1:A:22:ASN:HD22         1:A:24:GLY:H         5         0.04           (1,269)         1:A:22:ASN:HD22         1:A:24:GLY:H         5         0.04           (1,261)         1:A:29:LEU:HD21         1:A:116:ILE:HD11         3         0.04           (1,261)         1:A:99:LEU:HD21         1:A:116:ILE:HD12         3         0.04           (1,261)         1:A:99:LEU:HD22         1:A:116:ILE:HD13         3         0.04           (1,261)         1:A:99:LEU:HD23         1:A:116:ILE:HD13	(1,305)	1:A:25:THR:H	1:A:26:GLU:H	15	0.04
(1,29)         1:A:78:LYS:H         1:A:90:VAL:HG21         13         0.04           (1,29)         1:A:78:LYS:H         1:A:90:VAL:HG22         13         0.04           (1,29)         1:A:78:LYS:H         1:A:90:VAL:HG23         13         0.04           (1,281)         1:A:110:ASN:HD22         1:A:112:LEU:H         13         0.04           (1,274)         1:A:80:ASP:H         1:A:89:GLU:H         11         0.04           (1,270)         1:A:42:TYR:H         1:A:54:SER:H         7         0.04           (1,269)         1:A:22:ASN:HD22         1:A:24:GLY:H         3         0.04           (1,269)         1:A:22:ASN:HD22         1:A:24:GLY:H         5         0.04           (1,269)         1:A:22:ASN:HD22         1:A:24:GLY:H         5         0.04           (1,269)         1:A:21:GLN:H         1:A:24:GLY:H         5         0.04           (1,267)         1:A:21:GLN:H         1:A:16:ILE:HD11         3         0.04           (1,261)         1:A:99:LEU:HD21         1:A:16:ILE:HD12         3         0.04           (1,261)         1:A:99:LEU:HD22         1:A:116:ILE:HD13         3         0.04           (1,261)         1:A:99:LEU:HD22         1:A:116:ILE:HD13         3 <td>(1,303)</td> <td>1:A:18:GLU:H</td> <td>1:A:20:THR:H</td> <td>3</td> <td>0.04</td>	(1,303)	1:A:18:GLU:H	1:A:20:THR:H	3	0.04
(1,29)         1:A:78:LYS:H         1:A:90:VAL:HG22         13         0.04           (1,29)         1:A:78:LYS:H         1:A:90:VAL:HG23         13         0.04           (1,281)         1:A:110:ASN:HD22         1:A:112:LEU:H         13         0.04           (1,274)         1:A:80:ASP:H         1:A:89:GLU:H         11         0.04           (1,270)         1:A:42:TYR:H         1:A:54:SER:H         7         0.04           (1,269)         1:A:22:ASN:HD22         1:A:24:GLY:H         3         0.04           (1,269)         1:A:22:ASN:HD22         1:A:24:GLY:H         5         0.04           (1,269)         1:A:21:GLN:H         1:A:24:GLY:H         5         0.04           (1,269)         1:A:21:GLN:H         1:A:24:GLY:H         5         0.04           (1,261)         1:A:99:LEU:HD21         1:A:116:ILE:HD11         3         0.04           (1,261)         1:A:99:LEU:HD21         1:A:116:ILE:HD12         3         0.04           (1,261)         1:A:99:LEU:HD22         1:A:116:ILE:HD11         3         0.04           (1,261)         1:A:99:LEU:HD22         1:A:116:ILE:HD12         3         0.04           (1,261)         1:A:99:LEU:HD23         1:A:116:ILE:HD13 <td< td=""><td>(1,299)</td><td>1:A:15:MET:H</td><td>1:A:18:GLU:H</td><td>2</td><td>0.04</td></td<>	(1,299)	1:A:15:MET:H	1:A:18:GLU:H	2	0.04
(1,29)         1:A:78:LYS:H         1:A:90:VAL:HG23         13         0.04           (1,281)         1:A:110:ASN:HD22         1:A:112:LEU:H         13         0.04           (1,274)         1:A:80:ASP:H         1:A:89:GLU:H         11         0.04           (1,270)         1:A:42:TYR:H         1:A:54:SER:H         7         0.04           (1,269)         1:A:22:ASN:HD22         1:A:24:GLY:H         3         0.04           (1,269)         1:A:22:ASN:HD22         1:A:24:GLY:H         5         0.04           (1,269)         1:A:22:ASN:HD22         1:A:24:GLY:H         5         0.04           (1,269)         1:A:21:GLN:H         1:A:24:GLY:H         5         0.04           (1,267)         1:A:21:GLN:H         1:A:116:ILE:HD11         3         0.04           (1,261)         1:A:99:LEU:HD21         1:A:116:ILE:HD12         3         0.04           (1,261)         1:A:99:LEU:HD21         1:A:116:ILE:HD13         3         0.04           (1,261)         1:A:99:LEU:HD22         1:A:116:ILE:HD11         3         0.04           (1,261)         1:A:99:LEU:HD23         1:A:116:ILE:HD11         3         0.04           (1,261)         1:A:99:LEU:HD23         1:A:116:ILE:HD11	(1,29)	1:A:78:LYS:H	1:A:90:VAL:HG21	13	0.04
(1,281)         1:A:110:ASN:HD22         1:A:112:LEU:H         13         0.04           (1,274)         1:A:80:ASP:H         1:A:89:GLU:H         11         0.04           (1,270)         1:A:42:TYR:H         1:A:54:SER:H         7         0.04           (1,269)         1:A:22:ASN:HD22         1:A:24:GLY:H         3         0.04           (1,269)         1:A:22:ASN:HD22         1:A:24:GLY:H         5         0.04           (1,269)         1:A:22:ASN:HD22         1:A:24:GLY:H         5         0.04           (1,269)         1:A:21:GLN:H         1:A:24:GLY:H         5         0.04           (1,267)         1:A:21:GLN:H         1:A:24:GLY:H         5         0.04           (1,261)         1:A:99:LEU:HD21         1:A:116:ILE:HD11         3         0.04           (1,261)         1:A:99:LEU:HD21         1:A:116:ILE:HD13         3         0.04           (1,261)         1:A:99:LEU:HD22         1:A:116:ILE:HD11         3         0.04           (1,261)         1:A:99:LEU:HD22         1:A:116:ILE:HD13         3         0.04           (1,261)         1:A:99:LEU:HD23         1:A:116:ILE:HD11         3         0.04           (1,261)         1:A:99:LEU:HD23         1:A:116:ILE:HD13	(1,29)	1:A:78:LYS:H	1:A:90:VAL:HG22	13	0.04
(1,274)         1:A:80:ASP:H         1:A:89:GLU:H         11         0.04           (1,270)         1:A:42:TYR:H         1:A:54:SER:H         7         0.04           (1,269)         1:A:22:ASN:HD22         1:A:24:GLY:H         3         0.04           (1,269)         1:A:22:ASN:HD22         1:A:24:GLY:H         5         0.04           (1,269)         1:A:22:ASN:HD22         1:A:24:GLY:H         15         0.04           (1,267)         1:A:21:GLN:H         1:A:24:GLY:H         5         0.04           (1,261)         1:A:99:LEU:HD21         1:A:116:ILE:HD11         3         0.04           (1,261)         1:A:99:LEU:HD21         1:A:116:ILE:HD12         3         0.04           (1,261)         1:A:99:LEU:HD22         1:A:116:ILE:HD13         3         0.04           (1,261)         1:A:99:LEU:HD22         1:A:116:ILE:HD12         3         0.04           (1,261)         1:A:99:LEU:HD22         1:A:116:ILE:HD13         3         0.04           (1,261)         1:A:99:LEU:HD23         1:A:116:ILE:HD13         3         0.04           (1,261)         1:A:99:LEU:HD23         1:A:116:ILE:HD11         3         0.04           (1,261)         1:A:99:LEU:HD23         1:A:116:ILE:HD13 <td>(1,29)</td> <td>1:A:78:LYS:H</td> <td>1:A:90:VAL:HG23</td> <td>13</td> <td>0.04</td>	(1,29)	1:A:78:LYS:H	1:A:90:VAL:HG23	13	0.04
(1,270)         1:A:42:TYR:H         1:A:54:SER:H         7         0.04           (1,269)         1:A:22:ASN:HD22         1:A:24:GLY:H         3         0.04           (1,269)         1:A:22:ASN:HD22         1:A:24:GLY:H         5         0.04           (1,269)         1:A:22:ASN:HD22         1:A:24:GLY:H         15         0.04           (1,267)         1:A:21:GLN:H         1:A:24:GLY:H         5         0.04           (1,261)         1:A:99:LEU:HD21         1:A:116:ILE:HD11         3         0.04           (1,261)         1:A:99:LEU:HD21         1:A:116:ILE:HD12         3         0.04           (1,261)         1:A:99:LEU:HD21         1:A:116:ILE:HD13         3         0.04           (1,261)         1:A:99:LEU:HD22         1:A:116:ILE:HD12         3         0.04           (1,261)         1:A:99:LEU:HD22         1:A:116:ILE:HD13         3         0.04           (1,261)         1:A:99:LEU:HD23         1:A:116:ILE:HD11         3         0.04           (1,261)         1:A:99:LEU:HD23         1:A:116:ILE:HD11         3         0.04           (1,261)         1:A:99:LEU:HD23         1:A:116:ILE:HD11         3         0.04           (1,26)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD11<	(1,281)	1:A:110:ASN:HD22	1:A:112:LEU:H	13	0.04
(1,269)       1:A:22:ASN:HD22       1:A:24:GLY:H       3       0.04         (1,269)       1:A:22:ASN:HD22       1:A:24:GLY:H       5       0.04         (1,269)       1:A:22:ASN:HD22       1:A:24:GLY:H       15       0.04         (1,267)       1:A:21:GLN:H       1:A:24:GLY:H       5       0.04         (1,261)       1:A:99:LEU:HD21       1:A:116:ILE:HD11       3       0.04         (1,261)       1:A:99:LEU:HD21       1:A:116:ILE:HD12       3       0.04         (1,261)       1:A:99:LEU:HD21       1:A:116:ILE:HD13       3       0.04         (1,261)       1:A:99:LEU:HD22       1:A:116:ILE:HD12       3       0.04         (1,261)       1:A:99:LEU:HD22       1:A:116:ILE:HD13       3       0.04         (1,261)       1:A:99:LEU:HD23       1:A:116:ILE:HD13       3       0.04         (1,261)       1:A:99:LEU:HD23       1:A:116:ILE:HD13       3       0.04         (1,261)       1:A:99:LEU:HD23       1:A:116:ILE:HD13       3       0.04         (1,261)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD13       3       0.04         (1,26)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD13       3       0.04         (1,26)       1:A:128:LYS:H <td< td=""><td>(1,274)</td><td>1:A:80:ASP:H</td><td>1:A:89:GLU:H</td><td>11</td><td>0.04</td></td<>	(1,274)	1:A:80:ASP:H	1:A:89:GLU:H	11	0.04
(1,269)       1:A:22:ASN:HD22       1:A:24:GLY:H       5       0.04         (1,269)       1:A:22:ASN:HD22       1:A:24:GLY:H       15       0.04         (1,267)       1:A:21:GLN:H       1:A:24:GLY:H       5       0.04         (1,261)       1:A:99:LEU:HD21       1:A:116:ILE:HD11       3       0.04         (1,261)       1:A:99:LEU:HD21       1:A:116:ILE:HD12       3       0.04         (1,261)       1:A:99:LEU:HD21       1:A:116:ILE:HD13       3       0.04         (1,261)       1:A:99:LEU:HD22       1:A:116:ILE:HD11       3       0.04         (1,261)       1:A:99:LEU:HD22       1:A:116:ILE:HD12       3       0.04         (1,261)       1:A:99:LEU:HD23       1:A:116:ILE:HD13       3       0.04         (1,261)       1:A:99:LEU:HD23       1:A:116:ILE:HD12       3       0.04         (1,261)       1:A:99:LEU:HD23       1:A:116:ILE:HD13       3       0.04         (1,261)       1:A:129:LEU:HD23       1:A:116:ILE:HD13       3       0.04         (1,26)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD13       3       0.04         (1,26)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD13       3       0.04         (1,26)       1:A:128:LYS:H	(1,270)	1:A:42:TYR:H	1:A:54:SER:H	7	0.04
(1,269)       1:A:22:ASN:HD22       1:A:24:GLY:H       15       0.04         (1,267)       1:A:21:GLN:H       1:A:24:GLY:H       5       0.04         (1,261)       1:A:99:LEU:HD21       1:A:116:ILE:HD11       3       0.04         (1,261)       1:A:99:LEU:HD21       1:A:116:ILE:HD12       3       0.04         (1,261)       1:A:99:LEU:HD21       1:A:116:ILE:HD13       3       0.04         (1,261)       1:A:99:LEU:HD22       1:A:116:ILE:HD11       3       0.04         (1,261)       1:A:99:LEU:HD22       1:A:116:ILE:HD12       3       0.04         (1,261)       1:A:99:LEU:HD23       1:A:116:ILE:HD13       3       0.04         (1,261)       1:A:99:LEU:HD23       1:A:116:ILE:HD11       3       0.04         (1,261)       1:A:99:LEU:HD23       1:A:116:ILE:HD13       3       0.04         (1,261)       1:A:99:LEU:HD23       1:A:116:ILE:HD13       3       0.04         (1,261)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD11       3       0.04         (1,26)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD12       3       0.04         (1,26)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD13       3       0.04         (1,26)       1:A:15:1:LEU:HD21	(1,269)	1:A:22:ASN:HD22	1:A:24:GLY:H	3	0.04
(1,267)         1:A:21:GLN:H         1:A:24:GLY:H         5         0.04           (1,261)         1:A:99:LEU:HD21         1:A:116:ILE:HD11         3         0.04           (1,261)         1:A:99:LEU:HD21         1:A:116:ILE:HD12         3         0.04           (1,261)         1:A:99:LEU:HD21         1:A:116:ILE:HD13         3         0.04           (1,261)         1:A:99:LEU:HD22         1:A:116:ILE:HD11         3         0.04           (1,261)         1:A:99:LEU:HD22         1:A:116:ILE:HD13         3         0.04           (1,261)         1:A:99:LEU:HD23         1:A:116:ILE:HD11         3         0.04           (1,261)         1:A:99:LEU:HD23         1:A:116:ILE:HD12         3         0.04           (1,261)         1:A:99:LEU:HD23         1:A:116:ILE:HD13         3         0.04           (1,261)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD11         3         0.04           (1,26)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD12         3         0.04           (1,26)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD13         3         0.04           (1,26)         1:A:128:LYS:H         1:A:129:LEU:HD13         3         0.04           (1,259)         1:A:51:LEU:HD21         1:A:71:	(1,269)	1:A:22:ASN:HD22	1:A:24:GLY:H	5	0.04
(1,261)       1:A:99:LEU:HD21       1:A:116:ILE:HD11       3       0.04         (1,261)       1:A:99:LEU:HD21       1:A:116:ILE:HD12       3       0.04         (1,261)       1:A:99:LEU:HD21       1:A:116:ILE:HD13       3       0.04         (1,261)       1:A:99:LEU:HD22       1:A:116:ILE:HD11       3       0.04         (1,261)       1:A:99:LEU:HD22       1:A:116:ILE:HD12       3       0.04         (1,261)       1:A:99:LEU:HD23       1:A:116:ILE:HD13       3       0.04         (1,261)       1:A:99:LEU:HD23       1:A:116:ILE:HD12       3       0.04         (1,261)       1:A:99:LEU:HD23       1:A:116:ILE:HD13       3       0.04         (1,261)       1:A:99:LEU:HD23       1:A:116:ILE:HD13       3       0.04         (1,26)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD11       3       0.04         (1,26)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD12       3       0.04         (1,26)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD13       3       0.04         (1,259)       1:A:51:LEU:HD21       1:A:71:ILE:HD11       2       0.04	(1,269)	1:A:22:ASN:HD22	1:A:24:GLY:H	15	0.04
(1,261)       1:A:99:LEU:HD21       1:A:116:ILE:HD12       3       0.04         (1,261)       1:A:99:LEU:HD21       1:A:116:ILE:HD13       3       0.04         (1,261)       1:A:99:LEU:HD22       1:A:116:ILE:HD11       3       0.04         (1,261)       1:A:99:LEU:HD22       1:A:116:ILE:HD12       3       0.04         (1,261)       1:A:99:LEU:HD23       1:A:116:ILE:HD13       3       0.04         (1,261)       1:A:99:LEU:HD23       1:A:116:ILE:HD12       3       0.04         (1,261)       1:A:99:LEU:HD23       1:A:116:ILE:HD13       3       0.04         (1,261)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD13       3       0.04         (1,26)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD11       3       0.04         (1,26)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD12       3       0.04         (1,26)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD13       3       0.04         (1,259)       1:A:51:LEU:HD21       1:A:71:ILE:HD11       2       0.04	(1,267)	1:A:21:GLN:H	1:A:24:GLY:H	5	0.04
(1,261)       1:A:99:LEU:HD21       1:A:116:ILE:HD13       3       0.04         (1,261)       1:A:99:LEU:HD22       1:A:116:ILE:HD11       3       0.04         (1,261)       1:A:99:LEU:HD22       1:A:116:ILE:HD12       3       0.04         (1,261)       1:A:99:LEU:HD22       1:A:116:ILE:HD13       3       0.04         (1,261)       1:A:99:LEU:HD23       1:A:116:ILE:HD11       3       0.04         (1,261)       1:A:99:LEU:HD23       1:A:116:ILE:HD12       3       0.04         (1,261)       1:A:99:LEU:HD23       1:A:116:ILE:HD13       3       0.04         (1,26)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD11       3       0.04         (1,26)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD12       3       0.04         (1,26)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD13       3       0.04         (1,259)       1:A:51:LEU:HD21       1:A:71:ILE:HD11       2       0.04	(1,261)	1:A:99:LEU:HD21	1:A:116:ILE:HD11	3	0.04
(1,261)       1:A:99:LEU:HD22       1:A:116:ILE:HD11       3       0.04         (1,261)       1:A:99:LEU:HD22       1:A:116:ILE:HD12       3       0.04         (1,261)       1:A:99:LEU:HD22       1:A:116:ILE:HD13       3       0.04         (1,261)       1:A:99:LEU:HD23       1:A:116:ILE:HD11       3       0.04         (1,261)       1:A:99:LEU:HD23       1:A:116:ILE:HD12       3       0.04         (1,261)       1:A:99:LEU:HD23       1:A:116:ILE:HD13       3       0.04         (1,26)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD11       3       0.04         (1,26)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD12       3       0.04         (1,26)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD13       3       0.04         (1,259)       1:A:51:LEU:HD21       1:A:71:ILE:HD11       2       0.04	(1,261)	1:A:99:LEU:HD21	1:A:116:ILE:HD12	3	0.04
(1,261)       1:A:99:LEU:HD22       1:A:116:ILE:HD12       3       0.04         (1,261)       1:A:99:LEU:HD22       1:A:116:ILE:HD13       3       0.04         (1,261)       1:A:99:LEU:HD23       1:A:116:ILE:HD11       3       0.04         (1,261)       1:A:99:LEU:HD23       1:A:116:ILE:HD12       3       0.04         (1,261)       1:A:99:LEU:HD23       1:A:116:ILE:HD13       3       0.04         (1,26)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD11       3       0.04         (1,26)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD12       3       0.04         (1,26)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD13       3       0.04         (1,26)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD13       3       0.04         (1,259)       1:A:51:LEU:HD21       1:A:71:ILE:HD11       2       0.04	(1,261)	1:A:99:LEU:HD21	1:A:116:ILE:HD13	3	0.04
(1,261)       1:A:99:LEU:HD22       1:A:116:ILE:HD13       3       0.04         (1,261)       1:A:99:LEU:HD23       1:A:116:ILE:HD11       3       0.04         (1,261)       1:A:99:LEU:HD23       1:A:116:ILE:HD12       3       0.04         (1,261)       1:A:99:LEU:HD23       1:A:116:ILE:HD13       3       0.04         (1,26)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD11       3       0.04         (1,26)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD12       3       0.04         (1,26)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD13       3       0.04         (1,259)       1:A:51:LEU:HD21       1:A:71:ILE:HD11       2       0.04	(1,261)	1:A:99:LEU:HD22	1:A:116:ILE:HD11	3	0.04
(1,261)       1:A:99:LEU:HD23       1:A:116:ILE:HD11       3       0.04         (1,261)       1:A:99:LEU:HD23       1:A:116:ILE:HD12       3       0.04         (1,261)       1:A:99:LEU:HD23       1:A:116:ILE:HD13       3       0.04         (1,26)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD11       3       0.04         (1,26)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD12       3       0.04         (1,26)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD13       3       0.04         (1,259)       1:A:51:LEU:HD21       1:A:71:ILE:HD11       2       0.04	(1,261)	1:A:99:LEU:HD22	1:A:116:ILE:HD12	3	0.04
(1,261)       1:A:99:LEU:HD23       1:A:116:ILE:HD12       3       0.04         (1,261)       1:A:99:LEU:HD23       1:A:116:ILE:HD13       3       0.04         (1,26)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD11       3       0.04         (1,26)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD12       3       0.04         (1,26)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD13       3       0.04         (1,26)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD13       3       0.04         (1,259)       1:A:51:LEU:HD21       1:A:71:ILE:HD11       2       0.04	(1,261)	1:A:99:LEU:HD22	1:A:116:ILE:HD13	3	0.04
(1,261)       1:A:99:LEU:HD23       1:A:116:ILE:HD13       3       0.04         (1,26)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD11       3       0.04         (1,26)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD12       3       0.04         (1,26)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD13       3       0.04         (1,259)       1:A:51:LEU:HD21       1:A:71:ILE:HD11       2       0.04	· · /	1:A:99:LEU:HD23	1:A:116:ILE:HD11	3	0.04
(1,261)       1:A:99:LEU:HD23       1:A:116:ILE:HD13       3       0.04         (1,26)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD11       3       0.04         (1,26)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD12       3       0.04         (1,26)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD13       3       0.04         (1,259)       1:A:51:LEU:HD21       1:A:71:ILE:HD11       2       0.04	(1,261)	1:A:99:LEU:HD23	1:A:116:ILE:HD12	3	0.04
(1,26)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD11       3       0.04         (1,26)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD12       3       0.04         (1,26)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD13       3       0.04         (1,259)       1:A:51:LEU:HD21       1:A:71:ILE:HD11       2       0.04	(1,261)	1:A:99:LEU:HD23	1:A:116:ILE:HD13	3	0.04
(1,26)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD12       3       0.04         (1,26)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD13       3       0.04         (1,259)       1:A:51:LEU:HD21       1:A:71:ILE:HD11       2       0.04		1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD11	3	0.04
(1,26)       1:A:128:LYS:H       1:A:129:LEU:HD13       3       0.04         (1,259)       1:A:51:LEU:HD21       1:A:71:ILE:HD11       2       0.04		1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD12	3	0.04
		1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD13	3	0.04
(4 OFO) A A FA I DIVIDOS	(1,259)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD11	2	0.04
(1,259)   1:A:51:LEU:HD21   1:A:71:ILE:HD12   2   0.04	(1,259)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD12	2	0.04



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

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



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

(1,221) (1,221)	1:A:71:ILE:HD11 1:A:71:ILE:HD12	1:A:140:LEU:HD13	6	0.04
(1,221)	1.A.71.ILE.HD12		U	0.04
( ) /	1.11.11.1111111111111111111111111111111	1:A:140:LEU:HD11	6	0.04
(1. 5)	1:A:71:ILE:HD12	1:A:140:LEU:HD12	6	0.04
(1,221)	1:A:71:ILE:HD12	1:A:140:LEU:HD13	6	0.04
(1,221)	1:A:71:ILE:HD13	1:A:140:LEU:HD11	6	0.04
(1,221)	1:A:71:ILE:HD13	1:A:140:LEU:HD12	6	0.04
(1,221)	1:A:71:ILE:HD13	1:A:140:LEU:HD13	6	0.04
(1,214)	1:A:16:GLN:HE22	1:A:45:ILE:HD11	6	0.04
(1,214)	1:A:16:GLN:HE22	1:A:45:ILE:HD12	6	0.04
(1,214)	1:A:16:GLN:HE22	1:A:45:ILE:HD13	6	0.04
(1,212)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:129:LEU:HD11	8	0.04
(1,212)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:129:LEU:HD12	8	0.04
(1,212)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:129:LEU:HD13	8	0.04
(1,212)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:129:LEU:HD11	8	0.04
(1,212)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:129:LEU:HD12	8	0.04
(1,212)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:129:LEU:HD13	8	0.04
(1,212)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:129:LEU:HD11	8	0.04
(1,212)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:129:LEU:HD12	8	0.04
(1,212)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:129:LEU:HD13	8	0.04
(1,211)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:138:LEU:HD11	10	0.04
(1,211)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:138:LEU:HD12	10	0.04
(1,211)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:138:LEU:HD13	10	0.04
(1,211)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:138:LEU:HD11	10	0.04
(1,211)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:138:LEU:HD12	10	0.04
(1,211)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:138:LEU:HD13	10	0.04
(1,211)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:138:LEU:HD11	10	0.04
(1,211)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:138:LEU:HD12	10	0.04
(1,211)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:138:LEU:HD13	10	0.04
(1,21)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD11	6	0.04
(1,21)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD12	6	0.04
(1,21)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD13	6	0.04
(1,21)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD11	18	0.04
(1,21)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD12	18	0.04
(1,21)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD13	18	0.04
	1:A:43:VAL:HG11	1:A:124:VAL:HG11	2	0.04
	1:A:43:VAL:HG11	1:A:124:VAL:HG12	2	0.04
(1,207)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:124:VAL:HG13	2	0.04
(1,207)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:124:VAL:HG11	2	0.04
(1,207)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:124:VAL:HG12	2	0.04
	1:A:43:VAL:HG12	1:A:124:VAL:HG13	2	0.04
(1,207)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:124:VAL:HG11	2	0.04
(1,207)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:124:VAL:HG12	2	0.04



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,207)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:124:VAL:HG13	2	0.04
(1,206)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:124:VAL:HG11	11	0.04
(1,206)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:124:VAL:HG12	11	0.04
(1,206)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:124:VAL:HG13	11	0.04
(1,206)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:HG11	11	0.04
(1,206)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:HG12	11	0.04
(1,206)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:HG13	11	0.04
(1,206)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:HG11	11	0.04
(1,206)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:HG12	11	0.04
(1,206)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:HG13	11	0.04
(1,201)	1:A:88:THR:H	1:A:102:VAL:HG11	4	0.04
(1,201)	1:A:88:THR:H	1:A:102:VAL:HG12	4	0.04
(1,201)	1:A:88:THR:H	1:A:102:VAL:HG13	4	0.04
(1,201)	1:A:88:THR:H	1:A:102:VAL:HG11	9	0.04
(1,201)	1:A:88:THR:H	1:A:102:VAL:HG12	9	0.04
(1,201)	1:A:88:THR:H	1:A:102:VAL:HG13	9	0.04
(1,195)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:124:VAL:HG21	5	0.04
(1,195)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:124:VAL:HG22	5	0.04
(1,195)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:124:VAL:HG23	5	0.04
(1,195)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:124:VAL:HG21	5	0.04
(1,195)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:124:VAL:HG22	5	0.04
(1,195)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:124:VAL:HG23	5	0.04
(1,195)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:124:VAL:HG21	5	0.04
(1,195)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:124:VAL:HG22	5	0.04
(1,195)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:124:VAL:HG23	5	0.04
(1,189)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:124:VAL:HG21	17	0.04
(1,189)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:124:VAL:HG22	17	0.04
(1,189)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:124:VAL:HG23	17	0.04
(1,189)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:HG21	17	0.04
(1,189)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:HG22	17	0.04
(1,189)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:HG23	17	0.04
(1,189)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:HG21	17	0.04
(1,189)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:HG22	17	0.04
(1,189)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:HG23	17	0.04
(1,187)	1:A:42:TYR:H	1:A:124:VAL:HG21	9	0.04
(1,187)	1:A:42:TYR:H	1:A:124:VAL:HG22	9	0.04
(1,187)	1:A:42:TYR:H	1:A:124:VAL:HG23	9	0.04
(1,186)	1:A:43:VAL:H	1:A:124:VAL:HG21	20	0.04
(1,186)	1:A:43:VAL:H	1:A:124:VAL:HG22	20	0.04
(1,186)	1:A:43:VAL:H	1:A:124:VAL:HG23	20	0.04
(1,184)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:112:LEU:HD11	10	0.04
(1,184)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:112:LEU:HD12	10	0.04



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

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



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,148)	1:A:44:ASP:H	1:A:122:ARG:H	8	0.04
(1,148)	1:A:44:ASP:H	1:A:122:ARG:H	17	0.04
(1,146)	1:A:130:LYS:H	1:A:132:GLU:H	7	0.04
(1,146)	1:A:130:LYS:H	1:A:132:GLU:H	8	0.04
(1,146)	1:A:130:LYS:H	1:A:132:GLU:H	18	0.04
(1,145)	1:A:128:LYS:H	1:A:130:LYS:H	4	0.04
(1,131)	1:A:17:TYR:H	1:A:19:VAL:H	5	0.04
(1,131)	1:A:17:TYR:H	1:A:19:VAL:H	7	0.04
(1,131)	1:A:17:TYR:H	1:A:19:VAL:H	19	0.04
(1,1279)	1:A:71:ILE:HD11	1:A:140:LEU:HD11	6	0.04
(1,1279)	1:A:71:ILE:HD11	1:A:140:LEU:HD12	6	0.04
(1,1279)	1:A:71:ILE:HD11	1:A:140:LEU:HD13	6	0.04
(1,1279)	1:A:71:ILE:HD12	1:A:140:LEU:HD11	6	0.04
(1,1279)	1:A:71:ILE:HD12	1:A:140:LEU:HD12	6	0.04
(1,1279)	1:A:71:ILE:HD12	1:A:140:LEU:HD13	6	0.04
(1,1279)	1:A:71:ILE:HD13	1:A:140:LEU:HD11	6	0.04
(1,1279)	1:A:71:ILE:HD13	1:A:140:LEU:HD12	6	0.04
(1,1279)	1:A:71:ILE:HD13	1:A:140:LEU:HD13	6	0.04
(1,1271)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:140:LEU:HD11	2	0.04
(1,1271)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:140:LEU:HD12	2	0.04
(1,1271)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:140:LEU:HD13	2	0.04
(1,1271)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:140:LEU:HD11	2	0.04
(1,1271)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:140:LEU:HD12	2	0.04
(1,1271)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:140:LEU:HD13	2	0.04
(1,1271)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:140:LEU:HD11	2	0.04
(1,1271)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:140:LEU:HD12	2	0.04
(1,1271)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:140:LEU:HD13	2	0.04
(1,1266)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:51:LEU:H	20	0.04
(1,1266)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:51:LEU:H	20	0.04
(1,1266)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:51:LEU:H	20	0.04
(1,1258)	1:A:115:CYS:H	1:A:101:HIS:H	15	0.04
(1,1257)	1:A:102:VAL:H	1:A:88:THR:H	18	0.04
(1,1256)	1:A:100:GLY:H	1:A:90:VAL:H	5	0.04
(1,1256)	1:A:100:GLY:H	1:A:90:VAL:H	16	0.04
(1,1240)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD11	10	0.04
(1,1240)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD12	10	0.04
(1,1240)	1:A:104:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD13	10	0.04
(1,1237)	1:A:22:ASN:H	1:A:22:ASN:HD21	16	0.04
(1,1230)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG11	15	0.04
(1,1230)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG12	15	0.04
(1,1230)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG13	15	0.04
(1,1230)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG11	20	0.04



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1230)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG12	20	0.04
(1,1230)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG13	20	0.04
(1,1228)	1:A:90:VAL:H	1:A:102:VAL:HG21	17	0.04
(1,1228)	1:A:90:VAL:H	1:A:102:VAL:HG22	17	0.04
(1,1228)	1:A:90:VAL:H	1:A:102:VAL:HG23	17	0.04
(1,1226)	1:A:102:VAL:HG11	1:A:113:ARG:H	17	0.04
(1,1226)	1:A:102:VAL:HG12	1:A:113:ARG:H	17	0.04
(1,1226)	1:A:102:VAL:HG13	1:A:113:ARG:H	17	0.04
(1,1210)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:H	20	0.04
(1,1210)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:H	20	0.04
(1,1210)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:H	20	0.04
(1,1209)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:137:TYR:H	17	0.04
(1,1209)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:137:TYR:H	17	0.04
(1,1209)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:137:TYR:H	17	0.04
(1,1204)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:132:GLU:H	2	0.04
(1,1204)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:132:GLU:H	2	0.04
(1,1204)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:132:GLU:H	2	0.04
(1,1203)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:132:GLU:H	17	0.04
(1,1203)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:132:GLU:H	17	0.04
(1,1203)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:132:GLU:H	17	0.04
(1,1201)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD11	10	0.04
(1,1201)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD12	10	0.04
(1,1201)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD13	10	0.04
(1,1195)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG21	17	0.04
(1,1195)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG22	17	0.04
(1,1195)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG23	17	0.04
(1,1181)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:102:VAL:H	12	0.04
(1,1181)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:102:VAL:H	12	0.04
(1,1181)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:102:VAL:H	12	0.04
(1,1181)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:102:VAL:H	15	0.04
(1,1181)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:102:VAL:H	15	0.04
(1,1181)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:102:VAL:H	15	0.04
(1,1180)	1:A:101:HIS:H	1:A:116:ILE:HD11	2	0.04
(1,1180)	1:A:101:HIS:H	1:A:116:ILE:HD12	2	0.04
(1,1180)	1:A:101:HIS:H	1:A:116:ILE:HD13	2	0.04
(1,1179)	1:A:101:HIS:H	1:A:102:VAL:HG11	15	0.04
(1,1179)	1:A:101:HIS:H	1:A:102:VAL:HG12	15	0.04
(1,1179)	1:A:101:HIS:H	1:A:102:VAL:HG13	15	0.04
(1,1163)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD11	2	0.04
(1,1163)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD12	2	0.04
(1,1163)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD13	2	0.04
(1,1163)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD11	6	0.04



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1163)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD12	6	0.04
(1,1163)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD13	6	0.04
(1,1163)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD11	14	0.04
(1,1163)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD12	14	0.04
(1,1163)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD13	14	0.04
(1,1163)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD11	15	0.04
(1,1163)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD12	15	0.04
(1,1163)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD13	15	0.04
(1,1163)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD11	18	0.04
(1,1163)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD12	18	0.04
(1,1163)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD13	18	0.04
(1,1157)	1:A:79:LEU:HD21	1:A:87:ARG:H	8	0.04
(1,1157)	1:A:79:LEU:HD22	1:A:87:ARG:H	8	0.04
(1,1157)	1:A:79:LEU:HD23	1:A:87:ARG:H	8	0.04
(1,1152)	1:A:75:VAL:HG11	1:A:77:GLU:H	6	0.04
(1,1152)	1:A:75:VAL:HG12	1:A:77:GLU:H	6	0.04
(1,1152)	1:A:75:VAL:HG13	1:A:77:GLU:H	6	0.04
(1,1152)	1:A:75:VAL:HG11	1:A:77:GLU:H	13	0.04
(1,1152)	1:A:75:VAL:HG12	1:A:77:GLU:H	13	0.04
(1,1152)	1:A:75:VAL:HG13	1:A:77:GLU:H	13	0.04
(1,1142)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:H	10	0.04
(1,1142)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:H	10	0.04
(1,1142)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:H	10	0.04
(1,1141)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:54:SER:H	10	0.04
(1,1141)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:54:SER:H	10	0.04
(1,1141)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:54:SER:H	10	0.04
(1,1141)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:54:SER:H	18	0.04
(1,1141)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:54:SER:H	18	0.04
(1,1141)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:54:SER:H	18	0.04
(1,1139)	1:A:52:PHE:H	1:A:71:ILE:HD11	10	0.04
(1,1139)	1:A:52:PHE:H	1:A:71:ILE:HD12	10	0.04
(1,1139)	1:A:52:PHE:H	1:A:71:ILE:HD13	10	0.04
(1,1138)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:52:PHE:H	8	0.04
(1,1138)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:52:PHE:H	8	0.04
(1,1138)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:52:PHE:H	8	0.04
(1,1121)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:44:ASP:H	15	0.04
(1,1121)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:44:ASP:H	15	0.04
(1,1121)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:44:ASP:H	15	0.04
(1,1118)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD11	4	0.04
(1,1118)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD12	4	0.04
(1,1118)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD13	4	0.04
(1,1118)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD11	12	0.04



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1118)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD12	12	0.04
(1,1118)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD13	12	0.04
(1,1118)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD11	13	0.04
(1,1118)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD12	13	0.04
(1,1118)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD13	13	0.04
(1,1117)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:42:TYR:H	6	0.04
(1,1117)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:42:TYR:H	6	0.04
(1,1117)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:42:TYR:H	6	0.04
(1,1116)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:25:THR:H	1	0.04
(1,1116)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:25:THR:H	1	0.04
(1,1116)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:25:THR:H	1	0.04
(1,1114)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:24:GLY:H	15	0.04
(1,1114)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:24:GLY:H	15	0.04
(1,1114)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:24:GLY:H	15	0.04
(1,1113)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:23:ASN:H	1	0.04
(1,1113)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:23:ASN:H	1	0.04
(1,1113)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:23:ASN:H	1	0.04
(1,1107)	1:A:45:ILE:HD11	1:A:46:VAL:H	2	0.04
(1,1107)	1:A:45:ILE:HD12	1:A:46:VAL:H	2	0.04
(1,1107)	1:A:45:ILE:HD13	1:A:46:VAL:H	2	0.04
(1,1107)	1:A:45:ILE:HD11	1:A:46:VAL:H	9	0.04
(1,1107)	1:A:45:ILE:HD12	1:A:46:VAL:H	9	0.04
(1,1107)	1:A:45:ILE:HD13	1:A:46:VAL:H	9	0.04
(1,1103)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:10:LYS:H	1	0.04
(1,1103)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:10:LYS:H	1	0.04
(1,1103)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:10:LYS:H	1	0.04
(1,1103)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:10:LYS:H	2	0.04
(1,1103)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:10:LYS:H	2	0.04
(1,1103)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:10:LYS:H	2	0.04
(1,1101)	1:A:9:ILE:H	1:A:12:LEU:HD21	5	0.04
(1,1101)	1:A:9:ILE:H	1:A:12:LEU:HD22	5	0.04
(1,1101)	1:A:9:ILE:H	1:A:12:LEU:HD23	5	0.04
(1,1100)	1:A:8:LYS:H	1:A:9:ILE:HD11	16	0.04
(1,1100)	1:A:8:LYS:H	1:A:9:ILE:HD12	16	0.04
(1,1100)	1:A:8:LYS:H	1:A:9:ILE:HD13	16	0.04
(1,110)	1:A:95:ALA:H	1:A:96:ASP:H	13	0.04
(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD21	4	0.04
(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD22	4	0.04
(1,11)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:LEU:HD23	4	0.04
(1,1097)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG21	2	0.04
(1,1097)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG22	2	0.04
(1,1097)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG23	2	0.04



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1097)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG21	8	0.04
(1,1097)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG22	8	0.04
(1,1097)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG23	8	0.04
(1,1092)	1:A:41:LEU:H	1:A:124:VAL:HG21	13	0.04
(1,1092)	1:A:41:LEU:H	1:A:124:VAL:HG22	13	0.04
(1,1092)	1:A:41:LEU:H	1:A:124:VAL:HG23	13	0.04
(1,1091)	1:A:45:ILE:H	1:A:121:LEU:HD21	12	0.04
(1,1091)	1:A:45:ILE:H	1:A:121:LEU:HD22	12	0.04
(1,1091)	1:A:45:ILE:H	1:A:121:LEU:HD23	12	0.04
(1,1091)	1:A:45:ILE:H	1:A:121:LEU:HD21	15	0.04
(1,1091)	1:A:45:ILE:H	1:A:121:LEU:HD22	15	0.04
(1,1091)	1:A:45:ILE:H	1:A:121:LEU:HD23	15	0.04
(1,1088)	1:A:90:VAL:HG21	1:A:101:HIS:H	16	0.04
(1,1088)	1:A:90:VAL:HG22	1:A:101:HIS:H	16	0.04
(1,1088)	1:A:90:VAL:HG23	1:A:101:HIS:H	16	0.04
(1,1085)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:100:GLY:H	6	0.04
(1,1085)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:100:GLY:H	6	0.04
(1,1085)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:100:GLY:H	6	0.04
(1,1083)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:120:ALA:H	17	0.04
(1,1083)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:120:ALA:H	17	0.04
(1,1083)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:120:ALA:H	17	0.04
(1,1082)	1:A:46:VAL:HG11	1:A:48:GLY:H	2	0.04
(1,1082)	1:A:46:VAL:HG12	1:A:48:GLY:H	2	0.04
(1,1082)	1:A:46:VAL:HG13	1:A:48:GLY:H	2	0.04
(1,1082)	1:A:46:VAL:HG11	1:A:48:GLY:H	4	0.04
(1,1082)	1:A:46:VAL:HG12	1:A:48:GLY:H	4	0.04
(1,1082)	1:A:46:VAL:HG13	1:A:48:GLY:H	4	0.04
(1,1076)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:103:PHE:H	16	0.04
(1,1076)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:103:PHE:H	16	0.04
(1,1076)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:103:PHE:H	16	0.04
(1,1071)	1:A:12:LEU:HD21	1:A:13:ASN:H	7	0.04
(1,1071)	1:A:12:LEU:HD22	1:A:13:ASN:H	7	0.04
(1,1071)	1:A:12:LEU:HD23	1:A:13:ASN:H	7	0.04
(1,1066)	1:A:43:VAL:H	1:A:43:VAL:HG11	5	0.04
(1,1066)	1:A:43:VAL:H	1:A:43:VAL:HG12	5	0.04
(1,1066)	1:A:43:VAL:H	1:A:43:VAL:HG13	5	0.04
(1,1065)	1:A:19:VAL:H	1:A:19:VAL:HG11	1	0.04
(1,1065)	1:A:19:VAL:H	1:A:19:VAL:HG12	1	0.04
(1,1065)	1:A:19:VAL:H	1:A:19:VAL:HG13	1	0.04
(1,1060)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD21	2	0.04
(1,1060)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD22	2	0.04
(1,1060)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD23	2	0.04



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1060)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD21	10	0.04
(1,1060)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD22	10	0.04
(1,1060)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD23	10	0.04
(1,1044)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:129:LEU:HD21	17	0.04
(1,1044)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:129:LEU:HD22	17	0.04
(1,1044)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:129:LEU:HD23	17	0.04
(1,1044)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:129:LEU:HD21	17	0.04
(1,1044)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:129:LEU:HD22	17	0.04
(1,1044)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:129:LEU:HD23	17	0.04
(1,1044)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:129:LEU:HD21	17	0.04
(1,1044)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:129:LEU:HD22	17	0.04
(1,1044)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:129:LEU:HD23	17	0.04
(1,1042)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:12:LEU:HD21	9	0.04
(1,1042)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:12:LEU:HD22	9	0.04
(1,1042)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:12:LEU:HD23	9	0.04
(1,1042)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:12:LEU:HD21	9	0.04
(1,1042)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:12:LEU:HD22	9	0.04
(1,1042)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:12:LEU:HD23	9	0.04
(1,1042)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:12:LEU:HD21	9	0.04
(1,1042)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:12:LEU:HD22	9	0.04
(1,1042)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:12:LEU:HD23	9	0.04
(1,104)	1:A:73:GLU:H	1:A:75:VAL:H	12	0.04
(1,1038)	1:A:12:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HG11	15	0.04
(1,1038)	1:A:12:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HG12	15	0.04
(1,1038)	1:A:12:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HG13	15	0.04
(1,1038)	1:A:12:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HG11	15	0.04
(1,1038)	1:A:12:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HG12	15	0.04
(1,1038)	1:A:12:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HG13	15	0.04
(1,1038)	1:A:12:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HG11	15	0.04
(1,1038)	1:A:12:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HG12	15	0.04
(1,1038)	1:A:12:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HG13	15	0.04
(1,1020)	1:A:131:GLU:H	1:A:133:GLY:H	1	0.04
(1,1020)	1:A:131:GLU:H	1:A:133:GLY:H	13	0.04
(1,1019)	1:A:132:GLU:H	1:A:134:TYR:H	15	0.04
(1,1019)	1:A:132:GLU:H	1:A:134:TYR:H	17	0.04
(1,1015)	1:A:129:LEU:H	1:A:130:LYS:H	8	0.04
(1,1013)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:H	9	0.04
(1,1013)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:H	17	0.04
(1,1013)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:H	18	0.04
(1,1006)	1:A:45:ILE:H	1:A:122:ARG:H	4	0.04
(1,1006)	1:A:45:ILE:H	1:A:122:ARG:H	5	0.04
(1,1006)	1:A:45:ILE:H	1:A:122:ARG:H	19	0.04



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

(1,1005)         1:A:43:VAL:H         1:A:12:ARG:H         19         0.04           (1,976)         1:A:80:ASP:H         1:A:88:THR:H         1         0.03           (1,976)         1:A:80:ASP:H         1:A:88:THR:H         10         0.03           (1,975)         1:A:80:ASP:H         1:A:87:ARG:H         18         0.03           (1,963)         1:A:44:ASP:H         1:A:48:GLY:H         16         0.03           (1,957)         1:A:41:LEU:H         1:A:124:VAL:H         3         0.03           (1,953)         1:A:30:GLN:H         1:A:34:TRP:HE1         3         0.03           (1,952)         1:A:32:GLU:H         1:A:34:TRP:H         6         0.03           (1,930)         1:A:44:ASP:H         1:A:46:VAL:H         2         0.03           (1,928)         1:A:131:GLU:H         1:A:134:TYR:H         10         0.03           (1,914)         1:A:22:ASN:HD22         1:A:24:GLY:H         4         0.03           (1,912)         1:A:21:GLN:H         1:A:24:GLY:H         6         0.03           (1,912)         1:A:21:GLN:H         1:A:24:GLY:H         20         0.03           (1,903)         1:A:51:LEU:HD11         1:A:16:IE:HD11         3         0.03
(1,976)         1:A:80:ASP:H         1:A:88:THR:H         10         0.03           (1,975)         1:A:80:ASP:H         1:A:87:ARG:H         18         0.03           (1,963)         1:A:44:ASP:H         1:A:48:GLY:H         16         0.03           (1,957)         1:A:41:LEU:H         1:A:424:VAL:H         3         0.03           (1,953)         1:A:30:GLN:H         1:A:34:TRP:HE1         3         0.03           (1,952)         1:A:32:GLU:H         1:A:34:TRP:H         6         0.03           (1,930)         1:A:44:ASP:H         1:A:46:VAL:H         2         0.03           (1,928)         1:A:131:GLU:H         1:A:46:VAL:H         2         0.03           (1,928)         1:A:131:GLU:H         1:A:24:GLY:H         4         0.03           (1,91)         1:A:22:ASN:HD22         1:A:24:GLY:H         4         0.03           (1,912)         1:A:21:GLN:H         1:A:24:GLY:H         6         0.03           (1,903)         1:A:51:LEU:HD11         1:A:116:ILE:HD11         3         0.03           (1,903)         1:A:51:LEU:HD11         1:A:116:ILE:HD12         3         0.03           (1,903)         1:A:51:LEU:HD12         1:A:116:ILE:HD13         3         0.0
(1,975)         1:A:80:ASP:H         1:A:87:ARG:H         18         0.03           (1,963)         1:A:44:ASP:H         1:A:48:GLY:H         16         0.03           (1,957)         1:A:41:LEU:H         1:A:124:VAL:H         3         0.03           (1,953)         1:A:30:GLN:H         1:A:34:TRP:HE1         3         0.03           (1,952)         1:A:32:GLU:H         1:A:34:TRP:H         6         0.03           (1,930)         1:A:44:ASP:H         1:A:46:VAL:H         2         0.03           (1,928)         1:A:131:GLU:H         1:A:24:GV:H         10         0.03           (1,914)         1:A:22:ASN:HD22         1:A:24:GLY:H         4         0.03           (1,912)         1:A:21:GLN:H         1:A:24:GLY:H         6         0.03           (1,912)         1:A:21:GLN:H         1:A:24:GLY:H         20         0.03           (1,912)         1:A:51:LEU:HD11         1:A:16:ILE:HD11         3         0.03           (1,903)         1:A:51:LEU:HD11         1:A:16:ILE:HD11         3         0.03           (1,903)         1:A:51:LEU:HD12         1:A:116:ILE:HD13         3         0.03           (1,903)         1:A:51:LEU:HD12         1:A:116:ILE:HD13         3 <t< td=""></t<>
(1,963)         1:A:44:ASP:H         1:A:48:GLY:H         16         0.03           (1,957)         1:A:41:LEU:H         1:A:124:VAL:H         3         0.03           (1,953)         1:A:30:GLN:H         1:A:34:TRP:HE1         3         0.03           (1,952)         1:A:32:GLU:H         1:A:34:TRP:H         6         0.03           (1,930)         1:A:44:ASP:H         1:A:34:TYR:H         10         0.03           (1,928)         1:A:131:GLU:H         1:A:134:TYR:H         10         0.03           (1,914)         1:A:22:ASN:HD22         1:A:24:GLY:H         4         0.03           (1,912)         1:A:21:GLN:H         1:A:24:GLY:H         6         0.03           (1,912)         1:A:21:GLN:H         1:A:24:GLY:H         20         0.03           (1,903)         1:A:51:LEU:HD11         1:A:116:ILE:HD11         3         0.03           (1,903)         1:A:51:LEU:HD11         1:A:116:ILE:HD12         3         0.03           (1,903)         1:A:51:LEU:HD12         1:A:116:ILE:HD13         3         0.03           (1,903)         1:A:51:LEU:HD12         1:A:116:ILE:HD13         3         0.03           (1,903)         1:A:51:LEU:HD13         1:A:116:ILE:HD13         3
(1,957)         1:A:41:LEU:H         1:A:124:VAL:H         3         0.03           (1,953)         1:A:30:GLN:H         1:A:34:TRP:HE1         3         0.03           (1,952)         1:A:32:GLU:H         1:A:34:TRP:H         6         0.03           (1,930)         1:A:44:ASP:H         1:A:46:VAL:H         2         0.03           (1,928)         1:A:131:GLU:H         1:A:134:TYR:H         10         0.03           (1,914)         1:A:22:ASN:HD22         1:A:24:GLY:H         4         0.03           (1,912)         1:A:21:GLN:H         1:A:24:GLY:H         6         0.03           (1,912)         1:A:21:GLN:H         1:A:24:GLY:H         20         0.03           (1,903)         1:A:51:LEU:HD11         1:A:116:ILE:HD11         3         0.03           (1,903)         1:A:51:LEU:HD11         1:A:116:ILE:HD12         3         0.03           (1,903)         1:A:51:LEU:HD12         1:A:116:ILE:HD11         3         0.03           (1,903)         1:A:51:LEU:HD12         1:A:116:ILE:HD11         3         0.03           (1,903)         1:A:51:LEU:HD13         1:A:116:ILE:HD11         3         0.03           (1,903)         1:A:51:LEU:HD13         1:A:116:ILE:HD13         3
(1,953)         1:A:30:GLN:H         1:A:34:TRP:HE1         3         0.03           (1,952)         1:A:32:GLU:H         1:A:34:TRP:H         6         0.03           (1,930)         1:A:44:ASP:H         1:A:46:VAL:H         2         0.03           (1,928)         1:A:131:GLU:H         1:A:134:TYR:H         10         0.03           (1,914)         1:A:22:ASN:HD22         1:A:24:GLY:H         4         0.03           (1,912)         1:A:21:GLN:H         1:A:24:GLY:H         6         0.03           (1,912)         1:A:21:GLN:H         1:A:24:GLY:H         20         0.03           (1,903)         1:A:51:LEU:HD11         1:A:116:ILE:HD11         3         0.03           (1,903)         1:A:51:LEU:HD11         1:A:116:ILE:HD12         3         0.03           (1,903)         1:A:51:LEU:HD12         1:A:116:ILE:HD13         3         0.03           (1,903)         1:A:51:LEU:HD12         1:A:116:ILE:HD13         3         0.03           (1,903)         1:A:51:LEU:HD13         1:A:116:ILE:HD13         3         0.03           (1,903)         1:A:51:LEU:HD13         1:A:116:ILE:HD13         3         0.03           (1,903)         1:A:51:LEU:HD13         1:A:116:ILE:HD13
(1,952)         1:A:32:GLU:H         1:A:34:TRP:H         6         0.03           (1,930)         1:A:44:ASP:H         1:A:46:VAL:H         2         0.03           (1,928)         1:A:131:GLU:H         1:A:134:TYR:H         10         0.03           (1,914)         1:A:22:ASN:HD22         1:A:24:GLY:H         4         0.03           (1,912)         1:A:21:GLN:H         1:A:24:GLY:H         6         0.03           (1,912)         1:A:21:GLN:H         1:A:24:GLY:H         20         0.03           (1,903)         1:A:51:LEU:HD11         1:A:116:ILE:HD11         3         0.03           (1,903)         1:A:51:LEU:HD11         1:A:116:ILE:HD12         3         0.03           (1,903)         1:A:51:LEU:HD11         1:A:116:ILE:HD13         3         0.03           (1,903)         1:A:51:LEU:HD12         1:A:116:ILE:HD11         3         0.03           (1,903)         1:A:51:LEU:HD12         1:A:116:ILE:HD13         3         0.03           (1,903)         1:A:51:LEU:HD13         1:A:116:ILE:HD13         3         0.03           (1,903)         1:A:51:LEU:HD13         1:A:116:ILE:HD13         3         0.03           (1,903)         1:A:51:LEU:HD13         1:A:116:ILE:HD13
(1,930)         1:A:44:ASP:H         1:A:46:VAL:H         2         0.03           (1,928)         1:A:131:GLU:H         1:A:134:TYR:H         10         0.03           (1,914)         1:A:22:ASN:HD22         1:A:24:GLY:H         4         0.03           (1,912)         1:A:21:GLN:H         1:A:24:GLY:H         6         0.03           (1,912)         1:A:21:GLN:H         1:A:24:GLY:H         20         0.03           (1,903)         1:A:51:LEU:HD11         1:A:116:ILE:HD11         3         0.03           (1,903)         1:A:51:LEU:HD11         1:A:116:ILE:HD12         3         0.03           (1,903)         1:A:51:LEU:HD12         1:A:116:ILE:HD13         3         0.03           (1,903)         1:A:51:LEU:HD12         1:A:116:ILE:HD12         3         0.03           (1,903)         1:A:51:LEU:HD12         1:A:116:ILE:HD13         3         0.03           (1,903)         1:A:51:LEU:HD13         1:A:116:ILE:HD13         3         0.03           (1,903)         1:A:51:LEU:HD13         1:A:116:ILE:HD12         3         0.03           (1,903)         1:A:51:LEU:HD13         1:A:116:ILE:HD13         3         0.03           (1,902)         1:A:51:LEU:HD11         1:A:75:VAL:HG21 </td
(1,928)         1:A:131:GLU:H         1:A:134:TYR:H         10         0.03           (1,914)         1:A:22:ASN:HD22         1:A:24:GLY:H         4         0.03           (1,912)         1:A:21:GLN:H         1:A:24:GLY:H         6         0.03           (1,912)         1:A:21:GLN:H         1:A:24:GLY:H         20         0.03           (1,903)         1:A:51:LEU:HD11         1:A:116:ILE:HD11         3         0.03           (1,903)         1:A:51:LEU:HD11         1:A:116:ILE:HD12         3         0.03           (1,903)         1:A:51:LEU:HD12         1:A:116:ILE:HD13         3         0.03           (1,903)         1:A:51:LEU:HD12         1:A:116:ILE:HD12         3         0.03           (1,903)         1:A:51:LEU:HD12         1:A:116:ILE:HD13         3         0.03           (1,903)         1:A:51:LEU:HD13         1:A:116:ILE:HD13         3         0.03           (1,903)         1:A:51:LEU:HD13         1:A:116:ILE:HD13         3         0.03           (1,903)         1:A:51:LEU:HD13         1:A:116:ILE:HD13         3         0.03           (1,902)         1:A:51:LEU:HD11         1:A:75:VAL:HG21         9         0.03           (1,902)         1:A:51:LEU:HD12         1:A:75:VAL:
(1,914)         1:A:22:ASN:HD22         1:A:24:GLY:H         4         0.03           (1,912)         1:A:21:GLN:H         1:A:24:GLY:H         6         0.03           (1,912)         1:A:21:GLN:H         1:A:24:GLY:H         20         0.03           (1,903)         1:A:51:LEU:HD11         1:A:116:ILE:HD11         3         0.03           (1,903)         1:A:51:LEU:HD11         1:A:116:ILE:HD12         3         0.03           (1,903)         1:A:51:LEU:HD11         1:A:116:ILE:HD13         3         0.03           (1,903)         1:A:51:LEU:HD12         1:A:116:ILE:HD12         3         0.03           (1,903)         1:A:51:LEU:HD12         1:A:116:ILE:HD13         3         0.03           (1,903)         1:A:51:LEU:HD13         1:A:116:ILE:HD13         3         0.03           (1,903)         1:A:51:LEU:HD13         1:A:116:ILE:HD13         3         0.03           (1,903)         1:A:51:LEU:HD13         1:A:116:ILE:HD13         3         0.03           (1,902)         1:A:51:LEU:HD11         1:A:75:VAL:HG21         9         0.03           (1,902)         1:A:51:LEU:HD11         1:A:75:VAL:HG23         9         0.03           (1,902)         1:A:51:LEU:HD12         1:A:75:V
(1,912)         1:A:21:GLN:H         1:A:24:GLY:H         6         0.03           (1,912)         1:A:21:GLN:H         1:A:24:GLY:H         20         0.03           (1,903)         1:A:51:LEU:HD11         1:A:116:ILE:HD11         3         0.03           (1,903)         1:A:51:LEU:HD11         1:A:116:ILE:HD12         3         0.03           (1,903)         1:A:51:LEU:HD12         1:A:116:ILE:HD13         3         0.03           (1,903)         1:A:51:LEU:HD12         1:A:116:ILE:HD12         3         0.03           (1,903)         1:A:51:LEU:HD12         1:A:116:ILE:HD13         3         0.03           (1,903)         1:A:51:LEU:HD13         1:A:116:ILE:HD11         3         0.03           (1,903)         1:A:51:LEU:HD13         1:A:116:ILE:HD12         3         0.03           (1,903)         1:A:51:LEU:HD13         1:A:116:ILE:HD12         3         0.03           (1,902)         1:A:51:LEU:HD11         1:A:75:VAL:HG21         9         0.03           (1,902)         1:A:51:LEU:HD11         1:A:75:VAL:HG22         9         0.03           (1,902)         1:A:51:LEU:HD12         1:A:75:VAL:HG21         9         0.03           (1,902)         1:A:51:LEU:HD12         1:A:7
(1,912)         1:A:21:GLN:H         1:A:24:GLY:H         20         0.03           (1,903)         1:A:51:LEU:HD11         1:A:116:ILE:HD11         3         0.03           (1,903)         1:A:51:LEU:HD11         1:A:116:ILE:HD12         3         0.03           (1,903)         1:A:51:LEU:HD11         1:A:116:ILE:HD13         3         0.03           (1,903)         1:A:51:LEU:HD12         1:A:116:ILE:HD11         3         0.03           (1,903)         1:A:51:LEU:HD12         1:A:116:ILE:HD13         3         0.03           (1,903)         1:A:51:LEU:HD13         1:A:116:ILE:HD13         3         0.03           (1,903)         1:A:51:LEU:HD13         1:A:116:ILE:HD12         3         0.03           (1,903)         1:A:51:LEU:HD13         1:A:116:ILE:HD13         3         0.03           (1,903)         1:A:51:LEU:HD13         1:A:116:ILE:HD13         3         0.03           (1,902)         1:A:51:LEU:HD11         1:A:75:VAL:HG21         9         0.03           (1,902)         1:A:51:LEU:HD11         1:A:75:VAL:HG23         9         0.03           (1,902)         1:A:51:LEU:HD12         1:A:75:VAL:HG21         9         0.03           (1,902)         1:A:51:LEU:HD12 <t< td=""></t<>
(1,903)         1:A:51:LEU:HD11         1:A:116:ILE:HD11         3         0.03           (1,903)         1:A:51:LEU:HD11         1:A:116:ILE:HD12         3         0.03           (1,903)         1:A:51:LEU:HD11         1:A:116:ILE:HD13         3         0.03           (1,903)         1:A:51:LEU:HD12         1:A:116:ILE:HD11         3         0.03           (1,903)         1:A:51:LEU:HD12         1:A:116:ILE:HD12         3         0.03           (1,903)         1:A:51:LEU:HD12         1:A:116:ILE:HD13         3         0.03           (1,903)         1:A:51:LEU:HD13         1:A:116:ILE:HD11         3         0.03           (1,903)         1:A:51:LEU:HD13         1:A:116:ILE:HD12         3         0.03           (1,903)         1:A:51:LEU:HD13         1:A:116:ILE:HD13         3         0.03           (1,904)         1:A:51:LEU:HD13         1:A:75:VAL:HG21         9         0.03           (1,902)         1:A:51:LEU:HD11         1:A:75:VAL:HG23         9         0.03           (1,902)         1:A:51:LEU:HD12         1:A:75:VAL:HG21         9         0.03           (1,902)         1:A:51:LEU:HD12         1:A:75:VAL:HG22         9         0.03           (1,902)         1:A:51:LEU:HD12
(1,903)         1:A:51:LEU:HD11         1:A:116:ILE:HD12         3         0.03           (1,903)         1:A:51:LEU:HD11         1:A:116:ILE:HD13         3         0.03           (1,903)         1:A:51:LEU:HD12         1:A:116:ILE:HD11         3         0.03           (1,903)         1:A:51:LEU:HD12         1:A:116:ILE:HD12         3         0.03           (1,903)         1:A:51:LEU:HD12         1:A:116:ILE:HD13         3         0.03           (1,903)         1:A:51:LEU:HD13         1:A:116:ILE:HD11         3         0.03           (1,903)         1:A:51:LEU:HD13         1:A:116:ILE:HD12         3         0.03           (1,903)         1:A:51:LEU:HD13         1:A:116:ILE:HD13         3         0.03           (1,904)         1:A:51:LEU:HD11         1:A:75:VAL:HG21         9         0.03           (1,902)         1:A:51:LEU:HD11         1:A:75:VAL:HG23         9         0.03           (1,902)         1:A:51:LEU:HD12         1:A:75:VAL:HG21         9         0.03           (1,902)         1:A:51:LEU:HD12         1:A:75:VAL:HG22         9         0.03           (1,902)         1:A:51:LEU:HD12         1:A:75:VAL:HG22         9         0.03
(1,903)       1:A:51:LEU:HD11       1:A:116:ILE:HD13       3       0.03         (1,903)       1:A:51:LEU:HD12       1:A:116:ILE:HD11       3       0.03         (1,903)       1:A:51:LEU:HD12       1:A:116:ILE:HD12       3       0.03         (1,903)       1:A:51:LEU:HD12       1:A:116:ILE:HD13       3       0.03         (1,903)       1:A:51:LEU:HD13       1:A:116:ILE:HD11       3       0.03         (1,903)       1:A:51:LEU:HD13       1:A:116:ILE:HD12       3       0.03         (1,903)       1:A:51:LEU:HD13       1:A:116:ILE:HD13       3       0.03         (1,904)       1:A:51:LEU:HD11       1:A:75:VAL:HG21       9       0.03         (1,902)       1:A:51:LEU:HD11       1:A:75:VAL:HG23       9       0.03         (1,902)       1:A:51:LEU:HD12       1:A:75:VAL:HG21       9       0.03         (1,902)       1:A:51:LEU:HD12       1:A:75:VAL:HG21       9       0.03         (1,902)       1:A:51:LEU:HD12       1:A:75:VAL:HG22       9       0.03         (1,902)       1:A:51:LEU:HD12       1:A:75:VAL:HG22       9       0.03
(1,903)       1:A:51:LEU:HD12       1:A:116:ILE:HD11       3       0.03         (1,903)       1:A:51:LEU:HD12       1:A:116:ILE:HD12       3       0.03         (1,903)       1:A:51:LEU:HD12       1:A:116:ILE:HD13       3       0.03         (1,903)       1:A:51:LEU:HD13       1:A:116:ILE:HD11       3       0.03         (1,903)       1:A:51:LEU:HD13       1:A:116:ILE:HD12       3       0.03         (1,903)       1:A:51:LEU:HD13       1:A:116:ILE:HD13       3       0.03         (1,904)       1:A:51:LEU:HD11       1:A:75:VAL:HG21       9       0.03         (1,902)       1:A:51:LEU:HD11       1:A:75:VAL:HG22       9       0.03         (1,902)       1:A:51:LEU:HD12       1:A:75:VAL:HG21       9       0.03         (1,902)       1:A:51:LEU:HD12       1:A:75:VAL:HG21       9       0.03         (1,902)       1:A:51:LEU:HD12       1:A:75:VAL:HG22       9       0.03
(1,903)       1:A:51:LEU:HD12       1:A:116:ILE:HD12       3       0.03         (1,903)       1:A:51:LEU:HD12       1:A:116:ILE:HD13       3       0.03         (1,903)       1:A:51:LEU:HD13       1:A:116:ILE:HD11       3       0.03         (1,903)       1:A:51:LEU:HD13       1:A:116:ILE:HD12       3       0.03         (1,903)       1:A:51:LEU:HD13       1:A:116:ILE:HD13       3       0.03         (1,904)       1:A:51:LEU:HD11       1:A:75:VAL:HG21       9       0.03         (1,902)       1:A:51:LEU:HD11       1:A:75:VAL:HG22       9       0.03         (1,902)       1:A:51:LEU:HD11       1:A:75:VAL:HG23       9       0.03         (1,902)       1:A:51:LEU:HD12       1:A:75:VAL:HG21       9       0.03         (1,902)       1:A:51:LEU:HD12       1:A:75:VAL:HG22       9       0.03
(1,903)       1:A:51:LEU:HD12       1:A:116:ILE:HD13       3       0.03         (1,903)       1:A:51:LEU:HD13       1:A:116:ILE:HD11       3       0.03         (1,903)       1:A:51:LEU:HD13       1:A:116:ILE:HD12       3       0.03         (1,903)       1:A:51:LEU:HD13       1:A:116:ILE:HD13       3       0.03         (1,903)       1:A:51:LEU:HD11       1:A:75:VAL:HG21       9       0.03         (1,902)       1:A:51:LEU:HD11       1:A:75:VAL:HG22       9       0.03         (1,902)       1:A:51:LEU:HD11       1:A:75:VAL:HG23       9       0.03         (1,902)       1:A:51:LEU:HD12       1:A:75:VAL:HG21       9       0.03         (1,902)       1:A:51:LEU:HD12       1:A:75:VAL:HG22       9       0.03
(1,903)       1:A:51:LEU:HD13       1:A:116:ILE:HD11       3       0.03         (1,903)       1:A:51:LEU:HD13       1:A:116:ILE:HD12       3       0.03         (1,903)       1:A:51:LEU:HD13       1:A:116:ILE:HD13       3       0.03         (1,902)       1:A:51:LEU:HD11       1:A:75:VAL:HG21       9       0.03         (1,902)       1:A:51:LEU:HD11       1:A:75:VAL:HG22       9       0.03         (1,902)       1:A:51:LEU:HD11       1:A:75:VAL:HG23       9       0.03         (1,902)       1:A:51:LEU:HD12       1:A:75:VAL:HG21       9       0.03         (1,902)       1:A:51:LEU:HD12       1:A:75:VAL:HG22       9       0.03         (1,902)       1:A:51:LEU:HD12       1:A:75:VAL:HG22       9       0.03
(1,903)       1:A:51:LEU:HD13       1:A:116:ILE:HD12       3       0.03         (1,903)       1:A:51:LEU:HD13       1:A:116:ILE:HD13       3       0.03         (1,902)       1:A:51:LEU:HD11       1:A:75:VAL:HG21       9       0.03         (1,902)       1:A:51:LEU:HD11       1:A:75:VAL:HG22       9       0.03         (1,902)       1:A:51:LEU:HD11       1:A:75:VAL:HG23       9       0.03         (1,902)       1:A:51:LEU:HD12       1:A:75:VAL:HG21       9       0.03         (1,902)       1:A:51:LEU:HD12       1:A:75:VAL:HG22       9       0.03         (1,902)       1:A:51:LEU:HD12       1:A:75:VAL:HG22       9       0.03
(1,903)       1:A:51:LEU:HD13       1:A:116:ILE:HD13       3       0.03         (1,902)       1:A:51:LEU:HD11       1:A:75:VAL:HG21       9       0.03         (1,902)       1:A:51:LEU:HD11       1:A:75:VAL:HG22       9       0.03         (1,902)       1:A:51:LEU:HD11       1:A:75:VAL:HG23       9       0.03         (1,902)       1:A:51:LEU:HD12       1:A:75:VAL:HG21       9       0.03         (1,902)       1:A:51:LEU:HD12       1:A:75:VAL:HG22       9       0.03
(1,902)       1:A:51:LEU:HD11       1:A:75:VAL:HG21       9       0.03         (1,902)       1:A:51:LEU:HD11       1:A:75:VAL:HG22       9       0.03         (1,902)       1:A:51:LEU:HD11       1:A:75:VAL:HG23       9       0.03         (1,902)       1:A:51:LEU:HD12       1:A:75:VAL:HG21       9       0.03         (1,902)       1:A:51:LEU:HD12       1:A:75:VAL:HG22       9       0.03         (1,902)       1:A:51:LEU:HD12       1:A:75:VAL:HG22       9       0.03
(1,902)       1:A:51:LEU:HD11       1:A:75:VAL:HG22       9       0.03         (1,902)       1:A:51:LEU:HD11       1:A:75:VAL:HG23       9       0.03         (1,902)       1:A:51:LEU:HD12       1:A:75:VAL:HG21       9       0.03         (1,902)       1:A:51:LEU:HD12       1:A:75:VAL:HG22       9       0.03         (1,902)       1:A:51:LEU:HD12       1:A:75:VAL:HG22       9       0.03
(1,902)       1:A:51:LEU:HD11       1:A:75:VAL:HG23       9       0.03         (1,902)       1:A:51:LEU:HD12       1:A:75:VAL:HG21       9       0.03         (1,902)       1:A:51:LEU:HD12       1:A:75:VAL:HG22       9       0.03
(1,902)       1:A:51:LEU:HD12       1:A:75:VAL:HG21       9       0.03         (1,902)       1:A:51:LEU:HD12       1:A:75:VAL:HG22       9       0.03
(1,902) 1:A:51:LEU:HD12 1:A:75:VAL:HG22 9 0.03
(1,009) 1.A.E1.I EII.IID19 1.A.7E.VAI IIC99 0 0.09
(1,902)   1:A:51:LEU:HD12   1:A:75:VAL:HG23   9   0.03
(1,902) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:75:VAL:HG21 9 0.03
(1,902) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:75:VAL:HG22 9 0.03
(1,902) 1:A:51:LEU:HD13 1:A:75:VAL:HG23 9 0.03
(1,901) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD11 12 0.03
(1,901) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD12 12 0.03
(1,901) 1:A:46:VAL:HG21 1:A:51:LEU:HD13 12 0.03
(1,901) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD11 12 0.03
(1,901) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD12 12 0.03
(1,901) 1:A:46:VAL:HG22 1:A:51:LEU:HD13 12 0.03
(1,901) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD11 12 0.03
(1,901) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD12 12 0.03
(1,901) 1:A:46:VAL:HG23 1:A:51:LEU:HD13 12 0.03
(1,9) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:138:LEU:H 14 0.03
(1,9) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:138:LEU:H 14 0.03



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,9)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:138:LEU:H	14	0.03
(1,893)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD11	14	0.03
(1,893)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD12	14	0.03
(1,893)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD13	14	0.03
(1,889)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:130:LYS:H	14	0.03
(1,889)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:130:LYS:H	14	0.03
(1,889)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:130:LYS:H	14	0.03
(1,881)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:140:LEU:HD11	10	0.03
(1,881)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:140:LEU:HD12	10	0.03
(1,881)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:140:LEU:HD13	10	0.03
(1,881)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:140:LEU:HD11	10	0.03
(1,881)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:140:LEU:HD12	10	0.03
(1,881)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:140:LEU:HD13	10	0.03
(1,881)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:140:LEU:HD11	10	0.03
(1,881)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:140:LEU:HD12	10	0.03
(1,881)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:140:LEU:HD13	10	0.03
(1,881)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:140:LEU:HD11	15	0.03
(1,881)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:140:LEU:HD12	15	0.03
(1,881)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:140:LEU:HD13	15	0.03
(1,881)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:140:LEU:HD11	15	0.03
(1,881)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:140:LEU:HD12	15	0.03
(1,881)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:140:LEU:HD13	15	0.03
(1,881)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:140:LEU:HD11	15	0.03
(1,881)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:140:LEU:HD12	15	0.03
(1,881)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:140:LEU:HD13	15	0.03
(1,880)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:13:ASN:HD21	8	0.03
(1,880)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:13:ASN:HD21	8	0.03
(1,880)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:13:ASN:HD21	8	0.03
(1,880)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:13:ASN:HD21	14	0.03
(1,880)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:13:ASN:HD21	14	0.03
(1,880)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:13:ASN:HD21	14	0.03
(1,870)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:71:ILE:HD11	4	0.03
(1,870)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:71:ILE:HD12	4	0.03
(1,870)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:71:ILE:HD13	4	0.03
(1,870)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:71:ILE:HD11	4	0.03
(1,870)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:71:ILE:HD12	4	0.03
(1,870)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:71:ILE:HD13	4	0.03
(1,870)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:71:ILE:HD11	4	0.03
(1,870)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:71:ILE:HD12	4	0.03
(1,870)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:71:ILE:HD13	4	0.03
(1,87)	1:A:31:ASN:H	1:A:34:TRP:HE1	19	0.03
(1,866)	1:A:71:ILE:HD11	1:A:140:LEU:HD11	19	0.03



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,866)	1:A:71:ILE:HD11	1:A:140:LEU:HD12	19	0.03
(1,866)	1:A:71:ILE:HD11	1:A:140:LEU:HD13	19	0.03
(1,866)	1:A:71:ILE:HD12	1:A:140:LEU:HD11	19	0.03
(1,866)	1:A:71:ILE:HD12	1:A:140:LEU:HD12	19	0.03
(1,866)	1:A:71:ILE:HD12	1:A:140:LEU:HD13	19	0.03
(1,866)	1:A:71:ILE:HD13	1:A:140:LEU:HD11	19	0.03
(1,866)	1:A:71:ILE:HD13	1:A:140:LEU:HD12	19	0.03
(1,866)	1:A:71:ILE:HD13	1:A:140:LEU:HD13	19	0.03
(1,865)	1:A:42:TYR:H	1:A:71:ILE:HD11	10	0.03
(1,865)	1:A:42:TYR:H	1:A:71:ILE:HD12	10	0.03
(1,865)	1:A:42:TYR:H	1:A:71:ILE:HD13	10	0.03
(1,864)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:74:GLU:H	2	0.03
(1,864)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:74:GLU:H	2	0.03
(1,864)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:74:GLU:H	2	0.03
(1,860)	1:A:16:GLN:HE21	1:A:45:ILE:HD11	1	0.03
(1,860)	1:A:16:GLN:HE21	1:A:45:ILE:HD12	1	0.03
(1,860)	1:A:16:GLN:HE21	1:A:45:ILE:HD13	1	0.03
(1,858)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:43:VAL:HG11	14	0.03
(1,858)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:43:VAL:HG12	14	0.03
(1,858)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:43:VAL:HG13	14	0.03
(1,858)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:43:VAL:HG11	14	0.03
(1,858)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:43:VAL:HG12	14	0.03
(1,858)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:43:VAL:HG13	14	0.03
(1,858)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:43:VAL:HG11	14	0.03
(1,858)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:43:VAL:HG12	14	0.03
(1,858)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:43:VAL:HG13	14	0.03
(1,857)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:129:LEU:HD11	4	0.03
(1,857)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:129:LEU:HD12	4	0.03
(1,857)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:129:LEU:HD13	4	0.03
(1,857)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:129:LEU:HD11	4	0.03
(1,857)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:129:LEU:HD12	4	0.03
(1,857)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:129:LEU:HD13	4	0.03
(1,857)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:129:LEU:HD11	4	0.03
(1,857)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:129:LEU:HD12	4	0.03
(1,857)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:129:LEU:HD13	4	0.03
(1,856)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:138:LEU:HD11	12	0.03
(1,856)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:138:LEU:HD12	12	0.03
(1,856)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:138:LEU:HD13	12	0.03
(1,856)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:138:LEU:HD11	12	0.03
(1,856)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:138:LEU:HD12	12	0.03
(1,856)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:138:LEU:HD13	12	0.03
(1,856)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:138:LEU:HD11	12	0.03



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,856)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:138:LEU:HD12	12	0.03
(1,856)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:138:LEU:HD13	12	0.03
(1,852)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:124:VAL:HG11	8	0.03
(1,852)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:124:VAL:HG12	8	0.03
(1,852)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:124:VAL:HG13	8	0.03
(1,852)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:124:VAL:HG11	8	0.03
(1,852)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:124:VAL:HG12	8	0.03
(1,852)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:124:VAL:HG13	8	0.03
(1,852)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:124:VAL:HG11	8	0.03
(1,852)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:124:VAL:HG12	8	0.03
(1,852)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:124:VAL:HG13	8	0.03
(1,852)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:124:VAL:HG11	20	0.03
(1,852)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:124:VAL:HG12	20	0.03
(1,852)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:124:VAL:HG13	20	0.03
(1,852)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:124:VAL:HG11	20	0.03
(1,852)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:124:VAL:HG12	20	0.03
(1,852)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:124:VAL:HG13	20	0.03
(1,852)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:124:VAL:HG11	20	0.03
(1,852)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:124:VAL:HG12	20	0.03
(1,852)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:124:VAL:HG13	20	0.03
(1,846)	1:A:88:THR:H	1:A:102:VAL:HG11	7	0.03
(1,846)	1:A:88:THR:H	1:A:102:VAL:HG12	7	0.03
(1,846)	1:A:88:THR:H	1:A:102:VAL:HG13	7	0.03
(1,839)	1:A:42:TYR:H	1:A:43:VAL:HG11	7	0.03
(1,839)	1:A:42:TYR:H	1:A:43:VAL:HG12	7	0.03
(1,839)	1:A:42:TYR:H	1:A:43:VAL:HG13	7	0.03
(1,837)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:H	11	0.03
(1,837)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:H	11	0.03
(1,837)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:H	11	0.03
(1,837)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:H	12	0.03
(1,837)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:H	12	0.03
(1,837)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:H	12	0.03
(1,83)	1:A:9:ILE:H	1:A:12:LEU:H	3	0.03
(1,829)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:112:LEU:HD11	3	0.03
(1,829)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:112:LEU:HD12	3	0.03
(1,829)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:112:LEU:HD13	3	0.03
(1,829)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:112:LEU:HD11	3	0.03
(1,829)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:112:LEU:HD12	3	0.03
(1,829)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:112:LEU:HD13	3	0.03
(1,829)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:112:LEU:HD11	3	0.03
(1,829)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:112:LEU:HD12	3	0.03
(1,829)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:112:LEU:HD13	3	0.03



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,829)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:112:LEU:HD11	5	0.03
(1,829)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:112:LEU:HD12	5	0.03
(1,829)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:112:LEU:HD13	5	0.03
(1,829)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:112:LEU:HD11	5	0.03
(1,829)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:112:LEU:HD12	5	0.03
(1,829)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:112:LEU:HD13	5	0.03
(1,829)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:112:LEU:HD11	5	0.03
(1,829)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:112:LEU:HD12	5	0.03
(1,829)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:112:LEU:HD13	5	0.03
(1,825)	1:A:90:VAL:HG21	1:A:91:ARG:H	17	0.03
(1,825)	1:A:90:VAL:HG22	1:A:91:ARG:H	17	0.03
(1,825)	1:A:90:VAL:HG23	1:A:91:ARG:H	17	0.03
(1,822)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:43:VAL:HG21	6	0.03
(1,822)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:43:VAL:HG22	6	0.03
(1,822)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:43:VAL:HG23	6	0.03
(1,822)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:43:VAL:HG21	6	0.03
(1,822)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:43:VAL:HG22	6	0.03
(1,822)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:43:VAL:HG23	6	0.03
(1,822)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:43:VAL:HG21	6	0.03
(1,822)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:43:VAL:HG22	6	0.03
(1,822)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:43:VAL:HG23	6	0.03
(1,817)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:20:THR:H	11	0.03
(1,817)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:20:THR:H	11	0.03
(1,817)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:20:THR:H	11	0.03
(1,817)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:20:THR:H	14	0.03
(1,817)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:20:THR:H	14	0.03
(1,817)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:20:THR:H	14	0.03
(1,816)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG11	13	0.03
(1,816)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG12	13	0.03
(1,816)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG13	13	0.03
(1,81)	1:A:47:SER:H	1:A:48:GLY:H	19	0.03
(1,808)	1:A:15:MET:H	1:A:17:TYR:H	4	0.03
(1,806)	1:A:133:GLY:H	1:A:135:GLU:H	1	0.03
(1,806)	1:A:133:GLY:H	1:A:135:GLU:H	16	0.03
(1,805)	1:A:54:SER:H	1:A:56:ASP:H	14	0.03
(1,803)	1:A:77:GLU:H	1:A:78:LYS:H	15	0.03
(1,795)	1:A:81:THR:H	1:A:82:SER:H	4	0.03
(1,793)	1:A:44:ASP:H	1:A:122:ARG:H	7	0.03
(1,793)	1:A:44:ASP:H	1:A:122:ARG:H	14	0.03
(1,789)	1:A:130:LYS:H	1:A:133:GLY:H	15	0.03
(1,784)	1:A:46:VAL:H	1:A:48:GLY:H	5	0.03
(1,784)	1:A:46:VAL:H	1:A:48:GLY:H	9	0.03



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,78)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:H	4	0.03
(1,778)	1:A:7:GLU:H	1:A:9:ILE:H	2	0.03
(1,777)	1:A:16:GLN:H	1:A:19:VAL:H	17	0.03
(1,769)	1:A:5:LYS:H	1:A:7:GLU:H	10	0.03
(1,764)	1:A:88:THR:H	1:A:102:VAL:H	17	0.03
(1,759)	1:A:29:PHE:H	1:A:31:ASN:H	8	0.03
(1,751)	1:A:105:ASP:H	1:A:113:ARG:H	12	0.03
(1,749)	1:A:73:GLU:H	1:A:75:VAL:H	7	0.03
(1,747)	1:A:52:PHE:H	1:A:71:ILE:H	12	0.03
(1,732)	1:A:31:ASN:H	1:A:34:TRP:HE1	19	0.03
(1,728)	1:A:9:ILE:H	1:A:12:LEU:H	3	0.03
(1,726)	1:A:47:SER:H	1:A:48:GLY:H	19	0.03
(1,723)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:H	4	0.03
(1,712)	1:A:117:ASN:H	1:A:117:ASN:HD22	12	0.03
(1,710)	1:A:118:SER:HG	1:A:119:ALA:H	11	0.03
(1,710)	1:A:118:SER:HG	1:A:119:ALA:H	15	0.03
(1,709)	1:A:47:SER:HG	1:A:49:LYS:H	12	0.03
(1,708)	1:A:54:SER:HG	1:A:57:LYS:H	9	0.03
(1,704)	1:A:132:GLU:H	1:A:138:LEU:HD11	4	0.03
(1,704)	1:A:132:GLU:H	1:A:138:LEU:HD12	4	0.03
(1,704)	1:A:132:GLU:H	1:A:138:LEU:HD13	4	0.03
(1,704)	1:A:132:GLU:H	1:A:138:LEU:HD11	9	0.03
(1,704)	1:A:132:GLU:H	1:A:138:LEU:HD12	9	0.03
(1,704)	1:A:132:GLU:H	1:A:138:LEU:HD13	9	0.03
(1,702)	1:A:112:LEU:HD11	1:A:113:ARG:H	5	0.03
(1,702)	1:A:112:LEU:HD12	1:A:113:ARG:H	5	0.03
(1,702)	1:A:112:LEU:HD13	1:A:113:ARG:H	5	0.03
(1,702)	1:A:112:LEU:HD11	1:A:113:ARG:H	11	0.03
(1,702)	1:A:112:LEU:HD12	1:A:113:ARG:H	11	0.03
(1,702)	1:A:112:LEU:HD13	1:A:113:ARG:H	11	0.03
(1,702)	1:A:112:LEU:HD11	1:A:113:ARG:H	16	0.03
(1,702)	1:A:112:LEU:HD12	1:A:113:ARG:H	16	0.03
(1,702)	1:A:112:LEU:HD13	1:A:113:ARG:H	16	0.03
(1,701)	1:A:110:ASN:HD22	1:A:112:LEU:HD11	13	0.03
(1,701)	1:A:110:ASN:HD22	1:A:112:LEU:HD12	13	0.03
(1,701)	1:A:110:ASN:HD22	1:A:112:LEU:HD13	13	0.03
(1,7)	1:A:41:LEU:H	1:A:41:LEU:HD11	12	0.03
(1,7)	1:A:41:LEU:H	1:A:41:LEU:HD12	12	0.03
(1,7)	1:A:41:LEU:H	1:A:41:LEU:HD13	12	0.03
(1,695)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:64:TRP:HE1	5	0.03
(1,695)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:64:TRP:HE1	5	0.03
(1,695)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:64:TRP:HE1	5	0.03



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,690)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD11	15	0.03
(1,690)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD12	15	0.03
(1,690)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD13	15	0.03
(1,684)	1:A:140:LEU:H	1:A:140:LEU:HD11	3	0.03
(1,684)	1:A:140:LEU:H	1:A:140:LEU:HD12	3	0.03
(1,684)	1:A:140:LEU:H	1:A:140:LEU:HD13	3	0.03
(1,683)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:13:ASN:HD22	12	0.03
(1,683)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:13:ASN:HD22	12	0.03
(1,683)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:13:ASN:HD22	12	0.03
(1,683)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:13:ASN:HD22	17	0.03
(1,683)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:13:ASN:HD22	17	0.03
(1,683)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:13:ASN:HD22	17	0.03
(1,675)	1:A:106:GLY:H	1:A:112:LEU:HD21	20	0.03
(1,675)	1:A:106:GLY:H	1:A:112:LEU:HD22	20	0.03
(1,675)	1:A:106:GLY:H	1:A:112:LEU:HD23	20	0.03
(1,674)	1:A:78:LYS:H	1:A:90:VAL:HG21	15	0.03
(1,674)	1:A:78:LYS:H	1:A:90:VAL:HG22	15	0.03
(1,674)	1:A:78:LYS:H	1:A:90:VAL:HG23	15	0.03
(1,674)	1:A:78:LYS:H	1:A:90:VAL:HG21	20	0.03
(1,674)	1:A:78:LYS:H	1:A:90:VAL:HG22	20	0.03
(1,674)	1:A:78:LYS:H	1:A:90:VAL:HG23	20	0.03
(1,67)	1:A:117:ASN:H	1:A:117:ASN:HD22	12	0.03
(1,666)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD11	4	0.03
(1,666)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD12	4	0.03
(1,666)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD13	4	0.03
(1,666)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD11	10	0.03
(1,666)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD12	10	0.03
(1,666)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD13	10	0.03
(1,664)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:127:HIS:H	2	0.03
(1,664)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:127:HIS:H	2	0.03
(1,664)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:127:HIS:H	2	0.03
(1,663)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:128:LYS:H	2	0.03
(1,663)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:128:LYS:H	2	0.03
(1,663)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:128:LYS:H	2	0.03
(1,662)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD21	11	0.03
(1,662)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD22	11	0.03
(1,662)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD23	11	0.03
(1,661)	1:A:102:VAL:H	1:A:102:VAL:HG11	12	0.03
(1,661)	1:A:102:VAL:H	1:A:102:VAL:HG12	12	0.03
(1,661)	1:A:102:VAL:H	1:A:102:VAL:HG13	12	0.03
(1,659)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD21	3	0.03
(1,659)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD22	3	0.03



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,659)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD23	3	0.03
(1,654)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:138:LEU:H	14	0.03
(1,654)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:138:LEU:H	14	0.03
(1,654)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:138:LEU:H	14	0.03
(1,652)	1:A:41:LEU:H	1:A:41:LEU:HD11	12	0.03
(1,652)	1:A:41:LEU:H	1:A:41:LEU:HD12	12	0.03
(1,652)	1:A:41:LEU:H	1:A:41:LEU:HD13	12	0.03
(1,65)	1:A:118:SER:HG	1:A:119:ALA:H	11	0.03
(1,65)	1:A:118:SER:HG	1:A:119:ALA:H	15	0.03
(1,649)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:124:VAL:H	2	0.03
(1,649)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:H	2	0.03
(1,649)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:H	2	0.03
(1,644)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD11	17	0.03
(1,644)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD12	17	0.03
(1,644)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD13	17	0.03
(1,643)	1:A:13:ASN:HD22	1:A:12:LEU:HD11	9	0.03
(1,643)	1:A:13:ASN:HD22	1:A:12:LEU:HD12	9	0.03
(1,643)	1:A:13:ASN:HD22	1:A:12:LEU:HD13	9	0.03
(1,64)	1:A:47:SER:HG	1:A:49:LYS:H	12	0.03
(1,637)	1:A:116:ILE:HD11	1:A:99:LEU:HD11	3	0.03
(1,637)	1:A:116:ILE:HD11	1:A:99:LEU:HD12	3	0.03
(1,637)	1:A:116:ILE:HD11	1:A:99:LEU:HD13	3	0.03
(1,637)	1:A:116:ILE:HD12	1:A:99:LEU:HD11	3	0.03
(1,637)	1:A:116:ILE:HD12	1:A:99:LEU:HD12	3	0.03
(1,637)	1:A:116:ILE:HD12	1:A:99:LEU:HD13	3	0.03
(1,637)	1:A:116:ILE:HD13	1:A:99:LEU:HD11	3	0.03
(1,637)	1:A:116:ILE:HD13	1:A:99:LEU:HD12	3	0.03
(1,637)	1:A:116:ILE:HD13	1:A:99:LEU:HD13	3	0.03
(1,634)	1:A:71:ILE:HD11	1:A:140:LEU:HD11	19	0.03
(1,634)	1:A:71:ILE:HD11	1:A:140:LEU:HD12	19	0.03
(1,634)	1:A:71:ILE:HD11	1:A:140:LEU:HD13	19	0.03
(1,634)	1:A:71:ILE:HD12	1:A:140:LEU:HD11	19	0.03
(1,634)	1:A:71:ILE:HD12	1:A:140:LEU:HD12	19	0.03
(1,634)	1:A:71:ILE:HD12	1:A:140:LEU:HD13	19	0.03
(1,634)	1:A:71:ILE:HD13	1:A:140:LEU:HD11	19	0.03
(1,634)	1:A:71:ILE:HD13	1:A:140:LEU:HD12	19	0.03
(1,634)	1:A:71:ILE:HD13	1:A:140:LEU:HD13	19	0.03
(1,630)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD21	19	0.03
(1,630)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD22	19	0.03
(1,630)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD23	19	0.03
(1,630)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD21	19	0.03
(1,630)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD22	19	0.03



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,630)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD23	19	0.03
(1,630)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD21	19	0.03
(1,630)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD22	19	0.03
(1,630)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD23	19	0.03
(1,63)	1:A:54:SER:HG	1:A:57:LYS:H	9	0.03
(1,613)	1:A:115:CYS:H	1:A:101:HIS:H	14	0.03
(1,613)	1:A:115:CYS:H	1:A:101:HIS:H	18	0.03
(1,612)	1:A:102:VAL:H	1:A:88:THR:H	11	0.03
(1,59)	1:A:132:GLU:H	1:A:138:LEU:HD11	4	0.03
(1,59)	1:A:132:GLU:H	1:A:138:LEU:HD12	4	0.03
(1,59)	1:A:132:GLU:H	1:A:138:LEU:HD13	4	0.03
(1,59)	1:A:132:GLU:H	1:A:138:LEU:HD11	9	0.03
(1,59)	1:A:132:GLU:H	1:A:138:LEU:HD12	9	0.03
(1,59)	1:A:132:GLU:H	1:A:138:LEU:HD13	9	0.03
(1,577)	1:A:111:GLY:H	1:A:112:LEU:HD21	10	0.03
(1,577)	1:A:111:GLY:H	1:A:112:LEU:HD22	10	0.03
(1,577)	1:A:111:GLY:H	1:A:112:LEU:HD23	10	0.03
(1,571)	1:A:140:LEU:HD11	1:A:141:PHE:H	14	0.03
(1,571)	1:A:140:LEU:HD12	1:A:141:PHE:H	14	0.03
(1,571)	1:A:140:LEU:HD13	1:A:141:PHE:H	14	0.03
(1,57)	1:A:112:LEU:HD11	1:A:113:ARG:H	5	0.03
(1,57)	1:A:112:LEU:HD12	1:A:113:ARG:H	5	0.03
(1,57)	1:A:112:LEU:HD13	1:A:113:ARG:H	5	0.03
(1,57)	1:A:112:LEU:HD11	1:A:113:ARG:H	11	0.03
(1,57)	1:A:112:LEU:HD12	1:A:113:ARG:H	11	0.03
(1,57)	1:A:112:LEU:HD13	1:A:113:ARG:H	11	0.03
(1,57)	1:A:112:LEU:HD11	1:A:113:ARG:H	16	0.03
(1,57)	1:A:112:LEU:HD12	1:A:113:ARG:H	16	0.03
(1,57)	1:A:112:LEU:HD13	1:A:113:ARG:H	16	0.03
(1,564)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:137:TYR:H	2	0.03
(1,564)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:137:TYR:H	2	0.03
(1,564)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:137:TYR:H	2	0.03
(1,564)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:137:TYR:H	5	0.03
(1,564)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:137:TYR:H	5	0.03
(1,564)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:137:TYR:H	5	0.03
(1,562)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD21	11	0.03
(1,562)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD22	11	0.03
(1,562)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD23	11	0.03
(1,561)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:134:TYR:H	7	0.03
(1,561)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:134:TYR:H	7	0.03
(1,561)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:134:TYR:H	7	0.03
(1,561)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:134:TYR:H	20	0.03



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,561)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:134:TYR:H	20	0.03
(1,561)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:134:TYR:H	20	0.03
(1,56)	1:A:110:ASN:HD22	1:A:112:LEU:HD11	13	0.03
(1,56)	1:A:110:ASN:HD22	1:A:112:LEU:HD12	13	0.03
(1,56)	1:A:110:ASN:HD22	1:A:112:LEU:HD13	13	0.03
(1,557)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:131:GLU:H	15	0.03
(1,557)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:131:GLU:H	15	0.03
(1,557)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:131:GLU:H	15	0.03
(1,552)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD21	12	0.03
(1,552)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD22	12	0.03
(1,552)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD23	12	0.03
(1,548)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD11	11	0.03
(1,548)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD12	11	0.03
(1,548)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD13	11	0.03
(1,547)	1:A:45:ILE:HD11	1:A:121:LEU:H	2	0.03
(1,547)	1:A:45:ILE:HD12	1:A:121:LEU:H	2	0.03
(1,547)	1:A:45:ILE:HD13	1:A:121:LEU:H	2	0.03
(1,542)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD21	17	0.03
(1,542)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD22	17	0.03
(1,542)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD23	17	0.03
(1,536)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:102:VAL:H	6	0.03
(1,536)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:102:VAL:H	6	0.03
(1,536)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:102:VAL:H	6	0.03
(1,536)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:102:VAL:H	11	0.03
(1,536)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:102:VAL:H	11	0.03
(1,536)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:102:VAL:H	11	0.03
(1,526)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:98:HIS:H	12	0.03
(1,526)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:98:HIS:H	12	0.03
(1,526)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:98:HIS:H	12	0.03
(1,520)	1:A:90:VAL:H	1:A:90:VAL:HG11	2	0.03
(1,520)	1:A:90:VAL:H	1:A:90:VAL:HG12	2	0.03
(1,520)	1:A:90:VAL:H	1:A:90:VAL:HG13	2	0.03
(1,518)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD11	16	0.03
(1,518)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD12	16	0.03
(1,518)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD13	16	0.03
(1,517)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:HG21	16	0.03
(1,517)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:HG22	16	0.03
(1,517)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:HG23	16	0.03
(1,512)	1:A:79:LEU:HD21	1:A:87:ARG:H	20	0.03
(1,512)	1:A:79:LEU:HD22	1:A:87:ARG:H	20	0.03
(1,512)	1:A:79:LEU:HD23	1:A:87:ARG:H	20	0.03
(1,511)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:122:ARG:H	13	0.03



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

/	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,511)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:122:ARG:H	13	0.03
(1,511)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:122:ARG:H	13	0.03
(1,508)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG21	6	0.03
(1,508)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG22	6	0.03
(1,508)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG23	6	0.03
(1,507)	1:A:75:VAL:HG11	1:A:77:GLU:H	5	0.03
(1,507)	1:A:75:VAL:HG12	1:A:77:GLU:H	5	0.03
(1,507)	1:A:75:VAL:HG13	1:A:77:GLU:H	5	0.03
(1,505)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:76:GLU:H	2	0.03
(1,505)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:76:GLU:H	2	0.03
(1,505)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:76:GLU:H	2	0.03
(1,505)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:76:GLU:H	12	0.03
(1,505)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:76:GLU:H	12	0.03
(1,505)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:76:GLU:H	12	0.03
(1,500)	1:A:73:GLU:H	1:A:75:VAL:HG21	5	0.03
(1,500)	1:A:73:GLU:H	1:A:75:VAL:HG22	5	0.03
(1,500)	1:A:73:GLU:H	1:A:75:VAL:HG23	5	0.03
(1,50)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:64:TRP:HE1	5	0.03
(1,50)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:64:TRP:HE1	5	0.03
(1,50)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:64:TRP:HE1	5	0.03
(1,497)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:H	6	0.03
(1,497)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:H	6	0.03
(1,497)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:H	6	0.03
(1,497)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:H	12	0.03
(1,497)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:H	12	0.03
(1,497)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:H	12	0.03
(1,493)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:52:PHE:H	19	0.03
(1,493)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:52:PHE:H	19	0.03
(1,493)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:52:PHE:H	19	0.03
(1,491)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:52:PHE:H	7	0.03
(1,491)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:52:PHE:H	7	0.03
(1,491)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:52:PHE:H	7	0.03
(1,489)	1:A:51:LEU:H	1:A:71:ILE:HD11	10	0.03
(1,489)	1:A:51:LEU:H	1:A:71:ILE:HD12	10	0.03
(1,489)	1:A:51:LEU:H	1:A:71:ILE:HD13	10	0.03
(1,488)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:51:LEU:H	5	0.03
(1,488)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:51:LEU:H	5	0.03
(1,488)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:51:LEU:H	5	0.03
(1,475)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:44:ASP:H	2	0.03
(1,475)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:44:ASP:H	2	0.03
(1,475)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:44:ASP:H	2	0.03
(1,468)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:23:ASN:H	2	0.03



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

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



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,430)	1:A:46:VAL:HG12	1:A:47:SER:H	20	0.03
(1,430)	1:A:46:VAL:HG13	1:A:47:SER:H	20	0.03
(1,428)	1:A:79:LEU:HD21	1:A:80:ASP:H	4	0.03
(1,428)	1:A:79:LEU:HD22	1:A:80:ASP:H	4	0.03
(1,428)	1:A:79:LEU:HD23	1:A:80:ASP:H	4	0.03
(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD21	14	0.03
(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD22	14	0.03
(1,419)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD23	14	0.03
(1,414)	1:A:12:LEU:H	1:A:12:LEU:HD21	9	0.03
(1,414)	1:A:12:LEU:H	1:A:12:LEU:HD22	9	0.03
(1,414)	1:A:12:LEU:H	1:A:12:LEU:HD23	9	0.03
(1,407)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:46:VAL:HG21	15	0.03
(1,407)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:46:VAL:HG22	15	0.03
(1,407)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:46:VAL:HG23	15	0.03
(1,407)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:46:VAL:HG21	15	0.03
(1,407)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:46:VAL:HG22	15	0.03
(1,407)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:46:VAL:HG23	15	0.03
(1,407)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:46:VAL:HG21	15	0.03
(1,407)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:46:VAL:HG22	15	0.03
(1,407)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:46:VAL:HG23	15	0.03
(1,4)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:124:VAL:H	2	0.03
(1,4)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:H	2	0.03
(1,4)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:H	2	0.03
(1,39)	1:A:140:LEU:H	1:A:140:LEU:HD11	3	0.03
(1,39)	1:A:140:LEU:H	1:A:140:LEU:HD12	3	0.03
(1,39)	1:A:140:LEU:H	1:A:140:LEU:HD13	3	0.03
(1,387)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:90:VAL:HG21	3	0.03
(1,387)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:90:VAL:HG22	3	0.03
(1,387)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:90:VAL:HG23	3	0.03
(1,387)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:90:VAL:HG21	3	0.03
(1,387)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:90:VAL:HG22	3	0.03
(1,387)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:90:VAL:HG23	3	0.03
(1,387)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG21	3	0.03
(1,387)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG22	3	0.03
(1,387)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG23	3	0.03
(1,387)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:90:VAL:HG21	20	0.03
(1,387)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:90:VAL:HG22	20	0.03
(1,387)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:90:VAL:HG23	20	0.03
(1,387)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:90:VAL:HG21	20	0.03
(1,387)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:90:VAL:HG22	20	0.03
(1,387)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:90:VAL:HG23	20	0.03
(1,387)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG21	20	0.03



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,387)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG22	20	0.03
(1,387)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG23	20	0.03
(1,384)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:99:LEU:HD21	6	0.03
(1,384)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:99:LEU:HD22	6	0.03
(1,384)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:99:LEU:HD23	6	0.03
(1,384)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:99:LEU:HD21	6	0.03
(1,384)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:99:LEU:HD22	6	0.03
(1,384)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:99:LEU:HD23	6	0.03
(1,384)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:99:LEU:HD21	6	0.03
(1,384)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:99:LEU:HD22	6	0.03
(1,384)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:99:LEU:HD23	6	0.03
(1,384)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:99:LEU:HD21	9	0.03
(1,384)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:99:LEU:HD22	9	0.03
(1,384)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:99:LEU:HD23	9	0.03
(1,384)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:99:LEU:HD21	9	0.03
(1,384)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:99:LEU:HD22	9	0.03
(1,384)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:99:LEU:HD23	9	0.03
(1,384)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:99:LEU:HD21	9	0.03
(1,384)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:99:LEU:HD22	9	0.03
(1,384)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:99:LEU:HD23	9	0.03
(1,381)	1:A:140:LEU:H	1:A:142:ASN:H	11	0.03
(1,38)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:13:ASN:HD22	12	0.03
(1,38)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:13:ASN:HD22	12	0.03
(1,38)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:13:ASN:HD22	12	0.03
(1,38)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:13:ASN:HD22	17	0.03
(1,38)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:13:ASN:HD22	17	0.03
(1,38)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:13:ASN:HD22	17	0.03
(1,379)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:H	2	0.03
(1,379)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:H	5	0.03
(1,379)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:H	17	0.03
(1,375)	1:A:131:GLU:H	1:A:133:GLY:H	6	0.03
(1,370)	1:A:129:LEU:H	1:A:130:LYS:H	9	0.03
(1,368)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:H	6	0.03
(1,368)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:H	16	0.03
(1,366)	1:A:41:LEU:H	1:A:126:LYS:H	8	0.03
(1,361)	1:A:45:ILE:H	1:A:122:ARG:H	8	0.03
(1,357)	1:A:119:ALA:H	1:A:121:LEU:H	13	0.03
(1,357)	1:A:119:ALA:H	1:A:121:LEU:H	19	0.03
(1,331)	1:A:80:ASP:H	1:A:88:THR:H	1	0.03
(1,331)	1:A:80:ASP:H	1:A:88:THR:H	10	0.03
(1,330)	1:A:80:ASP:H	1:A:87:ARG:H	18	0.03
(1,318)	1:A:44:ASP:H	1:A:48:GLY:H	16	0.03



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

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



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,256)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD12	12	0.03
(1,256)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD13	12	0.03
(1,248)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD11	14	0.03
(1,248)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD12	14	0.03
(1,248)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD13	14	0.03
(1,244)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:130:LYS:H	14	0.03
(1,244)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:130:LYS:H	14	0.03
(1,244)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:130:LYS:H	14	0.03
(1,236)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:140:LEU:HD11	10	0.03
(1,236)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:140:LEU:HD12	10	0.03
(1,236)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:140:LEU:HD13	10	0.03
(1,236)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:140:LEU:HD11	10	0.03
(1,236)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:140:LEU:HD12	10	0.03
(1,236)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:140:LEU:HD13	10	0.03
(1,236)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:140:LEU:HD11	10	0.03
(1,236)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:140:LEU:HD12	10	0.03
(1,236)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:140:LEU:HD13	10	0.03
(1,236)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:140:LEU:HD11	15	0.03
(1,236)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:140:LEU:HD12	15	0.03
(1,236)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:140:LEU:HD13	15	0.03
(1,236)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:140:LEU:HD11	15	0.03
(1,236)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:140:LEU:HD12	15	0.03
(1,236)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:140:LEU:HD13	15	0.03
(1,236)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:140:LEU:HD11	15	0.03
(1,236)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:140:LEU:HD12	15	0.03
(1,236)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:140:LEU:HD13	15	0.03
(1,235)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:13:ASN:HD21	8	0.03
(1,235)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:13:ASN:HD21	8	0.03
(1,235)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:13:ASN:HD21	8	0.03
(1,235)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:13:ASN:HD21	14	0.03
(1,235)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:13:ASN:HD21	14	0.03
(1,235)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:13:ASN:HD21	14	0.03
(1,225)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:71:ILE:HD11	4	0.03
(1,225)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:71:ILE:HD12	4	0.03
(1,225)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:71:ILE:HD13	4	0.03
(1,225)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:71:ILE:HD11	4	0.03
(1,225)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:71:ILE:HD12	4	0.03
(1,225)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:71:ILE:HD13	4	0.03
(1,225)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:71:ILE:HD11	4	0.03
(1,225)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:71:ILE:HD12	4	0.03
(1,225)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:71:ILE:HD13	4	0.03
(1,221)	1:A:71:ILE:HD11	1:A:140:LEU:HD11	19	0.03



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

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



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

( ) /	1:A:41:LEU:HD23 1:A:41:LEU:HD23	1:A:138:LEU:HD12	12	0.03
(1,21)		1 A 100 I DIL IID 10		0.00
( ' /	1 A 105 THO II	1:A:138:LEU:HD13	12	0.03
(1,21)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD11	4	0.03
	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD12	4	0.03
(1,21)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD13	4	0.03
(1,21)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD11	10	0.03
(1,21)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD12	10	0.03
(1,21)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD13	10	0.03
(1,207)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:124:VAL:HG11	8	0.03
(1,207)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:124:VAL:HG12	8	0.03
(1,207)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:124:VAL:HG13	8	0.03
(1,207)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:124:VAL:HG11	8	0.03
(1,207)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:124:VAL:HG12	8	0.03
(1,207)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:124:VAL:HG13	8	0.03
	1:A:43:VAL:HG13	1:A:124:VAL:HG11	8	0.03
	1:A:43:VAL:HG13	1:A:124:VAL:HG12	8	0.03
(1,207)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:124:VAL:HG13	8	0.03
,	1:A:43:VAL:HG11	1:A:124:VAL:HG11	20	0.03
(1,207)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:124:VAL:HG12	20	0.03
(1,207)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:124:VAL:HG13	20	0.03
(1,207)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:124:VAL:HG11	20	0.03
(1,207)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:124:VAL:HG12	20	0.03
(1,207)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:124:VAL:HG13	20	0.03
(1,207)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:124:VAL:HG11	20	0.03
(1,207)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:124:VAL:HG12	20	0.03
(1,207)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:124:VAL:HG13	20	0.03
(1,201)	1:A:88:THR:H	1:A:102:VAL:HG11	7	0.03
(1,201)	1:A:88:THR:H	1:A:102:VAL:HG12	7	0.03
(1,201)	1:A:88:THR:H	1:A:102:VAL:HG13	7	0.03
(1,194)	1:A:42:TYR:H	1:A:43:VAL:HG11	7	0.03
(1,194)	1:A:42:TYR:H	1:A:43:VAL:HG12	7	0.03
(1,194)	1:A:42:TYR:H	1:A:43:VAL:HG13	7	0.03
(1,192)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:H	11	0.03
(1,192)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:H	11	0.03
(1,192)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:H	11	0.03
(1,192)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:H	12	0.03
(1,192)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:H	12	0.03
(1,192)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:H	12	0.03
(1,19)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:127:HIS:H	2	0.03
	1:A:124:VAL:HG12	1:A:127:HIS:H	2	0.03
(1,19)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:127:HIS:H	2	0.03
· · /	1:A:102:VAL:HG21	1:A:112:LEU:HD11	3	0.03



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,184)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:112:LEU:HD12	3	0.03
(1,184)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:112:LEU:HD13	3	0.03
(1,184)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:112:LEU:HD11	3	0.03
(1,184)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:112:LEU:HD12	3	0.03
(1,184)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:112:LEU:HD13	3	0.03
(1,184)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:112:LEU:HD11	3	0.03
(1,184)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:112:LEU:HD12	3	0.03
(1,184)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:112:LEU:HD13	3	0.03
(1,184)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:112:LEU:HD11	5	0.03
(1,184)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:112:LEU:HD12	5	0.03
(1,184)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:112:LEU:HD13	5	0.03
(1,184)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:112:LEU:HD11	5	0.03
(1,184)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:112:LEU:HD12	5	0.03
(1,184)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:112:LEU:HD13	5	0.03
(1,184)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:112:LEU:HD11	5	0.03
(1,184)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:112:LEU:HD12	5	0.03
(1,184)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:112:LEU:HD13	5	0.03
(1,180)	1:A:90:VAL:HG21	1:A:91:ARG:H	17	0.03
(1,180)	1:A:90:VAL:HG22	1:A:91:ARG:H	17	0.03
(1,180)	1:A:90:VAL:HG23	1:A:91:ARG:H	17	0.03
(1,18)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:128:LYS:H	2	0.03
(1,18)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:128:LYS:H	2	0.03
(1,18)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:128:LYS:H	2	0.03
(1,177)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:43:VAL:HG21	6	0.03
(1,177)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:43:VAL:HG22	6	0.03
(1,177)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:43:VAL:HG23	6	0.03
(1,177)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:43:VAL:HG21	6	0.03
(1,177)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:43:VAL:HG22	6	0.03
(1,177)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:43:VAL:HG23	6	0.03
(1,177)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:43:VAL:HG21	6	0.03
(1,177)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:43:VAL:HG22	6	0.03
(1,177)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:43:VAL:HG23	6	0.03
(1,172)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:20:THR:H	11	0.03
(1,172)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:20:THR:H	11	0.03
(1,172)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:20:THR:H	11	0.03
(1,172)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:20:THR:H	14	0.03
(1,172)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:20:THR:H	14	0.03
(1,172)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:20:THR:H	14	0.03
(1,171)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG11	13	0.03
(1,171)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG12	13	0.03
(1,171)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG13	13	0.03
(1,17)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD21	11	0.03



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,17)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD22	11	0.03
(1,17)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD23	11	0.03
(1,163)	1:A:15:MET:H	1:A:17:TYR:H	4	0.03
(1,161)	1:A:133:GLY:H	1:A:135:GLU:H	1	0.03
(1,161)	1:A:133:GLY:H	1:A:135:GLU:H	16	0.03
(1,160)	1:A:54:SER:H	1:A:56:ASP:H	14	0.03
(1,16)	1:A:102:VAL:H	1:A:102:VAL:HG11	12	0.03
(1,16)	1:A:102:VAL:H	1:A:102:VAL:HG12	12	0.03
(1,16)	1:A:102:VAL:H	1:A:102:VAL:HG13	12	0.03
(1,158)	1:A:77:GLU:H	1:A:78:LYS:H	15	0.03
(1,150)	1:A:81:THR:H	1:A:82:SER:H	4	0.03
(1,148)	1:A:44:ASP:H	1:A:122:ARG:H	7	0.03
(1,148)	1:A:44:ASP:H	1:A:122:ARG:H	14	0.03
(1,144)	1:A:130:LYS:H	1:A:133:GLY:H	15	0.03
(1,14)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD21	3	0.03
(1,14)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD22	3	0.03
(1,14)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD23	3	0.03
(1,139)	1:A:46:VAL:H	1:A:48:GLY:H	5	0.03
(1,139)	1:A:46:VAL:H	1:A:48:GLY:H	9	0.03
(1,133)	1:A:7:GLU:H	1:A:9:ILE:H	2	0.03
(1,132)	1:A:16:GLN:H	1:A:19:VAL:H	17	0.03
(1,1289)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD11	17	0.03
(1,1289)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD12	17	0.03
(1,1289)	1:A:17:TYR:H	1:A:12:LEU:HD13	17	0.03
(1,1288)	1:A:13:ASN:HD22	1:A:12:LEU:HD11	9	0.03
(1,1288)	1:A:13:ASN:HD22	1:A:12:LEU:HD12	9	0.03
(1,1288)	1:A:13:ASN:HD22	1:A:12:LEU:HD13	9	0.03
(1,1282)	1:A:116:ILE:HD11	1:A:99:LEU:HD11	3	0.03
(1,1282)	1:A:116:ILE:HD11	1:A:99:LEU:HD12	3	0.03
(1,1282)	1:A:116:ILE:HD11	1:A:99:LEU:HD13	3	0.03
(1,1282)	1:A:116:ILE:HD12	1:A:99:LEU:HD11	3	0.03
(1,1282)	1:A:116:ILE:HD12	1:A:99:LEU:HD12	3	0.03
(1,1282)	1:A:116:ILE:HD12	1:A:99:LEU:HD13	3	0.03
(1,1282)	1:A:116:ILE:HD13	1:A:99:LEU:HD11	3	0.03
(1,1282)	1:A:116:ILE:HD13	1:A:99:LEU:HD12	3	0.03
(1,1282)	1:A:116:ILE:HD13	1:A:99:LEU:HD13	3	0.03
(1,1279)	1:A:71:ILE:HD11	1:A:140:LEU:HD11	19	0.03
(1,1279)	1:A:71:ILE:HD11	1:A:140:LEU:HD12	19	0.03
(1,1279)	1:A:71:ILE:HD11	1:A:140:LEU:HD13	19	0.03
(1,1279)	1:A:71:ILE:HD12	1:A:140:LEU:HD11	19	0.03
(1,1279)	1:A:71:ILE:HD12	1:A:140:LEU:HD12	19	0.03
(1,1279)	1:A:71:ILE:HD12	1:A:140:LEU:HD13	19	0.03



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1279)	1:A:71:ILE:HD13	1:A:140:LEU:HD11	19	0.03
(1,1279)	1:A:71:ILE:HD13	1:A:140:LEU:HD12	19	0.03
(1,1279)	1:A:71:ILE:HD13	1:A:140:LEU:HD13	19	0.03
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD21	19	0.03
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD22	19	0.03
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD23	19	0.03
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD21	19	0.03
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD22	19	0.03
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:99:LEU:HD23	19	0.03
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD21	19	0.03
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD22	19	0.03
(1,1275)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HD23	19	0.03
(1,1258)	1:A:115:CYS:H	1:A:101:HIS:H	14	0.03
(1,1258)	1:A:115:CYS:H	1:A:101:HIS:H	18	0.03
(1,1257)	1:A:102:VAL:H	1:A:88:THR:H	11	0.03
(1,124)	1:A:5:LYS:H	1:A:7:GLU:H	10	0.03
(1,1222)	1:A:111:GLY:H	1:A:112:LEU:HD21	10	0.03
(1,1222)	1:A:111:GLY:H	1:A:112:LEU:HD22	10	0.03
(1,1222)	1:A:111:GLY:H	1:A:112:LEU:HD23	10	0.03
(1,1216)	1:A:140:LEU:HD11	1:A:141:PHE:H	14	0.03
(1,1216)	1:A:140:LEU:HD12	1:A:141:PHE:H	14	0.03
(1,1216)	1:A:140:LEU:HD13	1:A:141:PHE:H	14	0.03
(1,1209)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:137:TYR:H	2	0.03
(1,1209)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:137:TYR:H	2	0.03
(1,1209)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:137:TYR:H	2	0.03
(1,1209)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:137:TYR:H	5	0.03
(1,1209)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:137:TYR:H	5	0.03
(1,1209)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:137:TYR:H	5	0.03
(1,1207)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD21	11	0.03
(1,1207)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD22	11	0.03
(1,1207)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD23	11	0.03
(1,1206)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:134:TYR:H	7	0.03
(1,1206)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:134:TYR:H	7	0.03
(1,1206)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:134:TYR:H	7	0.03
(1,1206)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:134:TYR:H	20	0.03
(1,1206)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:134:TYR:H	20	0.03
(1,1206)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:134:TYR:H	20	0.03
(1,1202)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:131:GLU:H	15	0.03
(1,1202)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:131:GLU:H	15	0.03
(1,1202)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:131:GLU:H	15	0.03
(1,1197)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD21	12	0.03
(1,1197)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD22	12	0.03
				nd on mort nago



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1197)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD23	12	0.03
(1,1193)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD11	11	0.03
(1,1193)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD12	11	0.03
(1,1193)	1:A:130:LYS:H	1:A:138:LEU:HD13	11	0.03
(1,1192)	1:A:45:ILE:HD11	1:A:121:LEU:H	2	0.03
(1,1192)	1:A:45:ILE:HD12	1:A:121:LEU:H	2	0.03
(1,1192)	1:A:45:ILE:HD13	1:A:121:LEU:H	2	0.03
(1,119)	1:A:88:THR:H	1:A:102:VAL:H	17	0.03
(1,1187)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD21	17	0.03
(1,1187)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD22	17	0.03
(1,1187)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD23	17	0.03
(1,1181)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:102:VAL:H	6	0.03
(1,1181)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:102:VAL:H	6	0.03
(1,1181)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:102:VAL:H	6	0.03
(1,1181)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:102:VAL:H	11	0.03
(1,1181)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:102:VAL:H	11	0.03
(1,1181)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:102:VAL:H	11	0.03
(1,1171)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:98:HIS:H	12	0.03
(1,1171)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:98:HIS:H	12	0.03
(1,1171)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:98:HIS:H	12	0.03
(1,1165)	1:A:90:VAL:H	1:A:90:VAL:HG11	2	0.03
(1,1165)	1:A:90:VAL:H	1:A:90:VAL:HG12	2	0.03
(1,1165)	1:A:90:VAL:H	1:A:90:VAL:HG13	2	0.03
(1,1163)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD11	16	0.03
(1,1163)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD12	16	0.03
(1,1163)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD13	16	0.03
(1,1162)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:HG21	16	0.03
(1,1162)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:HG22	16	0.03
(1,1162)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:HG23	16	0.03
(1,1157)	1:A:79:LEU:HD21	1:A:87:ARG:H	20	0.03
(1,1157)	1:A:79:LEU:HD22	1:A:87:ARG:H	20	0.03
(1,1157)	1:A:79:LEU:HD23	1:A:87:ARG:H	20	0.03
(1,1156)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:122:ARG:H	13	0.03
(1,1156)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:122:ARG:H	13	0.03
(1,1156)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:122:ARG:H	13	0.03
(1,1153)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG21	6	0.03
(1,1153)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG22	6	0.03
(1,1153)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG23	6	0.03
(1,1152)	1:A:75:VAL:HG11	1:A:77:GLU:H	5	0.03
(1,1152)	1:A:75:VAL:HG12	1:A:77:GLU:H	5	0.03
(1,1152)	1:A:75:VAL:HG13	1:A:77:GLU:H	5	0.03
(1,1150)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:76:GLU:H	2	0.03



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1150)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:76:GLU:H	2	0.03
(1,1150)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:76:GLU:H	2	0.03
(1,1150)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:76:GLU:H	12	0.03
(1,1150)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:76:GLU:H	12	0.03
(1,1150)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:76:GLU:H	12	0.03
(1,1145)	1:A:73:GLU:H	1:A:75:VAL:HG21	5	0.03
(1,1145)	1:A:73:GLU:H	1:A:75:VAL:HG22	5	0.03
(1,1145)	1:A:73:GLU:H	1:A:75:VAL:HG23	5	0.03
(1,1142)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:H	6	0.03
(1,1142)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:H	6	0.03
(1,1142)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:H	6	0.03
(1,1142)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:H	12	0.03
(1,1142)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:H	12	0.03
(1,1142)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:H	12	0.03
(1,114)	1:A:29:PHE:H	1:A:31:ASN:H	8	0.03
(1,1138)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:52:PHE:H	19	0.03
(1,1138)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:52:PHE:H	19	0.03
(1,1138)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:52:PHE:H	19	0.03
(1,1136)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:52:PHE:H	7	0.03
(1,1136)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:52:PHE:H	7	0.03
(1,1136)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:52:PHE:H	7	0.03
(1,1134)	1:A:51:LEU:H	1:A:71:ILE:HD11	10	0.03
(1,1134)	1:A:51:LEU:H	1:A:71:ILE:HD12	10	0.03
(1,1134)	1:A:51:LEU:H	1:A:71:ILE:HD13	10	0.03
(1,1133)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:51:LEU:H	5	0.03
(1,1133)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:51:LEU:H	5	0.03
(1,1133)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:51:LEU:H	5	0.03
(1,1120)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:44:ASP:H	2	0.03
(1,1120)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:44:ASP:H	2	0.03
(1,1120)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:44:ASP:H	2	0.03
(1,1113)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:23:ASN:H	2	0.03
(1,1113)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:23:ASN:H	2	0.03
(1,1113)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:23:ASN:H	2	0.03
(1,1110)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG11	9	0.03
(1,1110)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG12	9	0.03
(1,1110)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG13	9	0.03
(1,1109)	1:A:16:GLN:H	1:A:46:VAL:HG11	11	0.03
(1,1109)	1:A:16:GLN:H	1:A:46:VAL:HG12	11	0.03
(1,1109)	1:A:16:GLN:H	1:A:46:VAL:HG13	11	0.03
(1,1108)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:16:GLN:H	20	0.03
(1,1108)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:16:GLN:H	20	0.03
(1,1108)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:16:GLN:H	20	0.03



Continued from previous page...

Key	$rac{d\ from\ previous\ page}{\mathbf{Atom-1}}$	Atom-2	Model	Violation (Å)
				( /
(1,1107)	1:A:45:ILE:HD11 1:A:45:ILE:HD12	1:A:46:VAL:H 1:A:46:VAL:H	15 15	0.03
$\begin{array}{ c c }\hline (1,1107) \\ \hline (1,1107) \\ \hline \end{array}$	1:A:45:ILE:HD12 1:A:45:ILE:HD13	1:A:46:VAL:H	15	0.03
( '	1:A:45:ILE:HD13	1:A:46:VAL:H	18	0.03
(1,1107)	1:A:45:ILE:HD11	1:A:46:VAL:H	18	0.03
(1,1107)	1:A:45:ILE:HD12 1:A:45:ILE:HD13	1:A:46:VAL:H	18	0.03
(1,1107)		1:A:40: VAL:H 1:A:10:LYS:H		
(1,1103)	1:A:9:ILE:HD11		8	0.03
(1,1103)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:10:LYS:H	8	0.03
(1,1103)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:10:LYS:H	8	0.03
(1,1101)	1:A:9:ILE:H	1:A:12:LEU:HD21	2	0.03
(1,1101)	1:A:9:ILE:H	1:A:12:LEU:HD22	2	0.03
(1,1101)	1:A:9:ILE:H	1:A:12:LEU:HD23	2	0.03
(1,1097)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG21	17	0.03
(1,1097)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG22	17	0.03
(1,1097)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG23	17	0.03
(1,1082)	1:A:46:VAL:HG11	1:A:48:GLY:H	14	0.03
(1,1082)	1:A:46:VAL:HG12	1:A:48:GLY:H	14	0.03
(1,1082)	1:A:46:VAL:HG13	1:A:48:GLY:H	14	0.03
(1,1082)	1:A:46:VAL:HG11	1:A:48:GLY:H	15	0.03
(1,1082)	1:A:46:VAL:HG12	1:A:48:GLY:H	15	0.03
(1,1082)	1:A:46:VAL:HG13	1:A:48:GLY:H	15	0.03
(1,1076)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:103:PHE:H	5	0.03
(1,1076)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:103:PHE:H	5	0.03
(1,1076)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:103:PHE:H	5	0.03
(1,1075)	1:A:46:VAL:HG11	1:A:47:SER:H	4	0.03
(1,1075)	1:A:46:VAL:HG12	1:A:47:SER:H	4	0.03
(1,1075)	1:A:46:VAL:HG13	1:A:47:SER:H	4	0.03
(1,1075)	1:A:46:VAL:HG11	1:A:47:SER:H	20	0.03
(1,1075)	1:A:46:VAL:HG12	1:A:47:SER:H	20	0.03
(1,1075)	1:A:46:VAL:HG13	1:A:47:SER:H	20	0.03
(1,1073)	1:A:79:LEU:HD21	1:A:80:ASP:H	4	0.03
(1,1073)	1:A:79:LEU:HD22	1:A:80:ASP:H	4	0.03
(1,1073)	1:A:79:LEU:HD23	1:A:80:ASP:H	4	0.03
(1,1064)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD21	14	0.03
(1,1064)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD22	14	0.03
(1,1064)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD23	14	0.03
(1,106)	1:A:105:ASP:H	1:A:113:ARG:H	12	0.03
(1,1059)	1:A:12:LEU:H	1:A:12:LEU:HD21	9	0.03
(1,1059)	1:A:12:LEU:H	1:A:12:LEU:HD22	9	0.03
(1,1059)	1:A:12:LEU:H	1:A:12:LEU:HD23	9	0.03
(1,1052)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:46:VAL:HG21	15	0.03
(1,1052)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:46:VAL:HG22	15	0.03
(=,===)			Continue	



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1052)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:46:VAL:HG23	15	0.03
(1,1052)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:46:VAL:HG21	15	0.03
(1,1052)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:46:VAL:HG22	15	0.03
(1,1052)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:46:VAL:HG23	15	0.03
(1,1052)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:46:VAL:HG21	15	0.03
(1,1052)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:46:VAL:HG22	15	0.03
(1,1052)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:46:VAL:HG23	15	0.03
(1,104)	1:A:73:GLU:H	1:A:75:VAL:H	7	0.03
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:90:VAL:HG21	3	0.03
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:90:VAL:HG22	3	0.03
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:90:VAL:HG23	3	0.03
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:90:VAL:HG21	3	0.03
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:90:VAL:HG22	3	0.03
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:90:VAL:HG23	3	0.03
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG21	3	0.03
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG22	3	0.03
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG23	3	0.03
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:90:VAL:HG21	20	0.03
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:90:VAL:HG22	20	0.03
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:90:VAL:HG23	20	0.03
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:90:VAL:HG21	20	0.03
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:90:VAL:HG22	20	0.03
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:90:VAL:HG23	20	0.03
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG21	20	0.03
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG22	20	0.03
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG23	20	0.03
(1,1029)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:99:LEU:HD21	6	0.03
(1,1029)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:99:LEU:HD22	6	0.03
(1,1029)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:99:LEU:HD23	6	0.03
(1,1029)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:99:LEU:HD21	6	0.03
(1,1029)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:99:LEU:HD22	6	0.03
(1,1029)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:99:LEU:HD23	6	0.03
(1,1029)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:99:LEU:HD21	6	0.03
(1,1029)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:99:LEU:HD22	6	0.03
(1,1029)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:99:LEU:HD23	6	0.03
(1,1029)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:99:LEU:HD21	9	0.03
(1,1029)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:99:LEU:HD22	9	0.03
(1,1029)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:99:LEU:HD23	9	0.03
(1,1029)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:99:LEU:HD21	9	0.03
(1,1029)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:99:LEU:HD22	9	0.03
(1,1029)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:99:LEU:HD23	9	0.03
(1,1029)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:99:LEU:HD21	9	0.03



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1029)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:99:LEU:HD22	9	0.03
(1,1029)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:99:LEU:HD23	9	0.03
(1,1026)	1:A:140:LEU:H	1:A:142:ASN:H	11	0.03
(1,1024)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:H	2	0.03
(1,1024)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:H	5	0.03
(1,1024)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:H	17	0.03
(1,1020)	1:A:131:GLU:H	1:A:133:GLY:H	6	0.03
(1,102)	1:A:52:PHE:H	1:A:71:ILE:H	12	0.03
(1,1015)	1:A:129:LEU:H	1:A:130:LYS:H	9	0.03
(1,1013)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:H	6	0.03
(1,1013)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:H	16	0.03
(1,1011)	1:A:41:LEU:H	1:A:126:LYS:H	8	0.03
(1,1006)	1:A:45:ILE:H	1:A:122:ARG:H	8	0.03
(1,1002)	1:A:119:ALA:H	1:A:121:LEU:H	13	0.03
(1,1002)	1:A:119:ALA:H	1:A:121:LEU:H	19	0.03
(1,997)	1:A:104:ASN:H	1:A:113:ARG:H	7	0.02
(1,99)	1:A:20:THR:H	1:A:23:ASN:H	6	0.02
(1,99)	1:A:20:THR:H	1:A:23:ASN:H	7	0.02
(1,986)	1:A:99:LEU:H	1:A:100:GLY:H	4	0.02
(1,982)	1:A:76:GLU:H	1:A:91:ARG:H	11	0.02
(1,979)	1:A:89:GLU:H	1:A:90:VAL:H	2	0.02
(1,979)	1:A:89:GLU:H	1:A:90:VAL:H	20	0.02
(1,977)	1:A:85:MET:H	1:A:86:ILE:H	15	0.02
(1,973)	1:A:78:LYS:H	1:A:79:LEU:H	10	0.02
(1,964)	1:A:45:ILE:H	1:A:48:GLY:H	5	0.02
(1,953)	1:A:30:GLN:H	1:A:34:TRP:HE1	9	0.02
(1,950)	1:A:25:THR:H	1:A:26:GLU:H	8	0.02
(1,948)	1:A:18:GLU:H	1:A:20:THR:H	8	0.02
(1,948)	1:A:18:GLU:H	1:A:20:THR:H	11	0.02
(1,947)	1:A:17:TYR:H	1:A:20:THR:H	18	0.02
(1,944)	1:A:15:MET:H	1:A:18:GLU:H	7	0.02
(1,930)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:H	12	0.02
(1,929)	1:A:6:GLU:H	1:A:8:LYS:H	2	0.02
(1,924)	1:A:26:GLU:H	1:A:64:TRP:HE1	11	0.02
(1,918)	1:A:78:LYS:H	1:A:91:ARG:H	17	0.02
(1,904)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD11	17	0.02
(1,904)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD12	17	0.02
(1,904)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:71:ILE:HD13	17	0.02
(1,904)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD11	17	0.02
(1,904)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD12	17	0.02
(1,904)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:71:ILE:HD13	17	0.02
(1,904)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD11	17	0.02



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,904)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD12	17	0.02
(1,904)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:71:ILE:HD13	17	0.02
(1,903)	1:A:51:LEU:HD11	1:A:116:ILE:HD11	7	0.02
(1,903)	1:A:51:LEU:HD11	1:A:116:ILE:HD12	7	0.02
(1,903)	1:A:51:LEU:HD11	1:A:116:ILE:HD13	7	0.02
(1,903)	1:A:51:LEU:HD12	1:A:116:ILE:HD11	7	0.02
(1,903)	1:A:51:LEU:HD12	1:A:116:ILE:HD12	7	0.02
(1,903)	1:A:51:LEU:HD12	1:A:116:ILE:HD13	7	0.02
(1,903)	1:A:51:LEU:HD13	1:A:116:ILE:HD11	7	0.02
(1,903)	1:A:51:LEU:HD13	1:A:116:ILE:HD12	7	0.02
(1,903)	1:A:51:LEU:HD13	1:A:116:ILE:HD13	7	0.02
(1,892)	1:A:121:LEU:HD11	1:A:122:ARG:H	2	0.02
(1,892)	1:A:121:LEU:HD12	1:A:122:ARG:H	2	0.02
(1,892)	1:A:121:LEU:HD13	1:A:122:ARG:H	2	0.02
(1,892)	1:A:121:LEU:HD11	1:A:122:ARG:H	14	0.02
(1,892)	1:A:121:LEU:HD12	1:A:122:ARG:H	14	0.02
(1,892)	1:A:121:LEU:HD13	1:A:122:ARG:H	14	0.02
(1,890)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:129:LEU:HD11	6	0.02
(1,890)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:129:LEU:HD12	6	0.02
(1,890)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:129:LEU:HD13	6	0.02
(1,890)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:129:LEU:HD11	6	0.02
(1,890)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:129:LEU:HD12	6	0.02
(1,890)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:129:LEU:HD13	6	0.02
(1,890)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:129:LEU:HD11	6	0.02
(1,890)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:129:LEU:HD12	6	0.02
(1,890)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:129:LEU:HD13	6	0.02
(1,889)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:130:LYS:H	15	0.02
(1,889)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:130:LYS:H	15	0.02
(1,889)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:130:LYS:H	15	0.02
(1,889)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:130:LYS:H	18	0.02
(1,889)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:130:LYS:H	18	0.02
(1,889)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:130:LYS:H	18	0.02
(1,875)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:129:LEU:HD21	9	0.02
(1,875)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:129:LEU:HD22	9	0.02
(1,875)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:129:LEU:HD23	9	0.02
(1,875)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:129:LEU:HD21	9	0.02
(1,875)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:129:LEU:HD22	9	0.02
(1,875)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:129:LEU:HD23	9	0.02
(1,875)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:129:LEU:HD21	9	0.02
(1,875)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:129:LEU:HD22	9	0.02
(1,875)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:129:LEU:HD23	9	0.02
(1,870)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:71:ILE:HD11	11	0.02



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,870)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:71:ILE:HD12	11	0.02
(1,870)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:71:ILE:HD13	11	0.02
(1,870)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:71:ILE:HD11	11	0.02
(1,870)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:71:ILE:HD12	11	0.02
(1,870)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:71:ILE:HD13	11	0.02
(1,870)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:71:ILE:HD11	11	0.02
(1,870)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:71:ILE:HD12	11	0.02
(1,870)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:71:ILE:HD13	11	0.02
(1,87)	1:A:31:ASN:H	1:A:34:TRP:HE1	4	0.02
(1,865)	1:A:42:TYR:H	1:A:71:ILE:HD11	13	0.02
(1,865)	1:A:42:TYR:H	1:A:71:ILE:HD12	13	0.02
(1,865)	1:A:42:TYR:H	1:A:71:ILE:HD13	13	0.02
(1,864)	1:A:51:LEU:HD21	1:A:74:GLU:H	9	0.02
(1,864)	1:A:51:LEU:HD22	1:A:74:GLU:H	9	0.02
(1,864)	1:A:51:LEU:HD23	1:A:74:GLU:H	9	0.02
(1,851)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:124:VAL:HG11	2	0.02
(1,851)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:124:VAL:HG12	2	0.02
(1,851)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:124:VAL:HG13	2	0.02
(1,851)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:HG11	2	0.02
(1,851)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:HG12	2	0.02
(1,851)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:HG13	2	0.02
(1,851)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:HG11	2	0.02
(1,851)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:HG12	2	0.02
(1,851)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:HG13	2	0.02
(1,839)	1:A:42:TYR:H	1:A:43:VAL:HG11	5	0.02
(1,839)	1:A:42:TYR:H	1:A:43:VAL:HG12	5	0.02
(1,839)	1:A:42:TYR:H	1:A:43:VAL:HG13	5	0.02
(1,829)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:112:LEU:HD11	19	0.02
(1,829)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:112:LEU:HD12	19	0.02
(1,829)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:112:LEU:HD13	19	0.02
(1,829)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:112:LEU:HD11	19	0.02
(1,829)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:112:LEU:HD12	19	0.02
(1,829)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:112:LEU:HD13	19	0.02
(1,829)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:112:LEU:HD11	19	0.02
(1,829)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:112:LEU:HD12	19	0.02
(1,829)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:112:LEU:HD13	19	0.02
(1,817)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:20:THR:H	7	0.02
(1,817)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:20:THR:H	7	0.02
(1,817)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:20:THR:H	7	0.02
(1,817)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:20:THR:H	15	0.02
(1,817)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:20:THR:H	15	0.02
(1,817)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:20:THR:H	15	0.02



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

(1,817) (1,817) (1,817)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:20:THR:H	10	
\ /	4 A 40 TTAT TICOO	1.71.20.11110.11	18	0.02
(1,817)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:20:THR:H	18	0.02
	1:A:19:VAL:HG23	1:A:20:THR:H	18	0.02
(1,817)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:20:THR:H	20	0.02
(1,817)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:20:THR:H	20	0.02
(1,817)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:20:THR:H	20	0.02
(1,816)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG11	9	0.02
(1,816)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG12	9	0.02
(1,816)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG13	9	0.02
(1,812)	1:A:101:HIS:H	1:A:115:CYS:H	20	0.02
(1,811)	1:A:40:GLY:H	1:A:54:SER:H	3	0.02
(1,81)	1:A:47:SER:H	1:A:48:GLY:H	2	0.02
(1,81)	1:A:47:SER:H	1:A:48:GLY:H	3	0.02
(1,81)	1:A:47:SER:H	1:A:48:GLY:H	11	0.02
(1,809)	1:A:76:GLU:H	1:A:77:GLU:H	8	0.02
(1,808)	1:A:15:MET:H	1:A:17:TYR:H	12	0.02
(1,805)	1:A:54:SER:H	1:A:56:ASP:H	8	0.02
(1,8)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:42:TYR:H	1	0.02
(1,8)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:42:TYR:H	1	0.02
(1,8)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:42:TYR:H	1	0.02
(1,8)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:42:TYR:H	10	0.02
(1,8)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:42:TYR:H	10	0.02
(1,8)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:42:TYR:H	10	0.02
(1,8)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:42:TYR:H	12	0.02
(1,8)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:42:TYR:H	12	0.02
(1,8)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:42:TYR:H	12	0.02
(1,795)	1:A:81:THR:H	1:A:82:SER:H	16	0.02
(1,793)	1:A:44:ASP:H	1:A:122:ARG:H	9	0.02
(1,790)	1:A:128:LYS:H	1:A:130:LYS:H	9	0.02
(1,790)	1:A:128:LYS:H	1:A:130:LYS:H	17	0.02
(1,79)	1:A:45:ILE:H	1:A:47:SER:H	13	0.02
(1,784)	1:A:46:VAL:H	1:A:48:GLY:H	4	0.02
(1,784)	1:A:46:VAL:H	1:A:48:GLY:H	19	0.02
(1,78)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:H	5	0.02
(1,777)	1:A:16:GLN:H	1:A:19:VAL:H	6	0.02
(1,772)	1:A:21:GLN:H	1:A:23:ASN:H	1	0.02
(1,772)	1:A:21:GLN:H	1:A:23:ASN:H	14	0.02
(1,764)	1:A:88:THR:H	1:A:102:VAL:H	5	0.02
(1,749)	1:A:73:GLU:H	1:A:75:VAL:H	19	0.02
(1,744)	1:A:20:THR:H	1:A:23:ASN:H	6	0.02
(1,744)	1:A:20:THR:H	1:A:23:ASN:H	7	0.02
(1,732)	1:A:31:ASN:H	1:A:34:TRP:HE1	4	0.02



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,726)	1:A:47:SER:H	1:A:48:GLY:H	2	0.02
(1,726)	1:A:47:SER:H	1:A:48:GLY:H	3	0.02
(1,726)	1:A:47:SER:H	1:A:48:GLY:H	11	0.02
(1,724)	1:A:45:ILE:H	1:A:47:SER:H	13	0.02
(1,723)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:H	5	0.02
(1,715)	1:A:16:GLN:HE21	1:A:46:VAL:H	4	0.02
(1,710)	1:A:118:SER:HG	1:A:119:ALA:H	20	0.02
(1,709)	1:A:47:SER:HG	1:A:49:LYS:H	10	0.02
(1,709)	1:A:47:SER:HG	1:A:49:LYS:H	19	0.02
(1,708)	1:A:54:SER:HG	1:A:57:LYS:H	8	0.02
(1,707)	1:A:54:SER:HG	1:A:56:ASP:H	13	0.02
(1,700)	1:A:110:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD11	4	0.02
(1,700)	1:A:110:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD12	4	0.02
(1,700)	1:A:110:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD13	4	0.02
(1,70)	1:A:16:GLN:HE21	1:A:46:VAL:H	4	0.02
(1,7)	1:A:41:LEU:H	1:A:41:LEU:HD11	6	0.02
(1,7)	1:A:41:LEU:H	1:A:41:LEU:HD12	6	0.02
(1,7)	1:A:41:LEU:H	1:A:41:LEU:HD13	6	0.02
(1,698)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD21	12	0.02
(1,698)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD22	12	0.02
(1,698)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD23	12	0.02
(1,697)	1:A:16:GLN:HE21	1:A:46:VAL:HG11	15	0.02
(1,697)	1:A:16:GLN:HE21	1:A:46:VAL:HG12	15	0.02
(1,697)	1:A:16:GLN:HE21	1:A:46:VAL:HG13	15	0.02
(1,695)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:64:TRP:HE1	10	0.02
(1,695)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:64:TRP:HE1	10	0.02
(1,695)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:64:TRP:HE1	10	0.02
(1,695)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:64:TRP:HE1	13	0.02
(1,695)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:64:TRP:HE1	13	0.02
(1,695)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:64:TRP:HE1	13	0.02
(1,690)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD11	19	0.02
(1,690)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD12	19	0.02
(1,690)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD13	19	0.02
(1,686)	1:A:45:ILE:H	1:A:46:VAL:HG21	4	0.02
(1,686)	1:A:45:ILE:H	1:A:46:VAL:HG22	4	0.02
(1,686)	1:A:45:ILE:H	1:A:46:VAL:HG23	4	0.02
(1,686)	1:A:45:ILE:H	1:A:46:VAL:HG21	13	0.02
(1,686)	1:A:45:ILE:H	1:A:46:VAL:HG22	13	0.02
(1,686)	1:A:45:ILE:H	1:A:46:VAL:HG23	13	0.02
(1,684)	1:A:140:LEU:H	1:A:140:LEU:HD11	4	0.02
(1,684)	1:A:140:LEU:H	1:A:140:LEU:HD12	4	0.02
1 1				



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,677)	1:A:103:PHE:H	1:A:112:LEU:HD21	2	0.02
(1,677)	1:A:103:PHE:H	1:A:112:LEU:HD22	2	0.02
(1,677)	1:A:103:PHE:H	1:A:112:LEU:HD23	2	0.02
(1,677)	1:A:103:PHE:H	1:A:112:LEU:HD21	3	0.02
(1,677)	1:A:103:PHE:H	1:A:112:LEU:HD22	3	0.02
(1,677)	1:A:103:PHE:H	1:A:112:LEU:HD23	3	0.02
(1,677)	1:A:103:PHE:H	1:A:112:LEU:HD21	16	0.02
(1,677)	1:A:103:PHE:H	1:A:112:LEU:HD22	16	0.02
(1,677)	1:A:103:PHE:H	1:A:112:LEU:HD23	16	0.02
(1,676)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:49:LYS:H	9	0.02
(1,676)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:49:LYS:H	9	0.02
(1,676)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:49:LYS:H	9	0.02
(1,670)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:123:PHE:H	11	0.02
(1,670)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:123:PHE:H	11	0.02
(1,670)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:123:PHE:H	11	0.02
(1,667)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:137:TYR:H	6	0.02
(1,667)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:137:TYR:H	6	0.02
(1,667)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:137:TYR:H	6	0.02
(1,667)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:137:TYR:H	20	0.02
(1,667)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:137:TYR:H	20	0.02
(1,667)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:137:TYR:H	20	0.02
(1,666)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD11	16	0.02
(1,666)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD12	16	0.02
(1,666)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD13	16	0.02
(1,666)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD11	19	0.02
(1,666)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD12	19	0.02
(1,666)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD13	19	0.02
(1,664)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:127:HIS:H	13	0.02
(1,664)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:127:HIS:H	13	0.02
(1,664)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:127:HIS:H	13	0.02
(1,664)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:127:HIS:H	15	0.02
(1,664)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:127:HIS:H	15	0.02
(1,664)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:127:HIS:H	15	0.02
(1,664)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:127:HIS:H	18	0.02
(1,664)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:127:HIS:H	18	0.02
(1,664)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:127:HIS:H	18	0.02
(1,663)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:128:LYS:H	11	0.02
(1,663)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:128:LYS:H	11	0.02
(1,663)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:128:LYS:H	11	0.02
(1,663)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:128:LYS:H	15	0.02
(1,663)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:128:LYS:H	15	0.02
(1,663)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:128:LYS:H	15	0.02



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,662)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD21	5	0.02
(1,662)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD22	5	0.02
(1,662)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD23	5	0.02
(1,662)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD21	12	0.02
(1,662)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD22	12	0.02
(1,662)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD23	12	0.02
(1,662)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD21	18	0.02
(1,662)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD22	18	0.02
(1,662)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD23	18	0.02
(1,661)	1:A:102:VAL:H	1:A:102:VAL:HG11	16	0.02
(1,661)	1:A:102:VAL:H	1:A:102:VAL:HG12	16	0.02
(1,661)	1:A:102:VAL:H	1:A:102:VAL:HG13	16	0.02
(1,661)	1:A:102:VAL:H	1:A:102:VAL:HG11	18	0.02
(1,661)	1:A:102:VAL:H	1:A:102:VAL:HG12	18	0.02
(1,661)	1:A:102:VAL:H	1:A:102:VAL:HG13	18	0.02
(1,660)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG11	15	0.02
(1,660)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG12	15	0.02
(1,660)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG13	15	0.02
(1,659)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD21	15	0.02
(1,659)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD22	15	0.02
(1,659)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD23	15	0.02
(1,653)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:42:TYR:H	1	0.02
(1,653)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:42:TYR:H	1	0.02
(1,653)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:42:TYR:H	1	0.02
(1,653)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:42:TYR:H	10	0.02
(1,653)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:42:TYR:H	10	0.02
(1,653)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:42:TYR:H	10	0.02
(1,653)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:42:TYR:H	12	0.02
(1,653)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:42:TYR:H	12	0.02
(1,653)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:42:TYR:H	12	0.02
(1,652)	1:A:41:LEU:H	1:A:41:LEU:HD11	6	0.02
(1,652)	1:A:41:LEU:H	1:A:41:LEU:HD12	6	0.02
(1,652)	1:A:41:LEU:H	1:A:41:LEU:HD13	6	0.02
(1,65)	1:A:118:SER:HG	1:A:119:ALA:H	20	0.02
(1,649)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:124:VAL:H	12	0.02
(1,649)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:H	12	0.02
(1,649)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:H	12	0.02
(1,64)	1:A:47:SER:HG	1:A:49:LYS:H	10	0.02
(1,64)	1:A:47:SER:HG	1:A:49:LYS:H	19	0.02
(1,63)	1:A:54:SER:HG	1:A:57:LYS:H	8	0.02
(1,626)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:140:LEU:HD11	20	0.02
(1,626)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:140:LEU:HD12	20	0.02



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,626)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:140:LEU:HD13	20	0.02
(1,626)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:140:LEU:HD11	20	0.02
(1,626)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:140:LEU:HD12	20	0.02
(1,626)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:140:LEU:HD13	20	0.02
(1,626)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:140:LEU:HD11	20	0.02
(1,626)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:140:LEU:HD12	20	0.02
(1,626)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:140:LEU:HD13	20	0.02
(1,623)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:71:ILE:HD11	4	0.02
(1,623)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:71:ILE:HD12	4	0.02
(1,623)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:71:ILE:HD13	4	0.02
(1,623)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:71:ILE:HD11	4	0.02
(1,623)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:71:ILE:HD12	4	0.02
(1,623)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:71:ILE:HD13	4	0.02
(1,623)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:71:ILE:HD11	4	0.02
(1,623)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:71:ILE:HD12	4	0.02
(1,623)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:71:ILE:HD13	4	0.02
(1,622)	1:A:86:ILE:HD11	1:A:80:ASP:H	12	0.02
(1,622)	1:A:86:ILE:HD12	1:A:80:ASP:H	12	0.02
(1,622)	1:A:86:ILE:HD13	1:A:80:ASP:H	12	0.02
(1,62)	1:A:54:SER:HG	1:A:56:ASP:H	13	0.02
(1,613)	1:A:115:CYS:H	1:A:101:HIS:H	12	0.02
(1,611)	1:A:100:GLY:H	1:A:90:VAL:H	12	0.02
(1,598)	1:A:110:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD11	4	0.02
(1,598)	1:A:110:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD12	4	0.02
(1,598)	1:A:110:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD13	4	0.02
(1,581)	1:A:102:VAL:HG11	1:A:113:ARG:H	15	0.02
(1,581)	1:A:102:VAL:HG12	1:A:113:ARG:H	15	0.02
(1,581)	1:A:102:VAL:HG13	1:A:113:ARG:H	15	0.02
(1,577)	1:A:111:GLY:H	1:A:112:LEU:HD21	19	0.02
(1,577)	1:A:111:GLY:H	1:A:112:LEU:HD22	19	0.02
(1,577)	1:A:111:GLY:H	1:A:112:LEU:HD23	19	0.02
(1,571)	1:A:140:LEU:HD11	1:A:141:PHE:H	5	0.02
(1,571)	1:A:140:LEU:HD12	1:A:141:PHE:H	5	0.02
(1,571)	1:A:140:LEU:HD13	1:A:141:PHE:H	5	0.02
(1,571)	1:A:140:LEU:HD11	1:A:141:PHE:H	8	0.02
(1,571)	1:A:140:LEU:HD12	1:A:141:PHE:H	8	0.02
(1,571)	1:A:140:LEU:HD13	1:A:141:PHE:H	8	0.02
(1,571)	1:A:140:LEU:HD11	1:A:141:PHE:H	19	0.02
(1,571)	1:A:140:LEU:HD12	1:A:141:PHE:H	19	0.02
(1,571)	1:A:140:LEU:HD13	1:A:141:PHE:H	19	0.02
(1,570)	1:A:140:LEU:H	1:A:140:LEU:HD21	19	0.02
(1,570)	1:A:140:LEU:H	1:A:140:LEU:HD22	19	0.02



Continued from previous page...

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



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

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



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,505)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:76:GLU:H	16	0.02
(1,503)	1:A:76:GLU:H	1:A:99:LEU:HD21	2	0.02
(1,503)	1:A:76:GLU:H	1:A:99:LEU:HD22	2	0.02
(1,503)	1:A:76:GLU:H	1:A:99:LEU:HD23	2	0.02
(1,503)	1:A:76:GLU:H	1:A:99:LEU:HD21	17	0.02
(1,503)	1:A:76:GLU:H	1:A:99:LEU:HD22	17	0.02
(1,503)	1:A:76:GLU:H	1:A:99:LEU:HD23	17	0.02
(1,501)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG21	8	0.02
(1,501)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG22	8	0.02
(1,501)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG23	8	0.02
(1,500)	1:A:73:GLU:H	1:A:75:VAL:HG21	4	0.02
(1,500)	1:A:73:GLU:H	1:A:75:VAL:HG22	4	0.02
(1,500)	1:A:73:GLU:H	1:A:75:VAL:HG23	4	0.02
(1,500)	1:A:73:GLU:H	1:A:75:VAL:HG21	6	0.02
(1,500)	1:A:73:GLU:H	1:A:75:VAL:HG22	6	0.02
(1,500)	1:A:73:GLU:H	1:A:75:VAL:HG23	6	0.02
(1,50)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:64:TRP:HE1	10	0.02
(1,50)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:64:TRP:HE1	10	0.02
(1,50)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:64:TRP:HE1	10	0.02
(1,50)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:64:TRP:HE1	13	0.02
(1,50)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:64:TRP:HE1	13	0.02
(1,50)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:64:TRP:HE1	13	0.02
(1,499)	1:A:71:ILE:H	1:A:71:ILE:HD11	18	0.02
(1,499)	1:A:71:ILE:H	1:A:71:ILE:HD12	18	0.02
(1,499)	1:A:71:ILE:H	1:A:71:ILE:HD13	18	0.02
(1,498)	1:A:71:ILE:H	1:A:75:VAL:HG21	11	0.02
(1,498)	1:A:71:ILE:H	1:A:75:VAL:HG22	11	0.02
(1,498)	1:A:71:ILE:H	1:A:75:VAL:HG23	11	0.02
(1,494)	1:A:52:PHE:H	1:A:71:ILE:HD11	13	0.02
(1,494)	1:A:52:PHE:H	1:A:71:ILE:HD12	13	0.02
(1,494)	1:A:52:PHE:H	1:A:71:ILE:HD13	13	0.02
(1,491)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:52:PHE:H	20	0.02
(1,491)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:52:PHE:H	20	0.02
(1,491)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:52:PHE:H	20	0.02
(1,488)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:51:LEU:H	4	0.02
(1,488)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:51:LEU:H	4	0.02
(1,488)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:51:LEU:H	4	0.02
(1,488)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:51:LEU:H	11	0.02
(1,488)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:51:LEU:H	11	0.02
(1,488)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:51:LEU:H	11	0.02
(1,483)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:49:LYS:H	17	0.02
(1,483)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:49:LYS:H	17	0.02



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

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



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

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



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

(1,414)       1:A:12:LEU:H       1:A:12:LEU:HD21       17       0         (1,414)       1:A:12:LEU:H       1:A:12:LEU:HD22       17       0         (1,414)       1:A:12:LEU:H       1:A:12:LEU:HD23       17       0         (1,414)       1:A:12:LEU:HD21       1:A:138:LEU:HD21       6       0         (1,412)       1:A:129:LEU:HD21       1:A:138:LEU:HD22       6       0         (1,412)       1:A:129:LEU:HD21       1:A:138:LEU:HD23       6       0         (1,412)       1:A:129:LEU:HD22       1:A:138:LEU:HD22       6       0         (1,412)       1:A:129:LEU:HD23       1:A:138:LEU:HD23       6       0         (1,412)       1:A:129:LEU:HD23       1:A:138:LEU:HD21       6       0         (1,412)       1:A:129:LEU:HD23       1:A:138:LEU:HD23       6       0	.02 .02 .02 .02 .02 .02 .02 .02 .02 .02
(1,414)       1:A:12:LEU:H       1:A:12:LEU:HD22       17       0         (1,414)       1:A:12:LEU:H       1:A:12:LEU:HD23       17       0         (1,412)       1:A:129:LEU:HD21       1:A:138:LEU:HD21       6       0         (1,412)       1:A:129:LEU:HD21       1:A:138:LEU:HD22       6       0         (1,412)       1:A:129:LEU:HD21       1:A:138:LEU:HD23       6       0         (1,412)       1:A:129:LEU:HD22       1:A:138:LEU:HD22       6       0         (1,412)       1:A:129:LEU:HD22       1:A:138:LEU:HD23       6       0         (1,412)       1:A:129:LEU:HD23       1:A:138:LEU:HD21       6       0         (1,412)       1:A:129:LEU:HD23       1:A:138:LEU:HD22       6       0         (1,412)       1:A:129:LEU:HD23       1:A:138:LEU:HD23       6       0	.02 .02 .02 .02 .02 .02 .02 .02 .02 .02
(1,414)       1:A:12:LEU:H       1:A:12:LEU:HD23       17       0         (1,412)       1:A:129:LEU:HD21       1:A:138:LEU:HD21       6       0         (1,412)       1:A:129:LEU:HD21       1:A:138:LEU:HD22       6       0         (1,412)       1:A:129:LEU:HD21       1:A:138:LEU:HD23       6       0         (1,412)       1:A:129:LEU:HD22       1:A:138:LEU:HD21       6       0         (1,412)       1:A:129:LEU:HD22       1:A:138:LEU:HD23       6       0         (1,412)       1:A:129:LEU:HD23       1:A:138:LEU:HD21       6       0         (1,412)       1:A:129:LEU:HD23       1:A:138:LEU:HD22       6       0         (1,412)       1:A:129:LEU:HD23       1:A:138:LEU:HD23       6       0	.02 .02 .02 .02 .02 .02 .02 .02 .02
(1,412)       1:A:129:LEU:HD21       1:A:138:LEU:HD21       6       0         (1,412)       1:A:129:LEU:HD21       1:A:138:LEU:HD22       6       0         (1,412)       1:A:129:LEU:HD21       1:A:138:LEU:HD23       6       0         (1,412)       1:A:129:LEU:HD22       1:A:138:LEU:HD21       6       0         (1,412)       1:A:129:LEU:HD22       1:A:138:LEU:HD22       6       0         (1,412)       1:A:129:LEU:HD23       1:A:138:LEU:HD23       6       0         (1,412)       1:A:129:LEU:HD23       1:A:138:LEU:HD22       6       0         (1,412)       1:A:129:LEU:HD23       1:A:138:LEU:HD23       6       0	.02 .02 .02 .02 .02 .02 .02 .02
(1,412)       1:A:129:LEU:HD21       1:A:138:LEU:HD22       6       0         (1,412)       1:A:129:LEU:HD21       1:A:138:LEU:HD23       6       0         (1,412)       1:A:129:LEU:HD22       1:A:138:LEU:HD21       6       0         (1,412)       1:A:129:LEU:HD22       1:A:138:LEU:HD22       6       0         (1,412)       1:A:129:LEU:HD23       1:A:138:LEU:HD23       6       0         (1,412)       1:A:129:LEU:HD23       1:A:138:LEU:HD21       6       0         (1,412)       1:A:129:LEU:HD23       1:A:138:LEU:HD23       6       0         (1,412)       1:A:129:LEU:HD23       1:A:138:LEU:HD23       6       0         (1,412)       1:A:129:LEU:HD23       1:A:138:LEU:HD23       6       0         (1,412)       1:A:129:LEU:HD21       1:A:138:LEU:HD21       20       0	.02 .02 .02 .02 .02 .02 .02 .02
(1,412)       1:A:129:LEU:HD21       1:A:138:LEU:HD23       6       0         (1,412)       1:A:129:LEU:HD22       1:A:138:LEU:HD21       6       0         (1,412)       1:A:129:LEU:HD22       1:A:138:LEU:HD22       6       0         (1,412)       1:A:129:LEU:HD22       1:A:138:LEU:HD23       6       0         (1,412)       1:A:129:LEU:HD23       1:A:138:LEU:HD21       6       0         (1,412)       1:A:129:LEU:HD23       1:A:138:LEU:HD22       6       0         (1,412)       1:A:129:LEU:HD23       1:A:138:LEU:HD23       6       0         (1,412)       1:A:129:LEU:HD23       1:A:138:LEU:HD23       6       0         (1,412)       1:A:129:LEU:HD21       1:A:138:LEU:HD21       20       0	.02 .02 .02 .02 .02 .02 .02
(1,412)       1:A:129:LEU:HD22       1:A:138:LEU:HD21       6       0         (1,412)       1:A:129:LEU:HD22       1:A:138:LEU:HD22       6       0         (1,412)       1:A:129:LEU:HD22       1:A:138:LEU:HD23       6       0         (1,412)       1:A:129:LEU:HD23       1:A:138:LEU:HD21       6       0         (1,412)       1:A:129:LEU:HD23       1:A:138:LEU:HD22       6       0         (1,412)       1:A:129:LEU:HD23       1:A:138:LEU:HD23       6       0         (1,412)       1:A:129:LEU:HD21       1:A:138:LEU:HD21       20       0	.02 .02 .02 .02 .02 .02
(1,412)       1:A:129:LEU:HD22       1:A:138:LEU:HD22       6       0         (1,412)       1:A:129:LEU:HD22       1:A:138:LEU:HD23       6       0         (1,412)       1:A:129:LEU:HD23       1:A:138:LEU:HD21       6       0         (1,412)       1:A:129:LEU:HD23       1:A:138:LEU:HD22       6       0         (1,412)       1:A:129:LEU:HD23       1:A:138:LEU:HD23       6       0         (1,412)       1:A:129:LEU:HD21       1:A:138:LEU:HD21       20       0	.02 .02 .02 .02
(1,412)       1:A:129:LEU:HD22       1:A:138:LEU:HD23       6       0         (1,412)       1:A:129:LEU:HD23       1:A:138:LEU:HD21       6       0         (1,412)       1:A:129:LEU:HD23       1:A:138:LEU:HD22       6       0         (1,412)       1:A:129:LEU:HD23       1:A:138:LEU:HD23       6       0         (1,412)       1:A:129:LEU:HD21       1:A:138:LEU:HD21       20       0	.02 .02 .02 .02
(1,412)       1:A:129:LEU:HD23       1:A:138:LEU:HD21       6       0         (1,412)       1:A:129:LEU:HD23       1:A:138:LEU:HD22       6       0         (1,412)       1:A:129:LEU:HD23       1:A:138:LEU:HD23       6       0         (1,412)       1:A:129:LEU:HD21       1:A:138:LEU:HD21       20       0	.02 .02 .02
(1,412)       1:A:129:LEU:HD23       1:A:138:LEU:HD22       6       0         (1,412)       1:A:129:LEU:HD23       1:A:138:LEU:HD23       6       0         (1,412)       1:A:129:LEU:HD21       1:A:138:LEU:HD21       20       0	.02
(1,412)       1:A:129:LEU:HD23       1:A:138:LEU:HD23       6       0         (1,412)       1:A:129:LEU:HD21       1:A:138:LEU:HD21       20       0	.02
(1,412) 1:A:129:LEU:HD21 1:A:138:LEU:HD21 20 0	
	.02
	.02
	.02
(1,412) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD21 20 0	.02
(1,412) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD22 20 0	.02
(1,412) 1:A:129:LEU:HD22 1:A:138:LEU:HD23 20 0	.02
(1,412) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD21 20 0	.02
(1,412) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD22 20 0	.02
(1,412) 1:A:129:LEU:HD23 1:A:138:LEU:HD23 20 0	.02
(1,41) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG21 4 0	.02
(1,41) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG22 4 0	.02
(1,41) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG23 4 0	.02
(1,41) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG21 13 0	.02
(1,41) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG22 13 0	.02
(1,41) 1:A:45:ILE:H 1:A:46:VAL:HG23 13 0	.02
(1,4) 1:A:41:LEU:HD11 1:A:124:VAL:H 12 0	.02
(1,4) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:124:VAL:H 12 0	.02
(1,4) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:H 12 0	.02
(1,39) 1:A:140:LEU:H 1:A:140:LEU:HD11 4 0	.02
(1,39) 1:A:140:LEU:H 1:A:140:LEU:HD12 4 0	.02
(1,39) 1:A:140:LEU:H 1:A:140:LEU:HD13 4 0	.02
(1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG21 1 0	.02
	.02
(1,387) 1:A:75:VAL:HG21 1:A:90:VAL:HG23 1 0	.02
	.02
(1,387) 1:A:75:VAL:HG22 1:A:90:VAL:HG22 1 0	.02
	.02
(1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG21 1 0	.02
(1,387) 1:A:75:VAL:HG23 1:A:90:VAL:HG22 1 0	.02



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

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



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

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



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

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



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

(1,206) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:124:VAL:HG13 2 0.02 (1,206) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:HG13 2 0.02 (1,206) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:HG11 2 0.02 (1,206) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:HG12 2 0.02 (1,206) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:HG13 2 0.02 (1,106) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:HG13 2 0.02 (1,194) 1:A:42:TYR:H 1:A:43:VAL:HG11 5 0.02 (1,194) 1:A:42:TYR:H 1:A:43:VAL:HG11 5 0.02 (1,194) 1:A:42:TYR:H 1:A:43:VAL:HG12 5 0.02 (1,194) 1:A:42:TYR:H 1:A:43:VAL:HG13 5 0.02 (1,194) 1:A:42:TYR:H 1:A:43:VAL:HG13 5 0.02 (1,194) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:127:HIS:H 13 0.02 (1,199) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:127:HIS:H 13 0.02 (1,19) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:127:HIS:H 13 0.02 (1,19) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:127:HIS:H 15 0.02 (1,19) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:127:HIS:H 18 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD11 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD11 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD11 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD11 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD11 19 0.02 (1,184) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LYS:H 11 0.02 (1,172) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:102:THR:H	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,206) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:HG11 2 0.02 (1,206) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:HG12 2 0.02 (1,206) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:HG13 2 0.02 (1,194) 1:A:42:TYR:H 1:A:43:VAL:HG11 5 0.02 (1,194) 1:A:42:TYR:H 1:A:43:VAL:HG12 5 0.02 (1,194) 1:A:42:TYR:H 1:A:43:VAL:HG13 5 0.02 (1,194) 1:A:42:TYR:H 1:A:43:VAL:HG13 5 0.02 (1,194) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:127:HIS:H 13 0.02 (1,19) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:127:HIS:H 13 0.02 (1,19) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:127:HIS:H 13 0.02 (1,19) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:127:HIS:H 15 0.02 (1,19) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:127:HIS:H 15 0.02 (1,19) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:127:HIS:H 15 0.02 (1,19) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:127:HIS:H 15 0.02 (1,19) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:127:HIS:H 15 0.02 (1,19) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:127:HIS:H 18 0.02 (1,19) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:127:HIS:H 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD11 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD11 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD11 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD11 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD13 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD11 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:10	(1,206)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:HG12	2	0.02
(1,206) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:HG12 2 0.02 (1,206) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:HG13 2 0.02 (1,194) 1:A:42:TYR:H 1:A:43:VAL:HG11 5 0.02 (1,194) 1:A:42:TYR:H 1:A:43:VAL:HG11 5 0.02 (1,194) 1:A:42:TYR:H 1:A:43:VAL:HG12 5 0.02 (1,194) 1:A:42:TYR:H 1:A:43:VAL:HG13 5 0.02 (1,194) 1:A:42:TYR:H 1:A:43:VAL:HG13 5 0.02 (1,195) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:127:HIS:H 13 0.02 (1,196) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:127:HIS:H 13 0.02 (1,197) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:127:HIS:H 13 0.02 (1,198) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:127:HIS:H 13 0.02 (1,199) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:127:HIS:H 15 0.02 (1,199) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:127:HIS:H 15 0.02 (1,199) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:127:HIS:H 15 0.02 (1,199) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:127:HIS:H 15 0.02 (1,199) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:127:HIS:H 18 0.02 (1,199) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:127:HIS:H 18 0.02 (1,199) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:127:HIS:H 18 0.02 (1,199) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:127:HIS:H 18 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD11 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD11 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD11 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD13 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD13 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD13 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:102:VAL:HG31 1:A:102:VAL:HG31 1:A:102:VAL:HG31 1:A:102:VAL:HG31 1:A:102:VAL:HG31 1:A:10	(1,206)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:124:VAL:HG13	2	0.02
(1,206) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:124:VAL:HG13 2 0.02 (1,194) 1:A:42:TYR:H 1:A:43:VAL:HG11 5 0.02 (1,194) 1:A:42:TYR:H 1:A:43:VAL:HG12 5 0.02 (1,194) 1:A:42:TYR:H 1:A:43:VAL:HG13 5 0.02 (1,194) 1:A:42:TYR:H 1:A:43:VAL:HG13 5 0.02 (1,194) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:127:HIS:H 13 0.02 (1,19) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:127:HIS:H 13 0.02 (1,19) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:127:HIS:H 13 0.02 (1,19) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:127:HIS:H 15 0.02 (1,19) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:127:HIS:H 15 0.02 (1,19) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:127:HIS:H 15 0.02 (1,19) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:127:HIS:H 15 0.02 (1,19) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:127:HIS:H 15 0.02 (1,19) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:127:HIS:H 18 0.02 (1,19) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:127:HIS:H 18 0.02 (1,19) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:127:HIS:H 18 0.02 (1,19) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:127:HIS:H 18 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG12 1:A:112:LEU:HD11 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD11 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD11 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD11 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD11 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD11 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD11 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD13 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:10A:MA:MA:MA:MA:MA:MA:MA:MA:MA:MA:MA:MA:MA	(1,206)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:HG11	2	0.02
(1,194) 1:A:42:TYR:H 1:A:43:VAL:HG11 5 0.02 (1,194) 1:A:42:TYR:H 1:A:43:VAL:HG12 5 0.02 (1,194) 1:A:42:TYR:H 1:A:43:VAL:HG13 5 0.02 (1,19) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:127:HIS:H 13 0.02 (1,19) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:127:HIS:H 13 0.02 (1,19) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:127:HIS:H 13 0.02 (1,19) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:127:HIS:H 13 0.02 (1,19) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:127:HIS:H 15 0.02 (1,19) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:127:HIS:H 15 0.02 (1,19) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:127:HIS:H 15 0.02 (1,19) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:127:HIS:H 15 0.02 (1,19) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:127:HIS:H 15 0.02 (1,19) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:127:HIS:H 18 0.02 (1,19) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:127:HIS:H 18 0.02 (1,19) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:127:HIS:H 18 0.02 (1,19) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:127:HIS:H 18 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD11 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD11 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD12 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD11 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD11 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD11 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD11 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD11 19 0.02 (1,172) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:128:LYS:H 11 0.02 (1,172) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:128:LYS:H 15 0.02 (1,172) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:20:THR:H 15 0.02 (1,172) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:2	(1,206)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:HG12	2	0.02
(1,194) 1:A:42:TYR:H 1:A:43:VAL:HG12 5 0.02 (1,194) 1:A:42:TYR:H 1:A:43:VAL:HG13 5 0.02 (1,19) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:127:HIS:H 13 0.02 (1,19) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:127:HIS:H 13 0.02 (1,19) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:127:HIS:H 13 0.02 (1,19) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:127:HIS:H 13 0.02 (1,19) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:127:HIS:H 15 0.02 (1,19) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:127:HIS:H 15 0.02 (1,19) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:127:HIS:H 15 0.02 (1,19) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:127:HIS:H 15 0.02 (1,19) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:127:HIS:H 15 0.02 (1,19) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:127:HIS:H 15 0.02 (1,19) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:127:HIS:H 18 0.02 (1,19) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:127:HIS:H 18 0.02 (1,19) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:127:HIS:H 18 0.02 (1,19) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:127:HIS:H 18 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD11 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD11 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD12 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD13 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD13 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD11 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD11 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD11 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD13 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD14 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG14 1:A:102:VAL:HG161 1:A:128:LYS:H 11 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG14 1:A:102:VAL:HG17 1:A:128:LYS:H 11 0.02 (1,184) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LYS:H 11 0.02 (1,184) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LYS:H 11 0.02 (1,185) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LYS:H 11 0.02 (1,172) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:102:CTHR:H 7 0.02 (1,172) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:102:CTHR:H 15 0.02 (1,172) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:20:THR:H 15 0.02 (1,172) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:20:THR:H 15 0.02 (1,172) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:20:THR:H 18 0.02 (1,172) 1:A:19:V	(1,206)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:124:VAL:HG13	2	0.02
(1,194) 1:A:42:TYR:H 1:A:43:VAL:HG13 5 0.02 (1,19) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:127:HIS:H 13 0.02 (1,19) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:127:HIS:H 13 0.02 (1,19) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:127:HIS:H 13 0.02 (1,19) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:127:HIS:H 15 0.02 (1,19) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:127:HIS:H 18 0.02 (1,19) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:127:HIS:H 18 0.02 (1,19) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:127:HIS:H 18 0.02 (1,19) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:127:HIS:H 18 0.02 (1,19) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:127:HIS:H 18 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD11 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD11 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD12 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD13 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD13 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD11 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD11 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD11 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD13 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD13 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD13 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD11 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD11 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD11 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG33 1:A:112:LEU:HD13 19 0.02 (1,184) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LYS:H 11 0.02 (1,184) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LYS:H 11 0.02 (1,185) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LYS:H 11 0.02 (1,186) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LYS:H 11 0.02 (1,187) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LYS:H 11 0.02 (1,188) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LYS:H 15 0.02 (1,172) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:102:VTHR:H 7 0.02 (1,172) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:128:LYS:H 15 0.02 (1,172) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:0:THR:H 7 0.02 (1,172) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:0:THR:H 15 0.02 (1,172) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:0:THR:H 18 0.02 (1,172) 1:A:19:VA	(1,194)	1:A:42:TYR:H	1:A:43:VAL:HG11	5	0.02
(1,19) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:127:HIS:H 13 0.02 (1,19) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:127:HIS:H 13 0.02 (1,19) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:127:HIS:H 13 0.02 (1,19) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:127:HIS:H 15 0.02 (1,19) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:127:HIS:H 15 0.02 (1,19) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:127:HIS:H 15 0.02 (1,19) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:127:HIS:H 15 0.02 (1,19) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:127:HIS:H 18 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD11 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD11 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD12 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD13 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD13 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD11 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD12 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD13 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD11 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD13 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD13 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD11 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD11 19 0.02 (1,184) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LYS:H 11 0.02 (1,184) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LYS:H 11 0.02 (1,184) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LYS:H 11 0.02 (1,188) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LYS:H 11 0.02 (1,188) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LYS:H 15 0.02 (1,188) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LYS:H 15 0.02 (1,188) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LYS:H 15 0.02 (1,172) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:20:THR:H 7 0.02 (1,172) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:20:THR:H 7 0.02 (1,172) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:20:THR:H 15 0.02 (1,172) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:20:THR:H 18 0.02 (1,172) 1:A:19:VAL:HG23	(1,194)	1:A:42:TYR:H	1:A:43:VAL:HG12	5	0.02
(1,19) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:127:HIS:H 13 0.02 (1,19) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:127:HIS:H 15 0.02 (1,19) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:127:HIS:H 15 0.02 (1,19) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:127:HIS:H 15 0.02 (1,19) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:127:HIS:H 15 0.02 (1,19) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:127:HIS:H 15 0.02 (1,19) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:127:HIS:H 18 0.02 (1,19) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:127:HIS:H 18 0.02 (1,19) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:127:HIS:H 18 0.02 (1,19) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:127:HIS:H 18 0.02 (1,19) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:127:HIS:H 18 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD11 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD12 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD12 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD13 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD11 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD11 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD11 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD11 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD13 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD11 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD11 19 0.02 (1,184) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:112:LEU:HD13 19 0.02 (1,184) 1:A:124:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD13 19 0.02 (1,184) 1:A:124:VAL:HG33 1:A:112:LEU:HD14 19 0.02 (1,184) 1:A:124:VAL:HG33 1:A:112:LEU:HD14 19 0.02 (1,184) 1:A:124:VAL:HG33 1:A:112:LEU:HD15 19 0.02 (1,184) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LYS:H 11 0.02 (1,185) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LYS:H 11 0.02 (1,186) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LYS:H 11 0.02 (1,187) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LYS:H 11 0.02 (1,187) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LYS:H 15 0.02 (1,187) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LYS:H 15 0.02 (1,187) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LYS:H 15 0.02 (1,172) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:128:LYS:H 15 0.02 (1,172) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:128:LYS:H 15 0.02 (1,172) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:20:THR:H 7 0.02 (1,172) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:20:THR:H 15 0.02 (1,172) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:20:THR:H 18 0.02 (1,172) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:20:THR:H 18 0.02 (1,17	(1,194)	1:A:42:TYR:H	1:A:43:VAL:HG13	5	0.02
(1,19) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:127:HIS:H 15 0.02 (1,19) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:127:HIS:H 15 0.02 (1,19) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:127:HIS:H 15 0.02 (1,19) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:127:HIS:H 15 0.02 (1,19) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:127:HIS:H 15 0.02 (1,19) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:127:HIS:H 18 0.02 (1,19) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:127:HIS:H 18 0.02 (1,19) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:127:HIS:H 18 0.02 (1,19) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:127:HIS:H 18 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD11 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD12 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD13 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD11 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD11 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD12 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD12 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD13 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD13 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD13 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD11 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD11 19 0.02 (1,184) 1:A:124:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD11 19 0.02 (1,184) 1:A:124:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD13 19 0.02 (1,184) 1:A:124:VAL:HG33 1:A:112:LEU:HD13 19 0.02 (1,184) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LYS:H 11 0.02 (1,185) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LYS:H 11 0.02 (1,186) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LYS:H 11 0.02 (1,187) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LYS:H 11 0.02 (1,188) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LYS:H 15 0.02 (1,188) 1:A:124:VAL:HG33 1:A:128:LYS:H 15 0.02 (1,189) 1:A:124:VAL:HG33 1:A:128:LYS:H 15 0.02 (1,172) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:20:THR:H 7 0.02 (1,172) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:20:THR:H 7 0.02 (1,172) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:20:THR:H 15 0.02 (1,172) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:20:THR:H 18 0.02 (1,172) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:20:THR:H 18 0.02	(1,19)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:127:HIS:H	13	0.02
(1,19)         1:A:124:VAL:HG11         1:A:127:HIS:H         15         0.02           (1,19)         1:A:124:VAL:HG12         1:A:127:HIS:H         15         0.02           (1,19)         1:A:124:VAL:HG13         1:A:127:HIS:H         15         0.02           (1,19)         1:A:124:VAL:HG11         1:A:127:HIS:H         18         0.02           (1,19)         1:A:124:VAL:HG12         1:A:127:HIS:H         18         0.02           (1,19)         1:A:124:VAL:HG13         1:A:127:HIS:H         18         0.02           (1,19)         1:A:124:VAL:HG21         1:A:1212:LEU:HD11         19         0.02           (1,184)         1:A:102:VAL:HG21         1:A:112:LEU:HD11         19         0.02           (1,184)         1:A:102:VAL:HG21         1:A:112:LEU:HD13         19         0.02           (1,184)         1:A:102:VAL:HG22         1:A:112:LEU:HD11         19         0.02           (1,184)         1:A:102:VAL:HG22         1:A:112:LEU:HD13         19         0.02           (1,184)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD13         19         0.02           (1,184)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD13         19         0.02           (1,184)         1:A:109:VAL:HG23 <td>(1,19)</td> <td>1:A:124:VAL:HG12</td> <td>1:A:127:HIS:H</td> <td>13</td> <td>0.02</td>	(1,19)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:127:HIS:H	13	0.02
(1,19)         1:A:124:VAL:HG12         1:A:127:HIS:H         15         0.02           (1,19)         1:A:124:VAL:HG13         1:A:127:HIS:H         15         0.02           (1,19)         1:A:124:VAL:HG11         1:A:127:HIS:H         18         0.02           (1,19)         1:A:124:VAL:HG12         1:A:127:HIS:H         18         0.02           (1,19)         1:A:124:VAL:HG13         1:A:127:HIS:H         18         0.02           (1,19)         1:A:124:VAL:HG13         1:A:127:HIS:H         18         0.02           (1,184)         1:A:102:VAL:HG21         1:A:112:LEU:HD11         19         0.02           (1,184)         1:A:102:VAL:HG21         1:A:112:LEU:HD13         19         0.02           (1,184)         1:A:102:VAL:HG22         1:A:112:LEU:HD11         19         0.02           (1,184)         1:A:102:VAL:HG22         1:A:112:LEU:HD12         19         0.02           (1,184)         1:A:102:VAL:HG22         1:A:112:LEU:HD13         19         0.02           (1,184)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD13         19         0.02           (1,184)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD14         19         0.02           (1,184)         1:A:102:VAL:HG23 <td>(1,19)</td> <td>1:A:124:VAL:HG13</td> <td>1:A:127:HIS:H</td> <td>13</td> <td>0.02</td>	(1,19)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:127:HIS:H	13	0.02
(1,19) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:127:HIS:H 15 0.02 (1,19) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:127:HIS:H 18 0.02 (1,19) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:127:HIS:H 18 0.02 (1,19) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:127:HIS:H 18 0.02 (1,19) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:127:HIS:H 18 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD11 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD12 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD12 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG21 1:A:112:LEU:HD13 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD11 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD11 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG22 1:A:112:LEU:HD11 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD13 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD13 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD11 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD11 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD12 19 0.02 (1,184) 1:A:102:VAL:HG23 1:A:112:LEU:HD13 19 0.02 (1,184) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LYS:H 11 0.02 (1,18) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LYS:H 11 0.02 (1,18) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LYS:H 11 0.02 (1,18) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LYS:H 11 0.02 (1,18) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LYS:H 15 0.02 (1,172) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:20:THR:H 7 0.02 (1,172) 1:A:19:VAL:HG21 1:A:20:THR:H 7 0.02 (1,172) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:20:THR:H 7 0.02 (1,172) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:20:THR:H 15 0.02 (1,172) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:20:THR:H 15 0.02 (1,172) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:20:THR:H 15 0.02 (1,172) 1:A:19:VAL:HG22 1:A:20:THR:H 15 0.02 (1,172) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:20:THR:H 18 0.02	(1,19)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:127:HIS:H	15	0.02
(1,19)         1:A:124:VAL:HG11         1:A:127:HIS:H         18         0.02           (1,19)         1:A:124:VAL:HG12         1:A:127:HIS:H         18         0.02           (1,19)         1:A:124:VAL:HG13         1:A:127:HIS:H         18         0.02           (1,184)         1:A:102:VAL:HG21         1:A:112:LEU:HD11         19         0.02           (1,184)         1:A:102:VAL:HG21         1:A:112:LEU:HD12         19         0.02           (1,184)         1:A:102:VAL:HG21         1:A:112:LEU:HD13         19         0.02           (1,184)         1:A:102:VAL:HG22         1:A:112:LEU:HD11         19         0.02           (1,184)         1:A:102:VAL:HG22         1:A:112:LEU:HD12         19         0.02           (1,184)         1:A:102:VAL:HG22         1:A:112:LEU:HD13         19         0.02           (1,184)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD11         19         0.02           (1,184)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD13         19         0.02           (1,184)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD13         19         0.02           (1,184)         1:A:124:VAL:HG23         1:A:1212:LEU:HD13         19         0.02           (1,184)         1:A:124	(1,19)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:127:HIS:H	15	0.02
(1,19)         1:A:124:VAL:HG11         1:A:127:HIS:H         18         0.02           (1,19)         1:A:124:VAL:HG12         1:A:127:HIS:H         18         0.02           (1,19)         1:A:124:VAL:HG13         1:A:127:HIS:H         18         0.02           (1,184)         1:A:102:VAL:HG21         1:A:112:LEU:HD11         19         0.02           (1,184)         1:A:102:VAL:HG21         1:A:112:LEU:HD12         19         0.02           (1,184)         1:A:102:VAL:HG21         1:A:112:LEU:HD13         19         0.02           (1,184)         1:A:102:VAL:HG22         1:A:112:LEU:HD11         19         0.02           (1,184)         1:A:102:VAL:HG22         1:A:112:LEU:HD12         19         0.02           (1,184)         1:A:102:VAL:HG22         1:A:112:LEU:HD13         19         0.02           (1,184)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD11         19         0.02           (1,184)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD13         19         0.02           (1,184)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD13         19         0.02           (1,184)         1:A:124:VAL:HG23         1:A:128:LYS:H         11         0.02           (1,18)         1:A:124:VAL:	(1,19)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:127:HIS:H	15	0.02
(1,19)         1:A:124:VAL:HG13         1:A:127:HIS:H         18         0.02           (1,184)         1:A:102:VAL:HG21         1:A:112:LEU:HD11         19         0.02           (1,184)         1:A:102:VAL:HG21         1:A:112:LEU:HD12         19         0.02           (1,184)         1:A:102:VAL:HG22         1:A:112:LEU:HD13         19         0.02           (1,184)         1:A:102:VAL:HG22         1:A:112:LEU:HD11         19         0.02           (1,184)         1:A:102:VAL:HG22         1:A:112:LEU:HD12         19         0.02           (1,184)         1:A:102:VAL:HG22         1:A:112:LEU:HD13         19         0.02           (1,184)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD11         19         0.02           (1,184)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD13         19         0.02           (1,184)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD13         19         0.02           (1,184)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD14         19         0.02           (1,184)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD13         19         0.02           (1,18)         1:A:124:VAL:HG13         1:A:128:LYS:H         11         0.02           (1,18)         1:A:1	(1,19)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:127:HIS:H	18	0.02
(1,184)         1:A:102:VAL:HG21         1:A:112:LEU:HD11         19         0.02           (1,184)         1:A:102:VAL:HG21         1:A:112:LEU:HD12         19         0.02           (1,184)         1:A:102:VAL:HG21         1:A:112:LEU:HD13         19         0.02           (1,184)         1:A:102:VAL:HG22         1:A:112:LEU:HD11         19         0.02           (1,184)         1:A:102:VAL:HG22         1:A:112:LEU:HD12         19         0.02           (1,184)         1:A:102:VAL:HG22         1:A:112:LEU:HD13         19         0.02           (1,184)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD11         19         0.02           (1,184)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD11         19         0.02           (1,184)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD12         19         0.02           (1,184)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD13         19         0.02           (1,184)         1:A:124:VAL:HG23         1:A:128:LYS:H         11         0.02           (1,188)         1:A:124:VAL:HG11         1:A:128:LYS:H         11         0.02           (1,18)         1:A:124:VAL:HG11         1:A:128:LYS:H         15         0.02           (1,18)         1:A:19:	(1,19)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:127:HIS:H	18	0.02
(1,184)         1:A:102:VAL:HG21         1:A:112:LEU:HD12         19         0.02           (1,184)         1:A:102:VAL:HG21         1:A:112:LEU:HD13         19         0.02           (1,184)         1:A:102:VAL:HG22         1:A:112:LEU:HD11         19         0.02           (1,184)         1:A:102:VAL:HG22         1:A:112:LEU:HD12         19         0.02           (1,184)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD13         19         0.02           (1,184)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD11         19         0.02           (1,184)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD12         19         0.02           (1,184)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD13         19         0.02           (1,184)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD13         19         0.02           (1,184)         1:A:124:VAL:HG23         1:A:128:LYS:H         11         0.02           (1,18)         1:A:124:VAL:HG11         1:A:128:LYS:H         11         0.02           (1,18)         1:A:124:VAL:HG13         1:A:128:LYS:H         15         0.02           (1,18)         1:A:124:VAL:HG12         1:A:128:LYS:H         15         0.02           (1,18)         1:A:19:VAL:H	(1,19)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:127:HIS:H	18	0.02
(1,184)         1:A:102:VAL:HG21         1:A:112:LEU:HD13         19         0.02           (1,184)         1:A:102:VAL:HG22         1:A:112:LEU:HD11         19         0.02           (1,184)         1:A:102:VAL:HG22         1:A:112:LEU:HD12         19         0.02           (1,184)         1:A:102:VAL:HG22         1:A:112:LEU:HD13         19         0.02           (1,184)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD11         19         0.02           (1,184)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD12         19         0.02           (1,184)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD13         19         0.02           (1,184)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD13         19         0.02           (1,184)         1:A:124:VAL:HG23         1:A:128:LYS:H         11         0.02           (1,18)         1:A:124:VAL:HG12         1:A:128:LYS:H         11         0.02           (1,18)         1:A:124:VAL:HG13         1:A:128:LYS:H         15         0.02           (1,18)         1:A:124:VAL:HG12         1:A:128:LYS:H         15         0.02           (1,18)         1:A:124:VAL:HG13         1:A:128:LYS:H         15         0.02           (1,18)         1:A:19:VAL:HG21<	· · /	1:A:102:VAL:HG21	1:A:112:LEU:HD11	19	0.02
(1,184)         1:A:102:VAL:HG22         1:A:112:LEU:HD11         19         0.02           (1,184)         1:A:102:VAL:HG22         1:A:112:LEU:HD12         19         0.02           (1,184)         1:A:102:VAL:HG22         1:A:112:LEU:HD13         19         0.02           (1,184)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD11         19         0.02           (1,184)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD12         19         0.02           (1,184)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD13         19         0.02           (1,184)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD13         19         0.02           (1,184)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:128:LYS:H         11         0.02           (1,18)         1:A:124:VAL:HG11         1:A:128:LYS:H         11         0.02           (1,18)         1:A:124:VAL:HG13         1:A:128:LYS:H         15         0.02           (1,18)         1:A:124:VAL:HG11         1:A:128:LYS:H         15         0.02           (1,18)         1:A:124:VAL:HG13         1:A:128:LYS:H         15         0.02           (1,18)         1:A:19:VAL:HG21         1:A:20:THR:H         7         0.02           (1,172)         1:A:19:VAL:HG23	(1,184)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:112:LEU:HD12	19	0.02
(1,184)         1:A:102:VAL:HG22         1:A:112:LEU:HD12         19         0.02           (1,184)         1:A:102:VAL:HG22         1:A:112:LEU:HD13         19         0.02           (1,184)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD11         19         0.02           (1,184)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD12         19         0.02           (1,184)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD13         19         0.02           (1,184)         1:A:124:VAL:HG11         1:A:128:LYS:H         11         0.02           (1,18)         1:A:124:VAL:HG12         1:A:128:LYS:H         11         0.02           (1,18)         1:A:124:VAL:HG13         1:A:128:LYS:H         15         0.02           (1,18)         1:A:124:VAL:HG11         1:A:128:LYS:H         15         0.02           (1,18)         1:A:124:VAL:HG12         1:A:128:LYS:H         15         0.02           (1,18)         1:A:124:VAL:HG13         1:A:128:LYS:H         15         0.02           (1,18)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:20:THR:H         7         0.02           (1,172)         1:A:19:VAL:HG21         1:A:20:THR:H         7         0.02           (1,172)         1:A:19:VAL:HG23 <td< td=""><td>(1,184)</td><td>1:A:102:VAL:HG21</td><td>1:A:112:LEU:HD13</td><td>19</td><td>0.02</td></td<>	(1,184)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:112:LEU:HD13	19	0.02
(1,184)         1:A:102:VAL:HG22         1:A:112:LEU:HD13         19         0.02           (1,184)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD11         19         0.02           (1,184)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD12         19         0.02           (1,184)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD13         19         0.02           (1,18)         1:A:124:VAL:HG11         1:A:128:LYS:H         11         0.02           (1,18)         1:A:124:VAL:HG12         1:A:128:LYS:H         11         0.02           (1,18)         1:A:124:VAL:HG13         1:A:128:LYS:H         15         0.02           (1,18)         1:A:124:VAL:HG11         1:A:128:LYS:H         15         0.02           (1,18)         1:A:124:VAL:HG11         1:A:128:LYS:H         15         0.02           (1,18)         1:A:124:VAL:HG12         1:A:128:LYS:H         15         0.02           (1,18)         1:A:124:VAL:HG12         1:A:128:LYS:H         15         0.02           (1,18)         1:A:19:VAL:HG21         1:A:20:THR:H         7         0.02           (1,172)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:20:THR:H         7         0.02           (1,172)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:	(1,184)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:112:LEU:HD11	19	0.02
(1,184)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD11         19         0.02           (1,184)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD12         19         0.02           (1,184)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD13         19         0.02           (1,18)         1:A:124:VAL:HG11         1:A:128:LYS:H         11         0.02           (1,18)         1:A:124:VAL:HG12         1:A:128:LYS:H         11         0.02           (1,18)         1:A:124:VAL:HG13         1:A:128:LYS:H         11         0.02           (1,18)         1:A:124:VAL:HG11         1:A:128:LYS:H         15         0.02           (1,18)         1:A:124:VAL:HG12         1:A:128:LYS:H         15         0.02           (1,18)         1:A:124:VAL:HG12         1:A:128:LYS:H         15         0.02           (1,18)         1:A:19:VAL:HG12         1:A:128:LYS:H         15         0.02           (1,18)         1:A:19:VAL:HG21         1:A:20:THR:H         7         0.02           (1,172)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:20:THR:H         7         0.02           (1,172)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:20:THR:H         15         0.02           (1,172)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:20:THR	(1,184)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:112:LEU:HD12	19	0.02
(1,184)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD12         19         0.02           (1,184)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD13         19         0.02           (1,18)         1:A:124:VAL:HG11         1:A:128:LYS:H         11         0.02           (1,18)         1:A:124:VAL:HG12         1:A:128:LYS:H         11         0.02           (1,18)         1:A:124:VAL:HG13         1:A:128:LYS:H         11         0.02           (1,18)         1:A:124:VAL:HG11         1:A:128:LYS:H         15         0.02           (1,18)         1:A:124:VAL:HG12         1:A:128:LYS:H         15         0.02           (1,18)         1:A:124:VAL:HG13         1:A:128:LYS:H         15         0.02           (1,18)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:128:LYS:H         15         0.02           (1,18)         1:A:19:VAL:HG21         1:A:20:THR:H         7         0.02           (1,172)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:20:THR:H         7         0.02           (1,172)         1:A:19:VAL:HG21         1:A:20:THR:H         15         0.02           (1,172)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:20:THR:H         15         0.02           (1,172)         1:A:19:VAL:HG21         1:A:20:THR:H <td>(1,184)</td> <td>1:A:102:VAL:HG22</td> <td>1:A:112:LEU:HD13</td> <td>19</td> <td>0.02</td>	(1,184)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:112:LEU:HD13	19	0.02
(1,184)         1:A:102:VAL:HG23         1:A:112:LEU:HD13         19         0.02           (1,18)         1:A:124:VAL:HG11         1:A:128:LYS:H         11         0.02           (1,18)         1:A:124:VAL:HG12         1:A:128:LYS:H         11         0.02           (1,18)         1:A:124:VAL:HG13         1:A:128:LYS:H         11         0.02           (1,18)         1:A:124:VAL:HG11         1:A:128:LYS:H         15         0.02           (1,18)         1:A:124:VAL:HG12         1:A:128:LYS:H         15         0.02           (1,18)         1:A:124:VAL:HG13         1:A:128:LYS:H         15         0.02           (1,18)         1:A:124:VAL:HG13         1:A:128:LYS:H         15         0.02           (1,18)         1:A:124:VAL:HG13         1:A:128:LYS:H         15         0.02           (1,172)         1:A:19:VAL:HG21         1:A:20:THR:H         7         0.02           (1,172)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:20:THR:H         15         0.02           (1,172)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:20:THR:H         15         0.02           (1,172)         1:A:19:VAL:HG21         1:A:20:THR:H         18         0.02           (1,172)         1:A:19:VAL:HG22         1:A:20:THR:H <td>(1,184)</td> <td>1:A:102:VAL:HG23</td> <td>1:A:112:LEU:HD11</td> <td>19</td> <td>0.02</td>	(1,184)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:112:LEU:HD11	19	0.02
(1,18)         1:A:124:VAL:HG11         1:A:128:LYS:H         11         0.02           (1,18)         1:A:124:VAL:HG12         1:A:128:LYS:H         11         0.02           (1,18)         1:A:124:VAL:HG13         1:A:128:LYS:H         11         0.02           (1,18)         1:A:124:VAL:HG11         1:A:128:LYS:H         15         0.02           (1,18)         1:A:124:VAL:HG12         1:A:128:LYS:H         15         0.02           (1,18)         1:A:124:VAL:HG13         1:A:128:LYS:H         15         0.02           (1,18)         1:A:19:VAL:HG13         1:A:128:LYS:H         15         0.02           (1,18)         1:A:19:VAL:HG21         1:A:20:THR:H         7         0.02           (1,172)         1:A:19:VAL:HG22         1:A:20:THR:H         7         0.02           (1,172)         1:A:19:VAL:HG21         1:A:20:THR:H         15         0.02           (1,172)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:20:THR:H         15         0.02           (1,172)         1:A:19:VAL:HG21         1:A:20:THR:H         18         0.02           (1,172)         1:A:19:VAL:HG22         1:A:20:THR:H         18         0.02           (1,172)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:20:THR:H	(1,184)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:112:LEU:HD12	19	0.02
(1,18)       1:A:124:VAL:HG12       1:A:128:LYS:H       11       0.02         (1,18)       1:A:124:VAL:HG13       1:A:128:LYS:H       11       0.02         (1,18)       1:A:124:VAL:HG11       1:A:128:LYS:H       15       0.02         (1,18)       1:A:124:VAL:HG12       1:A:128:LYS:H       15       0.02         (1,18)       1:A:124:VAL:HG13       1:A:128:LYS:H       15       0.02         (1,18)       1:A:19:VAL:HG13       1:A:20:THR:H       7       0.02         (1,172)       1:A:19:VAL:HG21       1:A:20:THR:H       7       0.02         (1,172)       1:A:19:VAL:HG23       1:A:20:THR:H       7       0.02         (1,172)       1:A:19:VAL:HG21       1:A:20:THR:H       15       0.02         (1,172)       1:A:19:VAL:HG23       1:A:20:THR:H       15       0.02         (1,172)       1:A:19:VAL:HG21       1:A:20:THR:H       18       0.02         (1,172)       1:A:19:VAL:HG22       1:A:20:THR:H       18       0.02         (1,172)       1:A:19:VAL:HG23       1:A:20:THR:H       18       0.02         (1,172)       1:A:19:VAL:HG23       1:A:20:THR:H       18       0.02	(1,184)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:112:LEU:HD13	19	0.02
(1,18)       1:A:124:VAL:HG13       1:A:128:LYS:H       11       0.02         (1,18)       1:A:124:VAL:HG11       1:A:128:LYS:H       15       0.02         (1,18)       1:A:124:VAL:HG12       1:A:128:LYS:H       15       0.02         (1,18)       1:A:124:VAL:HG13       1:A:128:LYS:H       15       0.02         (1,18)       1:A:19:VAL:HG13       1:A:20:THR:H       7       0.02         (1,172)       1:A:19:VAL:HG21       1:A:20:THR:H       7       0.02         (1,172)       1:A:19:VAL:HG23       1:A:20:THR:H       7       0.02         (1,172)       1:A:19:VAL:HG21       1:A:20:THR:H       15       0.02         (1,172)       1:A:19:VAL:HG23       1:A:20:THR:H       15       0.02         (1,172)       1:A:19:VAL:HG21       1:A:20:THR:H       18       0.02         (1,172)       1:A:19:VAL:HG22       1:A:20:THR:H       18       0.02         (1,172)       1:A:19:VAL:HG23       1:A:20:THR:H       18       0.02         (1,172)       1:A:19:VAL:HG23       1:A:20:THR:H       18       0.02         (1,172)       1:A:19:VAL:HG23       1:A:20:THR:H       18       0.02	(1,18)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:128:LYS:H	11	0.02
(1,18)       1:A:124:VAL:HG11       1:A:128:LYS:H       15       0.02         (1,18)       1:A:124:VAL:HG12       1:A:128:LYS:H       15       0.02         (1,18)       1:A:124:VAL:HG13       1:A:128:LYS:H       15       0.02         (1,172)       1:A:19:VAL:HG21       1:A:20:THR:H       7       0.02         (1,172)       1:A:19:VAL:HG22       1:A:20:THR:H       7       0.02         (1,172)       1:A:19:VAL:HG23       1:A:20:THR:H       15       0.02         (1,172)       1:A:19:VAL:HG21       1:A:20:THR:H       15       0.02         (1,172)       1:A:19:VAL:HG23       1:A:20:THR:H       15       0.02         (1,172)       1:A:19:VAL:HG23       1:A:20:THR:H       18       0.02         (1,172)       1:A:19:VAL:HG21       1:A:20:THR:H       18       0.02         (1,172)       1:A:19:VAL:HG22       1:A:20:THR:H       18       0.02         (1,172)       1:A:19:VAL:HG23       1:A:20:THR:H       18       0.02         (1,172)       1:A:19:VAL:HG23       1:A:20:THR:H       18       0.02	(1,18)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:128:LYS:H	11	0.02
(1,18)       1:A:124:VAL:HG12       1:A:128:LYS:H       15       0.02         (1,18)       1:A:124:VAL:HG13       1:A:128:LYS:H       15       0.02         (1,172)       1:A:19:VAL:HG21       1:A:20:THR:H       7       0.02         (1,172)       1:A:19:VAL:HG22       1:A:20:THR:H       7       0.02         (1,172)       1:A:19:VAL:HG23       1:A:20:THR:H       7       0.02         (1,172)       1:A:19:VAL:HG21       1:A:20:THR:H       15       0.02         (1,172)       1:A:19:VAL:HG22       1:A:20:THR:H       15       0.02         (1,172)       1:A:19:VAL:HG23       1:A:20:THR:H       18       0.02         (1,172)       1:A:19:VAL:HG22       1:A:20:THR:H       18       0.02         (1,172)       1:A:19:VAL:HG23       1:A:20:THR:H       18       0.02         (1,172)       1:A:19:VAL:HG23       1:A:20:THR:H       18       0.02	(1,18)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:128:LYS:H	11	0.02
(1,18)       1:A:124:VAL:HG13       1:A:128:LYS:H       15       0.02         (1,172)       1:A:19:VAL:HG21       1:A:20:THR:H       7       0.02         (1,172)       1:A:19:VAL:HG22       1:A:20:THR:H       7       0.02         (1,172)       1:A:19:VAL:HG23       1:A:20:THR:H       7       0.02         (1,172)       1:A:19:VAL:HG21       1:A:20:THR:H       15       0.02         (1,172)       1:A:19:VAL:HG22       1:A:20:THR:H       15       0.02         (1,172)       1:A:19:VAL:HG23       1:A:20:THR:H       18       0.02         (1,172)       1:A:19:VAL:HG22       1:A:20:THR:H       18       0.02         (1,172)       1:A:19:VAL:HG23       1:A:20:THR:H       18       0.02         (1,172)       1:A:19:VAL:HG23       1:A:20:THR:H       18       0.02         (1,172)       1:A:19:VAL:HG23       1:A:20:THR:H       18       0.02	(1,18)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:128:LYS:H	15	0.02
(1,172)       1:A:19:VAL:HG21       1:A:20:THR:H       7       0.02         (1,172)       1:A:19:VAL:HG22       1:A:20:THR:H       7       0.02         (1,172)       1:A:19:VAL:HG23       1:A:20:THR:H       7       0.02         (1,172)       1:A:19:VAL:HG21       1:A:20:THR:H       15       0.02         (1,172)       1:A:19:VAL:HG22       1:A:20:THR:H       15       0.02         (1,172)       1:A:19:VAL:HG23       1:A:20:THR:H       15       0.02         (1,172)       1:A:19:VAL:HG21       1:A:20:THR:H       18       0.02         (1,172)       1:A:19:VAL:HG22       1:A:20:THR:H       18       0.02         (1,172)       1:A:19:VAL:HG23       1:A:20:THR:H       18       0.02	(1,18)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:128:LYS:H	15	0.02
(1,172)       1:A:19:VAL:HG22       1:A:20:THR:H       7       0.02         (1,172)       1:A:19:VAL:HG23       1:A:20:THR:H       7       0.02         (1,172)       1:A:19:VAL:HG21       1:A:20:THR:H       15       0.02         (1,172)       1:A:19:VAL:HG22       1:A:20:THR:H       15       0.02         (1,172)       1:A:19:VAL:HG23       1:A:20:THR:H       15       0.02         (1,172)       1:A:19:VAL:HG21       1:A:20:THR:H       18       0.02         (1,172)       1:A:19:VAL:HG22       1:A:20:THR:H       18       0.02         (1,172)       1:A:19:VAL:HG23       1:A:20:THR:H       18       0.02         (1,172)       1:A:19:VAL:HG23       1:A:20:THR:H       18       0.02	(1,18)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:128:LYS:H	15	0.02
(1,172)       1:A:19:VAL:HG23       1:A:20:THR:H       7       0.02         (1,172)       1:A:19:VAL:HG21       1:A:20:THR:H       15       0.02         (1,172)       1:A:19:VAL:HG22       1:A:20:THR:H       15       0.02         (1,172)       1:A:19:VAL:HG23       1:A:20:THR:H       15       0.02         (1,172)       1:A:19:VAL:HG21       1:A:20:THR:H       18       0.02         (1,172)       1:A:19:VAL:HG22       1:A:20:THR:H       18       0.02         (1,172)       1:A:19:VAL:HG23       1:A:20:THR:H       18       0.02	(1,172)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:20:THR:H	7	0.02
(1,172)       1:A:19:VAL:HG23       1:A:20:THR:H       7       0.02         (1,172)       1:A:19:VAL:HG21       1:A:20:THR:H       15       0.02         (1,172)       1:A:19:VAL:HG22       1:A:20:THR:H       15       0.02         (1,172)       1:A:19:VAL:HG23       1:A:20:THR:H       15       0.02         (1,172)       1:A:19:VAL:HG21       1:A:20:THR:H       18       0.02         (1,172)       1:A:19:VAL:HG22       1:A:20:THR:H       18       0.02         (1,172)       1:A:19:VAL:HG23       1:A:20:THR:H       18       0.02		1:A:19:VAL:HG22	1:A:20:THR:H	7	0.02
(1,172)       1:A:19:VAL:HG22       1:A:20:THR:H       15       0.02         (1,172)       1:A:19:VAL:HG23       1:A:20:THR:H       15       0.02         (1,172)       1:A:19:VAL:HG21       1:A:20:THR:H       18       0.02         (1,172)       1:A:19:VAL:HG22       1:A:20:THR:H       18       0.02         (1,172)       1:A:19:VAL:HG23       1:A:20:THR:H       18       0.02         (1,172)       1:A:19:VAL:HG23       1:A:20:THR:H       18       0.02		1:A:19:VAL:HG23	1:A:20:THR:H	7	0.02
(1,172)       1:A:19:VAL:HG22       1:A:20:THR:H       15       0.02         (1,172)       1:A:19:VAL:HG23       1:A:20:THR:H       15       0.02         (1,172)       1:A:19:VAL:HG21       1:A:20:THR:H       18       0.02         (1,172)       1:A:19:VAL:HG22       1:A:20:THR:H       18       0.02         (1,172)       1:A:19:VAL:HG23       1:A:20:THR:H       18       0.02		1:A:19:VAL:HG21	1:A:20:THR:H	15	0.02
(1,172)       1:A:19:VAL:HG23       1:A:20:THR:H       15       0.02         (1,172)       1:A:19:VAL:HG21       1:A:20:THR:H       18       0.02         (1,172)       1:A:19:VAL:HG22       1:A:20:THR:H       18       0.02         (1,172)       1:A:19:VAL:HG23       1:A:20:THR:H       18       0.02         (1,172)       1:A:19:VAL:HG23       1:A:20:THR:H       18       0.02		1:A:19:VAL:HG22	1:A:20:THR:H	15	0.02
(1,172)       1:A:19:VAL:HG21       1:A:20:THR:H       18       0.02         (1,172)       1:A:19:VAL:HG22       1:A:20:THR:H       18       0.02         (1,172)       1:A:19:VAL:HG23       1:A:20:THR:H       18       0.02	` '	1:A:19:VAL:HG23	1:A:20:THR:H	15	0.02
(1,172)       1:A:19:VAL:HG22       1:A:20:THR:H       18       0.02         (1,172)       1:A:19:VAL:HG23       1:A:20:THR:H       18       0.02	_ `	1:A:19:VAL:HG21	1:A:20:THR:H	18	0.02
(1,172) 1:A:19:VAL:HG23 1:A:20:THR:H 18 0.02			1:A:20:THR:H	18	0.02
	/	1:A:19:VAL:HG23	1:A:20:THR:H	18	0.02
	· · /	1:A:19:VAL:HG21	1:A:20:THR:H	20	0.02



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,172)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:20:THR:H	20	0.02
(1,172)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:20:THR:H	20	0.02
(1,171)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG11	9	0.02
(1,171)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG12	9	0.02
(1,171)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG13	9	0.02
(1,17)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD21	5	0.02
(1,17)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD22	5	0.02
(1,17)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD23	5	0.02
(1,17)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD21	12	0.02
(1,17)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD22	12	0.02
(1,17)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD23	12	0.02
(1,17)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD21	18	0.02
(1,17)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD22	18	0.02
(1,17)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD23	18	0.02
(1,167)	1:A:101:HIS:H	1:A:115:CYS:H	20	0.02
(1,166)	1:A:40:GLY:H	1:A:54:SER:H	3	0.02
(1,164)	1:A:76:GLU:H	1:A:77:GLU:H	8	0.02
(1,163)	1:A:15:MET:H	1:A:17:TYR:H	12	0.02
(1,160)	1:A:54:SER:H	1:A:56:ASP:H	8	0.02
(1,16)	1:A:102:VAL:H	1:A:102:VAL:HG11	16	0.02
(1,16)	1:A:102:VAL:H	1:A:102:VAL:HG12	16	0.02
(1,16)	1:A:102:VAL:H	1:A:102:VAL:HG13	16	0.02
(1,16)	1:A:102:VAL:H	1:A:102:VAL:HG11	18	0.02
(1,16)	1:A:102:VAL:H	1:A:102:VAL:HG12	18	0.02
(1,16)	1:A:102:VAL:H	1:A:102:VAL:HG13	18	0.02
(1,150)	1:A:81:THR:H	1:A:82:SER:H	16	0.02
(1,15)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG11	15	0.02
(1,15)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG12	15	0.02
(1,15)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG13	15	0.02
(1,148)	1:A:44:ASP:H	1:A:122:ARG:H	9	0.02
(1,145)	1:A:128:LYS:H	1:A:130:LYS:H	9	0.02
(1,145)	1:A:128:LYS:H	1:A:130:LYS:H	17	0.02
(1,14)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD21	15	0.02
(1,14)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD22	15	0.02
(1,14)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD23	15	0.02
(1,139)	1:A:46:VAL:H	1:A:48:GLY:H	4	0.02
(1,139)	1:A:46:VAL:H	1:A:48:GLY:H	19	0.02
(1,132)	1:A:16:GLN:H	1:A:19:VAL:H	6	0.02
(1,1271)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:140:LEU:HD11	20	0.02
(1,1271)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:140:LEU:HD12	20	0.02
(1,1271)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:140:LEU:HD13	20	0.02
(1,1271)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:140:LEU:HD11	20	0.02



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1271)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:140:LEU:HD12	20	0.02
(1,1271)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:140:LEU:HD13	20	0.02
(1,1271)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:140:LEU:HD11	20	0.02
(1,1271)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:140:LEU:HD12	20	0.02
(1,1271)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:140:LEU:HD13	20	0.02
(1,127)	1:A:21:GLN:H	1:A:23:ASN:H	1	0.02
(1,127)	1:A:21:GLN:H	1:A:23:ASN:H	14	0.02
(1,1268)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:71:ILE:HD11	4	0.02
(1,1268)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:71:ILE:HD12	4	0.02
(1,1268)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:71:ILE:HD13	4	0.02
(1,1268)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:71:ILE:HD11	4	0.02
(1,1268)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:71:ILE:HD12	4	0.02
(1,1268)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:71:ILE:HD13	4	0.02
(1,1268)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:71:ILE:HD11	4	0.02
(1,1268)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:71:ILE:HD12	4	0.02
(1,1268)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:71:ILE:HD13	4	0.02
(1,1267)	1:A:86:ILE:HD11	1:A:80:ASP:H	12	0.02
(1,1267)	1:A:86:ILE:HD12	1:A:80:ASP:H	12	0.02
(1,1267)	1:A:86:ILE:HD13	1:A:80:ASP:H	12	0.02
(1,1258)	1:A:115:CYS:H	1:A:101:HIS:H	12	0.02
(1,1256)	1:A:100:GLY:H	1:A:90:VAL:H	12	0.02
(1,1243)	1:A:110:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD11	4	0.02
(1,1243)	1:A:110:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD12	4	0.02
(1,1243)	1:A:110:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD13	4	0.02
(1,1226)	1:A:102:VAL:HG11	1:A:113:ARG:H	15	0.02
(1,1226)	1:A:102:VAL:HG12	1:A:113:ARG:H	15	0.02
(1,1226)	1:A:102:VAL:HG13	1:A:113:ARG:H	15	0.02
(1,1222)	1:A:111:GLY:H	1:A:112:LEU:HD21	19	0.02
(1,1222)	1:A:111:GLY:H	1:A:112:LEU:HD22	19	0.02
(1,1222)	1:A:111:GLY:H	1:A:112:LEU:HD23	19	0.02
(1,1216)	1:A:140:LEU:HD11	1:A:141:PHE:H	5	0.02
(1,1216)	1:A:140:LEU:HD12	1:A:141:PHE:H	5	0.02
(1,1216)	1:A:140:LEU:HD13	1:A:141:PHE:H	5	0.02
(1,1216)	1:A:140:LEU:HD11	1:A:141:PHE:H	8	0.02
(1,1216)	1:A:140:LEU:HD12	1:A:141:PHE:H	8	0.02
(1,1216)	1:A:140:LEU:HD13	1:A:141:PHE:H	8	0.02
(1,1216)	1:A:140:LEU:HD11	1:A:141:PHE:H	19	0.02
(1,1216)	1:A:140:LEU:HD12	1:A:141:PHE:H	19	0.02
(1,1216)	1:A:140:LEU:HD13	1:A:141:PHE:H	19	0.02
(1,1215)	1:A:140:LEU:H	1:A:140:LEU:HD21	19	0.02
(1,1215)	1:A:140:LEU:H	1:A:140:LEU:HD22	19	0.02
(1,1215)	1:A:140:LEU:H	1:A:140:LEU:HD23	19	0.02



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1212)	1:A:138:LEU:H	1:A:138:LEU:HD21	18	0.02
(1,1212)	1:A:138:LEU:H	1:A:138:LEU:HD22	18	0.02
(1,1212)	1:A:138:LEU:H	1:A:138:LEU:HD23	18	0.02
(1,1210)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:H	3	0.02
(1,1210)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:H	3	0.02
(1,1210)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:H	3	0.02
(1,1206)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:134:TYR:H	19	0.02
(1,1206)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:134:TYR:H	19	0.02
(1,1206)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:134:TYR:H	19	0.02
(1,1204)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:132:GLU:H	1	0.02
(1,1204)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:132:GLU:H	1	0.02
(1,1204)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:132:GLU:H	1	0.02
(1,1203)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:132:GLU:H	9	0.02
(1,1203)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:132:GLU:H	9	0.02
(1,1203)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:132:GLU:H	9	0.02
(1,1201)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD11	12	0.02
(1,1201)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD12	12	0.02
(1,1201)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD13	12	0.02
(1,1198)	1:A:124:VAL:H	1:A:124:VAL:HG11	2	0.02
(1,1198)	1:A:124:VAL:H	1:A:124:VAL:HG12	2	0.02
(1,1198)	1:A:124:VAL:H	1:A:124:VAL:HG13	2	0.02
(1,1198)	1:A:124:VAL:H	1:A:124:VAL:HG11	13	0.02
(1,1198)	1:A:124:VAL:H	1:A:124:VAL:HG12	13	0.02
(1,1198)	1:A:124:VAL:H	1:A:124:VAL:HG13	13	0.02
(1,1197)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD21	14	0.02
(1,1197)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD22	14	0.02
(1,1197)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD23	14	0.02
(1,1196)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD11	5	0.02
(1,1196)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD12	5	0.02
(1,1196)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD13	5	0.02
(1,1195)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG21	2	0.02
(1,1195)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG22	2	0.02
(1,1195)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG23	2	0.02
(1,1190)	1:A:121:LEU:H	1:A:121:LEU:HD11	19	0.02
(1,1190)	1:A:121:LEU:H	1:A:121:LEU:HD12	19	0.02
(1,1190)	1:A:121:LEU:H	1:A:121:LEU:HD13	19	0.02
(1,119)	1:A:88:THR:H	1:A:102:VAL:H	5	0.02
(1,1187)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD21	11	0.02
(1,1187)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD22	11	0.02
(1,1187)	1:A:117:ASN:H	1:A:121:LEU:HD23	11	0.02
(1,1179)	1:A:101:HIS:H	1:A:102:VAL:HG11	18	0.02
(1,1179)	1:A:101:HIS:H	1:A:102:VAL:HG12	18	0.02
(1,1179)	1:A:101:HIS:H	1:A:102:VAL:HG12		0.02



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1179)	1:A:101:HIS:H	1:A:102:VAL:HG13	18	0.02
(1,1176)	1:A:99:LEU:HD21	1:A:100:GLY:H	13	0.02
(1,1176)	1:A:99:LEU:HD22	1:A:100:GLY:H	13	0.02
(1,1176)	1:A:99:LEU:HD23	1:A:100:GLY:H	13	0.02
(1,1165)	1:A:90:VAL:H	1:A:90:VAL:HG11	17	0.02
(1,1165)	1:A:90:VAL:H	1:A:90:VAL:HG12	17	0.02
(1,1165)	1:A:90:VAL:H	1:A:90:VAL:HG13	17	0.02
(1,1163)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD11	4	0.02
(1,1163)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD12	4	0.02
(1,1163)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD13	4	0.02
(1,1163)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD11	10	0.02
(1,1163)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD12	10	0.02
(1,1163)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD13	10	0.02
(1,1163)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD11	13	0.02
(1,1163)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD12	13	0.02
(1,1163)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD13	13	0.02
(1,1162)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:HG21	6	0.02
(1,1162)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:HG22	6	0.02
(1,1162)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:HG23	6	0.02
(1,1161)	1:A:89:GLU:H	1:A:90:VAL:HG11	14	0.02
(1,1161)	1:A:89:GLU:H	1:A:90:VAL:HG12	14	0.02
(1,1161)	1:A:89:GLU:H	1:A:90:VAL:HG13	14	0.02
(1,1158)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:87:ARG:H	15	0.02
(1,1158)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:87:ARG:H	15	0.02
(1,1158)	1:A:79:LEU:HD13	1:A:87:ARG:H	15	0.02
(1,1156)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:122:ARG:H	5	0.02
(1,1156)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:122:ARG:H	5	0.02
(1,1156)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:122:ARG:H	5	0.02
(1,1150)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:76:GLU:H	9	0.02
(1,1150)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:76:GLU:H	9	0.02
(1,1150)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:76:GLU:H	9	0.02
(1,1150)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:76:GLU:H	16	0.02
(1,1150)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:76:GLU:H	16	0.02
(1,1150)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:76:GLU:H	16	0.02
(1,1148)	1:A:76:GLU:H	1:A:99:LEU:HD21	2	0.02
(1,1148)	1:A:76:GLU:H	1:A:99:LEU:HD22	2	0.02
(1,1148)	1:A:76:GLU:H	1:A:99:LEU:HD23	2	0.02
(1,1148)	1:A:76:GLU:H	1:A:99:LEU:HD21	17	0.02
(1,1148)	1:A:76:GLU:H	1:A:99:LEU:HD22	17	0.02
(1,1148)	1:A:76:GLU:H	1:A:99:LEU:HD23	17	0.02
(1,1146)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG21	8	0.02
(1,1146)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG22	8	0.02



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1146)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG23	8	0.02
(1,1145)	1:A:73:GLU:H	1:A:75:VAL:HG21	4	0.02
(1,1145)	1:A:73:GLU:H	1:A:75:VAL:HG22	4	0.02
(1,1145)	1:A:73:GLU:H	1:A:75:VAL:HG23	4	0.02
(1,1145)	1:A:73:GLU:H	1:A:75:VAL:HG21	6	0.02
(1,1145)	1:A:73:GLU:H	1:A:75:VAL:HG22	6	0.02
(1,1145)	1:A:73:GLU:H	1:A:75:VAL:HG23	6	0.02
(1,1144)	1:A:71:ILE:H	1:A:71:ILE:HD11	18	0.02
(1,1144)	1:A:71:ILE:H	1:A:71:ILE:HD12	18	0.02
(1,1144)	1:A:71:ILE:H	1:A:71:ILE:HD13	18	0.02
(1,1143)	1:A:71:ILE:H	1:A:75:VAL:HG21	11	0.02
(1,1143)	1:A:71:ILE:H	1:A:75:VAL:HG22	11	0.02
(1,1143)	1:A:71:ILE:H	1:A:75:VAL:HG23	11	0.02
(1,1139)	1:A:52:PHE:H	1:A:71:ILE:HD11	13	0.02
(1,1139)	1:A:52:PHE:H	1:A:71:ILE:HD12	13	0.02
(1,1139)	1:A:52:PHE:H	1:A:71:ILE:HD13	13	0.02
(1,1136)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:52:PHE:H	20	0.02
(1,1136)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:52:PHE:H	20	0.02
(1,1136)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:52:PHE:H	20	0.02
(1,1133)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:51:LEU:H	4	0.02
(1,1133)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:51:LEU:H	4	0.02
(1,1133)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:51:LEU:H	4	0.02
(1,1133)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:51:LEU:H	11	0.02
(1,1133)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:51:LEU:H	11	0.02
(1,1133)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:51:LEU:H	11	0.02
(1,1128)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:49:LYS:H	17	0.02
(1,1128)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:49:LYS:H	17	0.02
(1,1128)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:49:LYS:H	17	0.02
(1,1125)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:48:GLY:H	19	0.02
(1,1125)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:48:GLY:H	19	0.02
(1,1125)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:48:GLY:H	19	0.02
(1,1118)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD11	10	0.02
(1,1118)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD12	10	0.02
(1,1118)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD13	10	0.02
(1,1118)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD11	17	0.02
(1,1118)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD12	17	0.02
(1,1118)	1:A:43:VAL:H	1:A:121:LEU:HD13	17	0.02
(1,1117)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:42:TYR:H	3	0.02
(1,1117)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:42:TYR:H	3	0.02
(1,1117)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:42:TYR:H	3	0.02
(1,1117)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:42:TYR:H	18	0.02
(1,1117)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:42:TYR:H	18	0.02



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1117)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:42:TYR:H	18	0.02
	1:A:19:VAL:HG11	1:A:23:ASN:H	9	0.02
(1,1113)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:23:ASN:H	9	0.02
(1,1113)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:23:ASN:H	9	0.02
(1,1110)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG11	11	0.02
(1,1110)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG12	11	0.02
(1,1110)	1:A:17:TYR:H	1:A:46:VAL:HG13	11	0.02
(1,1101)	1:A:9:ILE:H	1:A:12:LEU:HD21	10	0.02
(1,1101)	1:A:9:ILE:H	1:A:12:LEU:HD22	10	0.02
(1,1101)	1:A:9:ILE:H	1:A:12:LEU:HD23	10	0.02
(1,1098)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG21	18	0.02
(1,1098)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG22	18	0.02
(1,1098)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG23	18	0.02
(1,1097)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG21	9	0.02
(1,1097)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG22	9	0.02
(1,1097)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG23	9	0.02
(1,1097)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG21	14	0.02
(1,1097)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG22	14	0.02
(1,1097)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG23	14	0.02
(1,1096)	1:A:75:VAL:HG11	1:A:91:ARG:H	8	0.02
(1,1096)	1:A:75:VAL:HG12	1:A:91:ARG:H	8	0.02
(1,1096)	1:A:75:VAL:HG13	1:A:91:ARG:H	8	0.02
(1,1088)	1:A:90:VAL:HG21	1:A:101:HIS:H	12	0.02
(1,1088)	1:A:90:VAL:HG22	1:A:101:HIS:H	12	0.02
(1,1088)	1:A:90:VAL:HG23	1:A:101:HIS:H	12	0.02
(1,1088)	1:A:90:VAL:HG21	1:A:101:HIS:H	14	0.02
(1,1088)	1:A:90:VAL:HG22	1:A:101:HIS:H	14	0.02
(1,1088)	1:A:90:VAL:HG23	1:A:101:HIS:H	14	0.02
(1,1087)	1:A:71:ILE:H	1:A:75:VAL:HG11	3	0.02
(1,1087)	1:A:71:ILE:H	1:A:75:VAL:HG12	3	0.02
(1,1087)	1:A:71:ILE:H	1:A:75:VAL:HG13	3	0.02
(1,1086)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:124:VAL:H	8	0.02
(1,1086)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:124:VAL:H	8	0.02
(1,1086)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:124:VAL:H	8	0.02
(1,1083)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:120:ALA:H	19	0.02
(1,1083)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:120:ALA:H	19	0.02
(1,1083)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:120:ALA:H	19	0.02
(1,1083)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:120:ALA:H	20	0.02
(1,1083)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:120:ALA:H	20	0.02
(1,1083)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:120:ALA:H	20	0.02
(1,1082)	1:A:46:VAL:HG11	1:A:48:GLY:H	3	0.02
(1,1082)	1:A:46:VAL:HG12	1:A:48:GLY:H	3	0.02



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1082)	1:A:46:VAL:HG13	1:A:48:GLY:H	3	0.02
. ,	1:A:46:VAL:HG11	1:A:48:GLY:H	8	0.02
(1,1082)	1:A:46:VAL:HG12	1:A:48:GLY:H	8	0.02
(1,1082)	1:A:46:VAL:HG13	1:A:48:GLY:H	8	0.02
(1,1076)	1:A:102:VAL:HG21	1:A:103:PHE:H	3	0.02
(1,1076)	1:A:102:VAL:HG22	1:A:103:PHE:H	3	0.02
(1,1076)	1:A:102:VAL:HG23	1:A:103:PHE:H	3	0.02
(1,1073)	1:A:79:LEU:HD21	1:A:80:ASP:H	16	0.02
(1,1073)	1:A:79:LEU:HD22	1:A:80:ASP:H	16	0.02
(1,1073)	1:A:79:LEU:HD23	1:A:80:ASP:H	16	0.02
(1,1069)	1:A:90:VAL:HG21	1:A:115:CYS:H	5	0.02
(1,1069)	1:A:90:VAL:HG22	1:A:115:CYS:H	5	0.02
(1,1069)	1:A:90:VAL:HG23	1:A:115:CYS:H	5	0.02
(1,1066)	1:A:43:VAL:H	1:A:43:VAL:HG11	14	0.02
(1,1066)	1:A:43:VAL:H	1:A:43:VAL:HG12	14	0.02
(1,1066)	1:A:43:VAL:H	1:A:43:VAL:HG13	14	0.02
(1,1065)	1:A:19:VAL:H	1:A:19:VAL:HG11	15	0.02
(1,1065)	1:A:19:VAL:H	1:A:19:VAL:HG12	15	0.02
(1,1065)	1:A:19:VAL:H	1:A:19:VAL:HG13	15	0.02
(1,1060)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD21	12	0.02
(1,1060)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD22	12	0.02
(1,1060)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD23	12	0.02
(1,1059)	1:A:12:LEU:H	1:A:12:LEU:HD21	13	0.02
(1,1059)	1:A:12:LEU:H	1:A:12:LEU:HD22	13	0.02
(1,1059)	1:A:12:LEU:H	1:A:12:LEU:HD23	13	0.02
(1,1059)	1:A:12:LEU:H	1:A:12:LEU:HD21	17	0.02
(1,1059)	1:A:12:LEU:H	1:A:12:LEU:HD22	17	0.02
(1,1059)	1:A:12:LEU:H	1:A:12:LEU:HD23	17	0.02
(1,1057)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:138:LEU:HD21	6	0.02
(1,1057)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:138:LEU:HD22	6	0.02
(1,1057)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:138:LEU:HD23	6	0.02
(1,1057)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:138:LEU:HD21	6	0.02
(1,1057)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:138:LEU:HD22	6	0.02
(1,1057)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:138:LEU:HD23	6	0.02
(1,1057)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:138:LEU:HD21	6	0.02
(1,1057)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:138:LEU:HD22	6	0.02
(1,1057)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:138:LEU:HD23	6	0.02
(1,1057)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:138:LEU:HD21	20	0.02
(1,1057)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:138:LEU:HD22	20	0.02
(1,1057)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:138:LEU:HD23	20	0.02
(1,1057)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:138:LEU:HD21	20	0.02
(1,1057)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:138:LEU:HD22	20	0.02



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1057)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:138:LEU:HD23	20	0.02
(1,1057)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:138:LEU:HD21	20	0.02
(1,1057)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:138:LEU:HD22	20	0.02
(1,1057)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:138:LEU:HD23	20	0.02
(1,104)	1:A:73:GLU:H	1:A:75:VAL:H	19	0.02
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:90:VAL:HG21	1	0.02
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:90:VAL:HG22	1	0.02
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:90:VAL:HG23	1	0.02
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:90:VAL:HG21	1	0.02
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:90:VAL:HG22	1	0.02
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:90:VAL:HG23	1	0.02
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG21	1	0.02
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG22	1	0.02
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG23	1	0.02
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:90:VAL:HG21	15	0.02
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:90:VAL:HG22	15	0.02
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:90:VAL:HG23	15	0.02
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:90:VAL:HG21	15	0.02
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:90:VAL:HG22	15	0.02
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:90:VAL:HG23	15	0.02
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG21	15	0.02
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG22	15	0.02
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG23	15	0.02
(1,1026)	1:A:140:LEU:H	1:A:142:ASN:H	5	0.02
(1,1020)	1:A:131:GLU:H	1:A:133:GLY:H	14	0.02
(1,1013)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:H	10	0.02
(1,1010)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:H	2	0.02
(1,998)	1:A:104:ASN:H	1:A:106:GLY:H	7	0.01
(1,986)	1:A:99:LEU:H	1:A:100:GLY:H	1	0.01
(1,986)	1:A:99:LEU:H	1:A:100:GLY:H	9	0.01
(1,984)	1:A:92:SER:H	1:A:98:HIS:H	12	0.01
(1,982)	1:A:76:GLU:H	1:A:91:ARG:H	14	0.01
(1,980)	1:A:90:VAL:H	1:A:100:GLY:H	19	0.01
(1,98)	1:A:31:ASN:H	1:A:34:TRP:H	10	0.01
(1,979)	1:A:89:GLU:H	1:A:90:VAL:H	10	0.01
(1,976)	1:A:80:ASP:H	1:A:88:THR:H	12	0.01
(1,976)	1:A:80:ASP:H	1:A:88:THR:H	20	0.01
(1,972)	1:A:78:LYS:H	1:A:89:GLU:H	6	0.01
(1,972)	1:A:78:LYS:H	1:A:89:GLU:H	10	0.01
(1,953)	1:A:30:GLN:H	1:A:34:TRP:HE1	16	0.01
(1,950)	1:A:25:THR:H	1:A:26:GLU:H	19	0.01
(1,948)	1:A:18:GLU:H	1:A:20:THR:H	4	0.01



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,944)	1:A:15:MET:H	1:A:18:GLU:H	4	0.01
(1,944)	1:A:15:MET:H	1:A:18:GLU:H	9	0.01
(1,943)	1:A:14:ARG:H	1:A:17:TYR:H	17	0.01
(1,930)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:H	3	0.01
(1,912)	1:A:21:GLN:H	1:A:24:GLY:H	4	0.01
(1,901)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD11	7	0.01
(1,901)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD12	7	0.01
(1,901)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD13	7	0.01
(1,901)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD11	7	0.01
(1,901)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD12	7	0.01
(1,901)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD13	7	0.01
(1,901)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD11	7	0.01
(1,901)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD12	7	0.01
(1,901)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD13	7	0.01
(1,895)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:25:THR:H	1	0.01
(1,895)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:25:THR:H	1	0.01
(1,895)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:25:THR:H	1	0.01
(1,893)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD11	13	0.01
(1,893)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD12	13	0.01
(1,893)	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD13	13	0.01
(1,89)	1:A:55:LYS:H	1:A:57:LYS:H	15	0.01
(1,885)	1:A:75:VAL:H	1:A:99:LEU:HD11	16	0.01
(1,885)	1:A:75:VAL:H	1:A:99:LEU:HD12	16	0.01
(1,885)	1:A:75:VAL:H	1:A:99:LEU:HD13	16	0.01
(1,884)	1:A:51:LEU:HD11	1:A:99:LEU:HD21	9	0.01
(1,884)	1:A:51:LEU:HD11	1:A:99:LEU:HD22	9	0.01
(1,884)	1:A:51:LEU:HD11	1:A:99:LEU:HD23	9	0.01
(1,884)	1:A:51:LEU:HD12	1:A:99:LEU:HD21	9	0.01
(1,884)	1:A:51:LEU:HD12	1:A:99:LEU:HD22	9	0.01
(1,884)	1:A:51:LEU:HD12	1:A:99:LEU:HD23	9	0.01
(1,884)	1:A:51:LEU:HD13	1:A:99:LEU:HD21	9	0.01
(1,884)	1:A:51:LEU:HD13	1:A:99:LEU:HD22	9	0.01
(1,884)	1:A:51:LEU:HD13	1:A:99:LEU:HD23	9	0.01
(1,881)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:140:LEU:HD11	4	0.01
(1,881)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:140:LEU:HD12	4	0.01
(1,881)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:140:LEU:HD13	4	0.01
(1,881)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:140:LEU:HD11	4	0.01
(1,881)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:140:LEU:HD12	4	0.01
(1,881)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:140:LEU:HD13	4	0.01
(1,881)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:140:LEU:HD11	4	0.01
(1,881)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:140:LEU:HD12	4	0.01
(1,881)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:140:LEU:HD13	4	0.01



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,880)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:13:ASN:HD21	2	0.01
(1,880)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:13:ASN:HD21	2	0.01
(1,880)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:13:ASN:HD21	2	0.01
(1,875)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:129:LEU:HD21	10	0.01
(1,875)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:129:LEU:HD22	10	0.01
(1,875)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:129:LEU:HD23	10	0.01
(1,875)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:129:LEU:HD21	10	0.01
(1,875)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:129:LEU:HD22	10	0.01
(1,875)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:129:LEU:HD23	10	0.01
(1,875)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:129:LEU:HD21	10	0.01
(1,875)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:129:LEU:HD22	10	0.01
(1,875)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:129:LEU:HD23	10	0.01
(1,866)	1:A:71:ILE:HD11	1:A:140:LEU:HD11	5	0.01
(1,866)	1:A:71:ILE:HD11	1:A:140:LEU:HD12	5	0.01
(1,866)	1:A:71:ILE:HD11	1:A:140:LEU:HD13	5	0.01
(1,866)	1:A:71:ILE:HD12	1:A:140:LEU:HD11	5	0.01
(1,866)	1:A:71:ILE:HD12	1:A:140:LEU:HD12	5	0.01
(1,866)	1:A:71:ILE:HD12	1:A:140:LEU:HD13	5	0.01
(1,866)	1:A:71:ILE:HD13	1:A:140:LEU:HD11	5	0.01
(1,866)	1:A:71:ILE:HD13	1:A:140:LEU:HD12	5	0.01
(1,866)	1:A:71:ILE:HD13	1:A:140:LEU:HD13	5	0.01
(1,858)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:43:VAL:HG11	6	0.01
(1,858)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:43:VAL:HG12	6	0.01
(1,858)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:43:VAL:HG13	6	0.01
(1,858)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:43:VAL:HG11	6	0.01
(1,858)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:43:VAL:HG12	6	0.01
(1,858)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:43:VAL:HG13	6	0.01
(1,858)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:43:VAL:HG11	6	0.01
(1,858)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:43:VAL:HG12	6	0.01
(1,858)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:43:VAL:HG13	6	0.01
(1,858)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:43:VAL:HG11	17	0.01
(1,858)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:43:VAL:HG12	17	0.01
(1,858)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:43:VAL:HG13	17	0.01
(1,858)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:43:VAL:HG11	17	0.01
(1,858)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:43:VAL:HG12	17	0.01
(1,858)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:43:VAL:HG13	17	0.01
(1,858)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:43:VAL:HG11	17	0.01
(1,858)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:43:VAL:HG12	17	0.01
(1,858)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:43:VAL:HG13	17	0.01
(1,856)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:138:LEU:HD11	7	0.01
(1,856)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:138:LEU:HD12	7	0.01
(1,856)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:138:LEU:HD13	7	0.01



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,856)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:138:LEU:HD11	7	0.01
(1,856)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:138:LEU:HD12	7	0.01
(1,856)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:138:LEU:HD13	7	0.01
(1,856)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:138:LEU:HD11	7	0.01
(1,856)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:138:LEU:HD12	7	0.01
(1,856)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:138:LEU:HD13	7	0.01
(1,855)	1:A:41:LEU:H	1:A:41:LEU:HD21	18	0.01
(1,855)	1:A:41:LEU:H	1:A:41:LEU:HD22	18	0.01
(1,855)	1:A:41:LEU:H	1:A:41:LEU:HD23	18	0.01
(1,852)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:124:VAL:HG11	15	0.01
(1,852)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:124:VAL:HG12	15	0.01
(1,852)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:124:VAL:HG13	15	0.01
(1,852)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:124:VAL:HG11	15	0.01
(1,852)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:124:VAL:HG12	15	0.01
(1,852)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:124:VAL:HG13	15	0.01
(1,852)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:124:VAL:HG11	15	0.01
(1,852)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:124:VAL:HG12	15	0.01
(1,852)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:124:VAL:HG13	15	0.01
(1,846)	1:A:88:THR:H	1:A:102:VAL:HG11	16	0.01
(1,846)	1:A:88:THR:H	1:A:102:VAL:HG12	16	0.01
(1,846)	1:A:88:THR:H	1:A:102:VAL:HG13	16	0.01
(1,839)	1:A:42:TYR:H	1:A:43:VAL:HG11	15	0.01
(1,839)	1:A:42:TYR:H	1:A:43:VAL:HG12	15	0.01
(1,839)	1:A:42:TYR:H	1:A:43:VAL:HG13	15	0.01
(1,835)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:26:GLU:H	6	0.01
(1,835)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:26:GLU:H	6	0.01
(1,835)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:26:GLU:H	6	0.01
(1,83)	1:A:9:ILE:H	1:A:12:LEU:H	11	0.01
(1,825)	1:A:90:VAL:HG21	1:A:91:ARG:H	19	0.01
(1,825)	1:A:90:VAL:HG22	1:A:91:ARG:H	19	0.01
(1,825)	1:A:90:VAL:HG23	1:A:91:ARG:H	19	0.01
(1,822)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:43:VAL:HG21	11	0.01
(1,822)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:43:VAL:HG22	11	0.01
(1,822)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:43:VAL:HG23	11	0.01
(1,822)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:43:VAL:HG21	11	0.01
(1,822)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:43:VAL:HG22	11	0.01
(1,822)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:43:VAL:HG23	11	0.01
(1,822)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:43:VAL:HG21	11	0.01
(1,822)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:43:VAL:HG22	11	0.01
(1,822)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:43:VAL:HG23	11	0.01
(1,82)	1:A:13:ASN:H	1:A:13:ASN:HD21	12	0.01
(1,817)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:20:THR:H	4	0.01



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,817)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:20:THR:H	4	0.01
(1,817)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:20:THR:H	4	0.01
(1,816)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG11	8	0.01
(1,816)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG12	8	0.01
(1,816)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG13	8	0.01
(1,81)	1:A:47:SER:H	1:A:48:GLY:H	8	0.01
(1,81)	1:A:47:SER:H	1:A:48:GLY:H	18	0.01
(1,809)	1:A:76:GLU:H	1:A:77:GLU:H	6	0.01
(1,805)	1:A:54:SER:H	1:A:56:ASP:H	6	0.01
(1,803)	1:A:77:GLU:H	1:A:78:LYS:H	7	0.01
(1,803)	1:A:77:GLU:H	1:A:78:LYS:H	8	0.01
(1,795)	1:A:81:THR:H	1:A:82:SER:H	15	0.01
(1,784)	1:A:46:VAL:H	1:A:48:GLY:H	8	0.01
(1,784)	1:A:46:VAL:H	1:A:48:GLY:H	12	0.01
(1,772)	1:A:21:GLN:H	1:A:23:ASN:H	18	0.01
(1,764)	1:A:88:THR:H	1:A:102:VAL:H	13	0.01
(1,760)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:H	19	0.01
(1,751)	1:A:105:ASP:H	1:A:113:ARG:H	11	0.01
(1,749)	1:A:73:GLU:H	1:A:75:VAL:H	3	0.01
(1,749)	1:A:73:GLU:H	1:A:75:VAL:H	14	0.01
(1,747)	1:A:52:PHE:H	1:A:71:ILE:H	20	0.01
(1,743)	1:A:31:ASN:H	1:A:34:TRP:H	10	0.01
(1,734)	1:A:55:LYS:H	1:A:57:LYS:H	15	0.01
(1,728)	1:A:9:ILE:H	1:A:12:LEU:H	11	0.01
(1,727)	1:A:13:ASN:H	1:A:13:ASN:HD21	12	0.01
(1,726)	1:A:47:SER:H	1:A:48:GLY:H	8	0.01
(1,726)	1:A:47:SER:H	1:A:48:GLY:H	18	0.01
(1,705)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD11	3	0.01
(1,705)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD12	3	0.01
(1,705)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD13	3	0.01
(1,705)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD11	15	0.01
(1,705)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD12	15	0.01
(1,705)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD13	15	0.01
(1,705)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD11	19	0.01
(1,705)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD12	19	0.01
(1,705)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD13	19	0.01
(1,702)	1:A:112:LEU:HD11	1:A:113:ARG:H	9	0.01
(1,702)	1:A:112:LEU:HD12	1:A:113:ARG:H	9	0.01
(1,702)	1:A:112:LEU:HD13	1:A:113:ARG:H	9	0.01
(1,701)	1:A:110:ASN:HD22	1:A:112:LEU:HD11	11	0.01
(1,701)	1:A:110:ASN:HD22	1:A:112:LEU:HD12	11	0.01
(1,701)	1:A:110:ASN:HD22	1:A:112:LEU:HD13	11	0.01



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,7)	1:A:41:LEU:H	1:A:41:LEU:HD11	20	0.01
(1,7)	1:A:41:LEU:H	1:A:41:LEU:HD12	20	0.01
(1,7)	1:A:41:LEU:H	1:A:41:LEU:HD13	20	0.01
(1,694)	1:A:78:LYS:H	1:A:90:VAL:HG11	11	0.01
(1,694)	1:A:78:LYS:H	1:A:90:VAL:HG12	11	0.01
(1,694)	1:A:78:LYS:H	1:A:90:VAL:HG13	11	0.01
(1,693)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:88:THR:H	9	0.01
(1,693)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:88:THR:H	9	0.01
(1,693)	1:A:79:LEU:HD13	1:A:88:THR:H	9	0.01
(1,692)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:115:CYS:H	18	0.01
(1,692)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:115:CYS:H	18	0.01
(1,692)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:115:CYS:H	18	0.01
(1,690)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD11	17	0.01
(1,690)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD12	17	0.01
(1,690)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD13	17	0.01
(1,689)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:48:GLY:H	2	0.01
(1,689)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:48:GLY:H	2	0.01
(1,689)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:48:GLY:H	2	0.01
(1,676)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:49:LYS:H	5	0.01
(1,676)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:49:LYS:H	5	0.01
(1,676)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:49:LYS:H	5	0.01
(1,675)	1:A:106:GLY:H	1:A:112:LEU:HD21	16	0.01
(1,675)	1:A:106:GLY:H	1:A:112:LEU:HD22	16	0.01
(1,675)	1:A:106:GLY:H	1:A:112:LEU:HD23	16	0.01
(1,667)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:137:TYR:H	19	0.01
(1,667)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:137:TYR:H	19	0.01
(1,667)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:137:TYR:H	19	0.01
(1,662)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD21	19	0.01
(1,662)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD22	19	0.01
(1,662)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD23	19	0.01
(1,661)	1:A:102:VAL:H	1:A:102:VAL:HG11	20	0.01
(1,661)	1:A:102:VAL:H	1:A:102:VAL:HG12	20	0.01
(1,661)	1:A:102:VAL:H	1:A:102:VAL:HG13	20	0.01
(1,660)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG11	12	0.01
(1,660)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG12	12	0.01
(1,660)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG13	12	0.01
(1,660)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG11	19	0.01
(1,660)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG12	19	0.01
(1,660)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG13	19	0.01
(1,659)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD21	7	0.01
(1,659)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD22	7	0.01
(1,659)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD23	7	0.01



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,659)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD21	19	0.01
(1,659)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD22	19	0.01
(1,659)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD23	19	0.01
(1,658)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:131:GLU:H	1	0.01
(1,658)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:131:GLU:H	1	0.01
(1,658)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:131:GLU:H	1	0.01
(1,652)	1:A:41:LEU:H	1:A:41:LEU:HD11	20	0.01
(1,652)	1:A:41:LEU:H	1:A:41:LEU:HD12	20	0.01
(1,652)	1:A:41:LEU:H	1:A:41:LEU:HD13	20	0.01
(1,640)	1:A:34:TRP:HE1	1:A:31:ASN:H	7	0.01
(1,634)	1:A:71:ILE:HD11	1:A:140:LEU:HD11	5	0.01
(1,634)	1:A:71:ILE:HD11	1:A:140:LEU:HD12	5	0.01
(1,634)	1:A:71:ILE:HD11	1:A:140:LEU:HD13	5	0.01
(1,634)	1:A:71:ILE:HD12	1:A:140:LEU:HD11	5	0.01
(1,634)	1:A:71:ILE:HD12	1:A:140:LEU:HD12	5	0.01
(1,634)	1:A:71:ILE:HD12	1:A:140:LEU:HD13	5	0.01
(1,634)	1:A:71:ILE:HD13	1:A:140:LEU:HD11	5	0.01
(1,634)	1:A:71:ILE:HD13	1:A:140:LEU:HD12	5	0.01
(1,634)	1:A:71:ILE:HD13	1:A:140:LEU:HD13	5	0.01
(1,625)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:140:LEU:HD11	9	0.01
(1,625)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:140:LEU:HD12	9	0.01
(1,625)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:140:LEU:HD13	9	0.01
(1,625)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:140:LEU:HD11	9	0.01
(1,625)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:140:LEU:HD12	9	0.01
(1,625)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:140:LEU:HD13	9	0.01
(1,625)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:140:LEU:HD11	9	0.01
(1,625)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:140:LEU:HD12	9	0.01
(1,625)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:140:LEU:HD13	9	0.01
(1,622)	1:A:86:ILE:HD11	1:A:80:ASP:H	3	0.01
(1,622)	1:A:86:ILE:HD12	1:A:80:ASP:H	3	0.01
(1,622)	1:A:86:ILE:HD13	1:A:80:ASP:H	3	0.01
(1,619)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:H	11	0.01
(1,619)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:H	11	0.01
(1,619)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:H	11	0.01
(1,619)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:H	12	0.01
(1,619)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:H	12	0.01
(1,619)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:H	12	0.01
(1,612)	1:A:102:VAL:H	1:A:88:THR:H	8	0.01
(1,612)	1:A:102:VAL:H	1:A:88:THR:H	20	0.01
(1,600)	1:A:142:ASN:H	1:A:142:ASN:HD21	1	0.01
(1,60)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD11	3	0.01
(1,60)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD12	3	



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,60)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD13	3	0.01
(1,60)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD11	15	0.01
(1,60)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD12	15	0.01
(1,60)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD13	15	0.01
(1,60)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD11	19	0.01
(1,60)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD12	19	0.01
(1,60)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD13	19	0.01
(1,599)	1:A:117:ASN:H	1:A:117:ASN:HD21	18	0.01
(1,592)	1:A:22:ASN:H	1:A:22:ASN:HD21	14	0.01
(1,588)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:22:ASN:H	15	0.01
(1,588)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:22:ASN:H	15	0.01
(1,588)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:22:ASN:H	15	0.01
(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG11	14	0.01
(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG12	14	0.01
(1,585)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG13	14	0.01
(1,583)	1:A:90:VAL:H	1:A:102:VAL:HG21	11	0.01
(1,583)	1:A:90:VAL:H	1:A:102:VAL:HG22	11	0.01
(1,583)	1:A:90:VAL:H	1:A:102:VAL:HG23	11	0.01
(1,581)	1:A:102:VAL:HG11	1:A:113:ARG:H	14	0.01
(1,581)	1:A:102:VAL:HG12	1:A:113:ARG:H	14	0.01
(1,581)	1:A:102:VAL:HG13	1:A:113:ARG:H	14	0.01
(1,578)	1:A:112:LEU:H	1:A:112:LEU:HD11	8	0.01
(1,578)	1:A:112:LEU:H	1:A:112:LEU:HD12	8	0.01
(1,578)	1:A:112:LEU:H	1:A:112:LEU:HD13	8	0.01
(1,572)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:141:PHE:H	15	0.01
(1,572)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:141:PHE:H	15	0.01
(1,572)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:141:PHE:H	15	0.01
(1,571)	1:A:140:LEU:HD11	1:A:141:PHE:H	2	0.01
(1,571)	1:A:140:LEU:HD12	1:A:141:PHE:H	2	0.01
(1,571)	1:A:140:LEU:HD13	1:A:141:PHE:H	2	0.01
(1,57)	1:A:112:LEU:HD11	1:A:113:ARG:H	9	0.01
(1,57)	1:A:112:LEU:HD12	1:A:113:ARG:H	9	0.01
(1,57)	1:A:112:LEU:HD13	1:A:113:ARG:H	9	0.01
(1,565)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:H	5	0.01
(1,565)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:H	5	0.01
(1,565)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:H	5	0.01
(1,562)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD21	1	0.01
(1,562)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD22	1	0.01
(1,562)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD23	1	0.01
(1,56)	1:A:110:ASN:HD22	1:A:112:LEU:HD11	11	0.01
(1,56)	1:A:110:ASN:HD22	1:A:112:LEU:HD12	11	0.01
(1,56)	1:A:110:ASN:HD22	1:A:112:LEU:HD13	11	0.01



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,556)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD11	2	0.01
(1,556)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD12	2	0.01
(1,556)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD13	2	0.01
(1,552)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD21	17	0.01
(1,552)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD22	17	0.01
(1,552)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD23	17	0.01
(1,550)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG21	12	0.01
(1,550)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG22	12	0.01
(1,550)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG23	12	0.01
(1,544)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:120:ALA:H	5	0.01
(1,544)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:120:ALA:H	5	0.01
(1,544)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:120:ALA:H	5	0.01
(1,536)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:102:VAL:H	4	0.01
(1,536)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:102:VAL:H	4	0.01
(1,536)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:102:VAL:H	4	0.01
(1,528)	1:A:105:ASP:H	1:A:112:LEU:HD21	6	0.01
(1,528)	1:A:105:ASP:H	1:A:112:LEU:HD22	6	0.01
(1,528)	1:A:105:ASP:H	1:A:112:LEU:HD23	6	0.01
(1,518)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD11	8	0.01
(1,518)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD12	8	0.01
(1,518)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD13	8	0.01
(1,505)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:76:GLU:H	20	0.01
(1,505)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:76:GLU:H	20	0.01
(1,505)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:76:GLU:H	20	0.01
(1,503)	1:A:76:GLU:H	1:A:99:LEU:HD21	1	0.01
(1,503)	1:A:76:GLU:H	1:A:99:LEU:HD22	1	0.01
(1,503)	1:A:76:GLU:H	1:A:99:LEU:HD23	1	0.01
(1,501)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG21	5	0.01
(1,501)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG22	5	0.01
(1,501)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG23	5	0.01
(1,500)	1:A:73:GLU:H	1:A:75:VAL:HG21	7	0.01
(1,500)	1:A:73:GLU:H	1:A:75:VAL:HG22	7	0.01
(1,500)	1:A:73:GLU:H	1:A:75:VAL:HG23	7	0.01
(1,49)	1:A:78:LYS:H	1:A:90:VAL:HG11	11	0.01
(1,49)	1:A:78:LYS:H	1:A:90:VAL:HG12	11	0.01
(1,49)	1:A:78:LYS:H	1:A:90:VAL:HG13	11	0.01
(1,488)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:51:LEU:H	7	0.01
(1,488)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:51:LEU:H	7	0.01
(1,488)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:51:LEU:H	7	0.01
(1,488)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:51:LEU:H	8	0.01
(1,488)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:51:LEU:H	8	0.01
(1,488)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:51:LEU:H	8	0.01



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,48)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:88:THR:H	9	0.01
(1,48)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:88:THR:H	9	0.01
(1,48)	1:A:79:LEU:HD13	1:A:88:THR:H	9	0.01
(1,472)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:42:TYR:H	15	0.01
(1,472)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:42:TYR:H	15	0.01
(1,472)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:42:TYR:H	15	0.01
(1,47)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:115:CYS:H	18	0.01
(1,47)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:115:CYS:H	18	0.01
(1,47)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:115:CYS:H	18	0.01
(1,469)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:24:GLY:H	10	0.01
(1,469)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:24:GLY:H	10	0.01
(1,469)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:24:GLY:H	10	0.01
(1,463)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:16:GLN:H	3	0.01
(1,463)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:16:GLN:H	3	0.01
(1,463)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:16:GLN:H	3	0.01
(1,462)	1:A:45:ILE:HD11	1:A:46:VAL:H	7	0.01
(1,462)	1:A:45:ILE:HD12	1:A:46:VAL:H	7	0.01
(1,462)	1:A:45:ILE:HD13	1:A:46:VAL:H	7	0.01
(1,459)	1:A:12:LEU:H	1:A:12:LEU:HD11	9	0.01
(1,459)	1:A:12:LEU:H	1:A:12:LEU:HD12	9	0.01
(1,459)	1:A:12:LEU:H	1:A:12:LEU:HD13	9	0.01
(1,458)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:10:LYS:H	13	0.01
(1,458)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:10:LYS:H	13	0.01
(1,458)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:10:LYS:H	13	0.01
(1,456)	1:A:9:ILE:H	1:A:12:LEU:HD21	18	0.01
(1,456)	1:A:9:ILE:H	1:A:12:LEU:HD22	18	0.01
(1,456)	1:A:9:ILE:H	1:A:12:LEU:HD23	18	0.01
(1,455)	1:A:8:LYS:H	1:A:9:ILE:HD11	15	0.01
(1,455)	1:A:8:LYS:H	1:A:9:ILE:HD12	15	0.01
(1,455)	1:A:8:LYS:H	1:A:9:ILE:HD13	15	0.01
(1,455)	1:A:8:LYS:H	1:A:9:ILE:HD11	17	0.01
(1,455)	1:A:8:LYS:H	1:A:9:ILE:HD12	17	0.01
(1,455)	1:A:8:LYS:H	1:A:9:ILE:HD13	17	0.01
(1,453)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG21	13	0.01
(1,453)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG22	13	0.01
(1,453)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG23	13	0.01
(1,452)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG21	19	0.01
(1,452)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG22	19	0.01
(1,452)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG23	19	0.01
(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD11	17	0.01
(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD12	17	0.01
(1,45)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD13	17	0.01



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,448)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:89:GLU:H	1	0.01
(1,448)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:89:GLU:H	1	0.01
(1,448)	1:A:79:LEU:HD13	1:A:89:GLU:H	1	0.01
(1,447)	1:A:41:LEU:H	1:A:124:VAL:HG21	18	0.01
(1,447)	1:A:41:LEU:H	1:A:124:VAL:HG22	18	0.01
(1,447)	1:A:41:LEU:H	1:A:124:VAL:HG23	18	0.01
(1,442)	1:A:71:ILE:H	1:A:75:VAL:HG11	11	0.01
(1,442)	1:A:71:ILE:H	1:A:75:VAL:HG12	11	0.01
(1,442)	1:A:71:ILE:H	1:A:75:VAL:HG13	11	0.01
(1,440)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:100:GLY:H	8	0.01
(1,440)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:100:GLY:H	8	0.01
(1,440)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:100:GLY:H	8	0.01
(1,440)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:100:GLY:H	12	0.01
(1,440)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:100:GLY:H	12	0.01
(1,440)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:100:GLY:H	12	0.01
(1,44)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:48:GLY:H	2	0.01
(1,44)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:48:GLY:H	2	0.01
(1,44)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:48:GLY:H	2	0.01
(1,430)	1:A:46:VAL:HG11	1:A:47:SER:H	10	0.01
(1,430)	1:A:46:VAL:HG12	1:A:47:SER:H	10	0.01
(1,430)	1:A:46:VAL:HG13	1:A:47:SER:H	10	0.01
(1,421)	1:A:43:VAL:H	1:A:43:VAL:HG11	13	0.01
(1,421)	1:A:43:VAL:H	1:A:43:VAL:HG12	13	0.01
(1,421)	1:A:43:VAL:H	1:A:43:VAL:HG13	13	0.01
(1,420)	1:A:19:VAL:H	1:A:19:VAL:HG11	3	0.01
(1,420)	1:A:19:VAL:H	1:A:19:VAL:HG12	3	0.01
(1,420)	1:A:19:VAL:H	1:A:19:VAL:HG13	3	0.01
(1,420)	1:A:19:VAL:H	1:A:19:VAL:HG11	5	0.01
(1,420)	1:A:19:VAL:H	1:A:19:VAL:HG12	5	0.01
(1,420)	1:A:19:VAL:H	1:A:19:VAL:HG13	5	0.01
(1,420)	1:A:19:VAL:H	1:A:19:VAL:HG11	18	0.01
(1,420)	1:A:19:VAL:H	1:A:19:VAL:HG12	18	0.01
(1,420)	1:A:19:VAL:H	1:A:19:VAL:HG13	18	0.01
(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD21	17	0.01
(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD22	17	0.01
(1,415)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD23	17	0.01
(1,413)	1:A:51:LEU:HD11	1:A:121:LEU:HD11	20	0.01
(1,413)	1:A:51:LEU:HD11	1:A:121:LEU:HD12	20	0.01
(1,413)	1:A:51:LEU:HD11	1:A:121:LEU:HD13	20	0.01
(1,413)	1:A:51:LEU:HD12	1:A:121:LEU:HD11	20	0.01
(1,413)	1:A:51:LEU:HD12	1:A:121:LEU:HD12	20	0.01
(1,413)	1:A:51:LEU:HD12	1:A:121:LEU:HD13	20	0.01



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,413)	1:A:51:LEU:HD13	1:A:121:LEU:HD11	20	0.01
(1,413)	1:A:51:LEU:HD13	1:A:121:LEU:HD12	20	0.01
(1,413)	1:A:51:LEU:HD13	1:A:121:LEU:HD13	20	0.01
(1,412)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:138:LEU:HD21	5	0.01
(1,412)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:138:LEU:HD22	5	0.01
(1,412)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:138:LEU:HD23	5	0.01
(1,412)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:138:LEU:HD21	5	0.01
(1,412)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:138:LEU:HD22	5	0.01
(1,412)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:138:LEU:HD23	5	0.01
(1,412)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:138:LEU:HD21	5	0.01
(1,412)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:138:LEU:HD22	5	0.01
(1,412)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:138:LEU:HD23	5	0.01
(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD21	4	0.01
(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD22	4	0.01
(1,411)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD23	4	0.01
(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD21	4	0.01
(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD22	4	0.01
(1,411)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD23	4	0.01
(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD21	4	0.01
(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD22	4	0.01
(1,411)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD23	4	0.01
(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD11	10	0.01
(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD12	10	0.01
(1,408)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD13	10	0.01
(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD11	10	0.01
(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD12	10	0.01
(1,408)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD13	10	0.01
(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD11	10	0.01
(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD12	10	0.01
(1,408)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD13	10	0.01
(1,407)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:46:VAL:HG21	20	0.01
(1,407)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:46:VAL:HG22	20	0.01
(1,407)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:46:VAL:HG23	20	0.01
(1,407)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:46:VAL:HG21	20	0.01
(1,407)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:46:VAL:HG22	20	0.01
(1,407)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:46:VAL:HG23	20	0.01
(1,407)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:46:VAL:HG21	20	0.01
(1,407)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:46:VAL:HG22	20	0.01
(1,407)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:46:VAL:HG23	20	0.01
(1,398)	1:A:12:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HG21	20	0.01
(1,398)	1:A:12:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HG22	20	0.01
(1,398)	1:A:12:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HG23	20	0.01



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,398)	1:A:12:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HG21	20	0.01
(1,398)	1:A:12:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HG22	20	0.01
(1,398)	1:A:12:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HG23	20	0.01
(1,398)	1:A:12:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HG21	20	0.01
(1,398)	1:A:12:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HG22	20	0.01
(1,398)	1:A:12:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HG23	20	0.01
(1,387)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:90:VAL:HG21	7	0.01
(1,387)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:90:VAL:HG22	7	0.01
(1,387)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:90:VAL:HG23	7	0.01
(1,387)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:90:VAL:HG21	7	0.01
(1,387)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:90:VAL:HG22	7	0.01
(1,387)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:90:VAL:HG23	7	0.01
(1,387)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG21	7	0.01
(1,387)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG22	7	0.01
(1,387)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG23	7	0.01
(1,377)	1:A:134:TYR:H	1:A:135:GLU:H	19	0.01
(1,374)	1:A:132:GLU:H	1:A:134:TYR:H	5	0.01
(1,365)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:H	1	0.01
(1,365)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:H	10	0.01
(1,357)	1:A:119:ALA:H	1:A:121:LEU:H	2	0.01
(1,357)	1:A:119:ALA:H	1:A:121:LEU:H	16	0.01
(1,355)	1:A:67:PHE:H	1:A:114:TYR:H	5	0.01
(1,353)	1:A:104:ASN:H	1:A:106:GLY:H	7	0.01
(1,341)	1:A:99:LEU:H	1:A:100:GLY:H	1	0.01
(1,341)	1:A:99:LEU:H	1:A:100:GLY:H	9	0.01
(1,339)	1:A:92:SER:H	1:A:98:HIS:H	12	0.01
(1,337)	1:A:76:GLU:H	1:A:91:ARG:H	14	0.01
(1,335)	1:A:90:VAL:H	1:A:100:GLY:H	19	0.01
(1,334)	1:A:89:GLU:H	1:A:90:VAL:H	10	0.01
(1,331)	1:A:80:ASP:H	1:A:88:THR:H	12	0.01
(1,331)	1:A:80:ASP:H	1:A:88:THR:H	20	0.01
(1,327)	1:A:78:LYS:H	1:A:89:GLU:H	6	0.01
(1,327)	1:A:78:LYS:H	1:A:89:GLU:H	10	0.01
(1,31)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:49:LYS:H	5	0.01
(1,31)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:49:LYS:H	5	0.01
(1,31)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:49:LYS:H	5	0.01
(1,308)	1:A:30:GLN:H	1:A:34:TRP:HE1	16	0.01
(1,305)	1:A:25:THR:H	1:A:26:GLU:H	19	0.01
(1,303)	1:A:18:GLU:H	1:A:20:THR:H	4	0.01
(1,30)	1:A:106:GLY:H	1:A:112:LEU:HD21	16	0.01
(1,30)	1:A:106:GLY:H	1:A:112:LEU:HD22	16	0.01
(1,30)	1:A:106:GLY:H	1:A:112:LEU:HD23	16	0.01



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

(1,299)         1:A:15:MET:H         1:A:18:GLU:H         4         0.01           (1,299)         1:A:15:MET:H         1:A:18:GLU:H         9         0.01           (1,298)         1:A:14:ARG:H         1:A:17:TYR:H         17         0.01           (1,285)         1:A:44:ASP:H         1:A:46:VAL:H         3         0.01           (1,267)         1:A:21:GLN:H         1:A:22:GLY:H         4         0.01           (1,256)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:51:LEU:HD11         7         0.01           (1,256)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:51:LEU:HD13         7         0.01           (1,256)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:51:LEU:HD11         7         0.01           (1,256)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:51:LEU:HD12         7         0.01           (1,256)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:51:LEU:HD13         7         0.01           (1,256)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD11         7         0.01           (1,256)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD12         7         0.01           (1,256)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD13         7         0.01           (1,256)         1:A:19:VAL:HG21         1:A:51:LEU:HD13 <t< th=""><th>Key</th><th>Atom-1</th><th>Atom-2</th><th>Model</th><th>Violation (Å)</th></t<>	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,298)         1:A:14:ARG:H         1:A:17:TYR:H         17         0.01           (1,285)         1:A:44:ASP:H         1:A:46:VAL:H         3         0.01           (1,267)         1:A:21:GLN:H         1:A:46:VAL:H         4         0.01           (1,256)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:51:LEU:HD12         7         0.01           (1,256)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:51:LEU:HD13         7         0.01           (1,256)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:51:LEU:HD13         7         0.01           (1,256)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:51:LEU:HD11         7         0.01           (1,256)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:51:LEU:HD13         7         0.01           (1,256)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:51:LEU:HD13         7         0.01           (1,256)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD13         7         0.01           (1,256)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD12         7         0.01           (1,256)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD13         7         0.01           (1,256)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD13         7         0.01           (1,256)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD13 <td>(1,299)</td> <td>1:A:15:MET:H</td> <td>1:A:18:GLU:H</td> <td>4</td> <td>0.01</td>	(1,299)	1:A:15:MET:H	1:A:18:GLU:H	4	0.01
(1,285)         1:A:44:ASP:H         1:A:46:VAL:H         3         0.01           (1,267)         1:A:21:GLN:H         1:A:24:GLY:H         4         0.01           (1,256)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:51:LEU:HD11         7         0.01           (1,256)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:51:LEU:HD13         7         0.01           (1,256)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:51:LEU:HD11         7         0.01           (1,256)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:51:LEU:HD11         7         0.01           (1,256)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:51:LEU:HD12         7         0.01           (1,256)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:51:LEU:HD13         7         0.01           (1,256)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD11         7         0.01           (1,256)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD12         7         0.01           (1,256)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD13         7         0.01           (1,256)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD13         7         0.01           (1,250)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD13         7         0.01           (1,250)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:25:THR:H </td <td>(1,299)</td> <td>1:A:15:MET:H</td> <td>1:A:18:GLU:H</td> <td>9</td> <td>0.01</td>	(1,299)	1:A:15:MET:H	1:A:18:GLU:H	9	0.01
(1,267)         1:A:21:GLN:H         1:A:24:GLY:H         4         0.01           (1,256)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:51:LEU:HD11         7         0.01           (1,256)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:51:LEU:HD12         7         0.01           (1,256)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:51:LEU:HD13         7         0.01           (1,256)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:51:LEU:HD11         7         0.01           (1,256)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:51:LEU:HD13         7         0.01           (1,256)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD13         7         0.01           (1,256)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD11         7         0.01           (1,256)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD13         7         0.01           (1,256)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD13         7         0.01           (1,256)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD13         7         0.01           (1,250)         1:A:19:VAL:HG21         1:A:25:THR:H         1         0.01           (1,250)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:25:THR:H         1         0.01           (1,250)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:25:THR:H </td <td>(1,298)</td> <td>1:A:14:ARG:H</td> <td>1:A:17:TYR:H</td> <td>17</td> <td>0.01</td>	(1,298)	1:A:14:ARG:H	1:A:17:TYR:H	17	0.01
(1,256)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:51:LEU:HD11         7         0.01           (1,256)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:51:LEU:HD12         7         0.01           (1,256)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:51:LEU:HD13         7         0.01           (1,256)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:51:LEU:HD11         7         0.01           (1,256)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:51:LEU:HD12         7         0.01           (1,256)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD13         7         0.01           (1,256)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD11         7         0.01           (1,256)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD13         7         0.01           (1,256)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD13         7         0.01           (1,256)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD13         7         0.01           (1,250)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD13         7         0.01           (1,250)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:25:THR:H         1         0.01           (1,248)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:29:THR:H         1         0.01           (1,248)         1:A:120:ALA:H         1:A:121:LE	(1,285)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:H	3	0.01
(1,256)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:51:LEU:HD12         7         0.01           (1,256)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:51:LEU:HD13         7         0.01           (1,256)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:51:LEU:HD11         7         0.01           (1,256)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:51:LEU:HD12         7         0.01           (1,256)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD11         7         0.01           (1,256)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD12         7         0.01           (1,256)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD12         7         0.01           (1,256)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD12         7         0.01           (1,256)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD13         7         0.01           (1,256)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD13         7         0.01           (1,250)         1:A:19:VAL:HG21         1:A:25:THR:H         1         0.01           (1,250)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:25:THR:H         1         0.01           (1,248)         1:A:120:ALA:H         1:A:121:LEU:HD11         13         0.01           (1,248)         1:A:120:ALA:H         1:A:121:LE	(1,267)	1:A:21:GLN:H	1:A:24:GLY:H	4	0.01
(1,256)         1:A:46:VAL:HG21         1:A:51:LEU:HD13         7         0.01           (1,256)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:51:LEU:HD11         7         0.01           (1,256)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:51:LEU:HD12         7         0.01           (1,256)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD13         7         0.01           (1,256)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD11         7         0.01           (1,256)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD12         7         0.01           (1,256)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD13         7         0.01           (1,250)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:52:THR:H         1         0.01           (1,250)         1:A:19:VAL:HG21         1:A:25:THR:H         1         0.01           (1,250)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:25:THR:H         1         0.01           (1,250)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:25:THR:H         1         0.01           (1,250)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:25:THR:H         1         0.01           (1,248)         1:A:12:CALA:H         1:A:121:LEU:HD11         13         0.01           (1,248)         1:A:12:CALA:H         1:A:121:LEU:HD13 <td>(1,256)</td> <td>1:A:46:VAL:HG21</td> <td>1:A:51:LEU:HD11</td> <td>7</td> <td>0.01</td>	(1,256)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD11	7	0.01
(1,256)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:51:LEU:HD11         7         0.01           (1,256)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:51:LEU:HD12         7         0.01           (1,256)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:51:LEU:HD13         7         0.01           (1,256)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD11         7         0.01           (1,256)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD12         7         0.01           (1,256)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD13         7         0.01           (1,250)         1:A:19:VAL:HG21         1:A:25:THR:H         1         0.01           (1,250)         1:A:19:VAL:HG22         1:A:25:THR:H         1         0.01           (1,250)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:25:THR:H         1         0.01           (1,248)         1:A:120:ALA:H         1:A:211:LEU:HD11         13         0.01           (1,248)         1:A:120:ALA:H         1:A:121:LEU:HD13	(1,256)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD12	7	0.01
(1,256)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:51:LEU:HD12         7         0.01           (1,256)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:51:LEU:HD13         7         0.01           (1,256)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD11         7         0.01           (1,256)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD12         7         0.01           (1,256)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD13         7         0.01           (1,250)         1:A:19:VAL:HG21         1:A:25:THR:H         1         0.01           (1,250)         1:A:19:VAL:HG22         1:A:25:THR:H         1         0.01           (1,250)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:25:THR:H         1         0.01           (1,250)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:25:THR:H         1         0.01           (1,248)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:25:THR:H         1         0.01           (1,248)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:29:LEU:HD11         13         0.01           (1,248)         1:A:120:ALA:H         1:A:121:LEU:HD13         13         0.01           (1,248)         1:A:75:VAL:H         1:A:99:LEU:HD13         13         0.01           (1,240)         1:A:75:VAL:H         1:A:99:LEU:HD13	(1,256)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD13	7	0.01
(1,256)         1:A:46:VAL:HG22         1:A:51:LEU:HD13         7         0.01           (1,256)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD11         7         0.01           (1,256)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD12         7         0.01           (1,256)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD13         7         0.01           (1,250)         1:A:19:VAL:HG21         1:A:25:THR:H         1         0.01           (1,250)         1:A:19:VAL:HG22         1:A:25:THR:H         1         0.01           (1,250)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:25:THR:H         1         0.01           (1,250)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:25:THR:H         1         0.01           (1,248)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:25:THR:H         1         0.01           (1,248)         1:A:120:ALA:H         1:A:121:LEU:HD11         13         0.01           (1,248)         1:A:120:ALA:H         1:A:121:LEU:HD13         13         0.01           (1,248)         1:A:75:VAL:H         1:A:99:LEU:HD13         13         0.01           (1,240)         1:A:75:VAL:H         1:A:99:LEU:HD13         16         0.01           (1,239)         1:A:51:LEU:HD11         1:A:99:LEU:HD21	(1,256)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD11	7	0.01
(1,256)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD11         7         0.01           (1,256)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD12         7         0.01           (1,256)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD13         7         0.01           (1,250)         1:A:19:VAL:HG21         1:A:25:THR:H         1         0.01           (1,250)         1:A:19:VAL:HG22         1:A:25:THR:H         1         0.01           (1,250)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:25:THR:H         1         0.01           (1,248)         1:A:120:ALA:H         1:A:121:LEU:HD11         13         0.01           (1,248)         1:A:120:ALA:H         1:A:121:LEU:HD12         13         0.01           (1,248)         1:A:75:VAL:H         1:A:99:LEU:HD13         13         0.01           (1,240)         1:A:75:VAL:H         1:A:99:LEU:HD11         16         0.01           (1,240)         1:A:75:VAL:H         1:A:99:LEU:HD12         16         0.01           (1,239)         1:A:51:LEU:HD11         1:A:99:LEU:HD21         9         0.01           (1,239)         1:A:51:LEU:HD11         1:A:99:LEU:HD23         9         0.01           (1,239)         1:A:51:LEU:HD12         1:A:99:LEU:HD23 </td <td>(1,256)</td> <td>1:A:46:VAL:HG22</td> <td>1:A:51:LEU:HD12</td> <td>7</td> <td>0.01</td>	(1,256)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD12	7	0.01
(1,256)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD12         7         0.01           (1,256)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD13         7         0.01           (1,250)         1:A:19:VAL:HG21         1:A:25:THR:H         1         0.01           (1,250)         1:A:19:VAL:HG22         1:A:25:THR:H         1         0.01           (1,250)         1:A:120:ALA:H         1:A:25:THR:H         1         0.01           (1,248)         1:A:120:ALA:H         1:A:121:LEU:HD11         13         0.01           (1,248)         1:A:120:ALA:H         1:A:121:LEU:HD12         13         0.01           (1,248)         1:A:75:VAL:H         1:A:99:LEU:HD13         13         0.01           (1,240)         1:A:75:VAL:H         1:A:99:LEU:HD11         16         0.01           (1,240)         1:A:75:VAL:H         1:A:99:LEU:HD12         16         0.01           (1,239)         1:A:51:LEU:HD11         1:A:99:LEU:HD21         9         0.01           (1,239)         1:A:51:LEU:HD11         1:A:99:LEU:HD22         9         0.01           (1,239)         1:A:51:LEU:HD12         1:A:99:LEU:HD23         9         0.01           (1,239)         1:A:51:LEU:HD13         1:A:99:LEU:HD23 <td>(1,256)</td> <td>1:A:46:VAL:HG22</td> <td>1:A:51:LEU:HD13</td> <td>7</td> <td>0.01</td>	(1,256)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:51:LEU:HD13	7	0.01
(1,256)         1:A:46:VAL:HG23         1:A:51:LEU:HD13         7         0.01           (1,250)         1:A:19:VAL:HG21         1:A:25:THR:H         1         0.01           (1,250)         1:A:19:VAL:HG22         1:A:25:THR:H         1         0.01           (1,250)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:25:THR:H         1         0.01           (1,248)         1:A:120:ALA:H         1:A:121:LEU:HD11         13         0.01           (1,248)         1:A:120:ALA:H         1:A:121:LEU:HD12         13         0.01           (1,248)         1:A:120:ALA:H         1:A:121:LEU:HD13         13         0.01           (1,248)         1:A:75:VAL:H         1:A:99:LEU:HD13         16         0.01           (1,240)         1:A:75:VAL:H         1:A:99:LEU:HD12         16         0.01           (1,240)         1:A:75:VAL:H         1:A:99:LEU:HD13         16         0.01           (1,239)         1:A:51:LEU:HD11         1:A:99:LEU:HD21         9         0.01           (1,239)         1:A:51:LEU:HD11         1:A:99:LEU:HD22         9         0.01           (1,239)         1:A:51:LEU:HD12         1:A:99:LEU:HD23         9         0.01           (1,239)         1:A:51:LEU:HD13         1:A:99:LEU:HD22 </td <td>(1,256)</td> <td>1:A:46:VAL:HG23</td> <td>1:A:51:LEU:HD11</td> <td>7</td> <td>0.01</td>	(1,256)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD11	7	0.01
(1,250)         1:A:19:VAL:HG21         1:A:25:THR:H         1         0.01           (1,250)         1:A:19:VAL:HG22         1:A:25:THR:H         1         0.01           (1,250)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:25:THR:H         1         0.01           (1,248)         1:A:120:ALA:H         1:A:121:LEU:HD11         13         0.01           (1,248)         1:A:120:ALA:H         1:A:121:LEU:HD12         13         0.01           (1,248)         1:A:120:ALA:H         1:A:121:LEU:HD13         13         0.01           (1,240)         1:A:75:VAL:H         1:A:99:LEU:HD13         16         0.01           (1,240)         1:A:75:VAL:H         1:A:99:LEU:HD13         16         0.01           (1,239)         1:A:51:LEU:HD11         1:A:99:LEU:HD21         9         0.01           (1,239)         1:A:51:LEU:HD11         1:A:99:LEU:HD22         9         0.01           (1,239)         1:A:51:LEU:HD12         1:A:99:LEU:HD23	(1,256)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD12	7	0.01
(1,250)         1:A:19:VAL:HG22         1:A:25:THR:H         1         0.01           (1,250)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:25:THR:H         1         0.01           (1,248)         1:A:120:ALA:H         1:A:121:LEU:HD11         13         0.01           (1,248)         1:A:120:ALA:H         1:A:121:LEU:HD12         13         0.01           (1,248)         1:A:120:ALA:H         1:A:121:LEU:HD13         13         0.01           (1,248)         1:A:75:VAL:H         1:A:99:LEU:HD11         16         0.01           (1,240)         1:A:75:VAL:H         1:A:99:LEU:HD12         16         0.01           (1,240)         1:A:75:VAL:H         1:A:99:LEU:HD13         16         0.01           (1,239)         1:A:51:LEU:HD11         1:A:99:LEU:HD21         9         0.01           (1,239)         1:A:51:LEU:HD11         1:A:99:LEU:HD23         9         0.01           (1,239)         1:A:51:LEU:HD12         1:A:99:LEU:HD23         9         0.01           (1,239)         1:A:51:LEU:HD12         1:A:99:LEU:HD23         9         0.01           (1,239)         1:A:51:LEU:HD13         1:A:99:LEU:HD23         9         0.01           (1,239)         1:A:51:LEU:HD13         1:A:99:LEU:HD2	(1,256)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:51:LEU:HD13	7	0.01
(1,250)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:25:THR:H         1         0.01           (1,248)         1:A:120:ALA:H         1:A:121:LEU:HD11         13         0.01           (1,248)         1:A:120:ALA:H         1:A:121:LEU:HD12         13         0.01           (1,248)         1:A:120:ALA:H         1:A:121:LEU:HD13         13         0.01           (1,240)         1:A:75:VAL:H         1:A:99:LEU:HD11         16         0.01           (1,240)         1:A:75:VAL:H         1:A:99:LEU:HD12         16         0.01           (1,239)         1:A:51:LEU:HD11         1:A:99:LEU:HD21         9         0.01           (1,239)         1:A:51:LEU:HD11         1:A:99:LEU:HD22         9         0.01           (1,239)         1:A:51:LEU:HD11         1:A:99:LEU:HD23         9         0.01           (1,239)         1:A:51:LEU:HD12         1:A:99:LEU:HD23         9         0.01           (1,239)         1:A:51:LEU:HD12         1:A:99:LEU:HD22         9         0.01           (1,239)         1:A:51:LEU:HD13         1:A:99:LEU:HD23         9         0.01           (1,239)         1:A:51:LEU:HD13         1:A:99:LEU:HD23         9         0.01           (1,239)         1:A:51:LEU:HD13         1:A:99:LE	(1,250)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:25:THR:H	1	0.01
(1,250)         1:A:19:VAL:HG23         1:A:25:THR:H         1         0.01           (1,248)         1:A:120:ALA:H         1:A:121:LEU:HD11         13         0.01           (1,248)         1:A:120:ALA:H         1:A:121:LEU:HD12         13         0.01           (1,248)         1:A:120:ALA:H         1:A:121:LEU:HD13         13         0.01           (1,248)         1:A:75:VAL:H         1:A:99:LEU:HD11         16         0.01           (1,240)         1:A:75:VAL:H         1:A:99:LEU:HD12         16         0.01           (1,240)         1:A:75:VAL:H         1:A:99:LEU:HD13         16         0.01           (1,239)         1:A:51:LEU:HD11         1:A:99:LEU:HD21         9         0.01           (1,239)         1:A:51:LEU:HD11         1:A:99:LEU:HD22         9         0.01           (1,239)         1:A:51:LEU:HD12         1:A:99:LEU:HD23         9         0.01           (1,239)         1:A:51:LEU:HD12         1:A:99:LEU:HD22         9         0.01           (1,239)         1:A:51:LEU:HD13         1:A:99:LEU:HD23         9         0.01           (1,239)         1:A:51:LEU:HD13         1:A:99:LEU:HD23         9         0.01           (1,239)         1:A:51:LEU:HD13         1:A:99:LEU:	/	1:A:19:VAL:HG22	1:A:25:THR:H	1	0.01
(1,248)         1:A:120:ALA:H         1:A:121:LEU:HD11         13         0.01           (1,248)         1:A:120:ALA:H         1:A:121:LEU:HD12         13         0.01           (1,248)         1:A:120:ALA:H         1:A:121:LEU:HD13         13         0.01           (1,240)         1:A:75:VAL:H         1:A:99:LEU:HD11         16         0.01           (1,240)         1:A:75:VAL:H         1:A:99:LEU:HD12         16         0.01           (1,240)         1:A:75:VAL:H         1:A:99:LEU:HD13         16         0.01           (1,239)         1:A:51:LEU:HD11         1:A:99:LEU:HD21         9         0.01           (1,239)         1:A:51:LEU:HD11         1:A:99:LEU:HD22         9         0.01           (1,239)         1:A:51:LEU:HD12         1:A:99:LEU:HD23         9         0.01           (1,239)         1:A:51:LEU:HD12         1:A:99:LEU:HD22         9         0.01           (1,239)         1:A:51:LEU:HD12         1:A:99:LEU:HD23         9         0.01           (1,239)         1:A:51:LEU:HD13         1:A:99:LEU:HD23         9         0.01           (1,239)         1:A:51:LEU:HD13         1:A:99:LEU:HD23         9         0.01           (1,239)         1:A:51:LEU:HD13         1:A:99:L	/	1:A:19:VAL:HG23	1:A:25:THR:H	1	0.01
(1,248)         1:A:120:ALA:H         1:A:121:LEU:HD12         13         0.01           (1,248)         1:A:120:ALA:H         1:A:121:LEU:HD13         13         0.01           (1,240)         1:A:75:VAL:H         1:A:99:LEU:HD11         16         0.01           (1,240)         1:A:75:VAL:H         1:A:99:LEU:HD12         16         0.01           (1,240)         1:A:75:VAL:H         1:A:99:LEU:HD13         16         0.01           (1,239)         1:A:51:LEU:HD11         1:A:99:LEU:HD21         9         0.01           (1,239)         1:A:51:LEU:HD11         1:A:99:LEU:HD22         9         0.01           (1,239)         1:A:51:LEU:HD11         1:A:99:LEU:HD23         9         0.01           (1,239)         1:A:51:LEU:HD12         1:A:99:LEU:HD22         9         0.01           (1,239)         1:A:51:LEU:HD12         1:A:99:LEU:HD23         9         0.01           (1,239)         1:A:51:LEU:HD13         1:A:99:LEU:HD21         9         0.01           (1,239)         1:A:51:LEU:HD13         1:A:99:LEU:HD22         9         0.01           (1,239)         1:A:51:LEU:HD13         1:A:99:LEU:HD23         9         0.01           (1,236)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:140:	· · /	1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD11	13	
(1,248)         1:A:120:ALA:H         1:A:121:LEU:HD13         13         0.01           (1,240)         1:A:75:VAL:H         1:A:99:LEU:HD11         16         0.01           (1,240)         1:A:75:VAL:H         1:A:99:LEU:HD12         16         0.01           (1,240)         1:A:75:VAL:H         1:A:99:LEU:HD13         16         0.01           (1,239)         1:A:51:LEU:HD11         1:A:99:LEU:HD21         9         0.01           (1,239)         1:A:51:LEU:HD11         1:A:99:LEU:HD22         9         0.01           (1,239)         1:A:51:LEU:HD12         1:A:99:LEU:HD23         9         0.01           (1,239)         1:A:51:LEU:HD12         1:A:99:LEU:HD22         9         0.01           (1,239)         1:A:51:LEU:HD12         1:A:99:LEU:HD23         9         0.01           (1,239)         1:A:51:LEU:HD13         1:A:99:LEU:HD23         9         0.01           (1,239)         1:A:51:LEU:HD13         1:A:99:LEU:HD23         9         0.01           (1,239)         1:A:51:LEU:HD13         1:A:99:LEU:HD23         9         0.01           (1,236)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:140:LEU:HD11         4         0.01           (1,236)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:140		1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD12	13	0.01
(1,240)         1:A:75:VAL:H         1:A:99:LEU:HD11         16         0.01           (1,240)         1:A:75:VAL:H         1:A:99:LEU:HD12         16         0.01           (1,240)         1:A:75:VAL:H         1:A:99:LEU:HD13         16         0.01           (1,239)         1:A:51:LEU:HD11         1:A:99:LEU:HD21         9         0.01           (1,239)         1:A:51:LEU:HD11         1:A:99:LEU:HD22         9         0.01           (1,239)         1:A:51:LEU:HD11         1:A:99:LEU:HD23         9         0.01           (1,239)         1:A:51:LEU:HD12         1:A:99:LEU:HD22         9         0.01           (1,239)         1:A:51:LEU:HD12         1:A:99:LEU:HD23         9         0.01           (1,239)         1:A:51:LEU:HD13         1:A:99:LEU:HD23         9         0.01           (1,239)         1:A:51:LEU:HD13         1:A:99:LEU:HD21         9         0.01           (1,239)         1:A:51:LEU:HD13         1:A:99:LEU:HD22         9         0.01           (1,236)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:410:LEU:HD11         4         0.01           (1,236)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:140:LEU:HD13         4         0.01           (1,236)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:14		1:A:120:ALA:H	1:A:121:LEU:HD13	13	0.01
(1,240)         1:A:75:VAL:H         1:A:99:LEU:HD12         16         0.01           (1,240)         1:A:75:VAL:H         1:A:99:LEU:HD13         16         0.01           (1,239)         1:A:51:LEU:HD11         1:A:99:LEU:HD21         9         0.01           (1,239)         1:A:51:LEU:HD11         1:A:99:LEU:HD22         9         0.01           (1,239)         1:A:51:LEU:HD12         1:A:99:LEU:HD21         9         0.01           (1,239)         1:A:51:LEU:HD12         1:A:99:LEU:HD22         9         0.01           (1,239)         1:A:51:LEU:HD12         1:A:99:LEU:HD23         9         0.01           (1,239)         1:A:51:LEU:HD13         1:A:99:LEU:HD21         9         0.01           (1,239)         1:A:51:LEU:HD13         1:A:99:LEU:HD22         9         0.01           (1,239)         1:A:51:LEU:HD13         1:A:99:LEU:HD22         9         0.01           (1,236)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:140:LEU:HD11         4         0.01           (1,236)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:140:LEU:HD13         4         0.01           (1,236)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:140:LEU:HD11         4         0.01           (1,236)         1:A:41:LEU:HD12         1:A	, , ,	1:A:75:VAL:H	1:A:99:LEU:HD11	16	0.01
(1,240)         1:A:75:VAL:H         1:A:99:LEU:HD13         16         0.01           (1,239)         1:A:51:LEU:HD11         1:A:99:LEU:HD21         9         0.01           (1,239)         1:A:51:LEU:HD11         1:A:99:LEU:HD22         9         0.01           (1,239)         1:A:51:LEU:HD11         1:A:99:LEU:HD23         9         0.01           (1,239)         1:A:51:LEU:HD12         1:A:99:LEU:HD22         9         0.01           (1,239)         1:A:51:LEU:HD12         1:A:99:LEU:HD23         9         0.01           (1,239)         1:A:51:LEU:HD13         1:A:99:LEU:HD21         9         0.01           (1,239)         1:A:51:LEU:HD13         1:A:99:LEU:HD22         9         0.01           (1,239)         1:A:51:LEU:HD13         1:A:99:LEU:HD22         9         0.01           (1,239)         1:A:45:LEU:HD13         1:A:99:LEU:HD23         9         0.01           (1,236)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:140:LEU:HD11         4         0.01           (1,236)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:140:LEU:HD13         4         0.01           (1,236)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:140:LEU:HD11         4         0.01           (1,236)         1:A:41:LEU:HD12         1	(1,240)	1:A:75:VAL:H	1:A:99:LEU:HD12	16	0.01
(1,239)         1:A:51:LEU:HD11         1:A:99:LEU:HD22         9         0.01           (1,239)         1:A:51:LEU:HD11         1:A:99:LEU:HD23         9         0.01           (1,239)         1:A:51:LEU:HD12         1:A:99:LEU:HD21         9         0.01           (1,239)         1:A:51:LEU:HD12         1:A:99:LEU:HD22         9         0.01           (1,239)         1:A:51:LEU:HD12         1:A:99:LEU:HD23         9         0.01           (1,239)         1:A:51:LEU:HD13         1:A:99:LEU:HD22         9         0.01           (1,239)         1:A:51:LEU:HD13         1:A:99:LEU:HD22         9         0.01           (1,239)         1:A:51:LEU:HD13         1:A:99:LEU:HD23         9         0.01           (1,236)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:140:LEU:HD11         4         0.01           (1,236)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:140:LEU:HD13         4         0.01           (1,236)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:140:LEU:HD11         4         0.01           (1,236)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:140:LEU:HD12         4         0.01           (1,236)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:140:LEU:HD12         4         0.01	/	1:A:75:VAL:H	1:A:99:LEU:HD13	16	0.01
(1,239)         1:A:51:LEU:HD11         1:A:99:LEU:HD22         9         0.01           (1,239)         1:A:51:LEU:HD11         1:A:99:LEU:HD23         9         0.01           (1,239)         1:A:51:LEU:HD12         1:A:99:LEU:HD21         9         0.01           (1,239)         1:A:51:LEU:HD12         1:A:99:LEU:HD22         9         0.01           (1,239)         1:A:51:LEU:HD12         1:A:99:LEU:HD23         9         0.01           (1,239)         1:A:51:LEU:HD13         1:A:99:LEU:HD22         9         0.01           (1,239)         1:A:51:LEU:HD13         1:A:99:LEU:HD22         9         0.01           (1,239)         1:A:51:LEU:HD13         1:A:99:LEU:HD23         9         0.01           (1,236)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:140:LEU:HD11         4         0.01           (1,236)         1:A:41:LEU:HD11         1:A:140:LEU:HD13         4         0.01           (1,236)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:140:LEU:HD11         4         0.01           (1,236)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:140:LEU:HD12         4         0.01           (1,236)         1:A:41:LEU:HD12         1:A:140:LEU:HD12         4         0.01	( ' /	1:A:51:LEU:HD11	1:A:99:LEU:HD21	9	0.01
(1,239)       1:A:51:LEU:HD12       1:A:99:LEU:HD21       9       0.01         (1,239)       1:A:51:LEU:HD12       1:A:99:LEU:HD22       9       0.01         (1,239)       1:A:51:LEU:HD12       1:A:99:LEU:HD23       9       0.01         (1,239)       1:A:51:LEU:HD13       1:A:99:LEU:HD21       9       0.01         (1,239)       1:A:51:LEU:HD13       1:A:99:LEU:HD22       9       0.01         (1,239)       1:A:51:LEU:HD13       1:A:99:LEU:HD23       9       0.01         (1,236)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:140:LEU:HD11       4       0.01         (1,236)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:140:LEU:HD12       4       0.01         (1,236)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD11       4       0.01         (1,236)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD11       4       0.01         (1,236)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD12       4       0.01         (1,236)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD12       4       0.01	( ' /	1:A:51:LEU:HD11	1:A:99:LEU:HD22	9	0.01
(1,239)       1:A:51:LEU:HD12       1:A:99:LEU:HD21       9       0.01         (1,239)       1:A:51:LEU:HD12       1:A:99:LEU:HD22       9       0.01         (1,239)       1:A:51:LEU:HD12       1:A:99:LEU:HD23       9       0.01         (1,239)       1:A:51:LEU:HD13       1:A:99:LEU:HD21       9       0.01         (1,239)       1:A:51:LEU:HD13       1:A:99:LEU:HD22       9       0.01         (1,239)       1:A:51:LEU:HD13       1:A:99:LEU:HD23       9       0.01         (1,236)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:140:LEU:HD11       4       0.01         (1,236)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:140:LEU:HD12       4       0.01         (1,236)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD11       4       0.01         (1,236)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD11       4       0.01         (1,236)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD11       4       0.01         (1,236)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD12       4       0.01	( ' /	1:A:51:LEU:HD11	1:A:99:LEU:HD23	9	0.01
(1,239)       1:A:51:LEU:HD12       1:A:99:LEU:HD23       9       0.01         (1,239)       1:A:51:LEU:HD13       1:A:99:LEU:HD21       9       0.01         (1,239)       1:A:51:LEU:HD13       1:A:99:LEU:HD22       9       0.01         (1,239)       1:A:51:LEU:HD13       1:A:99:LEU:HD23       9       0.01         (1,236)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:140:LEU:HD11       4       0.01         (1,236)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:140:LEU:HD12       4       0.01         (1,236)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD13       4       0.01         (1,236)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD11       4       0.01         (1,236)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD12       4       0.01         (1,236)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD12       4       0.01	( ' /	1:A:51:LEU:HD12	1:A:99:LEU:HD21	9	0.01
(1,239)       1:A:51:LEU:HD12       1:A:99:LEU:HD23       9       0.01         (1,239)       1:A:51:LEU:HD13       1:A:99:LEU:HD21       9       0.01         (1,239)       1:A:51:LEU:HD13       1:A:99:LEU:HD22       9       0.01         (1,239)       1:A:51:LEU:HD13       1:A:99:LEU:HD23       9       0.01         (1,236)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:140:LEU:HD11       4       0.01         (1,236)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:140:LEU:HD12       4       0.01         (1,236)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD11       4       0.01         (1,236)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD11       4       0.01         (1,236)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD12       4       0.01	(1,239)	1:A:51:LEU:HD12	1:A:99:LEU:HD22	9	0.01
(1,239)       1:A:51:LEU:HD13       1:A:99:LEU:HD22       9       0.01         (1,239)       1:A:51:LEU:HD13       1:A:99:LEU:HD23       9       0.01         (1,236)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:140:LEU:HD11       4       0.01         (1,236)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:140:LEU:HD12       4       0.01         (1,236)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:140:LEU:HD13       4       0.01         (1,236)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD11       4       0.01         (1,236)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD12       4       0.01	· · /	1:A:51:LEU:HD12	1:A:99:LEU:HD23	9	0.01
(1,239)       1:A:51:LEU:HD13       1:A:99:LEU:HD22       9       0.01         (1,239)       1:A:51:LEU:HD13       1:A:99:LEU:HD23       9       0.01         (1,236)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:140:LEU:HD11       4       0.01         (1,236)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:140:LEU:HD12       4       0.01         (1,236)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:140:LEU:HD13       4       0.01         (1,236)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD11       4       0.01         (1,236)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD12       4       0.01	(1,239)	1:A:51:LEU:HD13	1:A:99:LEU:HD21	9	0.01
(1,236)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:140:LEU:HD11       4       0.01         (1,236)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:140:LEU:HD12       4       0.01         (1,236)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:140:LEU:HD13       4       0.01         (1,236)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD11       4       0.01         (1,236)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD12       4       0.01         (1,236)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD12       4       0.01		1:A:51:LEU:HD13	1:A:99:LEU:HD22	9	0.01
(1,236)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:140:LEU:HD11       4       0.01         (1,236)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:140:LEU:HD12       4       0.01         (1,236)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:140:LEU:HD13       4       0.01         (1,236)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD11       4       0.01         (1,236)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD12       4       0.01	(1,239)	1:A:51:LEU:HD13	1:A:99:LEU:HD23	9	0.01
(1,236)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:140:LEU:HD12       4       0.01         (1,236)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:140:LEU:HD13       4       0.01         (1,236)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD11       4       0.01         (1,236)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD12       4       0.01	, , ,	1:A:41:LEU:HD11	1:A:140:LEU:HD11	4	0.01
(1,236)       1:A:41:LEU:HD11       1:A:140:LEU:HD13       4       0.01         (1,236)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD11       4       0.01         (1,236)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD12       4       0.01	_ `	1:A:41:LEU:HD11	1:A:140:LEU:HD12	4	0.01
(1,236)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD11       4       0.01         (1,236)       1:A:41:LEU:HD12       1:A:140:LEU:HD12       4       0.01		1:A:41:LEU:HD11			
(1,236) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:140:LEU:HD12 4 0.01					
( , , ,	_ `				
(1,236) 1:A:41:LEU:HD12 1:A:140:LEU:HD13 4 0.01		1:A:41:LEU:HD12		4	
(1,236) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:140:LEU:HD11 4 0.01					
(1,236) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:140:LEU:HD12 4 0.01					
(1,236) 1:A:41:LEU:HD13 1:A:140:LEU:HD13 4 0.01	,				
(1,235) 1:A:12:LEU:HD11 1:A:13:ASN:HD21 2 0.01					



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,235)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:13:ASN:HD21	2	0.01
(1,235)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:13:ASN:HD21	2	0.01
(1,230)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:129:LEU:HD21	10	0.01
(1,230)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:129:LEU:HD22	10	0.01
(1,230)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:129:LEU:HD23	10	0.01
(1,230)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:129:LEU:HD21	10	0.01
(1,230)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:129:LEU:HD22	10	0.01
(1,230)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:129:LEU:HD23	10	0.01
(1,230)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:129:LEU:HD21	10	0.01
(1,230)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:129:LEU:HD22	10	0.01
(1,230)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:129:LEU:HD23	10	0.01
(1,221)	1:A:71:ILE:HD11	1:A:140:LEU:HD11	5	0.01
(1,221)	1:A:71:ILE:HD11	1:A:140:LEU:HD12	5	0.01
(1,221)	1:A:71:ILE:HD11	1:A:140:LEU:HD13	5	0.01
(1,221)	1:A:71:ILE:HD12	1:A:140:LEU:HD11	5	0.01
(1,221)	1:A:71:ILE:HD12	1:A:140:LEU:HD12	5	0.01
(1,221)	1:A:71:ILE:HD12	1:A:140:LEU:HD13	5	0.01
(1,221)	1:A:71:ILE:HD13	1:A:140:LEU:HD11	5	0.01
(1,221)	1:A:71:ILE:HD13	1:A:140:LEU:HD12	5	0.01
(1,221)	1:A:71:ILE:HD13	1:A:140:LEU:HD13	5	0.01
(1,22)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:137:TYR:H	19	0.01
(1,22)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:137:TYR:H	19	0.01
(1,22)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:137:TYR:H	19	0.01
(1,213)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:43:VAL:HG11	6	0.01
(1,213)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:43:VAL:HG12	6	0.01
(1,213)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:43:VAL:HG13	6	0.01
(1,213)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:43:VAL:HG11	6	0.01
(1,213)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:43:VAL:HG12	6	0.01
(1,213)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:43:VAL:HG13	6	0.01
(1,213)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:43:VAL:HG11	6	0.01
(1,213)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:43:VAL:HG12	6	0.01
(1,213)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:43:VAL:HG13	6	0.01
(1,213)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:43:VAL:HG11	17	0.01
(1,213)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:43:VAL:HG12	17	0.01
(1,213)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:43:VAL:HG13	17	0.01
(1,213)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:43:VAL:HG11	17	0.01
(1,213)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:43:VAL:HG12	17	0.01
(1,213)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:43:VAL:HG13	17	0.01
(1,213)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:43:VAL:HG11	17	0.01
(1,213)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:43:VAL:HG12	17	0.01
(1,213)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:43:VAL:HG13	17	0.01
(1,211)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:138:LEU:HD11	7	0.01



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,211)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:138:LEU:HD12	7	0.01
(1,211)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:138:LEU:HD13	7	0.01
(1,211)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:138:LEU:HD11	7	0.01
(1,211)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:138:LEU:HD12	7	0.01
(1,211)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:138:LEU:HD13	7	0.01
(1,211)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:138:LEU:HD11	7	0.01
(1,211)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:138:LEU:HD12	7	0.01
(1,211)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:138:LEU:HD13	7	0.01
(1,210)	1:A:41:LEU:H	1:A:41:LEU:HD21	18	0.01
(1,210)	1:A:41:LEU:H	1:A:41:LEU:HD22	18	0.01
(1,210)	1:A:41:LEU:H	1:A:41:LEU:HD23	18	0.01
(1,207)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:124:VAL:HG11	15	0.01
(1,207)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:124:VAL:HG12	15	0.01
(1,207)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:124:VAL:HG13	15	0.01
(1,207)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:124:VAL:HG11	15	0.01
(1,207)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:124:VAL:HG12	15	0.01
(1,207)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:124:VAL:HG13	15	0.01
(1,207)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:124:VAL:HG11	15	0.01
(1,207)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:124:VAL:HG12	15	0.01
(1,207)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:124:VAL:HG13	15	0.01
(1,201)	1:A:88:THR:H	1:A:102:VAL:HG11	16	0.01
(1,201)	1:A:88:THR:H	1:A:102:VAL:HG12	16	0.01
(1,201)	1:A:88:THR:H	1:A:102:VAL:HG13	16	0.01
(1,194)	1:A:42:TYR:H	1:A:43:VAL:HG11	15	0.01
(1,194)	1:A:42:TYR:H	1:A:43:VAL:HG12	15	0.01
(1,194)	1:A:42:TYR:H	1:A:43:VAL:HG13	15	0.01
(1,190)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:26:GLU:H	6	0.01
(1,190)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:26:GLU:H	6	0.01
(1,190)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:26:GLU:H	6	0.01
(1,180)	1:A:90:VAL:HG21	1:A:91:ARG:H	19	0.01
(1,180)	1:A:90:VAL:HG22	1:A:91:ARG:H	19	0.01
(1,180)	1:A:90:VAL:HG23	1:A:91:ARG:H	19	0.01
(1,177)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:43:VAL:HG21	11	0.01
(1,177)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:43:VAL:HG22	11	0.01
(1,177)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:43:VAL:HG23	11	0.01
(1,177)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:43:VAL:HG21	11	0.01
(1,177)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:43:VAL:HG22	11	0.01
(1,177)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:43:VAL:HG23	11	0.01
(1,177)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:43:VAL:HG21	11	0.01
(1,177)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:43:VAL:HG22	11	0.01
(1,177)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:43:VAL:HG23	11	0.01
(1,172)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:20:THR:H	4	0.01



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,172)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:20:THR:H	4	0.01
(1,172)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:20:THR:H	4	0.01
(1,171)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG11	8	0.01
(1,171)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG12	8	0.01
(1,171)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG13	8	0.01
(1,17)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD21	19	0.01
(1,17)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD22	19	0.01
(1,17)	1:A:126:LYS:H	1:A:129:LEU:HD23	19	0.01
(1,164)	1:A:76:GLU:H	1:A:77:GLU:H	6	0.01
(1,160)	1:A:54:SER:H	1:A:56:ASP:H	6	0.01
(1,16)	1:A:102:VAL:H	1:A:102:VAL:HG11	20	0.01
(1,16)	1:A:102:VAL:H	1:A:102:VAL:HG12	20	0.01
(1,16)	1:A:102:VAL:H	1:A:102:VAL:HG13	20	0.01
(1,158)	1:A:77:GLU:H	1:A:78:LYS:H	7	0.01
(1,158)	1:A:77:GLU:H	1:A:78:LYS:H	8	0.01
(1,150)	1:A:81:THR:H	1:A:82:SER:H	15	0.01
(1,15)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG11	12	0.01
(1,15)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG12	12	0.01
(1,15)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG13	12	0.01
(1,15)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG11	19	0.01
(1,15)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG12	19	0.01
(1,15)	1:A:78:LYS:H	1:A:102:VAL:HG13	19	0.01
(1,14)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD21	7	0.01
(1,14)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD22	7	0.01
(1,14)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD23	7	0.01
(1,14)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD21	19	0.01
(1,14)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD22	19	0.01
(1,14)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:LEU:HD23	19	0.01
(1,139)	1:A:46:VAL:H	1:A:48:GLY:H	8	0.01
(1,139)	1:A:46:VAL:H	1:A:48:GLY:H	12	0.01
(1,13)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:131:GLU:H	1	0.01
(1,13)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:131:GLU:H	1	0.01
(1,13)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:131:GLU:H	1	0.01
(1,1285)	1:A:34:TRP:HE1	1:A:31:ASN:H	7	0.01
(1,1279)	1:A:71:ILE:HD11	1:A:140:LEU:HD11	5	0.01
(1,1279)	1:A:71:ILE:HD11	1:A:140:LEU:HD12	5	0.01
(1,1279)	1:A:71:ILE:HD11	1:A:140:LEU:HD13	5	0.01
(1,1279)	1:A:71:ILE:HD12	1:A:140:LEU:HD11	5	0.01
(1,1279)	1:A:71:ILE:HD12	1:A:140:LEU:HD12	5	0.01
(1,1279)	1:A:71:ILE:HD12	1:A:140:LEU:HD13	5	0.01
(1,1279)	1:A:71:ILE:HD13	1:A:140:LEU:HD11	5	0.01
(1,1279)	1:A:71:ILE:HD13	1:A:140:LEU:HD12	5	0.01



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1279)	1:A:71:ILE:HD13	1:A:140:LEU:HD13	5	0.01
(1,1270)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:140:LEU:HD11	9	0.01
(1,1270)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:140:LEU:HD12	9	0.01
(1,1270)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:140:LEU:HD13	9	0.01
(1,1270)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:140:LEU:HD11	9	0.01
(1,1270)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:140:LEU:HD12	9	0.01
(1,1270)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:140:LEU:HD13	9	0.01
(1,1270)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:140:LEU:HD11	9	0.01
(1,1270)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:140:LEU:HD12	9	0.01
(1,1270)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:140:LEU:HD13	9	0.01
(1,127)	1:A:21:GLN:H	1:A:23:ASN:H	18	0.01
(1,1267)	1:A:86:ILE:HD11	1:A:80:ASP:H	3	0.01
(1,1267)	1:A:86:ILE:HD12	1:A:80:ASP:H	3	0.01
(1,1267)	1:A:86:ILE:HD13	1:A:80:ASP:H	3	0.01
(1,1264)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:H	11	0.01
(1,1264)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:H	11	0.01
(1,1264)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:H	11	0.01
(1,1264)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:117:ASN:H	12	0.01
(1,1264)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:117:ASN:H	12	0.01
(1,1264)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:117:ASN:H	12	0.01
(1,1257)	1:A:102:VAL:H	1:A:88:THR:H	8	0.01
(1,1257)	1:A:102:VAL:H	1:A:88:THR:H	20	0.01
(1,1245)	1:A:142:ASN:H	1:A:142:ASN:HD21	1	0.01
(1,1244)	1:A:117:ASN:H	1:A:117:ASN:HD21	18	0.01
(1,1237)	1:A:22:ASN:H	1:A:22:ASN:HD21	14	0.01
(1,1233)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:22:ASN:H	15	0.01
(1,1233)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:22:ASN:H	15	0.01
(1,1233)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:22:ASN:H	15	0.01
(1,1230)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG11	14	0.01
(1,1230)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG12	14	0.01
(1,1230)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG13	14	0.01
(1,1228)	1:A:90:VAL:H	1:A:102:VAL:HG21	11	0.01
(1,1228)	1:A:90:VAL:H	1:A:102:VAL:HG22	11	0.01
(1,1228)	1:A:90:VAL:H	1:A:102:VAL:HG23	11	0.01
(1,1226)	1:A:102:VAL:HG11	1:A:113:ARG:H	14	0.01
(1,1226)	1:A:102:VAL:HG12	1:A:113:ARG:H	14	0.01
(1,1226)	1:A:102:VAL:HG13	1:A:113:ARG:H	14	0.01
(1,1223)	1:A:112:LEU:H	1:A:112:LEU:HD11	8	0.01
(1,1223)	1:A:112:LEU:H	1:A:112:LEU:HD12	8	0.01
(1,1223)	1:A:112:LEU:H	1:A:112:LEU:HD13	8	0.01
(1,1217)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:141:PHE:H	15	0.01
(1,1217)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:141:PHE:H	15	0.01



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1217)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:141:PHE:H	15	0.01
(1,1216)	1:A:140:LEU:HD11	1:A:141:PHE:H	2	0.01
(1,1216)	1:A:140:LEU:HD12	1:A:141:PHE:H	2	0.01
(1,1216)	1:A:140:LEU:HD13	1:A:141:PHE:H	2	0.01
(1,1210)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:H	5	0.01
(1,1210)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:H	5	0.01
(1,1210)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:H	5	0.01
(1,1207)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD21	1	0.01
(1,1207)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD22	1	0.01
(1,1207)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:LEU:HD23	1	0.01
(1,1201)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD11	2	0.01
(1,1201)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD12	2	0.01
(1,1201)	1:A:129:LEU:H	1:A:138:LEU:HD13	2	0.01
(1,1197)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD21	17	0.01
(1,1197)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD22	17	0.01
(1,1197)	1:A:124:VAL:H	1:A:129:LEU:HD23	17	0.01
(1,1195)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG21	12	0.01
(1,1195)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG22	12	0.01
(1,1195)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:HG23	12	0.01
(1,119)	1:A:88:THR:H	1:A:102:VAL:H	13	0.01
(1,1189)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:120:ALA:H	5	0.01
(1,1189)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:120:ALA:H	5	0.01
(1,1189)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:120:ALA:H	5	0.01
(1,1181)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:102:VAL:H	4	0.01
(1,1181)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:102:VAL:H	4	0.01
(1,1181)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:102:VAL:H	4	0.01
(1,1173)	1:A:105:ASP:H	1:A:112:LEU:HD21	6	0.01
(1,1173)	1:A:105:ASP:H	1:A:112:LEU:HD22	6	0.01
(1,1173)	1:A:105:ASP:H	1:A:112:LEU:HD23	6	0.01
(1,1163)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD11	8	0.01
(1,1163)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD12	8	0.01
(1,1163)	1:A:115:CYS:H	1:A:116:ILE:HD13	8	0.01
(1,1150)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:76:GLU:H	20	0.01
(1,1150)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:76:GLU:H	20	0.01
(1,1150)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:76:GLU:H	20	0.01
(1,115)	1:A:89:GLU:H	1:A:102:VAL:H	19	0.01
(1,1148)	1:A:76:GLU:H	1:A:99:LEU:HD21	1	0.01
(1,1148)	1:A:76:GLU:H	1:A:99:LEU:HD22	1	0.01
(1,1148)	1:A:76:GLU:H	1:A:99:LEU:HD23	1	0.01
(1,1146)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG21	5	0.01
(1,1146)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG22	5	0.01
(1,1146)	1:A:74:GLU:H	1:A:75:VAL:HG23	5	0.01



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1145)	1:A:73:GLU:H	1:A:75:VAL:HG21	7	0.01
(1,1145)	1:A:73:GLU:H	1:A:75:VAL:HG22	7	0.01
(1,1145)	1:A:73:GLU:H	1:A:75:VAL:HG23	7	0.01
(1,1133)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:51:LEU:H	7	0.01
(1,1133)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:51:LEU:H	7	0.01
(1,1133)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:51:LEU:H	7	0.01
(1,1133)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:51:LEU:H	8	0.01
(1,1133)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:51:LEU:H	8	0.01
(1,1133)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:51:LEU:H	8	0.01
(1,1117)	1:A:41:LEU:HD21	1:A:42:TYR:H	15	0.01
(1,1117)	1:A:41:LEU:HD22	1:A:42:TYR:H	15	0.01
(1,1117)	1:A:41:LEU:HD23	1:A:42:TYR:H	15	0.01
(1,1114)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:24:GLY:H	10	0.01
(1,1114)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:24:GLY:H	10	0.01
(1,1114)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:24:GLY:H	10	0.01
(1,1108)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:16:GLN:H	3	0.01
(1,1108)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:16:GLN:H	3	0.01
(1,1108)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:16:GLN:H	3	0.01
(1,1107)	1:A:45:ILE:HD11	1:A:46:VAL:H	7	0.01
(1,1107)	1:A:45:ILE:HD12	1:A:46:VAL:H	7	0.01
(1,1107)	1:A:45:ILE:HD13	1:A:46:VAL:H	7	0.01
(1,1104)	1:A:12:LEU:H	1:A:12:LEU:HD11	9	0.01
(1,1104)	1:A:12:LEU:H	1:A:12:LEU:HD12	9	0.01
(1,1104)	1:A:12:LEU:H	1:A:12:LEU:HD13	9	0.01
(1,1103)	1:A:9:ILE:HD11	1:A:10:LYS:H	13	0.01
(1,1103)	1:A:9:ILE:HD12	1:A:10:LYS:H	13	0.01
(1,1103)	1:A:9:ILE:HD13	1:A:10:LYS:H	13	0.01
(1,1101)	1:A:9:ILE:H	1:A:12:LEU:HD21	18	0.01
(1,1101)	1:A:9:ILE:H	1:A:12:LEU:HD22	18	0.01
(1,1101)	1:A:9:ILE:H	1:A:12:LEU:HD23	18	0.01
(1,1100)	1:A:8:LYS:H	1:A:9:ILE:HD11	15	0.01
(1,1100)	1:A:8:LYS:H	1:A:9:ILE:HD12	15	0.01
(1,1100)	1:A:8:LYS:H	1:A:9:ILE:HD13	15	0.01
(1,1100)	1:A:8:LYS:H	1:A:9:ILE:HD11	17	0.01
(1,1100)	1:A:8:LYS:H	1:A:9:ILE:HD12	17	0.01
(1,1100)	1:A:8:LYS:H	1:A:9:ILE:HD13	17	0.01
(1,1098)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG21	13	0.01
(1,1098)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG22	13	0.01
(1,1098)	1:A:44:ASP:H	1:A:46:VAL:HG23	13	0.01
(1,1097)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG21	19	0.01
(1,1097)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG22	19	0.01
(1,1097)	1:A:76:GLU:H	1:A:90:VAL:HG23	19	0.01



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1093)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:89:GLU:H	1	0.01
(1,1093)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:89:GLU:H	1	0.01
(1,1093)	1:A:79:LEU:HD13	1:A:89:GLU:H	1	0.01
(1,1092)	1:A:41:LEU:H	1:A:124:VAL:HG21	18	0.01
(1,1092)	1:A:41:LEU:H	1:A:124:VAL:HG22	18	0.01
(1,1092)	1:A:41:LEU:H	1:A:124:VAL:HG23	18	0.01
(1,1087)	1:A:71:ILE:H	1:A:75:VAL:HG11	11	0.01
(1,1087)	1:A:71:ILE:H	1:A:75:VAL:HG12	11	0.01
(1,1087)	1:A:71:ILE:H	1:A:75:VAL:HG13	11	0.01
(1,1085)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:100:GLY:H	8	0.01
(1,1085)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:100:GLY:H	8	0.01
(1,1085)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:100:GLY:H	8	0.01
(1,1085)	1:A:90:VAL:HG11	1:A:100:GLY:H	12	0.01
(1,1085)	1:A:90:VAL:HG12	1:A:100:GLY:H	12	0.01
(1,1085)	1:A:90:VAL:HG13	1:A:100:GLY:H	12	0.01
(1,1075)	1:A:46:VAL:HG11	1:A:47:SER:H	10	0.01
(1,1075)	1:A:46:VAL:HG12	1:A:47:SER:H	10	0.01
(1,1075)	1:A:46:VAL:HG13	1:A:47:SER:H	10	0.01
(1,1066)	1:A:43:VAL:H	1:A:43:VAL:HG11	13	0.01
(1,1066)	1:A:43:VAL:H	1:A:43:VAL:HG12	13	0.01
(1,1066)	1:A:43:VAL:H	1:A:43:VAL:HG13	13	0.01
(1,1065)	1:A:19:VAL:H	1:A:19:VAL:HG11	3	0.01
(1,1065)	1:A:19:VAL:H	1:A:19:VAL:HG12	3	0.01
(1,1065)	1:A:19:VAL:H	1:A:19:VAL:HG13	3	0.01
(1,1065)	1:A:19:VAL:H	1:A:19:VAL:HG11	5	0.01
(1,1065)	1:A:19:VAL:H	1:A:19:VAL:HG12	5	0.01
(1,1065)	1:A:19:VAL:H	1:A:19:VAL:HG13	5	0.01
(1,1065)	1:A:19:VAL:H	1:A:19:VAL:HG11	18	0.01
(1,1065)	1:A:19:VAL:H	1:A:19:VAL:HG12	18	0.01
(1,1065)	1:A:19:VAL:H	1:A:19:VAL:HG13	18	0.01
(1,1060)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD21	17	0.01
(1,1060)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD22	17	0.01
(1,1060)	1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD23	17	0.01
(1,106)	1:A:105:ASP:H	1:A:113:ARG:H	11	0.01
(1,1058)	1:A:51:LEU:HD11	1:A:121:LEU:HD11	20	0.01
(1,1058)	1:A:51:LEU:HD11	1:A:121:LEU:HD12	20	0.01
(1,1058)	1:A:51:LEU:HD11	1:A:121:LEU:HD13	20	0.01
(1,1058)	1:A:51:LEU:HD12	1:A:121:LEU:HD11	20	0.01
(1,1058)	1:A:51:LEU:HD12	1:A:121:LEU:HD12	20	0.01
(1,1058)	1:A:51:LEU:HD12	1:A:121:LEU:HD13	20	0.01
(1,1058)	1:A:51:LEU:HD13	1:A:121:LEU:HD11	20	0.01
(1,1058)	1:A:51:LEU:HD13	1:A:121:LEU:HD12	20	0.01



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
	1:A:51:LEU:HD13	1:A:121:LEU:HD13	20	0.01
(1,1057)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:138:LEU:HD21	5	0.01
(1,1057)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:138:LEU:HD22	5	0.01
(1,1057)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:138:LEU:HD23	5	0.01
(1,1057)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:138:LEU:HD21	5	0.01
(1,1057)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:138:LEU:HD22	5	0.01
(1,1057)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:138:LEU:HD23	5	0.01
(1,1057)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:138:LEU:HD21	5	0.01
(1,1057)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:138:LEU:HD22	5	0.01
(1,1057)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:138:LEU:HD23	5	0.01
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD21	4	0.01
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD22	4	0.01
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD23	4	0.01
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD21	4	0.01
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD22	4	0.01
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD23	4	0.01
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD21	4	0.01
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD22	4	0.01
(1,1056)	1:A:129:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD23	4	0.01
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD11	10	0.01
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD12	10	0.01
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD11	1:A:138:LEU:HD13	10	0.01
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD11	10	0.01
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD12	10	0.01
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD12	1:A:138:LEU:HD13	10	0.01
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD11	10	0.01
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD12	10	0.01
(1,1053)	1:A:41:LEU:HD13	1:A:138:LEU:HD13	10	0.01
(1,1052)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:46:VAL:HG21	20	0.01
(1,1052)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:46:VAL:HG22	20	0.01
(1,1052)	1:A:12:LEU:HD11	1:A:46:VAL:HG23	20	0.01
(1,1052)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:46:VAL:HG21	20	0.01
(1,1052)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:46:VAL:HG22	20	0.01
(1,1052)	1:A:12:LEU:HD12	1:A:46:VAL:HG23	20	0.01
(1,1052)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:46:VAL:HG21	20	0.01
(1,1052)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:46:VAL:HG22	20	0.01
(1,1052)	1:A:12:LEU:HD13	1:A:46:VAL:HG23	20	0.01
(1,1043)	1:A:12:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HG21	20	0.01
(1,1043)	1:A:12:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HG22	20	0.01
(1,1043)	1:A:12:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HG23	20	0.01
(1,1043)	1:A:12:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HG21	20	0.01
(1,1043)	1:A:12:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HG22	20	0.01



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1043)	1:A:12:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HG23	20	0.01
(1,1043)	1:A:12:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HG21	20	0.01
(1,1043)	1:A:12:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HG22	20	0.01
(1,1043)	1:A:12:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HG23	20	0.01
(1,104)	1:A:73:GLU:H	1:A:75:VAL:H	3	0.01
(1,104)	1:A:73:GLU:H	1:A:75:VAL:H	14	0.01
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:90:VAL:HG21	7	0.01
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:90:VAL:HG22	7	0.01
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG21	1:A:90:VAL:HG23	7	0.01
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:90:VAL:HG21	7	0.01
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:90:VAL:HG22	7	0.01
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG22	1:A:90:VAL:HG23	7	0.01
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG21	7	0.01
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG22	7	0.01
(1,1032)	1:A:75:VAL:HG23	1:A:90:VAL:HG23	7	0.01
(1,1022)	1:A:134:TYR:H	1:A:135:GLU:H	19	0.01
(1,102)	1:A:52:PHE:H	1:A:71:ILE:H	20	0.01
(1,1019)	1:A:132:GLU:H	1:A:134:TYR:H	5	0.01
(1,1010)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:H	1	0.01
(1,1010)	1:A:123:PHE:H	1:A:124:VAL:H	10	0.01
(1,1002)	1:A:119:ALA:H	1:A:121:LEU:H	2	0.01
(1,1002)	1:A:119:ALA:H	1:A:121:LEU:H	16	0.01
(1,1000)	1:A:67:PHE:H	1:A:114:TYR:H	5	0.01



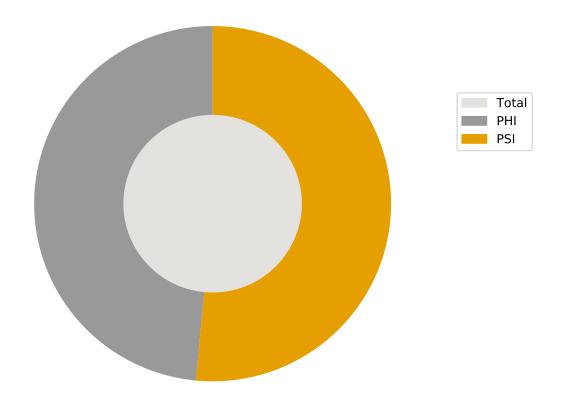
# 9 Dihedral angle restraints analysis

## 9.1 Dihedral angle restraints summary

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

## 9.1.1 Pie chart : Dihedral angle restraints

There are 0 unmapped restraints



# 9.2 Dihedral angle violations

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

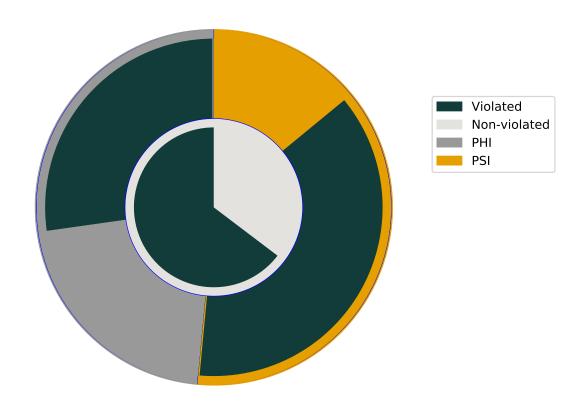
Angle name	Count	$\%^1$	$\%^2$
PHI	128	56.1	42.1
PSI	176	72.7	57.9



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

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>percentage of violated restraints in that particular agnle type, <sup>2</sup>percentage of violation in total violations.

#### 9.2.1 Pie chart : Dihedral angle violations



# 9.3 Consistent dihedral angle violations

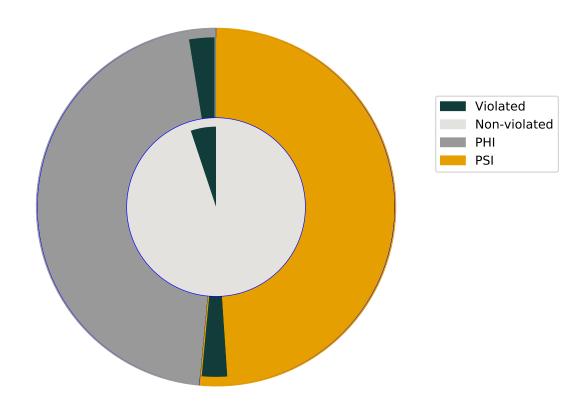
The following table provides the summary of consistently violated restraints. Restraints that are violated all models are counted as violated.

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

 $<sup>^{1}</sup>$ 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	64.3	4.99
5.0-10.0	10.5	9.79
10.0-20.0	8.6	19.75
20.0-40.0	15.1	39.98
40.0-80.0	13.6	69.9
80.0<	None	None

# 9.5 Dihedral angle violations in the ensemble

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

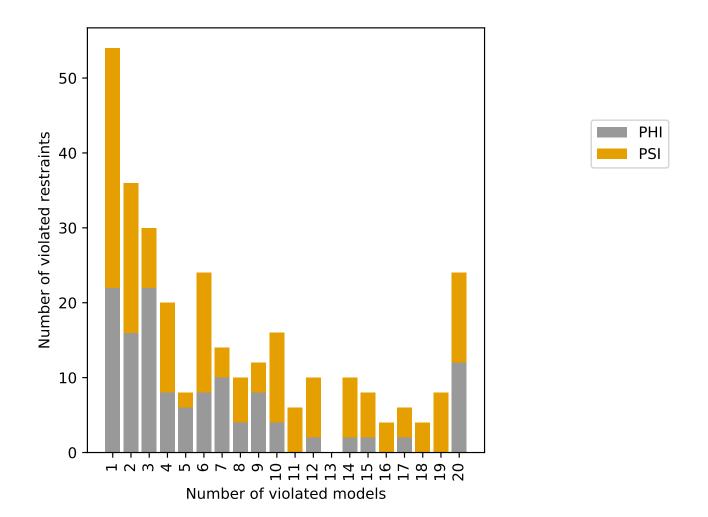
No.	of vic	lated restraints	No. of violated models
PHI	PSI Total		No. of violated models
22	32	54	1



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



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



# 9.6 Violations in each model

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

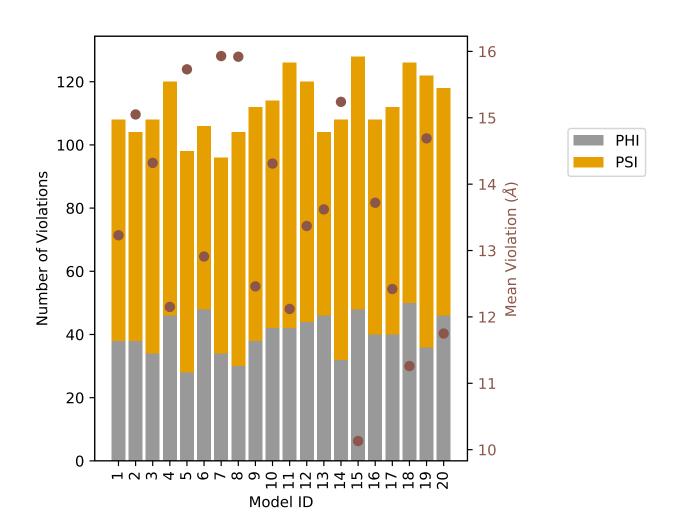
Model ID	No. of violations			Mean (Å)	Max (Å)	
Model 1D	PHI	PSI	Total	Mean (A)	IVIAN (A)	
1	38	70	108	13.23	66.84	
2	38	66	104	15.05	64.25	
3	34	74	108	14.32	65.72	
4	46	74	120	12.15	58.78	
5	28	70	98	15.73	65.67	
6	48	58	106	12.91	69.9	
7	34	62	96	15.93	62.88	
8	30	74	104	15.92	68.01	
9	38	74	112	12.46	69.47	



Continued from previous page...

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

## 9.6.1 Bar graph: Violations in each model

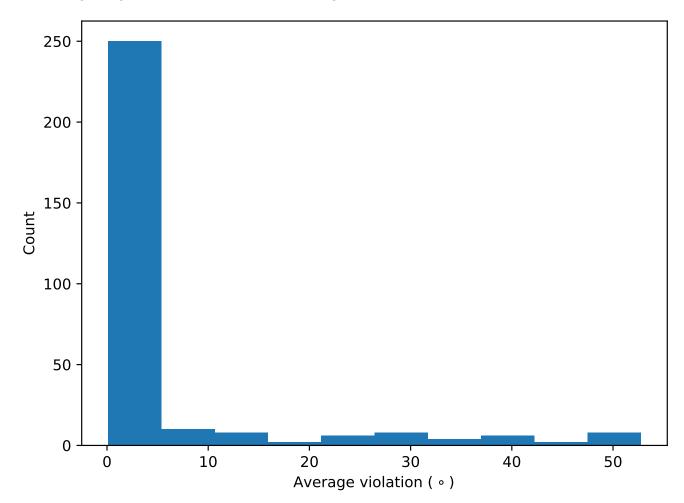




## 9.7 Most violated dihedral angle restraints

## 9.7.1 Histogram: Distribution of mean dihedral angle violations

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



### 9.7.2 Table: Most violated dihedral angle restraints

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

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



	ed from previous pe						
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models	$\mathbf{Mean} \; (\; \circ \; )$	$\mathbf{Max} (\circ)$
(1,417)	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	1:A:113:ARG:N	20	39.99	51.12
(1,182)	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	1:A:113:ARG:N	20	39.99	51.12
(1,338)	1:A:66:SER:N	1:A:66:SER:CA	1:A:66:SER:C	1:A:67:PHE:N	19	31.19	45.31
(1,103)	1:A:66:SER:N	1:A:66:SER:CA	1:A:66:SER:C	1:A:67:PHE:N	19	31.19	45.31
(1,59)	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	1:A:39:GLU:N	17	28.55	45.11
(1,294)	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	1:A:39:GLU:N	17	28.55	45.11
(1,281)	1:A:26:GLU:N	1:A:26:GLU:CA	1:A:26:GLU:C	1:A:27:PRO:N	19	33.32	43.84
(1,46)	1:A:26:GLU:N	1:A:26:GLU:CA	1:A:26:GLU:C	1:A:27:PRO:N	19	33.32	43.84
(1,144)	1:A:90:VAL:N	1:A:90:VAL:CA	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	20	23.55	35.88
(1,379)	1:A:90:VAL:N	1:A:90:VAL:CA	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	20	23.55	35.88
(1,373)	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	1:A:88:THR:N	19	21.93	34.58
(1,138)	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	1:A:88:THR:N	19	21.93	34.58
(1,105)	1:A:67:PHE:N	1:A:67:PHE:CA	1:A:67:PHE:C	1:A:68:THR:N	16	18.18	30.49
(1,340)	1:A:67:PHE:N	1:A:67:PHE:CA	1:A:67:PHE:C	1:A:68:THR:N	16	18.18	30.49
(1,389)	1:A:95:ALA:N	1:A:95:ALA:CA	1:A:95:ALA:C	1:A:96:ASP:N	9	11.86	20.75
(1,154)	1:A:95:ALA:N	1:A:95:ALA:CA	1:A:95:ALA:C	1:A:96:ASP:N	9	11.86	20.75
(1,148)	1:A:92:SER:N	1:A:92:SER:CA	1:A:92:SER:C	1:A:93:ARG:N	15	11.36	19.35
(1,383)	1:A:92:SER:N	1:A:92:SER:CA	1:A:92:SER:C	1:A:93:ARG:N	15	11.36	19.35
(1,134)	1:A:85:MET:N	1:A:85:MET:CA	1:A:85:MET:C	1:A:86:ILE:N	8	11.37	17.21
(1,369)	1:A:85:MET:N	1:A:85:MET:CA	1:A:85:MET:C	1:A:86:ILE:N	8	11.37	17.21
(1,387)	1:A:94:THR:N	1:A:94:THR:CA	1:A:94:THR:C	1:A:95:ALA:N	14	6.42	16.19
(1,152)	1:A:94:THR:N	1:A:94:THR:CA	1:A:94:THR:C	1:A:95:ALA:N	14	6.42	16.19
(1,284)	1:A:31:ASN:N	1:A:31:ASN:CA	1:A:31:ASN:C	1:A:32:GLU:N	11	9.25	15.65
(1,49)	1:A:31:ASN:N	1:A:31:ASN:CA	1:A:31:ASN:C	1:A:32:GLU:N	11	9.25	15.65
(1,156)	1:A:96:ASP:N	1:A:96:ASP:CA	1:A:96:ASP:C	1:A:97:SER:N	17	7.85	14.49
(1,391)	1:A:96:ASP:N	1:A:96:ASP:CA	1:A:96:ASP:C	1:A:97:SER:N	17	7.85	14.49
(1,110)	1:A:70:PRO:N	1:A:70:PRO:CA	1:A:70:PRO:C	1:A:71:ILE:N	14	4.03	11.32
(1,345)	1:A:70:PRO:N	1:A:70:PRO:CA	1:A:70:PRO:C	1:A:71:ILE:N	14	4.03	11.32
(1,393)	1:A:97:SER:N	1:A:97:SER:CA	1:A:97:SER:C	1:A:98:HIS:N	1	11.09	11.09
(1,158)	1:A:97:SER:N	1:A:97:SER:CA	1:A:97:SER:C	1:A:98:HIS:N	1	11.09	11.09
(1,423)	1:A:115:CYS:N	1:A:115:CYS:CA	1:A:115:CYS:C	1:A:116:ILE:N	14	4.85	9.58
(1,188)	1:A:115:CYS:N	1:A:115:CYS:CA	1:A:115:CYS:C	1:A:116:ILE:N	14	4.85	9.58
(1,61)	1:A:39:GLU:N	1:A:39:GLU:CA	1:A:39:GLU:C	1:A:40:GLY:N	5	2.78	8.67
(1,296)	1:A:39:GLU:N	1:A:39:GLU:CA	1:A:39:GLU:C	1:A:40:GLY:N	5	2.78	8.67
(1,397)		1:A:99:LEU:CA	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	16	3.44	8.66
(1,162)	1:A:99:LEU:N	1:A:99:LEU:CA	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	16	3.44	8.66
(1,456)	1:A:133:GLY:N	1:A:133:GLY:CA	1:A:133:GLY:C	1:A:134:TYR:N	12	4.49	7.85
(1,221)	1:A:133:GLY:N	1:A:133:GLY:CA	1:A:133:GLY:C	1:A:134:TYR:N	12	4.49	7.85
(1,186)	1:A:114:TYR:N	1:A:114:TYR:CA	1:A:114:TYR:C	1:A:115:CYS:N	12	3.46	7.67
(1,421)	1:A:114:TYR:N	1:A:114:TYR:CA	1:A:114:TYR:C	1:A:115:CYS:N	12	3.46	7.67
(1,419)	1:A:113:ARG:N	1:A:113:ARG:CA	1:A:113:ARG:C	1:A:114:TYR:N	18	2.8	7.11
(1,184)	1:A:113:ARG:N	1:A:113:ARG:CA	1:A:113:ARG:C	1:A:114:TYR:N	18	2.8	7.11
(1,42)	1:A:24:GLY:N	1:A:24:GLY:CA	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	15	3.31	6.97
(1,277)	1:A:24:GLY:N	1:A:24:GLY:CA	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	15	3.31	6.97
(1,261)	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	1:A:16:GLN:N	4	3.02	6.75
(1,26)	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	1:A:16:GLN:N	4	3.02	6.75
(1,315)	1:A:52:PHE:N	1:A:52:PHE:CA	1:A:52:PHE:C	1:A:53:THR:N	4	3.58	6.6
(1,80)	1:A:52:PHE:N	1:A:52:PHE:CA	1:A:52:PHE:C	1:A:53:THR:N	10	3.58	6.6 6.55
(1,395)	1:A:98:HIS:N 1:A:98:HIS:N	1:A:98:HIS:CA 1:A:98:HIS:CA	1:A:98:HIS:C 1:A:98:HIS:C	1:A:99:LEU:N 1:A:99:LEU:N	10	3.25 3.25	
(1,160) $(1,336)$	1:A:65:PRO:N	1:A:98:HIS:CA 1:A:65:PRO:CA	1:A:65:PRO:C	1:A:99:LEU:N 1:A:66:SER:N	14	2.44	$\frac{6.55}{6.27}$
(1,330)	1.A.00.F AO:N	1.A.00.F RO!UA	1.A.00.F RO:C	1.A.00.3ER:IN	14	Continued on	



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



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



	ed from previous po						
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models	$\mathbf{Mean} \; (\; \circ \; )$	$\mathbf{Max} (\circ)$
(1,298)	1:A:41:LEU:N	1:A:41:LEU:CA	1:A:41:LEU:C	1:A:42:TYR:N	1	0.91	0.91
(1,100)	1:A:64:TRP:N	1:A:64:TRP:CA	1:A:64:TRP:C	1:A:65:PRO:N	3	0.45	0.88
(1,335)	1:A:64:TRP:N	1:A:64:TRP:CA	1:A:64:TRP:C	1:A:65:PRO:N	3	0.45	0.88
(1,466)	1:A:139:HIS:N	1:A:139:HIS:CA	1:A:139:HIS:C	1:A:140:LEU:N	1	0.85	0.85
(1,231)	1:A:139:HIS:N	1:A:139:HIS:CA	1:A:139:HIS:C	1:A:140:LEU:N	1	0.85	0.85
(1,321)	1:A:55:LYS:N	1:A:55:LYS:CA	1:A:55:LYS:C	1:A:56:ASP:N	1	0.82	0.82
(1,86)	1:A:55:LYS:N	1:A:55:LYS:CA	1:A:55:LYS:C	1:A:56:ASP:N	1	0.82	0.82
(1,146)	1:A:91:ARG:N	1:A:91:ARG:CA	1:A:91:ARG:C	1:A:92:SER:N	1	0.48	0.48
(1,381)	1:A:91:ARG:N	1:A:91:ARG:CA	1:A:91:ARG:C	1:A:92:SER:N	1	0.48	0.48
(1,439)	1:A:124:VAL:N	1:A:124:VAL:CA	1:A:124:VAL:C	1:A:125:PRO:N	1	0.29	0.29
(1,204)	1:A:124:VAL:N	1:A:124:VAL:CA	1:A:124:VAL:C	1:A:125:PRO:N	1	0.29	0.29
(1,10)	1:A:7:GLU:N	1:A:7:GLU:CA	1:A:7:GLU:C	1:A:8:LYS:N	1	0.13	0.13
(1,245)	1:A:7:GLU:N	1:A:7:GLU:CA	1:A:7:GLU:C	1:A:8:LYS:N	1	0.13	0.13
(1,43)	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	1:A:25:THR:CA	1:A:25:THR:C	20	50.29	69.47
(1,278)	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	1:A:25:THR:CA	1:A:25:THR:C	20	50.29	69.47
(1,173)	1:A:105:ASP:C	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	20	52.06	68.6
(1,408)	1:A:105:ASP:C	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	20	52.06	68.6
(1,343)	1:A:68:THR:C	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	20	40.4	66.84
(1,108)	1:A:68:THR:C	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	20	40.4	66.84
(1,163)	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	1:A:100:GLY:CA	1:A:100:GLY:C	20	28.71	65.33
(1,398)	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	1:A:100:GLY:CA	1:A:100:GLY:C	20	28.71	65.33
(1,137)	1:A:86:ILE:C	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	20	49.01	63.56
(1,372)	1:A:86:ILE:C	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	20	49.01	63.56
(1,58)	1:A:37:LYS:C	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	20	22.23	52.32
(1,293)	1:A:37:LYS:C	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	20	22.23	52.32
(1,153)	1:A:94:THR:C	1:A:95:ALA:N	1:A:95:ALA:CA	1:A:95:ALA:C	14	6.79	19.74
(1,388)	1:A:94:THR:C	1:A:95:ALA:N	1:A:95:ALA:CA	1:A:95:ALA:C	14	6.79	19.74
(1,155)	1:A:95:ALA:C	1:A:96:ASP:N	1:A:96:ASP:CA	1:A:96:ASP:C	9	7.43	16.13
(1,390)	1:A:95:ALA:C	1:A:96:ASP:N	1:A:96:ASP:CA	1:A:96:ASP:C	9	7.43	16.13
(1,145)	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	1:A:91:ARG:CA	1:A:91:ARG:C	15	4.26	13.11
(1,380)	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	1:A:91:ARG:CA	1:A:91:ARG:C	15	4.26	13.11
(1,157)	1:A:96:ASP:C	1:A:97:SER:N	1:A:97:SER:CA	1:A:97:SER:C	10	5.08	12.44
(1,392)	1:A:96:ASP:C	1:A:97:SER:N	1:A:97:SER:CA	1:A:97:SER:C	10	5.08	12.44
(1,386)	1:A:93:ARG:C	1:A:94:THR:N	1:A:94:THR:CA	1:A:94:THR:C	9	2.7	9.26
(1,151)	1:A:93:ARG:C	1:A:94:THR:N	1:A:94:THR:CA	1:A:94:THR:C	9	2.7	9.26
(1,465)	1:A:138:LEU:C	1:A:139:HIS:N	1:A:139:HIS:CA	1:A:139:HIS:C	8	4.39	8.83
(1,230)	1:A:138:LEU:C	1:A:139:HIS:N	1:A:139:HIS:CA	1:A:139:HIS:C	8	4.39	8.83
(1,79)	1:A:51:LEU:C	1:A:52:PHE:N	1:A:52:PHE:CA	1:A:52:PHE:C	9	2.15	7.56
(1,314)	1:A:51:LEU:C	1:A:52:PHE:N	1:A:52:PHE:CA	1:A:52:PHE:C	9	2.15	7.56
(1,324)	1:A:57:LYS:C	1:A:58:PHE:N	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:C	7	2.83	7.27
(1,89)	1:A:57:LYS:C	1:A:58:PHE:N	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:C	7	2.83	7.27
(1,220)	1:A:132:GLU:C	1:A:133:GLY:N	1:A:133:GLY:CA	1:A:133:GLY:C	12	2.32	7.21
(1,455)	1:A:132:GLU:C	1:A:133:GLY:N	1:A:133:GLY:CA	1:A:133:GLY:C	12	2.32	7.21
(1,87)	1:A:56:ASP:C	1:A:57:LYS:N	1:A:57:LYS:CA	1:A:57:LYS:C	10	2.45	6.9
(1,322)	1:A:56:ASP:C	1:A:57:LYS:N	1:A:57:LYS:CA	1:A:57:LYS:C	10	2.45	6.9
(1,11)	1:A:7:GLU:C	1:A:8:LYS:N	1:A:8:LYS:CA	1:A:8:LYS:C	2	3.52	6.8
(1,246)	1:A:7:GLU:C	1:A:8:LYS:N	1:A:8:LYS:CA	1:A:8:LYS:C	7	3.52	6.8
(1,139) $(1,374)$	1:A:87:ARG:C 1:A:87:ARG:C	1:A:88:THR:N 1:A:88:THR:N	1:A:88:THR:CA 1:A:88:THR:CA	1:A:88:THR:C 1:A:88:THR:C	7	2.6	6.6
(1,374) $(1,25)$	1:A:14:ARG:C	1:A:88:1HR:N 1:A:15:MET:N	1:A:88:1 HR:CA 1:A:15:MET:CA	1:A:88:1HR:C 1:A:15:MET:C	4	2.54	5.84
(1,26) $(1,260)$	1:A:14:ARG:C 1:A:14:ARG:C	1:A:15:MET:N 1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA 1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C 1:A:15:MET:C	4	2.54	5.84
(1,200)	1.A.14.AIIG.U	1.4.10.10111	1.A.10.ME1.OA	1.A.10.ME1.O	4	Continued on	



$ \begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	5.49 5.49 5.48 5.48 5.35 5.35 5.34 4.91 4.91 4.69
(1,216)         1:A:130:LYS:C         1:A:131:GLU:N         1:A:131:GLU:CA         1:A:131:GLU:C         7         2.37           (1,224)         1:A:135:GLU:C         1:A:136:SER:N         1:A:136:SER:CA         1:A:136:SER:C         9         2.73           (1,459)         1:A:135:GLU:C         1:A:136:SER:N         1:A:136:SER:CA         1:A:136:SER:C         9         2.73           (1,159)         1:A:97:SER:C         1:A:98:HIS:N         1:A:98:HIS:CA         1:A:98:HIS:C         6         2.71           (1,394)         1:A:97:SER:C         1:A:98:HIS:N         1:A:98:HIS:CA         1:A:98:HIS:C         6         2.71           (1,181)         1:A:111:GLY:C         1:A:112:LEU:N         1:A:112:LEU:CA         1:A:112:LEU:C         17         3.36           (1,416)         1:A:111:GLY:C         1:A:112:LEU:N         1:A:112:LEU:CA         1:A:112:LEU:C         17         3.36           (1,378)         1:A:89:GLU:C         1:A:90:VAL:N         1:A:90:VAL:CA         1:A:90:VAL:C         8         1.48           (1,143)         1:A:89:GLU:C         1:A:90:VAL:N         1:A:108:GLY:CA         1:A:108:GLY:C         6         2.52           (1,411)         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:N         1:A:108:GLY:CA         1:A:108:GLY:C	5.49 5.48 5.48 5.35 5.35 5.34 5.34 4.91 4.69
(1,224)         1:A:135:GLU:C         1:A:136:SER:N         1:A:136:SER:CA         1:A:136:SER:C         9         2.73           (1,459)         1:A:135:GLU:C         1:A:136:SER:N         1:A:136:SER:CA         1:A:136:SER:C         9         2.73           (1,159)         1:A:97:SER:C         1:A:98:HIS:N         1:A:98:HIS:CA         1:A:98:HIS:C         6         2.71           (1,394)         1:A:97:SER:C         1:A:98:HIS:N         1:A:98:HIS:CA         1:A:98:HIS:C         6         2.71           (1,181)         1:A:111:GLY:C         1:A:112:LEU:N         1:A:112:LEU:CA         1:A:112:LEU:C         17         3.36           (1,416)         1:A:111:GLY:C         1:A:112:LEU:N         1:A:112:LEU:CA         1:A:112:LEU:C         17         3.36           (1,378)         1:A:89:GLU:C         1:A:90:VAL:N         1:A:90:VAL:CA         1:A:90:VAL:C         8         1.48           (1,143)         1:A:89:GLU:C         1:A:90:VAL:N         1:A:108:GLY:CA         1:A:108:GLY:C         8         1.48           (1,176)         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:N         1:A:108:GLY:CA         1:A:108:GLY:C         6         2.52           (1,411)         1:A:46:VAL:C         1:A:47:SER:N         1:A:47:SER:CA         1:A:47:SER:C <th< td=""><td>5.48 5.48 5.35 5.35 5.34 5.34 4.91 4.91 4.69</td></th<>	5.48 5.48 5.35 5.35 5.34 5.34 4.91 4.91 4.69
(1,459)         1:A:135:GLU:C         1:A:136:SER:N         1:A:136:SER:CA         1:A:136:SER:C         9         2.73           (1,159)         1:A:97:SER:C         1:A:98:HIS:N         1:A:98:HIS:CA         1:A:98:HIS:C         6         2.71           (1,394)         1:A:97:SER:C         1:A:98:HIS:N         1:A:98:HIS:CA         1:A:98:HIS:C         6         2.71           (1,181)         1:A:111:GLY:C         1:A:112:LEU:N         1:A:112:LEU:CA         1:A:112:LEU:C         17         3.36           (1,416)         1:A:111:GLY:C         1:A:112:LEU:N         1:A:112:LEU:CA         1:A:112:LEU:C         17         3.36           (1,378)         1:A:89:GLU:C         1:A:90:VAL:N         1:A:90:VAL:CA         1:A:90:VAL:C         8         1.48           (1,143)         1:A:89:GLU:C         1:A:90:VAL:N         1:A:90:VAL:CA         1:A:90:VAL:C         8         1.48           (1,176)         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:N         1:A:108:GLY:CA         1:A:108:GLY:C         6         2.52           (1,411)         1:A:46:VAL:C         1:A:47:SER:N         1:A:47:SER:CA         1:A:47:SER:C         4         1.84           (1,309)         1:A:46:VAL:C         1:A:92:SER:N         1:A:92:SER:CA         1:A:92:SER:C         3 <td>5.48 5.35 5.35 5.34 5.34 4.91 4.91 4.69</td>	5.48 5.35 5.35 5.34 5.34 4.91 4.91 4.69
(1,159)         1:A:97:SER:C         1:A:98:HIS:N         1:A:98:HIS:CA         1:A:98:HIS:C         6         2.71           (1,394)         1:A:97:SER:C         1:A:98:HIS:N         1:A:98:HIS:CA         1:A:98:HIS:C         6         2.71           (1,181)         1:A:111:GLY:C         1:A:112:LEU:N         1:A:112:LEU:CA         1:A:112:LEU:C         17         3.36           (1,416)         1:A:111:GLY:C         1:A:112:LEU:N         1:A:112:LEU:CA         1:A:112:LEU:C         17         3.36           (1,378)         1:A:89:GLU:C         1:A:90:VAL:N         1:A:90:VAL:CA         1:A:90:VAL:C         8         1.48           (1,143)         1:A:89:GLU:C         1:A:90:VAL:N         1:A:90:VAL:CA         1:A:90:VAL:C         8         1.48           (1,176)         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:N         1:A:108:GLY:CA         1:A:108:GLY:C         6         2.52           (1,411)         1:A:46:VAL:C         1:A:47:SER:N         1:A:47:SER:CA         1:A:47:SER:C         4         1.84           (1,309)         1:A:46:VAL:C         1:A:47:SER:N         1:A:47:SER:CA         1:A:47:SER:C         4         1.84           (1,382)         1:A:91:ARG:C         1:A:92:SER:N         1:A:92:SER:CA         1:A:92:SER:C         3	5.35 5.35 5.34 5.34 4.91 4.91 4.69
(1,394)         1:A:97:SER:C         1:A:98:HIS:N         1:A:98:HIS:CA         1:A:98:HIS:C         6         2.71           (1,181)         1:A:111:GLY:C         1:A:112:LEU:N         1:A:112:LEU:CA         1:A:112:LEU:C         17         3.36           (1,416)         1:A:111:GLY:C         1:A:112:LEU:N         1:A:112:LEU:CA         1:A:112:LEU:C         17         3.36           (1,378)         1:A:89:GLU:C         1:A:90:VAL:N         1:A:90:VAL:CA         1:A:90:VAL:C         8         1.48           (1,143)         1:A:89:GLU:C         1:A:90:VAL:N         1:A:90:VAL:CA         1:A:90:VAL:C         8         1.48           (1,176)         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:N         1:A:108:GLY:CA         1:A:108:GLY:C         6         2.52           (1,411)         1:A:107:PRO:C         1:A:4108:GLY:N         1:A:408:GLY:CA         1:A:4108:GLY:C         6         2.52           (1,74)         1:A:46:VAL:C         1:A:47:SER:N         1:A:47:SER:CA         1:A:47:SER:C         4         1.84           (1,382)         1:A:91:ARG:C         1:A:92:SER:N         1:A:92:SER:CA         1:A:92:SER:C         3         2.65           (1,147)         1:A:91:ARG:C         1:A:92:SER:N         1:A:92:SER:CA         1:A:92:SER:C         3 <td>5.35 5.34 5.34 4.91 4.91 4.69</td>	5.35 5.34 5.34 4.91 4.91 4.69
(1,181)         1:A:111:GLY:C         1:A:112:LEU:N         1:A:112:LEU:CA         1:A:112:LEU:C         17         3.36           (1,416)         1:A:111:GLY:C         1:A:112:LEU:N         1:A:112:LEU:CA         1:A:112:LEU:C         17         3.36           (1,378)         1:A:89:GLU:C         1:A:90:VAL:N         1:A:90:VAL:CA         1:A:90:VAL:C         8         1.48           (1,143)         1:A:89:GLU:C         1:A:90:VAL:N         1:A:90:VAL:CA         1:A:90:VAL:C         8         1.48           (1,176)         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:N         1:A:108:GLY:CA         1:A:108:GLY:C         6         2.52           (1,411)         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:N         1:A:108:GLY:CA         1:A:108:GLY:C         6         2.52           (1,741)         1:A:46:VAL:C         1:A:47:SER:N         1:A:47:SER:CA         1:A:47:SER:C         4         1.84           (1,309)         1:A:46:VAL:C         1:A:47:SER:N         1:A:47:SER:CA         1:A:47:SER:C         4         1.84           (1,382)         1:A:91:ARG:C         1:A:92:SER:N         1:A:92:SER:CA         1:A:92:SER:C         3         2.65           (1,147)         1:A:91:ARG:C         1:A:92:SER:N         1:A:92:SER:CA         1:A:92:SER:C         3 <td>5.34 5.34 4.91 4.91 4.69</td>	5.34 5.34 4.91 4.91 4.69
(1,416)         1:A:111:GLY:C         1:A:112:LEU:N         1:A:112:LEU:CA         1:A:112:LEU:C         17         3.36           (1,378)         1:A:89:GLU:C         1:A:90:VAL:N         1:A:90:VAL:CA         1:A:90:VAL:C         8         1.48           (1,143)         1:A:89:GLU:C         1:A:90:VAL:N         1:A:90:VAL:CA         1:A:90:VAL:C         8         1.48           (1,176)         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:N         1:A:108:GLY:CA         1:A:108:GLY:C         6         2.52           (1,411)         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:N         1:A:108:GLY:CA         1:A:108:GLY:C         6         2.52           (1,74)         1:A:46:VAL:C         1:A:47:SER:N         1:A:47:SER:CA         1:A:47:SER:C         4         1.84           (1,309)         1:A:46:VAL:C         1:A:47:SER:N         1:A:47:SER:CA         1:A:47:SER:C         4         1.84           (1,382)         1:A:91:ARG:C         1:A:92:SER:N         1:A:92:SER:CA         1:A:92:SER:C         3         2.65           (1,147)         1:A:91:ARG:C         1:A:92:SER:N         1:A:92:SER:CA         1:A:92:SER:C         3         2.65	5.34 4.91 4.91 4.69
(1,378)         1:A:89:GLU:C         1:A:90:VAL:N         1:A:90:VAL:CA         1:A:90:VAL:C         8         1.48           (1,143)         1:A:89:GLU:C         1:A:90:VAL:N         1:A:90:VAL:CA         1:A:90:VAL:C         8         1.48           (1,176)         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:N         1:A:108:GLY:CA         1:A:108:GLY:C         6         2.52           (1,411)         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:N         1:A:108:GLY:CA         1:A:108:GLY:C         6         2.52           (1,74)         1:A:46:VAL:C         1:A:47:SER:N         1:A:47:SER:CA         1:A:47:SER:C         4         1.84           (1,309)         1:A:46:VAL:C         1:A:47:SER:N         1:A:47:SER:CA         1:A:47:SER:C         4         1.84           (1,382)         1:A:91:ARG:C         1:A:92:SER:N         1:A:92:SER:CA         1:A:92:SER:C         3         2.65           (1,147)         1:A:91:ARG:C         1:A:92:SER:N         1:A:92:SER:CA         1:A:92:SER:C         3         2.65	4.91 4.91 4.69
(1,143)         1:A:89:GLU:C         1:A:90:VAL:N         1:A:90:VAL:CA         1:A:90:VAL:C         8         1.48           (1,176)         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:N         1:A:108:GLY:CA         1:A:108:GLY:C         6         2.52           (1,411)         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:N         1:A:108:GLY:CA         1:A:108:GLY:C         6         2.52           (1,74)         1:A:46:VAL:C         1:A:47:SER:N         1:A:47:SER:CA         1:A:47:SER:C         4         1.84           (1,309)         1:A:46:VAL:C         1:A:47:SER:N         1:A:47:SER:CA         1:A:47:SER:C         4         1.84           (1,382)         1:A:91:ARG:C         1:A:92:SER:N         1:A:92:SER:CA         1:A:92:SER:C         3         2.65           (1,147)         1:A:91:ARG:C         1:A:92:SER:N         1:A:92:SER:CA         1:A:92:SER:C         3         2.65	4.91 4.69
(1,176)       1:A:107:PRO:C       1:A:108:GLY:N       1:A:108:GLY:CA       1:A:108:GLY:C       6       2.52         (1,411)       1:A:107:PRO:C       1:A:108:GLY:N       1:A:108:GLY:CA       1:A:108:GLY:C       6       2.52         (1,74)       1:A:46:VAL:C       1:A:47:SER:N       1:A:47:SER:CA       1:A:47:SER:C       4       1.84         (1,309)       1:A:46:VAL:C       1:A:47:SER:N       1:A:47:SER:CA       1:A:47:SER:C       4       1.84         (1,382)       1:A:91:ARG:C       1:A:92:SER:N       1:A:92:SER:CA       1:A:92:SER:C       3       2.65         (1,147)       1:A:91:ARG:C       1:A:92:SER:N       1:A:92:SER:CA       1:A:92:SER:C       3       2.65	4.69
(1,411)       1:A:107:PRO:C       1:A:108:GLY:N       1:A:108:GLY:CA       1:A:108:GLY:C       6       2.52         (1,74)       1:A:46:VAL:C       1:A:47:SER:N       1:A:47:SER:CA       1:A:47:SER:C       4       1.84         (1,309)       1:A:46:VAL:C       1:A:47:SER:N       1:A:47:SER:CA       1:A:47:SER:C       4       1.84         (1,382)       1:A:91:ARG:C       1:A:92:SER:N       1:A:92:SER:CA       1:A:92:SER:C       3       2.65         (1,147)       1:A:91:ARG:C       1:A:92:SER:N       1:A:92:SER:CA       1:A:92:SER:C       3       2.65	
(1,74)       1:A:46:VAL:C       1:A:47:SER:N       1:A:47:SER:CA       1:A:47:SER:C       4       1.84         (1,309)       1:A:46:VAL:C       1:A:47:SER:N       1:A:47:SER:CA       1:A:47:SER:C       4       1.84         (1,382)       1:A:91:ARG:C       1:A:92:SER:N       1:A:92:SER:CA       1:A:92:SER:C       3       2.65         (1,147)       1:A:91:ARG:C       1:A:92:SER:N       1:A:92:SER:CA       1:A:92:SER:C       3       2.65	
(1,309)       1:A:46:VAL:C       1:A:47:SER:N       1:A:47:SER:CA       1:A:47:SER:C       4       1.84         (1,382)       1:A:91:ARG:C       1:A:92:SER:N       1:A:92:SER:CA       1:A:92:SER:C       3       2.65         (1,147)       1:A:91:ARG:C       1:A:92:SER:N       1:A:92:SER:CA       1:A:92:SER:C       3       2.65	4.69
(1,382)       1:A:91:ARG:C       1:A:92:SER:N       1:A:92:SER:CA       1:A:92:SER:C       3       2.65         (1,147)       1:A:91:ARG:C       1:A:92:SER:N       1:A:92:SER:CA       1:A:92:SER:C       3       2.65	4.34
(1,147) 1:A:91:ARG:C 1:A:92:SER:N 1:A:92:SER:CA 1:A:92:SER:C 3 2.65	4.34
	4.27
$  (1.50)   1.4.31.4 \text{ SN} \cdot C   1.4.32. \text{CLH} \cdot N   1.4.32. \text{CHH} \cdot CA   1.4.32. \text{CHH} \cdot CA   5.32. $	4.27
	4.12
(1,285) 1:A:31:ASN:C 1:A:32:GLU:N 1:A:32:GLU:CA 1:A:32:GLU:C 5 2.71	4.12
(1,133) 1:A:84:GLY:C 1:A:85:MET:N 1:A:85:MET:CA 1:A:85:MET:C 2 2.92	3.55
(1,368) 1:A:84:GLY:C 1:A:85:MET:N 1:A:85:MET:CA 1:A:85:MET:C 2 2.92	3.55
(1,414) 1:A:109:PRO:C 1:A:110:ASN:N 1:A:110:ASN:CA 1:A:110:ASN:C 7 1.27	3.39
(1,179)   1:A:109:PRO:C   1:A:110:ASN:N   1:A:110:ASN:CA   1:A:110:ASN:C   7   1.27	3.39
(1,362)   1:A:79:LEU:C   1:A:80:ASP:N   1:A:80:ASP:CA   1:A:80:ASP:C   4   2.23	3.35
(1,127) 1:A:79:LEU:C 1:A:80:ASP:N 1:A:80:ASP:CA 1:A:80:ASP:C 4 2.23	3.35
(1,364)   1:A:81:THR:C   1:A:82:SER:N   1:A:82:SER:CA   1:A:82:SER:C   3   1.73	3.31
(1,129)   1:A:81:THR:C   1:A:82:SER:N   1:A:82:SER:CA   1:A:82:SER:C   3   1.73	3.31
(1,52)   1:A:32:GLU:C   1:A:33:TYR:N   1:A:33:TYR:CA   1:A:33:TYR:C   3   1.36	3.23
(1,287) 1:A:32:GLU:C 1:A:33:TYR:N 1:A:33:TYR:CA 1:A:33:TYR:C 3 1.36	3.23
(1,467) 1:A:139:HIS:C 1:A:140:LEU:N 1:A:140:LEU:CA 1:A:140:LEU:C 3 1.1	3.22
(1,232) 1:A:139:HIS:C 1:A:140:LEU:N 1:A:140:LEU:CA 1:A:140:LEU:C 3 1.1	3.22
(1,254) 1:A:11:SER:C 1:A:12:LEU:N 1:A:12:LEU:CA 1:A:12:LEU:C 6 1.51	3.17
(1,19) 1:A:11:SER:C 1:A:12:LEU:N 1:A:12:LEU:CA 1:A:12:LEU:C 6 1.51	3.17
(1,238) 1:A:3:TYR:C 1:A:4:ASN:N 1:A:4:ASN:CA 1:A:4:ASN:C 3 1.25	3.14
(1,3) 1:A:3:TYR:C 1:A:4:ASN:N 1:A:4:ASN:CA 1:A:4:ASN:C 3 1.25	3.14
(1,56) 1:A:36:HIS:C 1:A:37:LYS:N 1:A:37:LYS:CA 1:A:37:LYS:C 5 0.9	2.91
(1,291)   1:A:36:HIS:C   1:A:37:LYS:N   1:A:37:LYS:CA   1:A:37:LYS:C   5   0.9	2.91
(1,318) 1:A:53:THR:C 1:A:54:SER:N 1:A:54:SER:CA 1:A:54:SER:C 7 1.59	2.73
(1,83)   1:A:53:THR:C   1:A:54:SER:N   1:A:54:SER:CA   1:A:54:SER:C   7   1.59	2.73
(1,9)   1:A:6:GLU:C   1:A:7:GLU:N   1:A:7:GLU:CA   1:A:7:GLU:C   1   2.53	2.53
(1,244)   1:A:6:GLU:C   1:A:7:GLU:N   1:A:7:GLU:CA   1:A:7:GLU:C   1   2.53	2.53
(1,330)   1:A:60:SER:C   1:A:61:GLN:N   1:A:61:GLN:CA   1:A:61:GLN:C   2   2.05	2.51
(1,95)   1:A:60:SER:C   1:A:61:GLN:N   1:A:61:GLN:CA   1:A:61:GLN:C   2   2.05	2.51
(1,102) 1:A:65:PRO:C 1:A:66:SER:N 1:A:66:SER:CA 1:A:66:SER:C 2 1.99	2.34
(1,337) 1:A:65:PRO:C 1:A:66:SER:N 1:A:66:SER:CA 1:A:66:SER:C 2 1.99	2.34
(1,461) 1:A:136:SER:C 1:A:137:TYR:N 1:A:137:TYR:CA 1:A:137:TYR:C 3 1.78	2.25
(1,226) 1:A:136:SER:C 1:A:137:TYR:N 1:A:137:TYR:CA 1:A:137:TYR:C 3 1.78	2.25
(1,99) 1:A:63:GLY:C 1:A:64:TRP:N 1:A:64:TRP:CA 1:A:64:TRP:C 2 1.57	2.17
(1,334) 1:A:63:GLY:C 1:A:64:TRP:N 1:A:64:TRP:CA 1:A:64:TRP:C 2 1.57	2.17
(1,218) 1:A:131:GLU:C 1:A:132:GLU:N 1:A:132:GLU:CA 1:A:132:GLU:C 3 1.27	2.06
(1,453) 1:A:131:GLU:C 1:A:132:GLU:N 1:A:132:GLU:CA 1:A:132:GLU:C 3 1.27	2.06
(1,91) 1:A:58:PHE:C 1:A:59:ASP:N 1:A:59:ASP:CA 1:A:59:ASP:C 3 0.76	



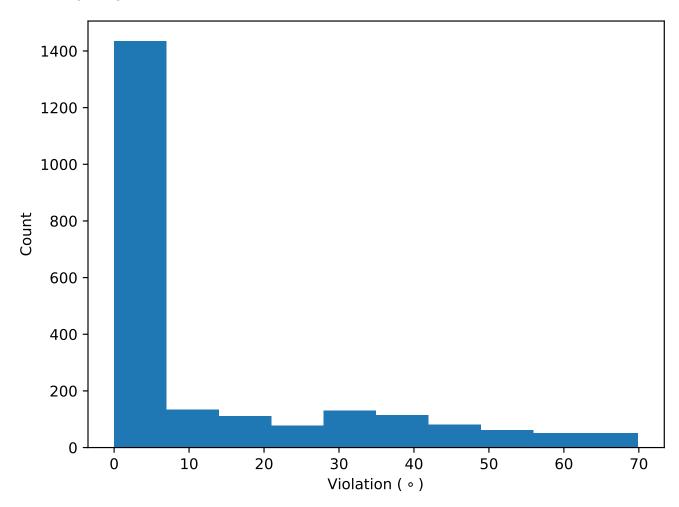
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models	Mean ( o )	Max ( ° )
(1,326)	1:A:58:PHE:C	1:A:59:ASP:N	1:A:59:ASP:CA	1:A:59:ASP:C	3	0.76	1.67
(1,341)	1:A:67:PHE:C	1:A:68:THR:N	1:A:68:THR:CA	1:A:68:THR:C	2	1.03	1.59
(1,106)	1:A:67:PHE:C	1:A:68:THR:N	1:A:68:THR:CA	1:A:68:THR:C	2	1.03	1.59
(1,45)	1:A:25:THR:C	1:A:26:GLU:N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



## 9.8 All violated dihedral angleeee restraints

### 9.8.1 Histogram: Distribution of violations

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



### 9.8.2 Table: All violated dihedral angle restraints

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

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



	ed from previous pe					
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	$\textbf{Violation} \ (\ \circ \ )$
(1,409)	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	1:A:107:PRO:N	8	68.01
(1,174)	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	1:A:107:PRO:N	8	68.01
(1,343)	1:A:68:THR:C	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	1	66.84
(1,108)	1:A:68:THR:C	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	1	66.84
(1,343)	1:A:68:THR:C	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	8	66.32
(1,108)	1:A:68:THR:C	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	8	66.32
(1,94)	1:A:60:SER:N	1:A:60:SER:CA	1:A:60:SER:C	1:A:61:GLN:N	12	66.14
(1,329)	1:A:60:SER:N	1:A:60:SER:CA	1:A:60:SER:C	1:A:61:GLN:N	12	66.14
(1,408)	1:A:105:ASP:C	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	3	65.72
(1,173)	1:A:105:ASP:C	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	3	65.72
(1,94)	1:A:60:SER:N	1:A:60:SER:CA	1:A:60:SER:C	1:A:61:GLN:N	5	65.67
(1,329)	1:A:60:SER:N	1:A:60:SER:CA	1:A:60:SER:C	1:A:61:GLN:N	5	65.67
(1,408)	1:A:105:ASP:C	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	19	65.55
(1,173)	1:A:105:ASP:C	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	19	65.55
(1,408)	1:A:105:ASP:C	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	6	65.44
(1,173)	1:A:105:ASP:C	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	6	65.44
(1,343)	1:A:68:THR:C	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	19	65.36
(1,108)	1:A:68:THR:C	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	19	65.36
(1,398)	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	1:A:100:GLY:CA	1:A:100:GLY:C	19	65.33
(1,163)	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	1:A:100:GLY:CA	1:A:100:GLY:C	19	65.33
(1,43)	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	1:A:25:THR:CA	1:A:25:THR:C	13	64.85
(1,278)	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	1:A:25:THR:CA	1:A:25:THR:C	13	64.85
(1,94)	1:A:60:SER:N	1:A:60:SER:CA	1:A:60:SER:C	1:A:61:GLN:N	19	64.62
(1,329)	1:A:60:SER:N	1:A:60:SER:CA	1:A:60:SER:C	1:A:61:GLN:N	19	64.62
(1,409)	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	1:A:107:PRO:N	5	64.58
(1,174)	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	1:A:107:PRO:N	5	64.58
(1,408)	1:A:105:ASP:C	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	17	64.33
(1,173)	1:A:105:ASP:C	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	17	64.33
(1,409)	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	1:A:107:PRO:N	2	64.25
(1,174)	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	1:A:107:PRO:N	2	64.25
(1,372)	1:A:86:ILE:C	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	3	63.56
(1,137)	1:A:86:ILE:C	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	3	63.56
(1,409)	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	1:A:107:PRO:N	19	63.45
(1,174)	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	1:A:107:PRO:N	19	63.45
(1,69)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	13	63.31
(1,304)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	13	63.31
(1,343)	1:A:68:THR:C	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	6	63.16
(1,108)	1:A:68:THR:C	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	6	63.16
(1,69)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	19	63.07
(1,304)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	19	63.07
(1,408)	1:A:105:ASP:C	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	7	62.88
(1,173)	1:A:105:ASP:C	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	7	62.88
(1,408)	1:A:105:ASP:C	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	10	62.84
(1,173)	1:A:105:ASP:C	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	10	62.84
(1,408)	1:A:105:ASP:C	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	14	62.75
(1,173)	1:A:105:ASP:C	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	14	62.75
(1,179) $(1,409)$	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	1:A:107:PRO:N	17	62.64
(1,174)	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	1:A:107:PRO:N	17	62.64
(1,114) $(1,409)$	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	1:A:107:PRO:N	9	62.54
(1,174)	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	1:A:107:PRO:N	9	62.54
(1,69)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	5	61.81
(2,00)			1.11.111101.0	1.11.10.1111		ed on nert nage



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



	ed from previous po	*				
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation $(\circ)$
(1,409)	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	1:A:107:PRO:N	11	54.41
(1,174)	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	1:A:107:PRO:N	11	54.41
(1,43)	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	1:A:25:THR:CA	1:A:25:THR:C	5	54.27
(1,278)	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	1:A:25:THR:CA	1:A:25:THR:C	5	54.27
(1,43)	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	1:A:25:THR:CA	1:A:25:THR:C	17	53.9
(1,278)	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	1:A:25:THR:CA	1:A:25:THR:C	17	53.9
(1,43)	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	1:A:25:THR:CA	1:A:25:THR:C	8	53.63
(1,278)	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	1:A:25:THR:CA	1:A:25:THR:C	8	53.63
(1,94)	1:A:60:SER:N	1:A:60:SER:CA	1:A:60:SER:C	1:A:61:GLN:N	3	53.48
(1,329)	1:A:60:SER:N	1:A:60:SER:CA	1:A:60:SER:C	1:A:61:GLN:N	3	53.48
(1,409)	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	1:A:107:PRO:N	14	53.37
(1,174)	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	1:A:107:PRO:N	14	53.37
(1,94)	1:A:60:SER:N	1:A:60:SER:CA	1:A:60:SER:C	1:A:61:GLN:N	10	53.06
(1,329)	1:A:60:SER:N	1:A:60:SER:CA	1:A:60:SER:C	1:A:61:GLN:N	10	53.06
(1,344)	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	1:A:70:PRO:N	20	52.43
(1,109)	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	1:A:70:PRO:N	20	52.43
(1,58)	1:A:37:LYS:C	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	7	52.32
(1,293)	1:A:37:LYS:C	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	7	52.32
(1,412)	1:A:108:GLY:N	1:A:108:GLY:CA	1:A:108:GLY:C	1:A:109:PRO:N	14	51.98
(1,177)	1:A:108:GLY:N	1:A:108:GLY:CA	1:A:108:GLY:C	1:A:109:PRO:N	14	51.98
(1,344)	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	1:A:70:PRO:N	2	51.25
(1,109)	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	1:A:70:PRO:N	2	51.25
(1,372)	1:A:86:ILE:C	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	10	51.14
(1,137)	1:A:86:ILE:C	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	10	51.14
(1,417)	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	1:A:113:ARG:N	1	51.12
(1,182)	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	1:A:113:ARG:N	1	51.12
(1,409)	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	1:A:107:PRO:N	3	51.01
(1,174)	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	1:A:107:PRO:N	3	51.01
(1,43)	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	1:A:25:THR:CA	1:A:25:THR:C	12	50.94
(1,278)	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	1:A:25:THR:CA	1:A:25:THR:C	12	50.94
(1,372)	1:A:86:ILE:C	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	5	50.81
(1,137)	1:A:86:ILE:C	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	5	50.81
(1,372)	1:A:86:ILE:C	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	15	50.19
(1,137)	1:A:86:ILE:C	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	15	50.19
(1,344)	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	1:A:70:PRO:N	4	50.18
(1,109)	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	1:A:70:PRO:N	4	50.18
(1,343)	1:A:68:THR:C	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	17	50.11
(1,108)	1:A:68:THR:C	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	17	50.11
(1,412)	1:A:108:GLY:N	1:A:108:GLY:CA	1:A:108:GLY:C	1:A:109:PRO:N	19	49.99
(1,177)	1:A:108:GLY:N	1:A:108:GLY:CA	1:A:108:GLY:C	1:A:109:PRO:N	19	49.99
(1,412)	1:A:108:GLY:N	1:A:108:GLY:CA	1:A:108:GLY:C	1:A:109:PRO:N	11	49.94
(1,177)	1:A:108:GLY:N	1:A:108:GLY:CA	1:A:108:GLY:C	1:A:109:PRO:N	11	49.94
(1,343)	1:A:68:THR:C	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	2	49.83
(1,108)	1:A:68:THR:C	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	2	49.83
(1,417)	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	1:A:113:ARG:N	11	49.39
(1,182)	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	1:A:113:ARG:N	11	49.39
(1,344)	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	1:A:70:PRO:N	12	49.13
(1,109)	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	1:A:70:PRO:N	12	49.13
(1,417)	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	1:A:113:ARG:N	8	49.12
(1,182)	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	1:A:113:ARG:N	8	49.12
(1,372)	1:A:86:ILE:C	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	6	48.35
					Continu	ed on next page



Key	$rac{d\ from\ previous\ po}{\mathbf{Atom-1}}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation ( o )
(1,137)	1:A:86:ILE:C	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	6	48.35
(1,43)	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	1:A:25:THR:CA	1:A:25:THR:C	15	48.09
(1,278)	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	1:A:25:THR:CA	1:A:25:THR:C	15	48.09
(1,412)	1:A:108:GLY:N	1:A:108:GLY:CA	1:A:108:GLY:C	1:A:109:PRO:N	20	47.89
(1,177)	1:A:108:GLY:N	1:A:108:GLY:CA	1:A:108:GLY:C	1:A:109:PRO:N	20	47.89
(1,408)	1:A:105:ASP:C	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	5	47.32
(1,173)	1:A:105:ASP:C	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	5	47.32
(1,372)	1:A:86:ILE:C	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	14	47.07
(1,137)	1:A:86:ILE:C	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	14	47.07
(1,417)	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	1:A:113:ARG:N	13	46.95
(1,182)	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	1:A:113:ARG:N	13	46.95
(1,372)	1:A:86:ILE:C	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	2	46.92
(1,137)	1:A:86:ILE:C	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	2	46.92
(1,344)	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	1:A:70:PRO:N	8	46.39
(1,109)	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	1:A:70:PRO:N	8	46.39
(1,43)	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	1:A:25:THR:CA	1:A:25:THR:C	11	46.23
(1,278)	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	1:A:25:THR:CA	1:A:25:THR:C	11	46.23
(1,372)	1:A:86:ILE:C	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	4	46.17
(1,137)	1:A:86:ILE:C	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	4	46.17
(1,417)	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	1:A:113:ARG:N	12	46.09
(1,182)	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	1:A:113:ARG:N	12	46.09
(1,408)	1:A:105:ASP:C	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	15	45.32
(1,173)	1:A:105:ASP:C	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	15	45.32
(1,338)	1:A:66:SER:N	1:A:66:SER:CA	1:A:66:SER:C	1:A:67:PHE:N	7	45.31
(1,103)	1:A:66:SER:N	1:A:66:SER:CA	1:A:66:SER:C	1:A:67:PHE:N	7	45.31
(1,69)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	12	45.12
(1,304)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	12	45.12
(1,59)	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	1:A:39:GLU:N	8	45.11
(1,294)	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	1:A:39:GLU:N	8	45.11
(1,43)	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	1:A:25:THR:CA	1:A:25:THR:C	19	45.06
(1,278)	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	1:A:25:THR:CA	1:A:25:THR:C	19	45.06
(1,372)	1:A:86:ILE:C	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	12	45.04
(1,137)	1:A:86:ILE:C	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	12	45.04
(1,94)	1:A:60:SER:N	1:A:60:SER:CA	1:A:60:SER:C	1:A:61:GLN:N	11	44.86
(1,69)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	15	44.86
(1,329)	1:A:60:SER:N	1:A:60:SER:CA	1:A:60:SER:C	1:A:61:GLN:N	11	44.86
(1,304)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	15	44.86
(1,94)	1:A:60:SER:N	1:A:60:SER:CA	1:A:60:SER:C	1:A:61:GLN:N	14	44.6
(1,329)	1:A:60:SER:N	1:A:60:SER:CA	1:A:60:SER:C	1:A:61:GLN:N	14	44.6
(1,94)	1:A:60:SER:N	1:A:60:SER:CA	1:A:60:SER:C	1:A:61:GLN:N	16	44.51
(1,329)	1:A:60:SER:N	1:A:60:SER:CA	1:A:60:SER:C	1:A:61:GLN:N	16	44.51
(1,372)	1:A:86:ILE:C	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	11	44.49
(1,137)	1:A:86:ILE:C	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	11	44.49
(1,344)	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	1:A:70:PRO:N	9	44.37
(1,109)	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	1:A:70:PRO:N	9	44.37
(1,417)	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	1:A:113:ARG:N	18	44.26
(1,182)	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	1:A:113:ARG:N	18	44.26
(1,417)	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	1:A:113:ARG:N	2	43.85
` ' /	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	1:A:113:ARG:N	2	43.85
(1,182)	1.A.112.DEU.N	1.71.112.1110.071	1.111.111			
(1,182) $(1,46)$	1:A:26:GLU:N	1:A:26:GLU:CA	1:A:26:GLU:C	1:A:27:PRO:N	2	43.84



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



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



	ed from previous pe					
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation $(\circ)$
(1,58)	1:A:37:LYS:C	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	16	37.3
(1,293)	1:A:37:LYS:C	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	16	37.3
(1,372)	1:A:86:ILE:C	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	19	37.12
(1,137)	1:A:86:ILE:C	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	19	37.12
(1,46)	1:A:26:GLU:N	1:A:26:GLU:CA	1:A:26:GLU:C	1:A:27:PRO:N	18	37.06
(1,281)	1:A:26:GLU:N	1:A:26:GLU:CA	1:A:26:GLU:C	1:A:27:PRO:N	18	37.06
(1,69)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	16	37.0
(1,304)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	16	37.0
(1,46)	1:A:26:GLU:N	1:A:26:GLU:CA	1:A:26:GLU:C	1:A:27:PRO:N	6	36.87
(1,281)	1:A:26:GLU:N	1:A:26:GLU:CA	1:A:26:GLU:C	1:A:27:PRO:N	6	36.87
(1,46)	1:A:26:GLU:N	1:A:26:GLU:CA	1:A:26:GLU:C	1:A:27:PRO:N	8	36.64
(1,281)	1:A:26:GLU:N	1:A:26:GLU:CA	1:A:26:GLU:C	1:A:27:PRO:N	8	36.64
(1,417)	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	1:A:113:ARG:N	3	36.58
(1,182)	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	1:A:113:ARG:N	3	36.58
(1,43)	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	1:A:25:THR:CA	1:A:25:THR:C	1	36.5
(1,278)	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	1:A:25:THR:CA	1:A:25:THR:C	1	36.5
(1,46)	1:A:26:GLU:N	1:A:26:GLU:CA	1:A:26:GLU:C	1:A:27:PRO:N	10	36.42
(1,281)	1:A:26:GLU:N	1:A:26:GLU:CA	1:A:26:GLU:C	1:A:27:PRO:N	10	36.42
(1,398)	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	1:A:100:GLY:CA	1:A:100:GLY:C	11	35.91
(1,163)	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	1:A:100:GLY:CA	1:A:100:GLY:C	11	35.91
(1,379)	1:A:90:VAL:N	1:A:90:VAL:CA	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	10	35.88
(1,379) $(1,144)$	1:A:90:VAL:N	1:A:90:VAL:CA	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	10	35.88
· · /	1:A:105:ASP:C	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	20	35.81
(1,408)					20	
(1,173)	1:A:105:ASP:C	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C		35.81
(1,398)	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	1:A:100:GLY:CA	1:A:100:GLY:C	14	35.79
(1,163)	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	1:A:100:GLY:CA	1:A:100:GLY:C	14	35.79
(1,379)	1:A:90:VAL:N	1:A:90:VAL:CA	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	5	35.74
(1,144)	1:A:90:VAL:N	1:A:90:VAL:CA	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	5	35.74
(1,409)	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	1:A:107:PRO:N	16	35.71
(1,174)	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	1:A:107:PRO:N	16	35.71
(1,69)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	6	35.64
(1,304)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	6	35.64
(1,412)	1:A:108:GLY:N	1:A:108:GLY:CA	1:A:108:GLY:C	1:A:109:PRO:N	12	35.58
(1,177)	1:A:108:GLY:N	1:A:108:GLY:CA	1:A:108:GLY:C	1:A:109:PRO:N	12	35.58
(1,69)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	3	35.42
(1,304)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	3	35.42
(1,338)	1:A:66:SER:N	1:A:66:SER:CA	1:A:66:SER:C	1:A:67:PHE:N	14	35.28
(1,103)	1:A:66:SER:N	1:A:66:SER:CA	1:A:66:SER:C	1:A:67:PHE:N	14	35.28
(1,59)	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	1:A:39:GLU:N	7	35.2
(1,294)	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	1:A:39:GLU:N	7	35.2
(1,343)	1:A:68:THR:C	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	5	34.78
(1,108)	1:A:68:THR:C	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	5	34.78
(1,58)	1:A:37:LYS:C	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	19	34.73
(1,293)	1:A:37:LYS:C	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	19	34.73
(1,398)	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	1:A:100:GLY:CA	1:A:100:GLY:C	17	34.71
(1,163)	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	1:A:100:GLY:CA	1:A:100:GLY:C	17	34.71
(1,373)	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	1:A:88:THR:N	14	34.58
(1,138)	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	1:A:88:THR:N	14	34.58
(1,343)	1:A:68:THR:C	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	9	34.56
(1,08)	1:A:68:THR:C	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	9	34.56
(1,373)	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	1:A:88:THR:N	10	34.52
(1,010)	1.11.01.A1IG.IV	1.11.01.111G.UA	1.11.01.AIIG.C	1.71.00.1111.11		34.32



Key	$rac{ed\ from\ previous\ po}{\mathbf{Atom-1}}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation ( o )
(1,138)	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	1:A:88:THR:N	10	34.52
(1,409)	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	1:A:107:PRO:N	13	34.41
(1,174)	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	1:A:107:PRO:N	13	34.41
(1,69)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	18	34.25
(1,304)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	18	34.25
(1,417)	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	1:A:113:ARG:N	16	34.12
(1,182)	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	1:A:113:ARG:N	16	34.12
(1,58)	1:A:37:LYS:C	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	4	33.89
(1,293)	1:A:37:LYS:C	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	4	33.89
(1,417)	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	1:A:113:ARG:N	20	33.87
(1,182)	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	1:A:113:ARG:N	20	33.87
(1,46)	1:A:26:GLU:N	1:A:26:GLU:CA	1:A:26:GLU:C	1:A:27:PRO:N	13	33.69
(1,372)	1:A:86:ILE:C	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	20	33.69
(1,281)	1:A:26:GLU:N	1:A:26:GLU:CA	1:A:26:GLU:C	1:A:27:PRO:N	13	33.69
(1,137)	1:A:86:ILE:C	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	20	33.69
(1,344)	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	1:A:70:PRO:N	17	33.47
(1,109)	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	1:A:70:PRO:N	17	33.47
(1,398)	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	1:A:100:GLY:CA	1:A:100:GLY:C	20	33.28
(1,163)	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	1:A:100:GLY:CA	1:A:100:GLY:C	20	33.28
(1,46)	1:A:26:GLU:N	1:A:26:GLU:CA	1:A:26:GLU:C	1:A:27:PRO:N	16	33.09
(1,281)	1:A:26:GLU:N	1:A:26:GLU:CA	1:A:26:GLU:C	1:A:27:PRO:N	16	33.09
(1,201) $(1,417)$	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	1:A:113:ARG:N	4	33.02
(1,117) $(1,182)$	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	1:A:113:ARG:N	4	33.02
(1,409)	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	1:A:107:PRO:N	15	32.73
(1,174)	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	1:A:107:PRO:N	15	32.73
(1,338)	1:A:66:SER:N	1:A:66:SER:CA	1:A:66:SER:C	1:A:67:PHE:N	13	32.57
(1,103)	1:A:66:SER:N	1:A:66:SER:CA	1:A:66:SER:C	1:A:67:PHE:N	13	32.57
(1,408)	1:A:105:ASP:C	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	4	32.42
(1,173)	1:A:105:ASP:C	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	4	32.42
(1,379)	1:A:90:VAL:N	1:A:90:VAL:CA	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	7	32.35
(1,344)	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	1:A:70:PRO:N	10	32.35
(1,144)	1:A:90:VAL:N	1:A:90:VAL:CA	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	7	32.35
(1,109)	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	1:A:70:PRO:N	10	32.35
(1,59)	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	1:A:39:GLU:N	9	32.29
(1,294)	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	1:A:39:GLU:N	9	32.29
(1,344)	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	1:A:70:PRO:N	15	32.2
(1,109)	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	1:A:70:PRO:N	15	32.2
(1,398)	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	1:A:100:GLY:CA	1:A:100:GLY:C	1	31.94
(1,163)	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	1:A:100:GLY:CA	1:A:100:GLY:C	1	31.94
(1,59)	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	1:A:39:GLU:N	4	31.78
(1,294)	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	1:A:39:GLU:N	4	31.78
(1,398)	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	1:A:100:GLY:CA	1:A:100:GLY:C	12	31.3
(1,163)	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	1:A:100:GLY:CA	1:A:100:GLY:C	12	31.3
(1,46)	1:A:26:GLU:N	1:A:26:GLU:CA	1:A:26:GLU:C	1:A:27:PRO:N	11	31.29
(1,281)	1:A:26:GLU:N	1:A:26:GLU:CA	1:A:26:GLU:C	1:A:27:PRO:N	11	31.29
(1,69)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	7	31.24
(1,304)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	7	31.24
(1,59)	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	1:A:39:GLU:N	19	31.16
(1,417)	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	1:A:113:ARG:N	19	31.16
(1,294)	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	1:A:39:GLU:N	19	31.16
(1,182)	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	1:A:113:ARG:N	19	31.16
( ))						ed on nert nage



	ed from previous pe					
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation ( $\circ$ )
(1,398)	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	1:A:100:GLY:CA	1:A:100:GLY:C	9	31.12
(1,163)	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	1:A:100:GLY:CA	1:A:100:GLY:C	9	31.12
(1,344)	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	1:A:70:PRO:N	6	31.11
(1,109)	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	1:A:70:PRO:N	6	31.11
(1,69)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	17	31.08
(1,304)	1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:CA	1:A:44:ASP:C	1:A:45:ILE:N	17	31.08
(1,398)	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	1:A:100:GLY:CA	1:A:100:GLY:C	6	30.9
(1,163)	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	1:A:100:GLY:CA	1:A:100:GLY:C	6	30.9
(1,417)	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	1:A:113:ARG:N	15	30.76
(1,379)	1:A:90:VAL:N	1:A:90:VAL:CA	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	4	30.76
(1,182)	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	1:A:113:ARG:N	15	30.76
(1,144)	1:A:90:VAL:N	1:A:90:VAL:CA	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	4	30.76
(1,373)	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	1:A:88:THR:N	17	30.72
(1,138)	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	1:A:88:THR:N	17	30.72
(1,59)	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	1:A:39:GLU:N	13	30.61
(1,294)	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	1:A:39:GLU:N	13	30.61
(1,340)	1:A:67:PHE:N	1:A:67:PHE:CA	1:A:67:PHE:C	1:A:68:THR:N	7	30.49
(1,105)	1:A:67:PHE:N	1:A:67:PHE:CA	1:A:67:PHE:C	1:A:68:THR:N	7	30.49
(1,373)	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	1:A:88:THR:N	7	30.45
(1,138)	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	1:A:88:THR:N	7	30.45
(1,46)	1:A:26:GLU:N	1:A:26:GLU:CA	1:A:26:GLU:C	1:A:27:PRO:N	7	30.41
(1,281)	1:A:26:GLU:N	1:A:26:GLU:CA	1:A:26:GLU:C	1:A:27:PRO:N	7	30.41
(1,46)	1:A:26:GLU:N	1:A:26:GLU:CA	1:A:26:GLU:C	1:A:27:PRO:N	12	30.33
(1,281)	1:A:26:GLU:N	1:A:26:GLU:CA	1:A:26:GLU:C	1:A:27:PRO:N	12	30.33
(1,412)	1:A:108:GLY:N	1:A:108:GLY:CA	1:A:108:GLY:C	1:A:109:PRO:N	17	30.31
(1,177)	1:A:108:GLY:N	1:A:108:GLY:CA	1:A:108:GLY:C	1:A:109:PRO:N	17	30.31
(1,379)	1:A:90:VAL:N	1:A:90:VAL:CA	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	3	30.21
(1,144)	1:A:90:VAL:N	1:A:90:VAL:CA	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	3	30.21
(1,343)	1:A:68:THR:C	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	20	30.14
(1,108)	1:A:68:THR:C	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	20	30.14
(1,340)	1:A:67:PHE:N	1:A:67:PHE:CA	1:A:67:PHE:C	1:A:68:THR:N	13	30.09
(1,105)	1:A:67:PHE:N	1:A:67:PHE:CA	1:A:67:PHE:C	1:A:68:THR:N	13	30.09
(1,58)	1:A:37:LYS:C	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	10	30.01
(1,293)	1:A:37:LYS:C	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	10	30.01
(1,58)	1:A:37:LYS:C	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	17	29.96
(1,293)	1:A:37:LYS:C	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	17	29.96
(1,59)	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	1:A:39:GLU:N	5	29.69
(1,294)	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	1:A:39:GLU:N	5	29.69
(1,412)	1:A:108:GLY:N	1:A:108:GLY:CA	1:A:108:GLY:C	1:A:109:PRO:N	9	29.54
(1,177)	1:A:108:GLY:N	1:A:108:GLY:CA	1:A:108:GLY:C	1:A:109:PRO:N	9	29.54
(1,343)	1:A:68:THR:C	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	15	29.51
(1,108)	1:A:68:THR:C	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	15	29.51
(1,412)	1:A:108:GLY:N	1:A:108:GLY:CA	1:A:108:GLY:C	1:A:109:PRO:N	15	29.5
(1,177)	1:A:108:GLY:N	1:A:108:GLY:CA	1:A:108:GLY:C	1:A:109:PRO:N	15	29.5
(1,379)	1:A:90:VAL:N	1:A:90:VAL:CA	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	8	29.47
(1,344)	1:A:90:VAL:N	1:A:90:VAL:CA	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	8	29.47
(1,340)	1:A:67:PHE:N	1:A:67:PHE:CA	1:A:67:PHE:C	1:A:68:THR:N	3	29.19
(1,105)	1:A:67:PHE:N	1:A:67:PHE:CA	1:A:67:PHE:C	1:A:68:THR:N	3	29.19
(1,373)	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	1:A:88:THR:N	3	29.14
(1,313) $(1,138)$	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	1:A:88:THR:N	3	29.14
(1,343)	1:A:68:THR:C	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	10	29.12
(1,010)	1.11.00.11110.0	1.11.00.1110.11	1.11.00.11 0.011	1.11.00.L10.0		ad an next nage



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



	ed from previous po					
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation ( $\circ$ )
(1,417)	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	1:A:113:ARG:N	9	24.22
(1,182)	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	1:A:113:ARG:N	9	24.22
(1,43)	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	1:A:25:THR:CA	1:A:25:THR:C	6	24.21
(1,278)	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	1:A:25:THR:CA	1:A:25:THR:C	6	24.21
(1,373)	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	1:A:88:THR:N	16	23.98
(1,138)	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	1:A:88:THR:N	16	23.98
(1,58)	1:A:37:LYS:C	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	15	23.95
(1,293)	1:A:37:LYS:C	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	15	23.95
(1,379)	1:A:90:VAL:N	1:A:90:VAL:CA	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	15	23.92
(1,144)	1:A:90:VAL:N	1:A:90:VAL:CA	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	15	23.92
(1,379)	1:A:90:VAL:N	1:A:90:VAL:CA	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	18	23.3
(1,144)	1:A:90:VAL:N	1:A:90:VAL:CA	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	18	23.3
(1,379)	1:A:90:VAL:N	1:A:90:VAL:CA	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	1	23.26
(1,144)	1:A:90:VAL:N	1:A:90:VAL:CA	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	1	23.26
(1,94)	1:A:60:SER:N	1:A:60:SER:CA	1:A:60:SER:C	1:A:61:GLN:N	15	23.23
(1,329)	1:A:60:SER:N	1:A:60:SER:CA	1:A:60:SER:C	1:A:61:GLN:N	15	23.23
(1,59)	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	1:A:39:GLU:N	12	22.72
(1,294)	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	1:A:39:GLU:N	12	22.72
(1,379)	1:A:90:VAL:N	1:A:90:VAL:CA	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	13	22.54
(1,144)	1:A:90:VAL:N	1:A:90:VAL:CA	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	13	22.54
(1,412)	1:A:108:GLY:N	1:A:108:GLY:CA	1:A:108:GLY:C	1:A:109:PRO:N	1	22.48
(1,177)	1:A:108:GLY:N	1:A:108:GLY:CA	1:A:108:GLY:C	1:A:109:PRO:N	1	22.48
(1,343)	1:A:68:THR:C	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	14	22.29
(1,108)	1:A:68:THR:C	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	14	22.29
(1,398)	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	1:A:100:GLY:CA	1:A:100:GLY:C	8	22.22
(1,163)	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	1:A:100:GLY:CA	1:A:100:GLY:C	8	22.22
(1,412)	1:A:108:GLY:N	1:A:108:GLY:CA	1:A:108:GLY:C	1:A:109:PRO:N	16	22.16
(1,177)	1:A:108:GLY:N	1:A:108:GLY:CA	1:A:108:GLY:C	1:A:109:PRO:N	16	22.16
(1,398)	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	1:A:100:GLY:CA	1:A:100:GLY:C	7	21.76
(1,340)	1:A:67:PHE:N	1:A:67:PHE:CA	1:A:67:PHE:C	1:A:68:THR:N	9	21.76
(1,163)	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	1:A:100:GLY:CA	1:A:100:GLY:C	7	21.76
(1,105)	1:A:67:PHE:N	1:A:67:PHE:CA	1:A:67:PHE:C	1:A:68:THR:N	9	21.76
(1,344)	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	1:A:70:PRO:N	11	21.73
(1,109)	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	1:A:70:PRO:N	11	21.73
(1,59)	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	1:A:39:GLU:N	20	21.71
(1,294)	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	1:A:39:GLU:N	20	21.71
(1,412)	1:A:108:GLY:N	1:A:108:GLY:CA	1:A:108:GLY:C	1:A:109:PRO:N	2	21.48
(1,177)	1:A:108:GLY:N	1:A:108:GLY:CA	1:A:108:GLY:C	1:A:109:PRO:N	2	21.48
(1,379)	1:A:90:VAL:N	1:A:90:VAL:CA	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	11	21.28
(1,313) $(1,144)$	1:A:90:VAL:N	1:A:90:VAL:CA	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	11	21.28
(1,58)	1:A:37:LYS:C	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	20	21.25
(1,38) $(1,293)$	1:A:37:LYS:C	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	20	21.25
(1,293) $(1,398)$	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	1:A:100:GLY:CA	1:A:100:GLY:C	20	21.15
(1,360) $(1,163)$	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	1:A:100:GLY:CA	1:A:100:GLT:C	2	21.15
(1,373)	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	1:A:88:THR:N	15	20.96
(1,373) $(1,138)$	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	1:A:88:THR:N	15	20.96
(1,138) (1,389)	1:A:95:ALA:N	1:A:95:ALA:CA	1:A:95:ALA:C	1:A:96:ASP:N	16	20.75
(1,369) $(1,154)$	1:A:95:ALA:N	1:A:95:ALA:CA 1:A:95:ALA:CA	1:A:95:ALA:C	1:A:96:ASP:N	16	20.75
(1,134) $(1,373)$	1:A:95:ALA:N 1:A:87:ARG:N	1:A:95:ALA:CA 1:A:87:ARG:CA	1:A:95:ALA:C 1:A:87:ARG:C	1:A:88:THR:N	12	20.49
(1,373) $(1,138)$	1:A:87:ARG:N 1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA 1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C 1:A:87:ARG:C	1:A:88:THR:N	12	20.49
(1,138) $(1,58)$	1:A:37:LYS:C	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	12	20.49
(1,38)	1:A:37:L13:U	1:A:30:GLU:N	1:A:30:GLU:UA	1:A:30:GLU:U		20.4



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



Key				A	3.5.1.1	TT0 7 . 0 / \
	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation $(\circ)$
(1,369)	1:A:85:MET:N	1:A:85:MET:CA	1:A:85:MET:C	1:A:86:ILE:N	12	16.8
(1,134)	1:A:85:MET:N	1:A:85:MET:CA	1:A:85:MET:C	1:A:86:ILE:N	12	16.8
(1,398)	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	1:A:100:GLY:CA	1:A:100:GLY:C	3	16.65
(1,379)	1:A:90:VAL:N	1:A:90:VAL:CA	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	19	16.65
(1,163)	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	1:A:100:GLY:CA	1:A:100:GLY:C	3	16.65
(1,144)	1:A:90:VAL:N	1:A:90:VAL:CA	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	19	16.65
(1,383)	1:A:92:SER:N	1:A:92:SER:CA	1:A:92:SER:C	1:A:93:ARG:N	20	16.6
(1,148)	1:A:92:SER:N	1:A:92:SER:CA	1:A:92:SER:C	1:A:93:ARG:N	20	16.6
(1,388)	1:A:94:THR:C	1:A:95:ALA:N	1:A:95:ALA:CA	1:A:95:ALA:C	19	16.56
(1,153)	1:A:94:THR:C	1:A:95:ALA:N	1:A:95:ALA:CA	1:A:95:ALA:C	19	16.56
(1,58)	1:A:37:LYS:C	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	14	16.55
(1,293)	1:A:37:LYS:C	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	14	16.55
(1,383)	1:A:92:SER:N	1:A:92:SER:CA	1:A:92:SER:C	1:A:93:ARG:N	11	16.53
(1,148)	1:A:92:SER:N	1:A:92:SER:CA	1:A:92:SER:C	1:A:93:ARG:N	11	16.53
(1,387)	1:A:94:THR:N	1:A:94:THR:CA	1:A:94:THR:C	1:A:95:ALA:N	19	16.19
(1,152)	1:A:94:THR:N	1:A:94:THR:CA	1:A:94:THR:C	1:A:95:ALA:N	19	16.19
(1,379)	1:A:90:VAL:N	1:A:90:VAL:CA	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	6	16.16
(1,144)	1:A:90:VAL:N	1:A:90:VAL:CA	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	6	16.16
(1,390)	1:A:95:ALA:C	1:A:96:ASP:N	1:A:96:ASP:CA	1:A:96:ASP:C	16	16.13
(1,155)	1:A:95:ALA:C	1:A:96:ASP:N	1:A:96:ASP:CA	1:A:96:ASP:C	16	16.13
(1,383)	1:A:92:SER:N	1:A:92:SER:CA	1:A:92:SER:C	1:A:93:ARG:N	1	16.06
(1,148)	1:A:92:SER:N	1:A:92:SER:CA	1:A:92:SER:C	1:A:93:ARG:N	1	16.06
(1,389)	1:A:95:ALA:N	1:A:95:ALA:CA	1:A:95:ALA:C	1:A:96:ASP:N	14	15.99
(1,154)	1:A:95:ALA:N	1:A:95:ALA:CA	1:A:95:ALA:C	1:A:96:ASP:N	14	15.99
(1,58)	1:A:37:LYS:C	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	6	15.9
(1,293)	1:A:37:LYS:C	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	6	15.9
(1,383)	1:A:92:SER:N	1:A:92:SER:CA	1:A:92:SER:C	1:A:93:ARG:N	4	15.78
(1,148)	1:A:92:SER:N	1:A:92:SER:CA	1:A:92:SER:C	1:A:93:ARG:N	4	15.78
(1,49)	1:A:31:ASN:N	1:A:31:ASN:CA	1:A:31:ASN:C	1:A:32:GLU:N	2	15.65
(1,284)	1:A:31:ASN:N	1:A:31:ASN:CA	1:A:31:ASN:C	1:A:32:GLU:N	2	15.65
(1,390)	1:A:95:ALA:C	1:A:96:ASP:N	1:A:96:ASP:CA	1:A:96:ASP:C	20	15.29
(1,155)	1:A:95:ALA:C	1:A:96:ASP:N	1:A:96:ASP:CA	1:A:96:ASP:C	20	15.29
(1,408)	1:A:105:ASP:C	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	9	14.88
(1,173)	1:A:105:ASP:C	1:A:106:GLY:N	1:A:106:GLY:CA	1:A:106:GLY:C	9	14.88
(1,59)	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	1:A:39:GLU:N	14	14.79
(1,294)	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	1:A:39:GLU:N	14	14.79
(1,373)	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	1:A:88:THR:N	4	14.74
(1,138)	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	1:A:88:THR:N	4	14.74
(1,412)	1:A:108:GLY:N	1:A:108:GLY:CA	1:A:108:GLY:C	1:A:109:PRO:N	7	14.73
(1,177)	1:A:108:GLY:N	1:A:108:GLY:CA	1:A:108:GLY:C	1:A:109:PRO:N	7	14.73
(1,390)	1:A:95:ALA:C	1:A:96:ASP:N	1:A:96:ASP:CA	1:A:96:ASP:C	14	14.62
(1,155)	1:A:95:ALA:C	1:A:96:ASP:N	1:A:96:ASP:CA	1:A:96:ASP:C	14	14.62
(1,49)	1:A:31:ASN:N	1:A:31:ASN:CA	1:A:31:ASN:C	1:A:32:GLU:N	18	14.58
(1,284)	1:A:31:ASN:N	1:A:31:ASN:CA	1:A:31:ASN:C	1:A:32:GLU:N	18	14.58
(1,391)	1:A:96:ASP:N	1:A:96:ASP:CA	1:A:96:ASP:C	1:A:97:SER:N	16	14.49
(1,156)	1:A:96:ASP:N	1:A:96:ASP:CA	1:A:96:ASP:C	1:A:97:SER:N	16	14.49
(1,369)	1:A:85:MET:N	1:A:85:MET:CA	1:A:85:MET:C	1:A:86:ILE:N	10	14.4
(1,134)	1:A:85:MET:N	1:A:85:MET:CA	1:A:85:MET:C	1:A:86:ILE:N	10	14.4
(1,343)	1:A:68:THR:C	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	13	14.32
(1,108)	1:A:68:THR:C	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	13	14.32
(1,58)	1:A:37:LYS:C	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	12	14.04



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



(1,391   1:A:96:ASP:N   1:A:96:ASP:CA   1:A:96:ASP:C   1:A:97:SER:N   11   10.99   (1,156   1:A:99:LEU:C   1:A:100:GLY:N   1:A:100:GLY:CA   1:A:100:GLY:C   5   10.88   (1,163   1:A:99:LEU:C   1:A:100:GLY:N   1:A:100:GLY:CA   1:A:100:GLY:C   5   10.88   (1,163   1:A:99:LEU:C   1:A:100:GLY:N   1:A:100:GLY:CA   1:A:100:GLY:C   5   10.88   (1,391   1:A:96:ASP:N   1:A:96:ASP:N   1:A:96:ASP:CA   1:A:96:ASP:C   1:A:97:SER:N   12   10.74   (1,389   1:A:96:ASP:N   1:A:96:ASP:CA   1:A:96:ASP:C   1:A:97:SER:N   12   10.74   (1,389   1:A:96:ASP:N   1:A:96:ASP:CA   1:A:96:ASP:C   1:A:97:SER:N   12   10.74   (1,389   1:A:96:ASP:C   1:A:95:ALA:CA   1:A:96:ASP:C   1:A:97:SER:N   4   10.72   (1,392   1:A:96:ASP:C   1:A:97:SER:N   1:A:96:ASP:N   4   10.72   (1,392   1:A:96:ASP:C   1:A:97:SER:N   1:A:96:ASP:C   1:A:97:SER:C   20   10.71   (1,157   1:A:96:ASP:C   1:A:97:SER:N   1:A:97:SER:CA   1:A:97:SER:C   20   10.71   (1,151   1:A:96:ASP:N   1:A:96:ASP:CA   1:A:96:ASP:C   1:A:97:SER:C   20   10.71   (1,151   1:A:96:ASP:N   1:A:96:ASP:CA   1:A:96:ASP:C   1:A:97:SER:N   9   10.7   (1,156   1:A:96:ASP:N   1:A:96:ASP:CA   1:A:96:ASP:C   1:A:97:SER:N   9   10.7   (1,156   1:A:96:ASP:N   1:A:96:ASP:CA   1:A:96:ASP:C   1:A:97:SER:N   9   10.7   (1,154   1:A:95:ALA:N   1:A:95:ALA:CA   1:A:95:ALA:C   1:A:96:ASP:N   7   10.55   (1,94   1:A:96:ASP:N   1:A:96:ASP:C   1:A:96:ASP:C   1:A:96:ASP:N   1:A:96:ASP:N   1:A:96:ASP:C   1:A:96:ASP:C   1:A:96:ASP:N   1   10.53   (1,331   1:A:92:SER:N   1:A:92:SER:C   1:A:96:ASP:C   1:A:96:ASP:N   1   10.53   (1,331   1:A:92:SER:N   1:A:96:ASP:C   1:A:96:ASP:C   1:A:96:ASP:N   1   10.53   (1,331   1:A:92:SER:N   1:A:96:ASP:C   1:A:96:ASP:C   1:A:96:ASP:N   1   10.53   (1,331   1:A:94:ASP:N   1:A:96:ASP:C   1:A:96:ASP:C   1:A:96:ASP:C   1:A:96:ASP:N   1   10.53   (1,331   1:A:94:ASP:N   1   1:A:96:ASP:C   1:A:	(1,391) (1,156) (1,398) (1,163) (1,391) (1,156) (1,389)	1:A:96:ASP:N 1:A:96:ASP:N 1:A:99:LEU:C 1:A:99:LEU:C 1:A:96:ASP:N 1:A:96:ASP:N	1:A:96:ASP:CA 1:A:96:ASP:CA 1:A:100:GLY:N 1:A:100:GLY:N	1:A:96:ASP:C 1:A:96:ASP:C	1:A:97:SER:N	11	Violation ( • ) 10.99
(1,156  1:A:96:ASPN	(1,156) (1,398) (1,163) (1,391) (1,156) (1,389)	1:A:96:ASP:N 1:A:99:LEU:C 1:A:99:LEU:C 1:A:96:ASP:N 1:A:96:ASP:N	1:A:96:ASP:CA 1:A:100:GLY:N 1:A:100:GLY:N	1:A:96:ASP:C			
(1,398  1:A:99:LEU:C	(1,398) (1,163) (1,391) (1,156) (1,389)	1:A:99:LEU:C 1:A:99:LEU:C 1:A:96:ASP:N 1:A:96:ASP:N	1:A:100:GLY:N 1:A:100:GLY:N		1:A:97:SER:N	11	
(1,163)   1:A:99:LEU-C	(1,163) (1,391) (1,156) (1,389)	1:A:99:LEU:C 1:A:96:ASP:N 1:A:96:ASP:N	1:A:100:GLY:N	1:A:100:GLY:CA	4 A 400 OTTE		
(1,391)	(1,391) (1,156) (1,389)	1:A:96:ASP:N 1:A:96:ASP:N				1	
(1,156)   1:A:96:ASP:N   1:A:96:ASP:CA   1:A:96:ASP:C   1:A:97:SER:N   12   10.74	(1,156) (1,389)	1:A:96:ASP:N					
(1,389)         1:A:95:ALA:N         1:A:95:ALA:CA         1:A:95:ALA:C         1:A:96:ASP:N         4         10.72           (1,154)         1:A:95:ALA:N         1:A:95:ALA:CA         1:A:95:ALA:C         1:A:96:ASP:N         4         10.72           (1,392)         1:A:96:ASP:C         1:A:97:SER:N         1:A:97:SER:CA         1:A:97:SER:C         20         10.71           (1,157)         1:A:96:ASP:C         1:A:96:ASP:CA         1:A:97:SER:N         9         10.7           (1,391)         1:A:96:ASP:N         1:A:96:ASP:CA         1:A:97:SER:N         9         10.7           (1,156)         1:A:96:ASP:N         1:A:96:ASP:CA         1:A:97:SER:N         9         10.7           (1,154)         1:A:96:ASP:N         1:A:96:ASP:CA         1:A:96:ASP:N         7         10.55           (1,154)         1:A:96:ALA:N         1:A:95:ALA:CA         1:A:95:ALA:C         1:A:96:ASP:N         7         10.55           (1,154)         1:A:96:ASP:N         1:A:60:SER:CA         1:A:60:SER:C         1:A:61:GLN:N         4         10.33           (1,329)         1:A:60:SER:N         1:A:92:SER:CA         1:A:93:ASR:CN         1:A:93:ARG:N         18         10.5           (1,331)         1:A:96:ASP:N         1:A:96:ASP:CA	(1,389)						
(1,154)         1:A:95:ALA:N         1:A:95:ALA:CA         1:A:95:ALA:C         1:A:96:ASP:N         4         10.72           (1,392)         1:A:96:ASP:C         1:A:97:SER:N         1:A:97:SER:CA         1:A:97:SER:C         20         10.71           (1,157)         1:A:96:ASP:N         1:A:96:ASP:CA         1:A:96:ASP:C         20         10.71           (1,391)         1:A:96:ASP:N         1:A:96:ASP:CA         1:A:96:ASP:C         1:A:97:SER:N         9         10.7           (1,392)         1:A:96:ASP:N         1:A:96:ASP:CA         1:A:96:ASP:N         7         10.55           (1,154)         1:A:95:ALA:N         1:A:95:ALA:CA         1:A:96:ASP:N         7         10.55           (1,194)         1:A:395:ALA:N         1:A:69:SER:CA         1:A:60:SER:C         1:A:60:SER:N         7         10.55           (1,394)         1:A:60:SER:N         1:A:60:SER:CA         1:A:60:SER:C         1:A:39:AGR:N         18         10.5           (1,438)         1:A:99:SER:N         1:A:99:SER:CA         1:A:96:ASP:C         1:A:39:ARG:N         18         10.5           (1,391)         1:A:96:ASP:N         1:A:99:SER:CA         1:A:39:ASP:CC         1:A:39:ARG:N         18         10.5           (1,491)         1:A:31:ASN:N <td> /</td> <td>Ι 1 · Δ · 05 · Δ Ι .Δ · ΝΙ Ι</td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td>	/	Ι 1 · Δ · 05 · Δ Ι .Δ · ΝΙ Ι					
(1,392)							
(1,157)         1:A:96:ASP:C         1:A:97:SER:N         1:A:96:ASP:C         1:A:96:ASP:C         20         10.71           (1,331)         1:A:96:ASP:N         1:A:96:ASP:C         1:A:96:ASP:C         1:A:97:SER:N         9         10.7           (1,156)         1:A:96:ASP:N         1:A:96:ASP:CA         1:A:96:ASP:C         1:A:97:SER:N         9         10.7           (1,389)         1:A:95:ALA:N         1:A:95:ALA:CA         1:A:95:ALA:C         1:A:96:ASP:N         7         10.55           (1,94)         1:A:60:SER:N         1:A:60:SER:CA         1:A:60:SER:C         1:A:61:GLN:N         4         10.53           (1,329)         1:A:60:SER:N         1:A:60:SER:CA         1:A:60:SER:C         1:A:61:GLN:N         4         10.53           (1,331)         1:A:92:SER:N         1:A:92:SER:CA         1:A:92:SER:C         1:A:93:ARG:N         18         10.5           (1,448)         1:A:99:ASP:N         1:A:96:ASP:C         1:A:49:ASP:C         1:A:49:ASP:C         1         10.53           (1,449)         1:A:31:ASN:N         1:A:31:ASN:C         1:A:31:ASN:C         1:A:31:ASN:C         1:A:31:ASN:C         1:A:32:GLU:N         4         10.23           (1,49)         1:A:31:ASN:N         1:A:31:ASN:C         1:A:31:ASN:C	/						
(1,391)	/						
(1,156)         1:A:96:ASP:N         1:A:96:ASP:CA         1:A:96:ASP:C         1:A:97:SER:N         9         10.7           (1,389)         1:A:95:ALA:N         1:A:95:ALA:CA         1:A:95:ALA:C         1:A:96:ASP:N         7         10.55           (1,154)         1:A:95:ALA:CA         1:A:95:ALA:CA         1:A:96:ASP:N         7         10.55           (1,94)         1:A:60:SER:N         1:A:60:SER:CA         1:A:60:SER:C         1:A:61:GLN:N         4         10.53           (1,332)         1:A:60:SER:N         1:A:60:SER:CA         1:A:60:SER:C         1:A:61:GLN:N         4         10.53           (1,383)         1:A:92:SER:N         1:A:92:SER:CA         1:A:92:SER:C         1:A:93:ARG:N         18         10.5           (1,48)         1:A:92:SER:N         1:A:96:ASP:CA         1:A:96:ASP:C         1:A:97:SER:N         8         10.24           (1,156)         1:A:96:ASP:N         1:A:96:ASP:CA         1:A:96:ASP:C         1:A:97:SER:N         8         10.24           (1,49)         1:A:31:ASN:N         1:A:31:ASN:CA         1:A:31:ASN:C         1:A:31:ASN:C         1:A:32:GLU:N         4         10.23           (1,284)         1:A:31:ASN:N         1:A:31:ASN:CA         1:A:31:ASN:C         1:A:33:ASD:C         1:A:32:GU:N							
(1,389							
(1,154)         1:A:95:ALA:N         1:A:95:ALA:CA         1:A:95:ALA:C         1:A:96:ASP:N         7         10.55           (1,94)         1:A:60:SER:N         1:A:60:SER:CA         1:A:60:SER:C         1:A:61:GLN:N         4         10.53           (1,329)         1:A:60:SER:N         1:A:60:SER:CA         1:A:60:SER:C         1:A:61:GLN:N         4         10.53           (1,333)         1:A:92:SER:N         1:A:92:SER:CA         1:A:92:SER:C         1:A:93:ARG:N         18         10.5           (1,148)         1:A:92:SER:N         1:A:92:SER:CA         1:A:92:SER:C         1:A:93:ARG:N         18         10.5           (1,149)         1:A:96:ASP:N         1:A:96:ASP:CA         1:A:96:ASP:C         1:A:97:SER:N         8         10.24           (1,156)         1:A:96:ASP:N         1:A:30:ASP:CA         1:A:96:ASP:C         1:A:97:SER:N         8         10.24           (1,149)         1:A:31:ASN:N         1:A:31:ASN:CA         1:A:31:ASN:C         1:A:32:GLU:N         4         10.23           (1,249)         1:A:31:ASN:N         1:A:31:ASN:CA         1:A:31:ASN:C         1:A:32:GLU:N         8         9.79           (1,284)         1:A:37:LYS:C         1:A:38:GLU:N         1:A:38:GLU:N         8         9.79	/						
(1,94)         1:A:60:SER:N         1:A:60:SER:CA         1:A:60:SER:C         1:A:61:GLN:N         4         10.53           (1,329)         1:A:60:SER:N         1:A:60:SER:CA         1:A:60:SER:C         1:A:61:GLN:N         4         10.53           (1,333)         1:A:92:SER:N         1:A:92:SER:CA         1:A:92:SER:C         1:A:93:ARG:N         18         10.5           (1,148)         1:A:92:SER:N         1:A:92:SER:CA         1:A:92:SER:C         1:A:93:ARG:N         18         10.5           (1,391)         1:A:96:ASP:N         1:A:96:ASP:CA         1:A:96:ASP:C         1:A:97:SER:N         8         10.24           (1,49)         1:A:31:ASN:N         1:A:31:ASN:CA         1:A:31:ASN:C         1:A:32:GLU:N         4         10.23           (1,284)         1:A:31:ASN:N         1:A:31:ASN:CA         1:A:31:ASN:C         1:A:32:GLU:N         4         10.23           (1,491)         1:A:31:ASN:N         1:A:31:ASN:CA         1:A:31:ASN:C         1:A:32:GLU:N         8         9.79           (1,284)         1:A:31:ASN:C         1:A:33:ASN:C         1:A:33:GLU:C         3         9.69           (1,284)         1:A:31:ASN:C         1:A:33:GLU:C         1:A:33:GLU:C         3         9.69           (1,284)							
(1,329)         1:A:60:SER:N         1:A:60:SER:CA         1:A:60:SER:C         1:A:61:GLN:N         4         10.53           (1,383)         1:A:92:SER:N         1:A:92:SER:CA         1:A:92:SER:C         1:A:93:ARG:N         18         10.5           (1,148)         1:A:92:SER:N         1:A:92:SER:CA         1:A:92:SER:C         1:A:93:ARG:N         18         10.5           (1,391)         1:A:96:ASP:N         1:A:96:ASP:CA         1:A:96:ASP:C         1:A:97:SER:N         8         10.24           (1,156)         1:A:96:ASP:N         1:A:36:ASP:CA         1:A:36:ASP:C         1:A:97:SER:N         8         10.24           (1,49)         1:A:31:ASN:N         1:A:31:ASN:CA         1:A:31:ASN:C         1:A:32:GLU:N         4         10.23           (1,284)         1:A:31:ASN:N         1:A:31:ASN:CA         1:A:31:ASN:C         1:A:32:GLU:N         8         9.79           (1,284)         1:A:31:ASN:N         1:A:31:ASN:CA         1:A:31:ASN:C         1:A:32:GLU:N         8         9.79           (1,284)         1:A:31:ASN:N         1:A:31:ASN:CA         1:A:31:ASN:C         1:A:32:GLU:N         8         9.79           (1,284)         1:A:31:ASN:C         1:A:31:ASN:C         1:A:32:GLU:N         8         9.79	· · /						
(1,383)         1:A:92:SER:N         1:A:92:SER:CA         1:A:92:SER:C         1:A:93:ARG:N         18         10.5           (1,148)         1:A:92:SER:N         1:A:92:SER:CA         1:A:92:SER:C         1:A:93:ARG:N         18         10.5           (1,391)         1:A:96:ASP:N         1:A:96:ASP:CA         1:A:96:ASP:C         1:A:97:SER:N         8         10.24           (1,156)         1:A:96:ASP:N         1:A:31:ASN:CA         1:A:31:ASN:C         1:A:32:GLU:N         4         10.23           (1,284)         1:A:31:ASN:N         1:A:31:ASN:CA         1:A:31:ASN:C         1:A:32:GLU:N         4         10.23           (1,49)         1:A:31:ASN:N         1:A:31:ASN:CA         1:A:31:ASN:C         1:A:32:GLU:N         8         9.79           (1,284)         1:A:31:ASN:C         1:A:33:ASN:C         1:A:33:GLU:N         1:A:33:GLU:N         1:A:33:GLU:N	· · /					4	
(1,148)         1:A:92:SER:N         1:A:92:SER:CA         1:A:92:SER:C         1:A:93:ARG:N         18         10.5           (1,391)         1:A:96:ASP:N         1:A:96:ASP:CA         1:A:96:ASP:C         1:A:97:SER:N         8         10.24           (1,156)         1:A:96:ASP:N         1:A:96:ASP:CA         1:A:96:ASP:C         1:A:97:SER:N         8         10.24           (1,49)         1:A:31:ASN:N         1:A:31:ASN:CA         1:A:31:ASN:C         1:A:32:GLU:N         4         10.23           (1,49)         1:A:31:ASN:N         1:A:31:ASN:CA         1:A:31:ASN:C         1:A:32:GLU:N         4         10.23           (1,49)         1:A:31:ASN:N         1:A:31:ASN:CA         1:A:31:ASN:C         1:A:32:GLU:N         8         9.79           (1,284)         1:A:31:ASN:N         1:A:31:ASN:CA         1:A:31:ASN:C         1:A:33:GLU:N         8         9.79           (1,284)         1:A:31:ASN:N         1:A:31:ASN:CA         1:A:31:ASN:C         1:A:33:GLU:N         8         9.79           (1,284)         1:A:31:ASN:N         1:A:38:GLU:N         1:A:38:GLU:CA         1:A:38:GLU:CA         1:A:38:GLU:CA         1:A:38:GLU:CA         1:A:38:GLU:CA         1:A:38:GLU:CA         1:A:38:GLU:CA         1:A:38:GLU:CA         1:A:38:GLU:CA         1:A:38:GL	· · /						10.53
(1,391)         1:A:96:ASP:N         1:A:96:ASP:CA         1:A:96:ASP:C         1:A:97:SER:N         8         10.24           (1,156)         1:A:96:ASP:N         1:A:96:ASP:CA         1:A:96:ASP:C         1:A:97:SER:N         8         10.24           (1,49)         1:A:31:ASN:N         1:A:31:ASN:CA         1:A:31:ASN:C         1:A:32:GLU:N         4         10.23           (1,284)         1:A:31:ASN:N         1:A:31:ASN:CA         1:A:31:ASN:C         1:A:32:GLU:N         8         9.79           (1,284)         1:A:31:ASN:N         1:A:31:ASN:CA         1:A:31:ASN:C         1:A:32:GLU:N         8         9.79           (1,284)         1:A:31:ASN:N         1:A:31:ASN:CA         1:A:31:ASN:C         1:A:32:GLU:N         8         9.79           (1,284)         1:A:37:LYS:C         1:A:38:GLU:N         1:A:38:GLU:CA         1:A:38:GLU:N         8         9.79           (1,58)         1:A:37:LYS:C         1:A:38:GLU:N         1:A:38:GLU:CA         1:A:38:GLU:C         3         9.69           (1,293)         1:A:31:5:CYS:N         1:A:115:CYS:CA         1:A:115:CYS:C         1:A:116:LE:N         13         9.58           (1,487)         1:A:494:THR:N         1:A:94:THR:C         1:A:16:GLE:N         1         9.49	(1,383)	1:A:92:SER:N	1:A:92:SER:CA				10.5
(1,156)         1:A:96:ASP:N         1:A:96:ASP:CA         1:A:96:ASP:C         1:A:97:SER:N         8         10.24           (1,49)         1:A:31:ASN:N         1:A:31:ASN:CA         1:A:31:ASN:C         1:A:32:GLU:N         4         10.23           (1,284)         1:A:31:ASN:N         1:A:31:ASN:CA         1:A:31:ASN:C         1:A:32:GLU:N         4         10.23           (1,284)         1:A:31:ASN:N         1:A:31:ASN:CA         1:A:31:ASN:C         1:A:32:GLU:N         8         9.79           (1,284)         1:A:31:ASN:N         1:A:31:ASN:CA         1:A:31:ASN:C         1:A:32:GLU:N         8         9.79           (1,284)         1:A:31:ASN:N         1:A:31:ASN:CA         1:A:31:ASN:C         1:A:32:GLU:N         8         9.79           (1,58)         1:A:37:LYS:C         1:A:38:GLU:N         1:A:38:GLU:CA         1:A:38:GLU:C         3         9.69           (1,293)         1:A:37:LYS:C         1:A:315:CYS:CA         1:A:115:CYS:C         1:A:115:CYS:D         1:A:115:CYS:D         1:A:115:CYS:D         1:A:115:CYS:D         1:A:116:ILE:N         13         9.58           (1,387)         1:A:94:THR:N         1:A:94:THR:CA         1:A:94:THR:C         1:A:94:THR:C         1:A:94:THR:C         1:A:95:ALA:N         14         9.49	(1,148)	1:A:92:SER:N	1:A:92:SER:CA		1:A:93:ARG:N		10.5
(1,49)         1:A:31:ASN:N         1:A:31:ASN:CA         1:A:31:ASN:C         1:A:32:GLU:N         4         10.23           (1,284)         1:A:31:ASN:N         1:A:31:ASN:CA         1:A:31:ASN:C         1:A:32:GLU:N         4         10.23           (1,49)         1:A:31:ASN:N         1:A:31:ASN:CA         1:A:31:ASN:C         1:A:32:GLU:N         8         9.79           (1,284)         1:A:31:ASN:N         1:A:31:ASN:CA         1:A:31:ASN:C         1:A:38:GLU:N         8         9.79           (1,58)         1:A:37:LYS:C         1:A:38:GLU:N         1:A:38:GLU:CA         1:A:38:GLU:C         3         9.69           (1,293)         1:A:37:LYS:C         1:A:38:GLU:N         1:A:38:GLU:CA         1:A:38:GLU:C         3         9.69           (1,423)         1:A:115:CYS:C         1:A:38:GLU:N         1:A:38:GLU:CA         1:A:38:GLU:C         3         9.69           (1,423)         1:A:115:CYS:C         1:A:115:CYS:CA         1:A:115:CYS:C         1:A:116:ILE:N         13         9.58           (1,188)         1:A:115:CYS:N         1:A:115:CYS:CA         1:A:115:CYS:C         1:A:116:ILE:N         13         9.58           (1,387)         1:A:94:THR:N         1:A:94:THR:CA         1:A:94:THR:C         1:A:95:ALA:N         14	(1,391)	1:A:96:ASP:N	1:A:96:ASP:CA	1:A:96:ASP:C	1:A:97:SER:N		10.24
(1,284)         1:A:31:ASN:N         1:A:31:ASN:CA         1:A:31:ASN:C         1:A:32:GLU:N         4         10.23           (1,49)         1:A:31:ASN:N         1:A:31:ASN:CA         1:A:31:ASN:C         1:A:32:GLU:N         8         9.79           (1,284)         1:A:31:ASN:N         1:A:31:ASN:CA         1:A:31:ASN:C         1:A:32:GLU:N         8         9.79           (1,58)         1:A:37:LYS:C         1:A:38:GLU:N         1:A:38:GLU:CA         1:A:38:GLU:C         3         9.69           (1,293)         1:A:37:LYS:C         1:A:38:GLU:N         1:A:38:GLU:CA         1:A:38:GLU:C         3         9.69           (1,423)         1:A:115:CYS:C         1:A:38:GLU:CA         1:A:38:GLU:C         3         9.69           (1,423)         1:A:115:CYS:C         1:A:38:GLU:CA         1:A:38:GLU:C         3         9.69           (1,423)         1:A:115:CYS:C         1:A:115:CYS:CA         1:A:115:CYS:C         1:A:116:ILE:N         13         9.58           (1,343)         1:A:49:THR:N         1:A:15:CYS:CA         1:A:115:CYS:C         1:A:116:ILE:N         13         9.58           (1,347)         1:A:94:THR:N         1:A:94:THR:CA         1:A:95:ALA:N         14         9.49           (1,152)         1:A:494:THR:N	(1,156)	1:A:96:ASP:N	1:A:96:ASP:CA	1:A:96:ASP:C	1:A:97:SER:N	8	10.24
(1,49)         1:A:31:ASN:N         1:A:31:ASN:CA         1:A:31:ASN:C         1:A:32:GLU:N         8         9.79           (1,284)         1:A:31:ASN:N         1:A:31:ASN:CA         1:A:31:ASN:C         1:A:32:GLU:N         8         9.79           (1,58)         1:A:37:LYS:C         1:A:38:GLU:N         1:A:38:GLU:CA         1:A:38:GLU:C         3         9.69           (1,293)         1:A:37:LYS:C         1:A:38:GLU:N         1:A:38:GLU:CA         1:A:38:GLU:C         3         9.69           (1,423)         1:A:115:CYS:N         1:A:115:CYS:CA         1:A:115:CYS:C         1:A:116:ILE:N         13         9.58           (1,488)         1:A:415:CYS:N         1:A:115:CYS:CA         1:A:115:CYS:C         1:A:116:ILE:N         13         9.58           (1,387)         1:A:94:THR:N         1:A:94:THR:CA         1:A:94:THR:C         1:A:95:ALA:N         14         9.49           (1,152)         1:A:49:THR:N         1:A:49:THR:CA         1:A:49:THR:C         1:A:49:AA:N         14         9.49           (1,329)         1:A:60:SER:N         1:A:60:SER:CA         1:A:60:SER:C         1:A:61:GLN:N         7         9.45           (1,373)         1:A:87:ARG:N         1:A:87:ARG:CA         1:A:87:ARG:C         1:A:88:THR:N         20	(1,49)	1:A:31:ASN:N	1:A:31:ASN:CA	1:A:31:ASN:C	1:A:32:GLU:N	4	10.23
(1,284)         1:A:31:ASN:N         1:A:31:ASN:CA         1:A:31:ASN:C         1:A:32:GLU:N         8         9.79           (1,58)         1:A:37:LYS:C         1:A:38:GLU:N         1:A:38:GLU:CA         1:A:38:GLU:C         3         9.69           (1,293)         1:A:37:LYS:C         1:A:38:GLU:N         1:A:38:GLU:CA         1:A:38:GLU:C         3         9.69           (1,423)         1:A:115:CYS:N         1:A:115:CYS:CA         1:A:115:CYS:C         1:A:116:ILE:N         13         9.58           (1,188)         1:A:115:CYS:N         1:A:115:CYS:CA         1:A:115:CYS:C         1:A:116:ILE:N         13         9.58           (1,387)         1:A:94:THR:N         1:A:94:THR:CA         1:A:94:THR:C         1:A:95:ALA:N         14         9.49           (1,152)         1:A:94:THR:N         1:A:60:SER:CA         1:A:60:SER:C         1:A:60:SER:C         1:A:60:SER:C         1:A:60:SER:C         1:A:60:SER:C         1:A:60:SER:C         1:A:60:SER:C         1:A:60:SER:C         1:A:87:ARG:C         1:A:88:THR:N         20         9.29           (1,373)         1:A:87:ARG:N         1:A:87:ARG:CA         1:A:87:ARG:C         1:A:88:THR:N         20         9.29           (1,386)         1:A:93:ARG:C         1:A:94:THR:N         1:A:94:THR:CA         1:A:94:	(1,284)	1:A:31:ASN:N	1:A:31:ASN:CA	1:A:31:ASN:C	1:A:32:GLU:N		10.23
(1,58)         1:A:37:LYS:C         1:A:38:GLU:N         1:A:38:GLU:CA         1:A:38:GLU:C         3         9.69           (1,293)         1:A:37:LYS:C         1:A:38:GLU:N         1:A:38:GLU:CA         1:A:38:GLU:C         3         9.69           (1,423)         1:A:115:CYS:N         1:A:115:CYS:CA         1:A:115:CYS:C         1:A:116:ILE:N         13         9.58           (1,188)         1:A:115:CYS:N         1:A:115:CYS:CA         1:A:115:CYS:C         1:A:116:ILE:N         13         9.58           (1,387)         1:A:94:THR:N         1:A:94:THR:CA         1:A:94:THR:C         1:A:95:ALA:N         14         9.49           (1,52)         1:A:94:THR:N         1:A:94:THR:CA         1:A:94:THR:C         1:A:95:ALA:N         14         9.49           (1,94)         1:A:60:SER:N         1:A:60:SER:CA         1:A:60:SER:C         1:A:61:GLN:N         7         9.45           (1,329)         1:A:60:SER:N         1:A:87:ARG:CA         1:A:87:ARG:C         1:A:88:THR:N         20         9.29           (1,138)         1:A:87:ARG:N         1:A:87:ARG:CA         1:A:87:ARG:C         1:A:88:THR:N         20         9.29           (1,386)         1:A:93:ARG:C         1:A:94:THR:N         1:A:94:THR:CA         1:A:94:THR:C         19	(1,49)	1:A:31:ASN:N	1:A:31:ASN:CA	1:A:31:ASN:C	1:A:32:GLU:N	8	9.79
(1,293)         1:A:37:LYS:C         1:A:38:GLU:N         1:A:38:GLU:CA         1:A:38:GLU:C         3         9.69           (1,423)         1:A:115:CYS:N         1:A:115:CYS:CA         1:A:115:CYS:C         1:A:116:ILE:N         13         9.58           (1,188)         1:A:115:CYS:N         1:A:115:CYS:CA         1:A:115:CYS:C         1:A:116:ILE:N         13         9.58           (1,387)         1:A:94:THR:N         1:A:94:THR:CA         1:A:94:THR:C         1:A:95:ALA:N         14         9.49           (1,152)         1:A:94:THR:N         1:A:60:SER:CA         1:A:60:SER:C         1:A:60:SER:C         1:A:61:GLN:N         7         9.45           (1,349)         1:A:60:SER:N         1:A:60:SER:CA         1:A:60:SER:C         1:A:61:GLN:N         7         9.45           (1,329)         1:A:60:SER:N         1:A:60:SER:CA         1:A:60:SER:C         1:A:61:GLN:N         7         9.45           (1,373)         1:A:87:ARG:N         1:A:87:ARG:CA         1:A:87:ARG:C         1:A:88:THR:N         20         9.29           (1,386)         1:A:93:ARG:C         1:A:94:THR:N         1:A:94:THR:CA         1:A:94:THR:C         19         9.26           (1,383)         1:A:93:ARG:C         1:A:94:THR:N         1:A:99:THR:CA         1:A:94:THR	(1,284)	1:A:31:ASN:N	1:A:31:ASN:CA	1:A:31:ASN:C	1:A:32:GLU:N		9.79
(1,423)         1:A:115:CYS:N         1:A:115:CYS:CA         1:A:115:CYS:C         1:A:116:ILE:N         13         9.58           (1,188)         1:A:115:CYS:N         1:A:115:CYS:CA         1:A:115:CYS:C         1:A:116:ILE:N         13         9.58           (1,387)         1:A:94:THR:N         1:A:94:THR:CA         1:A:94:THR:C         1:A:95:ALA:N         14         9.49           (1,152)         1:A:94:THR:N         1:A:60:SER:CA         1:A:60:SER:C         1:A:61:GLN:N         7         9.45           (1,94)         1:A:60:SER:N         1:A:60:SER:CA         1:A:60:SER:C         1:A:61:GLN:N         7         9.45           (1,329)         1:A:60:SER:N         1:A:60:SER:CA         1:A:60:SER:C         1:A:61:GLN:N         7         9.45           (1,373)         1:A:60:SER:N         1:A:60:SER:CA         1:A:60:SER:C         1:A:61:GLN:N         7         9.45           (1,373)         1:A:60:SER:N         1:A:60:SER:CA         1:A:60:SER:C         1:A:61:GLN:N         7         9.45           (1,373)         1:A:60:SER:N         1:A:60:SER:CA         1:A:60:SER:C         1:A:61:GLN:N         7         9.45           (1,381)         1:A:93:ARG:N         1:A:87:ARG:CA         1:A:87:ARG:C         1:A:88:THR:N         20	(1,58)	1:A:37:LYS:C	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C		9.69
(1,188)         1:A:115:CYS:N         1:A:115:CYS:CA         1:A:115:CYS:C         1:A:116:ILE:N         13         9.58           (1,387)         1:A:94:THR:N         1:A:94:THR:CA         1:A:94:THR:C         1:A:95:ALA:N         14         9.49           (1,152)         1:A:94:THR:N         1:A:94:THR:CA         1:A:94:THR:C         1:A:95:ALA:N         14         9.49           (1,94)         1:A:60:SER:N         1:A:60:SER:CA         1:A:60:SER:C         1:A:61:GLN:N         7         9.45           (1,329)         1:A:60:SER:N         1:A:60:SER:CA         1:A:60:SER:C         1:A:61:GLN:N         7         9.45           (1,373)         1:A:87:ARG:N         1:A:87:ARG:CA         1:A:87:ARG:C         1:A:88:THR:N         20         9.29           (1,138)         1:A:87:ARG:N         1:A:87:ARG:CA         1:A:87:ARG:C         1:A:88:THR:N         20         9.29           (1,386)         1:A:93:ARG:C         1:A:94:THR:N         1:A:94:THR:CA         1:A:94:THR:C         19         9.26           (1,151)         1:A:93:ARG:C         1:A:94:THR:N         1:A:94:THR:CA         1:A:94:THR:C         19         9.26           (1,383)         1:A:92:SER:N         1:A:92:SER:CA         1:A:92:SER:C         1:A:93:ARG:N         19	(1,293)	1:A:37:LYS:C	1:A:38:GLU:N		1:A:38:GLU:C	3	9.69
(1,387)         1:A:94:THR:N         1:A:94:THR:CA         1:A:94:THR:C         1:A:95:ALA:N         14         9.49           (1,152)         1:A:94:THR:N         1:A:94:THR:CA         1:A:94:THR:C         1:A:95:ALA:N         14         9.49           (1,94)         1:A:60:SER:N         1:A:60:SER:CA         1:A:60:SER:C         1:A:61:GLN:N         7         9.45           (1,329)         1:A:60:SER:N         1:A:60:SER:CA         1:A:60:SER:C         1:A:61:GLN:N         7         9.45           (1,373)         1:A:87:ARG:N         1:A:87:ARG:CA         1:A:87:ARG:C         1:A:88:THR:N         20         9.29           (1,138)         1:A:87:ARG:N         1:A:87:ARG:CA         1:A:87:ARG:C         1:A:88:THR:N         20         9.29           (1,386)         1:A:93:ARG:C         1:A:94:THR:N         1:A:94:THR:CA         1:A:94:THR:C         19         9.26           (1,151)         1:A:93:ARG:C         1:A:94:THR:N         1:A:94:THR:CA         1:A:94:THR:C         19         9.26           (1,383)         1:A:92:SER:N         1:A:92:SER:CA         1:A:92:SER:C         1:A:93:ARG:N         19         9.12           (1,148)         1:A:92:SER:N         1:A:92:SER:CA         1:A:92:SER:C         1:A:93:ARG:N         19         <	(1,423)	1:A:115:CYS:N	1:A:115:CYS:CA	1:A:115:CYS:C	1:A:116:ILE:N	13	9.58
(1,152)         1:A:94:THR:N         1:A:94:THR:CA         1:A:94:THR:C         1:A:95:ALA:N         14         9.49           (1,94)         1:A:60:SER:N         1:A:60:SER:CA         1:A:60:SER:C         1:A:61:GLN:N         7         9.45           (1,329)         1:A:60:SER:N         1:A:60:SER:CA         1:A:60:SER:C         1:A:61:GLN:N         7         9.45           (1,373)         1:A:87:ARG:N         1:A:87:ARG:CA         1:A:87:ARG:C         1:A:88:THR:N         20         9.29           (1,138)         1:A:87:ARG:N         1:A:87:ARG:CA         1:A:87:ARG:C         1:A:88:THR:N         20         9.29           (1,386)         1:A:93:ARG:C         1:A:94:THR:N         1:A:94:THR:CA         1:A:94:THR:C         19         9.26           (1,151)         1:A:93:ARG:C         1:A:94:THR:N         1:A:94:THR:CA         1:A:94:THR:C         19         9.26           (1,383)         1:A:92:SER:N         1:A:92:SER:CA         1:A:92:SER:C         1:A:93:ARG:N         19         9.12           (1,148)         1:A:92:SER:N         1:A:92:SER:CA         1:A:92:SER:C         1:A:93:ARG:N         19         9.12           (1,389)         1:A:95:ALA:N         1:A:95:ALA:CA         1:A:95:ALA:C         1:A:96:ASP:N         5 <t< td=""><td>(1,188)</td><td>1:A:115:CYS:N</td><td>1:A:115:CYS:CA</td><td>1:A:115:CYS:C</td><td>1:A:116:ILE:N</td><td>13</td><td>9.58</td></t<>	(1,188)	1:A:115:CYS:N	1:A:115:CYS:CA	1:A:115:CYS:C	1:A:116:ILE:N	13	9.58
(1,94)         1:A:60:SER:N         1:A:60:SER:CA         1:A:60:SER:C         1:A:61:GLN:N         7         9.45           (1,329)         1:A:60:SER:N         1:A:60:SER:CA         1:A:60:SER:C         1:A:61:GLN:N         7         9.45           (1,373)         1:A:87:ARG:N         1:A:87:ARG:CA         1:A:87:ARG:C         1:A:88:THR:N         20         9.29           (1,138)         1:A:87:ARG:N         1:A:87:ARG:CA         1:A:87:ARG:C         1:A:88:THR:N         20         9.29           (1,386)         1:A:93:ARG:C         1:A:94:THR:N         1:A:94:THR:CA         1:A:94:THR:C         19         9.26           (1,151)         1:A:93:ARG:C         1:A:94:THR:N         1:A:94:THR:CA         1:A:94:THR:C         19         9.26           (1,383)         1:A:92:SER:N         1:A:92:SER:CA         1:A:92:SER:C         1:A:93:ARG:N         19         9.12           (1,148)         1:A:92:SER:N         1:A:92:SER:CA         1:A:92:SER:C         1:A:93:ARG:N         19         9.12           (1,389)         1:A:95:ALA:N         1:A:95:ALA:CA         1:A:95:ALA:C         1:A:96:ASP:N         5         8.94           (1,154)         1:A:95:ALA:N         1:A:85:MET:CA         1:A:85:MET:C         1:A:86:ILE:N         13 <t< td=""><td>(1,387)</td><td>1:A:94:THR:N</td><td>1:A:94:THR:CA</td><td>1:A:94:THR:C</td><td>1:A:95:ALA:N</td><td>14</td><td>9.49</td></t<>	(1,387)	1:A:94:THR:N	1:A:94:THR:CA	1:A:94:THR:C	1:A:95:ALA:N	14	9.49
(1,329)         1:A:60:SER:N         1:A:60:SER:CA         1:A:60:SER:C         1:A:61:GLN:N         7         9.45           (1,373)         1:A:87:ARG:N         1:A:87:ARG:CA         1:A:87:ARG:C         1:A:88:THR:N         20         9.29           (1,138)         1:A:87:ARG:N         1:A:87:ARG:CA         1:A:87:ARG:C         1:A:88:THR:N         20         9.29           (1,386)         1:A:93:ARG:C         1:A:94:THR:N         1:A:94:THR:CA         1:A:94:THR:C         19         9.26           (1,151)         1:A:93:ARG:C         1:A:94:THR:N         1:A:94:THR:CA         1:A:94:THR:C         19         9.26           (1,383)         1:A:92:SER:N         1:A:92:SER:CA         1:A:92:SER:C         1:A:93:ARG:N         19         9.12           (1,389)         1:A:92:SER:N         1:A:92:SER:CA         1:A:92:SER:C         1:A:93:ARG:N         19         9.12           (1,389)         1:A:95:ALA:N         1:A:95:ALA:CA         1:A:95:ALA:C         1:A:96:ASP:N         5         8.94           (1,154)         1:A:95:ALA:N         1:A:95:ALA:CA         1:A:95:ALA:C         1:A:86:ILE:N         13         8.92           (1,369)         1:A:85:MET:N         1:A:85:MET:CA         1:A:85:MET:C         1:A:86:ILE:N         13	(1,152)	1:A:94:THR:N	1:A:94:THR:CA	1:A:94:THR:C	1:A:95:ALA:N	14	9.49
(1,373)         1:A:87:ARG:N         1:A:87:ARG:CA         1:A:87:ARG:C         1:A:88:THR:N         20         9.29           (1,138)         1:A:87:ARG:N         1:A:87:ARG:CA         1:A:87:ARG:C         1:A:88:THR:N         20         9.29           (1,386)         1:A:93:ARG:C         1:A:94:THR:N         1:A:94:THR:CA         1:A:94:THR:C         19         9.26           (1,151)         1:A:93:ARG:C         1:A:94:THR:N         1:A:94:THR:CA         1:A:94:THR:C         19         9.26           (1,383)         1:A:92:SER:N         1:A:92:SER:CA         1:A:92:SER:C         1:A:93:ARG:N         19         9.12           (1,148)         1:A:92:SER:N         1:A:92:SER:CA         1:A:92:SER:C         1:A:93:ARG:N         19         9.12           (1,389)         1:A:95:ALA:N         1:A:95:ALA:CA         1:A:95:ALA:C         1:A:96:ASP:N         5         8.94           (1,154)         1:A:95:ALA:N         1:A:85:MET:CA         1:A:85:MET:C         1:A:86:ILE:N         13         8.92           (1,369)         1:A:85:MET:N         1:A:85:MET:CA         1:A:85:MET:C         1:A:86:ILE:N         13         8.92           (1,465)         1:A:138:LEU:C         1:A:139:HIS:N         1:A:139:HIS:CA         1:A:139:HIS:C         18	(1,94)	1:A:60:SER:N	1:A:60:SER:CA	1:A:60:SER:C	1:A:61:GLN:N	7	9.45
(1,138)         1:A:87:ARG:N         1:A:87:ARG:CA         1:A:87:ARG:C         1:A:88:THR:N         20         9.29           (1,386)         1:A:93:ARG:C         1:A:94:THR:N         1:A:94:THR:CA         1:A:94:THR:C         19         9.26           (1,151)         1:A:93:ARG:C         1:A:94:THR:N         1:A:94:THR:CA         1:A:94:THR:C         19         9.26           (1,383)         1:A:92:SER:N         1:A:92:SER:CA         1:A:92:SER:C         1:A:93:ARG:N         19         9.12           (1,148)         1:A:92:SER:N         1:A:92:SER:CA         1:A:92:SER:C         1:A:93:ARG:N         19         9.12           (1,389)         1:A:95:ALA:N         1:A:95:ALA:CA         1:A:95:ALA:C         1:A:96:ASP:N         5         8.94           (1,154)         1:A:95:ALA:N         1:A:85:MET:CA         1:A:85:MET:C         1:A:86:ILE:N         13         8.92           (1,369)         1:A:85:MET:N         1:A:85:MET:CA         1:A:85:MET:C         1:A:86:ILE:N         13         8.92           (1,465)         1:A:138:LEU:C         1:A:139:HIS:N         1:A:139:HIS:CA         1:A:139:HIS:C         18         8.83           (1,230)         1:A:138:LEU:C         1:A:139:HIS:N         1:A:139:HIS:CA         1:A:139:HIS:C         18	(1,329)	1:A:60:SER:N	1:A:60:SER:CA	1:A:60:SER:C	1:A:61:GLN:N	7	9.45
(1,386)         1:A:93:ARG:C         1:A:94:THR:N         1:A:94:THR:CA         1:A:94:THR:C         19         9.26           (1,151)         1:A:93:ARG:C         1:A:94:THR:N         1:A:94:THR:CA         1:A:94:THR:C         19         9.26           (1,383)         1:A:92:SER:N         1:A:92:SER:CA         1:A:92:SER:C         1:A:93:ARG:N         19         9.12           (1,148)         1:A:92:SER:N         1:A:92:SER:CA         1:A:92:SER:C         1:A:93:ARG:N         19         9.12           (1,389)         1:A:95:ALA:N         1:A:95:ALA:CA         1:A:95:ALA:C         1:A:96:ASP:N         5         8.94           (1,154)         1:A:95:ALA:N         1:A:95:ALA:CA         1:A:95:ALA:C         1:A:96:ASP:N         5         8.94           (1,369)         1:A:85:MET:N         1:A:85:MET:CA         1:A:85:MET:C         1:A:86:ILE:N         13         8.92           (1,134)         1:A:85:MET:N         1:A:85:MET:CA         1:A:85:MET:C         1:A:86:ILE:N         13         8.92           (1,465)         1:A:138:LEU:C         1:A:139:HIS:N         1:A:139:HIS:CA         1:A:139:HIS:C         18         8.83           (1,230)         1:A:138:LEU:C         1:A:139:HIS:N         1:A:139:HIS:CA         1:A:139:HIS:C         18	(1,373)	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	1:A:88:THR:N	20	9.29
(1,151)         1:A:93:ARG:C         1:A:94:THR:N         1:A:94:THR:CA         1:A:94:THR:C         19         9.26           (1,383)         1:A:92:SER:N         1:A:92:SER:CA         1:A:92:SER:C         1:A:93:ARG:N         19         9.12           (1,148)         1:A:92:SER:N         1:A:92:SER:CA         1:A:92:SER:C         1:A:93:ARG:N         19         9.12           (1,389)         1:A:95:ALA:N         1:A:95:ALA:CA         1:A:95:ALA:C         1:A:96:ASP:N         5         8.94           (1,154)         1:A:95:ALA:N         1:A:95:ALA:CA         1:A:95:ALA:C         1:A:96:ASP:N         5         8.94           (1,369)         1:A:85:MET:N         1:A:85:MET:CA         1:A:85:MET:C         1:A:86:ILE:N         13         8.92           (1,134)         1:A:85:MET:N         1:A:85:MET:CA         1:A:85:MET:C         1:A:86:ILE:N         13         8.92           (1,465)         1:A:138:LEU:C         1:A:139:HIS:N         1:A:139:HIS:CA         1:A:139:HIS:C         18         8.83           (1,230)         1:A:138:LEU:C         1:A:139:HIS:N         1:A:139:HIS:CA         1:A:139:HIS:C         18         8.83	(1,138)	1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	1:A:88:THR:N	20	9.29
(1,383)         1:A:92:SER:N         1:A:92:SER:CA         1:A:92:SER:C         1:A:93:ARG:N         19         9.12           (1,148)         1:A:92:SER:N         1:A:92:SER:CA         1:A:92:SER:C         1:A:93:ARG:N         19         9.12           (1,389)         1:A:95:ALA:N         1:A:95:ALA:CA         1:A:95:ALA:C         1:A:96:ASP:N         5         8.94           (1,154)         1:A:95:ALA:N         1:A:95:ALA:CA         1:A:95:ALA:C         1:A:96:ASP:N         5         8.94           (1,369)         1:A:85:MET:N         1:A:85:MET:CA         1:A:85:MET:C         1:A:86:ILE:N         13         8.92           (1,134)         1:A:85:MET:N         1:A:85:MET:CA         1:A:85:MET:C         1:A:86:ILE:N         13         8.92           (1,465)         1:A:138:LEU:C         1:A:139:HIS:N         1:A:139:HIS:CA         1:A:139:HIS:C         18         8.83           (1,230)         1:A:138:LEU:C         1:A:139:HIS:N         1:A:139:HIS:CA         1:A:139:HIS:C         18         8.83	(1,386)	1:A:93:ARG:C	1:A:94:THR:N	1:A:94:THR:CA	1:A:94:THR:C	19	9.26
(1,148)         1:A:92:SER:N         1:A:92:SER:CA         1:A:92:SER:C         1:A:93:ARG:N         19         9.12           (1,389)         1:A:95:ALA:N         1:A:95:ALA:CA         1:A:95:ALA:C         1:A:96:ASP:N         5         8.94           (1,154)         1:A:95:ALA:N         1:A:95:ALA:CA         1:A:95:ALA:C         1:A:96:ASP:N         5         8.94           (1,369)         1:A:85:MET:N         1:A:85:MET:CA         1:A:85:MET:C         1:A:86:ILE:N         13         8.92           (1,134)         1:A:85:MET:N         1:A:85:MET:CA         1:A:85:MET:C         1:A:86:ILE:N         13         8.92           (1,465)         1:A:138:LEU:C         1:A:139:HIS:N         1:A:139:HIS:CA         1:A:139:HIS:C         18         8.83           (1,230)         1:A:138:LEU:C         1:A:139:HIS:N         1:A:139:HIS:CA         1:A:139:HIS:C         18         8.83	(1,151)	1:A:93:ARG:C	1:A:94:THR:N	1:A:94:THR:CA	1:A:94:THR:C	19	9.26
(1,389)       1:A:95:ALA:N       1:A:95:ALA:CA       1:A:95:ALA:C       1:A:96:ASP:N       5       8.94         (1,154)       1:A:95:ALA:N       1:A:95:ALA:CA       1:A:95:ALA:C       1:A:96:ASP:N       5       8.94         (1,369)       1:A:85:MET:N       1:A:85:MET:CA       1:A:85:MET:C       1:A:86:ILE:N       13       8.92         (1,134)       1:A:85:MET:N       1:A:85:MET:CA       1:A:85:MET:C       1:A:86:ILE:N       13       8.92         (1,465)       1:A:138:LEU:C       1:A:139:HIS:N       1:A:139:HIS:CA       1:A:139:HIS:C       18       8.83         (1,230)       1:A:138:LEU:C       1:A:139:HIS:N       1:A:139:HIS:CA       1:A:139:HIS:C       18       8.83	(1,383)	1:A:92:SER:N	1:A:92:SER:CA	1:A:92:SER:C	1:A:93:ARG:N	19	9.12
(1,154)       1:A:95:ALA:N       1:A:95:ALA:CA       1:A:95:ALA:C       1:A:96:ASP:N       5       8.94         (1,369)       1:A:85:MET:N       1:A:85:MET:CA       1:A:85:MET:C       1:A:86:ILE:N       13       8.92         (1,134)       1:A:85:MET:N       1:A:85:MET:CA       1:A:85:MET:C       1:A:86:ILE:N       13       8.92         (1,465)       1:A:138:LEU:C       1:A:139:HIS:N       1:A:139:HIS:CA       1:A:139:HIS:C       18       8.83         (1,230)       1:A:138:LEU:C       1:A:139:HIS:N       1:A:139:HIS:CA       1:A:139:HIS:C       18       8.83	(1,148)	1:A:92:SER:N	1:A:92:SER:CA	1:A:92:SER:C	1:A:93:ARG:N	19	9.12
(1,369)       1:A:85:MET:N       1:A:85:MET:CA       1:A:85:MET:C       1:A:86:ILE:N       13       8.92         (1,134)       1:A:85:MET:N       1:A:85:MET:CA       1:A:85:MET:C       1:A:86:ILE:N       13       8.92         (1,465)       1:A:138:LEU:C       1:A:139:HIS:N       1:A:139:HIS:CA       1:A:139:HIS:C       18       8.83         (1,230)       1:A:138:LEU:C       1:A:139:HIS:N       1:A:139:HIS:CA       1:A:139:HIS:C       18       8.83	(1,389)	1:A:95:ALA:N	1:A:95:ALA:CA	1:A:95:ALA:C	1:A:96:ASP:N	1	8.94
(1,134)       1:A:85:MET:N       1:A:85:MET:CA       1:A:85:MET:C       1:A:86:ILE:N       13       8.92         (1,465)       1:A:138:LEU:C       1:A:139:HIS:N       1:A:139:HIS:CA       1:A:139:HIS:C       18       8.83         (1,230)       1:A:138:LEU:C       1:A:139:HIS:N       1:A:139:HIS:CA       1:A:139:HIS:C       18       8.83	(1,154)	1:A:95:ALA:N	1:A:95:ALA:CA	1:A:95:ALA:C	1:A:96:ASP:N	5	8.94
(1,465)       1:A:138:LEU:C       1:A:139:HIS:N       1:A:139:HIS:CA       1:A:139:HIS:C       18       8.83         (1,230)       1:A:138:LEU:C       1:A:139:HIS:N       1:A:139:HIS:CA       1:A:139:HIS:C       18       8.83	(1,369)	1:A:85:MET:N	1:A:85:MET:CA	1:A:85:MET:C	1:A:86:ILE:N	13	8.92
(1,230) 1:A:138:LEU:C 1:A:139:HIS:N 1:A:139:HIS:CA 1:A:139:HIS:C 18 8.83	(1,134)	1:A:85:MET:N	1:A:85:MET:CA	1:A:85:MET:C	1:A:86:ILE:N	13	8.92
(1,230) 1:A:138:LEU:C 1:A:139:HIS:N 1:A:139:HIS:CA 1:A:139:HIS:C 18 8.83	(1,465)	1:A:138:LEU:C	1:A:139:HIS:N	1:A:139:HIS:CA	1:A:139:HIS:C	18	8.83
(1,340) 1:A:67:PHE:N 1:A:67:PHE:CA 1:A:67:PHE:C 1:A:68:THR:N 2 8.73	(1,230)	1:A:138:LEU:C	1:A:139:HIS:N	1:A:139:HIS:CA	1:A:139:HIS:C	18	8.83
1	(1,340)	1:A:67:PHE:N	1:A:67:PHE:CA	1:A:67:PHE:C	1:A:68:THR:N	2	8.73
(1,105) 1:A:67:PHE:N 1:A:67:PHE:CA 1:A:67:PHE:C 1:A:68:THR:N 2 8.73			1:A:67:PHE:CA		1:A:68:THR:N		
(1,373) 1:A:87:ARG:N 1:A:87:ARG:CA 1:A:87:ARG:C 1:A:88:THR:N 19 8.7		1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C		19	
(1,138) 1:A:87:ARG:N 1:A:87:ARG:CA 1:A:87:ARG:C 1:A:88:THR:N 19 8.7		1:A:87:ARG:N	1:A:87:ARG:CA	1:A:87:ARG:C	1:A:88:THR:N	19	8.7
(1,61) 1:A:39:GLU:N 1:A:39:GLU:CA 1:A:39:GLU:C 1:A:40:GLY:N 15 8.67							
(1,296) 1:A:39:GLU:N 1:A:39:GLU:CA 1:A:39:GLU:C 1:A:40:GLY:N 15 8.67	· · /						
	(1,397)	1:A:99:LEU:N	1:A:99:LEU:CA	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	3	8.66



	ed from previous pe					
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation ( $\circ$ )
(1,162)	1:A:99:LEU:N	1:A:99:LEU:CA	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	3	8.66
(1,412)	1:A:108:GLY:N	1:A:108:GLY:CA	1:A:108:GLY:C	1:A:109:PRO:N	3	8.62
(1,177)	1:A:108:GLY:N	1:A:108:GLY:CA	1:A:108:GLY:C	1:A:109:PRO:N	3	8.62
(1,58)	1:A:37:LYS:C	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	8	8.57
(1,293)	1:A:37:LYS:C	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	8	8.57
(1,94)	1:A:60:SER:N	1:A:60:SER:CA	1:A:60:SER:C	1:A:61:GLN:N	13	8.36
(1,329)	1:A:60:SER:N	1:A:60:SER:CA	1:A:60:SER:C	1:A:61:GLN:N	13	8.36
(1,456)	1:A:133:GLY:N	1:A:133:GLY:CA	1:A:133:GLY:C	1:A:134:TYR:N	4	7.85
(1,221)	1:A:133:GLY:N	1:A:133:GLY:CA	1:A:133:GLY:C	1:A:134:TYR:N	4	7.85
(1,338)	1:A:66:SER:N	1:A:66:SER:CA	1:A:66:SER:C	1:A:67:PHE:N	1	7.8
(1,103)	1:A:66:SER:N	1:A:66:SER:CA	1:A:66:SER:C	1:A:67:PHE:N	1	7.8
(1,391)	1:A:96:ASP:N	1:A:96:ASP:CA	1:A:96:ASP:C	1:A:97:SER:N	20	7.76
(1,156)	1:A:96:ASP:N	1:A:96:ASP:CA	1:A:96:ASP:C	1:A:97:SER:N	20	7.76
(1,391)	1:A:96:ASP:N	1:A:96:ASP:CA	1:A:96:ASP:C	1:A:97:SER:N	1	7.72
(1,156)	1:A:96:ASP:N	1:A:96:ASP:CA	1:A:96:ASP:C	1:A:97:SER:N	1	7.72
(1,421)	1:A:114:TYR:N	1:A:114:TYR:CA	1:A:114:TYR:C	1:A:115:CYS:N	9	7.67
(1,186)	1:A:114:TYR:N	1:A:114:TYR:CA	1:A:114:TYR:C	1:A:115:CYS:N	9	7.67
(1,345)	1:A:70:PRO:N	1:A:70:PRO:CA	1:A:70:PRO:C	1:A:71:ILE:N	14	7.59
(1,110)	1:A:70:PRO:N	1:A:70:PRO:CA	1:A:70:PRO:C	1:A:71:ILE:N	14	7.59
(1,79)	1:A:51:LEU:C	1:A:52:PHE:N	1:A:52:PHE:CA	1:A:52:PHE:C	4	7.56
(1,314)	1:A:51:LEU:C	1:A:52:PHE:N	1:A:52:PHE:CA	1:A:52:PHE:C	4	7.56
(1,389)	1:A:95:ALA:N	1:A:95:ALA:CA	1:A:95:ALA:C	1:A:96:ASP:N	17	7.48
(1,154)	1:A:95:ALA:N	1:A:95:ALA:CA	1:A:95:ALA:C	1:A:96:ASP:N	17	7.48
(1,89)	1:A:57:LYS:C	1:A:58:PHE:N	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:C	15	7.27
(1,324)	1:A:57:LYS:C	1:A:58:PHE:N	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:C	15	7.27
(1,59)	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	1:A:39:GLU:N	6	7.22
(1,294)	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	1:A:39:GLU:N	6	7.22
(1,455)	1:A:132:GLU:C	1:A:133:GLY:N	1:A:133:GLY:CA	1:A:133:GLY:C	5	7.21
(1,220)	1:A:132:GLU:C	1:A:133:GLY:N	1:A:133:GLY:CA	1:A:133:GLY:C	5	7.21
(1,389)	1:A:95:ALA:N	1:A:95:ALA:CA	1:A:95:ALA:C	1:A:96:ASP:N	10	7.18
(1,154)	1:A:95:ALA:N	1:A:95:ALA:CA	1:A:95:ALA:C	1:A:96:ASP:N	10	7.18
(1,419)	1:A:113:ARG:N	1:A:113:ARG:CA	1:A:113:ARG:C	1:A:114:TYR:N	13	7.11
(1,184)	1:A:113:ARG:N	1:A:113:ARG:CA	1:A:113:ARG:C	1:A:114:TYR:N	13	7.11
(1,42)	1:A:24:GLY:N	1:A:24:GLY:CA	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	11	6.97
(1,277)	1:A:24:GLY:N	1:A:24:GLY:CA	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	11	6.97
(1,456)	1:A:133:GLY:N	1:A:133:GLY:CA	1:A:133:GLY:C	1:A:134:TYR:N	12	6.94
(1,221)	1:A:133:GLY:N	1:A:133:GLY:CA	1:A:133:GLY:C	1:A:134:TYR:N	12	6.94
(1,87)	1:A:56:ASP:C	1:A:57:LYS:N	1:A:57:LYS:CA	1:A:57:LYS:C	8	6.9
(1,322)	1:A:56:ASP:C	1:A:57:LYS:N	1:A:57:LYS:CA	1:A:57:LYS:C	8	6.9
(1,456)	1:A:133:GLY:N	1:A:133:GLY:CA	1:A:133:GLY:C	1:A:134:TYR:N	18	6.86
(1,221)	1:A:133:GLY:N	1:A:133:GLY:CA	1:A:133:GLY:C	1:A:134:TYR:N	18	6.86
(1,246)	1:A:7:GLU:C	1:A:8:LYS:N	1:A:8:LYS:CA	1:A:8:LYS:C	12	6.8
(1,11)	1:A:7:GLU:C	1:A:8:LYS:N	1:A:8:LYS:CA	1:A:8:LYS:C	12	6.8
(1,59)	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	1:A:39:GLU:N	17	6.79
(1,294)	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	1:A:39:GLU:N	17	6.79
(1,397)	1:A:99:LEU:N	1:A:99:LEU:CA	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	4	6.78
(1,162)	1:A:99:LEU:N	1:A:99:LEU:CA	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	4	6.78
(1,42)	1:A:24:GLY:N	1:A:24:GLY:CA	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	8	6.77
(1,277)	1:A:24:GLY:N	1:A:24:GLY:CA	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	8	6.77
(1,261)	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	1:A:16:GLN:N	17	6.75
(1,26)	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	1:A:16:GLN:N	17	6.75
					0 1:	ed on nert nage



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



	d from previous pe		A	A	3.6 1.1	<b>T79 1 19</b> ( )
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation ( o )
(1,162)	1:A:99:LEU:N	1:A:99:LEU:CA	1:A:99:LEU:C	1:A:100:GLY:N	20	5.98
(1,345)	1:A:70:PRO:N	1:A:70:PRO:CA	1:A:70:PRO:C	1:A:71:ILE:N	16	5.96
(1,110)	1:A:70:PRO:N	1:A:70:PRO:CA	1:A:70:PRO:C	1:A:71:ILE:N	16	5.96
(1,390)	1:A:95:ALA:C	1:A:96:ASP:N	1:A:96:ASP:CA	1:A:96:ASP:C	4	5.88
(1,155)	1:A:95:ALA:C	1:A:96:ASP:N	1:A:96:ASP:CA	1:A:96:ASP:C	4	5.88
(1,42)	1:A:24:GLY:N	1:A:24:GLY:CA	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	14	5.84
(1,277)	1:A:24:GLY:N	1:A:24:GLY:CA	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	14	5.84
(1,260)	1:A:14:ARG:C	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	17	5.84
(1,25)	1:A:14:ARG:C	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	17	5.84
(1,349)	1:A:73:GLU:N	1:A:73:GLU:CA	1:A:73:GLU:C	1:A:74:GLU:N	14	5.83
(1,114)	1:A:73:GLU:N	1:A:73:GLU:CA	1:A:73:GLU:C	1:A:74:GLU:N	14	5.83
(1,345)	1:A:70:PRO:N	1:A:70:PRO:CA	1:A:70:PRO:C	1:A:71:ILE:N	7	5.82
(1,110)	1:A:70:PRO:N	1:A:70:PRO:CA	1:A:70:PRO:C	1:A:71:ILE:N	7	5.82
(1,419)	1:A:113:ARG:N	1:A:113:ARG:CA	1:A:113:ARG:C	1:A:114:TYR:N	1	5.81
(1,184)	1:A:113:ARG:N	1:A:113:ARG:CA	1:A:113:ARG:C	1:A:114:TYR:N	1	5.81
(1,57)	1:A:37:LYS:N	1:A:37:LYS:CA	1:A:37:LYS:C	1:A:38:GLU:N	15	5.76
(1,423)	1:A:115:CYS:N	1:A:115:CYS:CA	1:A:115:CYS:C	1:A:116:ILE:N	15	5.76
(1,292)	1:A:37:LYS:N	1:A:37:LYS:CA	1:A:37:LYS:C	1:A:38:GLU:N	15	5.76
(1,188)	1:A:115:CYS:N	1:A:115:CYS:CA	1:A:115:CYS:C	1:A:116:ILE:N	15	5.76
(1,336)	1:A:65:PRO:N	1:A:65:PRO:CA	1:A:65:PRO:C	1:A:66:SER:N	9	5.75
(1,101)	1:A:65:PRO:N	1:A:65:PRO:CA	1:A:65:PRO:C	1:A:66:SER:N	9	5.75
(1,423)	1:A:115:CYS:N	1:A:115:CYS:CA	1:A:115:CYS:C	1:A:116:ILE:N	10	5.72
(1,188)	1:A:115:CYS:N	1:A:115:CYS:CA	1:A:115:CYS:C	1:A:116:ILE:N	10	5.72
(1,423)	1:A:115:CYS:N	1:A:115:CYS:CA	1:A:115:CYS:C	1:A:116:ILE:N	16	5.71
(1,188)	1:A:115:CYS:N	1:A:115:CYS:CA	1:A:115:CYS:C	1:A:116:ILE:N	16	5.71
(1,395)	1:A:98:HIS:N	1:A:98:HIS:CA	1:A:98:HIS:C	1:A:99:LEU:N	18	5.67
(1,160)	1:A:98:HIS:N	1:A:98:HIS:CA	1:A:98:HIS:C	1:A:99:LEU:N	18	5.67
(1,419)	1:A:113:ARG:N	1:A:113:ARG:CA	1:A:113:ARG:C	1:A:114:TYR:N	18	5.66
(1,184)	1:A:113:ARG:N	1:A:113:ARG:CA	1:A:113:ARG:C	1:A:114:TYR:N	18	5.66
(1,365)	1:A:82:SER:N	1:A:82:SER:CA	1:A:82:SER:C	1:A:83:HIS:N	17	5.63
(1,130)	1:A:82:SER:N	1:A:82:SER:CA	1:A:82:SER:C	1:A:83:HIS:N	17	5.63
(1,464)	1:A:138:LEU:N	1:A:138:LEU:CA	1:A:138:LEU:C	1:A:139:HIS:N	7	5.61
(1,229)	1:A:138:LEU:N	1:A:138:LEU:CA	1:A:138:LEU:C	1:A:139:HIS:N	7	5.61
(1,94)	1:A:60:SER:N	1:A:60:SER:CA	1:A:60:SER:C	1:A:61:GLN:N	1	5.58
(1,329)	1:A:60:SER:N	1:A:60:SER:CA	1:A:60:SER:C	1:A:61:GLN:N	1	5.58
(1,58)	1:A:37:LYS:C	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	18	5.56
(1,293)	1:A:37:LYS:C	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	18	5.56
(1,387)	1:A:94:THR:N	1:A:94:THR:CA	1:A:94:THR:C	1:A:95:ALA:N	15	5.51
(1,152)	1:A:94:THR:N	1:A:94:THR:CA	1:A:94:THR:C	1:A:95:ALA:N	15	5.51
(1,456)	1:A:133:GLY:N	1:A:133:GLY:CA	1:A:133:GLY:C	1:A:134:TYR:N	15	5.49
(1,451)	1:A:130:LYS:C	1:A:131:GLU:N	1:A:131:GLU:CA	1:A:131:GLU:C	12	5.49
(1,221)	1:A:133:GLY:N	1:A:133:GLY:CA	1:A:133:GLY:C	1:A:134:TYR:N	15	5.49
(1,216)	1:A:130:LYS:C	1:A:131:GLU:N	1:A:131:GLU:CA	1:A:131:GLU:C	12	5.49
(1,459)	1:A:135:GLU:C	1:A:136:SER:N	1:A:136:SER:CA	1:A:136:SER:C	6	5.48
(1,423)	1:A:115:CYS:N	1:A:115:CYS:CA	1:A:115:CYS:C	1:A:116:ILE:N	5	5.48
(1,347)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:GLU:N	15	5.48
(1,224)	1:A:135:GLU:C	1:A:136:SER:N	1:A:136:SER:CA	1:A:136:SER:C	6	5.48
(1,188)	1:A:115:CYS:N	1:A:115:CYS:CA	1:A:115:CYS:C	1:A:116:ILE:N	5	5.48
(1,112)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:GLU:N	15	5.48
(1,423)	1:A:115:CYS:N	1:A:115:CYS:CA	1:A:115:CYS:C	1:A:116:ILE:N	3	5.47
				1		· ·



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



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



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



	ed from previous pe	•			7.5 1.1	<b>T71 1 11 ( )</b>
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation $(\circ)$
(1,150)	1:A:93:ARG:N	1:A:93:ARG:CA	1:A:93:ARG:C	1:A:94:THR:N	5	3.85
(1,459)	1:A:135:GLU:C	1:A:136:SER:N	1:A:136:SER:CA	1:A:136:SER:C	20	3.84
(1,224)	1:A:135:GLU:C	1:A:136:SER:N	1:A:136:SER:CA	1:A:136:SER:C	20	3.84
(1,395)	1:A:98:HIS:N	1:A:98:HIS:CA	1:A:98:HIS:C	1:A:99:LEU:N	9	3.82
(1,160)	1:A:98:HIS:N	1:A:98:HIS:CA	1:A:98:HIS:C	1:A:99:LEU:N	9	3.82
(1,78)	1:A:50:PRO:N	1:A:50:PRO:CA	1:A:50:PRO:C	1:A:51:LEU:N	11	3.8
(1,462)	1:A:137:TYR:N	1:A:137:TYR:CA	1:A:137:TYR:C	1:A:138:LEU:N	14	3.8
(1,313)	1:A:50:PRO:N	1:A:50:PRO:CA	1:A:50:PRO:C	1:A:51:LEU:N	11	3.8
(1,227)	1:A:137:TYR:N	1:A:137:TYR:CA	1:A:137:TYR:C	1:A:138:LEU:N	14	3.8
(1,416)	1:A:111:GLY:C	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	16	3.79
(1,181)	1:A:111:GLY:C	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	16	3.79
(1,416)	1:A:111:GLY:C	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	14	3.78
(1,181)	1:A:111:GLY:C	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	14	3.78
(1,90)	1:A:58:PHE:N	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:C	1:A:59:ASP:N	5	3.77
(1,343)	1:A:68:THR:C	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	11	3.77
(1,325)	1:A:58:PHE:N	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:C	1:A:59:ASP:N	5	3.77
(1,108)	1:A:68:THR:C	1:A:69:LYS:N	1:A:69:LYS:CA	1:A:69:LYS:C	11	3.77
(1,470)	1:A:141:PHE:N	1:A:141:PHE:CA	1:A:141:PHE:C	1:A:142:ASN:N	5	3.76
(1,416)	1:A:111:GLY:C	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	9	3.76
(1,235)	1:A:141:PHE:N	1:A:141:PHE:CA	1:A:141:PHE:C	1:A:142:ASN:N	5	3.76
(1,181)	1:A:111:GLY:C	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	9	3.76
(1,237)	1:A:3:TYR:N	1:A:3:TYR:CA	1:A:3:TYR:C	1:A:4:ASN:N	7	3.71
(1,2)	1:A:3:TYR:N	1:A:3:TYR:CA	1:A:3:TYR:C	1:A:4:ASN:N	7	3.71
(1,47)	1:A:27:PRO:N	1:A:27:PRO:CA	1:A:27:PRO:C	1:A:28:PRO:N	19	3.69
(1,282)	1:A:27:PRO:N	1:A:27:PRO:CA	1:A:27:PRO:C	1:A:28:PRO:N	19	3.69
(1,78)	1:A:50:PRO:N	1:A:50:PRO:CA	1:A:50:PRO:C	1:A:51:LEU:N	3	3.66
(1,380)	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	1:A:91:ARG:CA	1:A:91:ARG:C	13	3.66
(1,313)	1:A:50:PRO:N	1:A:50:PRO:CA	1:A:50:PRO:C	1:A:51:LEU:N	3	3.66
(1,145)	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	1:A:91:ARG:CA	1:A:91:ARG:C	13	3.66
(1,78)	1:A:50:PRO:N	1:A:50:PRO:CA	1:A:50:PRO:C	1:A:51:LEU:N	2	3.63
(1,58)	1:A:37:LYS:C	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	9	3.63
(1,459)	1:A:135:GLU:C	1:A:136:SER:N	1:A:136:SER:CA	1:A:136:SER:C	19	3.63
(1,387)	1:A:94:THR:N	1:A:94:THR:CA	1:A:94:THR:C	1:A:95:ALA:N	11	3.63
(1,313)	1:A:50:PRO:N	1:A:50:PRO:CA	1:A:50:PRO:C	1:A:51:LEU:N	2	3.63
(1,293)	1:A:37:LYS:C	1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:C	9	3.63
(1,224)	1:A:135:GLU:C	1:A:136:SER:N	1:A:136:SER:CA	1:A:136:SER:C	19	3.63
(1,152)	1:A:94:THR:N	1:A:94:THR:CA	1:A:94:THR:C	1:A:95:ALA:N	11	3.63
(1,468)	1:A:140:LEU:N	1:A:140:LEU:CA	1:A:140:LEU:C	1:A:141:PHE:N	4	3.62
(1,233)	1:A:140:LEU:N	1:A:140:LEU:CA	1:A:140:LEU:C	1:A:141:PHE:N	4	3.62
(1,380)	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	1:A:91:ARG:CA	1:A:91:ARG:C	2	3.61
(1,145)	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	1:A:91:ARG:CA	1:A:91:ARG:C	2	3.61
(1,345)	1:A:70:PRO:N	1:A:70:PRO:CA	1:A:70:PRO:C	1:A:71:ILE:N	17	3.6
(1,110)	1:A:70:PRO:N	1:A:70:PRO:CA	1:A:70:PRO:C	1:A:71:ILE:N	17	3.6
(1,380)	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	1:A:91:ARG:CA	1:A:91:ARG:C	18	3.58
(1,145)	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	1:A:91:ARG:CA	1:A:91:ARG:C	18	3.58
(1,421)	1:A:114:TYR:N	1:A:114:TYR:CA	1:A:114:TYR:C	1:A:115:CYS:N	17	3.57
(1,186)	1:A:114:TYR:N	1:A:114:TYR:CA	1:A:114:TYR:C	1:A:115:CYS:N	17	3.57
(1,84)	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	1:A:55:LYS:N	4	3.56
(1,416)	1:A:111:GLY:C	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	4	3.56
(1,319)	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	1:A:55:LYS:N	4	3.56
(1,181)	1:A:111:GLY:C	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	4	3.56



(1,87)	
(1,61) 1:A:39:GLU:N 1:A:39:GLU:CA 1:A:39:GLU:C 1:A:40:GLY:N 14 (1,368) 1:A:84:GLY:C 1:A:85:MET:N 1:A:85:MET:CA 1:A:85:MET:C 11 (1,322) 1:A:56:ASP:C 1:A:57:LYS:N 1:A:57:LYS:CA 1:A:57:LYS:C 7 (1,296) 1:A:39:GLU:N 1:A:39:GLU:CA 1:A:39:GLU:C 1:A:40:GLY:N 14 (1,133) 1:A:84:GLY:C 1:A:85:MET:N 1:A:85:MET:CA 1:A:85:MET:C 11 (1,411) 1:A:107:PRO:C 1:A:108:GLY:N 1:A:108:GLY:CA 1:A:45:MET:C 11 (1,411) 1:A:107:PRO:C 1:A:108:GLY:N 1:A:108:GLY:CA 1:A:85:MET:C 11 (1,411) 1:A:107:PRO:C 1:A:108:GLY:N 1:A:108:GLY:CA 1:A:89:GLU:N 12 (1,176) 1:A:88:THR:N 1:A:88:THR:CA 1:A:88:THR:C 1:A:89:GLU:N 12 (1,176) 1:A:107:PRO:C 1:A:108:GLY:N 1:A:108:GLY:CA 1:A:108:GLY:C 13 (1,140) 1:A:88:THR:N 1:A:88:THR:CA 1:A:88:THR:C 1:A:89:GLU:N 12 (1,139) 1:A:97:SER:C 1:A:98:HIS:N 1:A:98:HIS:CA 1:A:98-HIS:C 17 (1,159) 1:A:97:SER:C 1:A:98:HIS:N 1:A:98:HIS:CA 1:A:98:HIS:C 17 (1,159) 1:A:97:SER:C 1:A:98:HIS:N 1:A:98:HIS:CA 1:A:98:HIS:C 17 (1,140) 1:A:141:PHE:N 1:A:141:PHE:CA 1:A:141:PHE:C 1:A:142:ASN:N 11 (1,347) 1:A:72:GLU:N 1:A:72:GLU:CA 1:A:72:GLU:C 1:A:73:GLU:N 5 (1,347) 1:A:72:GLU:N 1:A:72:GLU:CA 1:A:72:GLU:C 1:A:73:GLU:N 5 (1,341) 1:A:96:ASP:N 1:A:96:ASP:CA 1:A:96:ASP:C 1:A:96:ASP:N 1:A:96:ASP:N 1:A:96:ASP:CA 1:A:96:ASP:C 1:A:96:ASP:N 1 (1,150) 1:A:96:ASP:N 1:A:96:ASP:CA 1:A:96:ASP:C 1:A:96:ASP:C 1:A:97:SER:N 4 (1,375) 1:A:88:THR:N 1:A:96:ASP:CA 1:A:96:ASP:C 1:A:97:SER:N 4 (1,375) 1:A:96:ASP:N 1:A:96:ASP:CA 1:A:96:ASP:C 1:A:97:SER:N 5 (1,150) 1:A:96:ASP:N 1:A:96:ASP:CA 1:A:96:ASP:C 1:A:97:SER:N	ation (°)
Carrier   Carr	3.55
(1,322)	3.55
(1,296) 1:A:39:GLU:N 1:A:39:GLU:CA 1:A:39:GLU:C 1:A:40:GLY:N 14 (1,133) 1:A:84:GLY:C 1:A:85:MET:N 1:A:85:MET:CA 1:A:85:MET:C 11 (1,411) 1:A:107:PRO:C 1:A:108:GLY:N 1:A:108:GLY:CA 1:A:108:GLY:C 13 (1,375) 1:A:88:THR:N 1:A:88:THR:CA 1:A:88:THR:CA 1:A:89:GLU:N 12 (1,176) 1:A:107:PRO:C 1:A:108:GLY:N 1:A:108:GLY:CA 1:A:108:GLY:C 13 (1,140) 1:A:88:THR:N 1:A:88:THR:CA 1:A:88:THR:C 1:A:89:GLU:N 12 (1,394) 1:A:97:SER:C 1:A:98:HIS:N 1:A:98:HIS:CA 1:A:98:HIS:C 17 (1,159) 1:A:97:SER:C 1:A:98:HIS:N 1:A:98:HIS:CA 1:A:98:HIS:C 17 (1,159) 1:A:97:SER:C 1:A:98:HIS:N 1:A:98:HIS:CA 1:A:98:HIS:C 17 (1,470) 1:A:141:PHE:N 1:A:141:PHE:CA 1:A:141:PHE:C 1:A:142:ASN:N 11 (1,347) 1:A:72:GLU:N 1:A:141:PHE:CA 1:A:141:PHE:C 1:A:142:ASN:N 11 (1,347) 1:A:141:PHE:N 1:A:141:PHE:CA 1:A:141:PHE:C 1:A:142:ASN:N 11 (1,347) 1:A:141:PHE:N 1:A:141:PHE:CA 1:A:141:PHE:C 1:A:142:ASN:N 11 (1,317) 1:A:53:THR:N 1:A:53:THR:CA 1:A:96:ASP:C 1:A:97:SER:N 4 (1,375) 1:A:88:THR:N 1:A:88:THR:CA 1:A:88:THR:C 1:A:96:ASP:C 1:A:97:SER:N 4 (1,375) 1:A:96:ASP:C 1:A:97:SER:N 1:A:96:ASP:C 1:A:97:SER:N 4 (1,392) 1:A:96:ASP:C 1:A:97:SER:N 1:A:96:ASP:C 1:A:97:SER:N 5 (1,392) 1:A:96:ASP:C 1:A:97:SER:N 1:A:96:ASP:C 1:A:97:SER:C 8 (1,391) 1:A:96:ASP:C 1:A:97:SER:N 1:A:96:ASP:C 1:A:97:SER:C 8 (1,391) 1:A:96:ASP:C 1:A:97:SER:N 1:A:96:ASP:C 1:A:97:SER:C 5 (1,391) 1:A:96:ASP:C 1:A:97:SER:N 1:A:96:ASP:C 1:A:97:SER:N 5 (1,391) 1:A:96:ASP:C 1:A:97:SER:N 1:A:94:THR:C 1:A:94:THR:C 5 (1,494) 1:A:94:THR:C 1:A:94:THR:C 5 (1,494) 1:A:107:PRO:C 1:A:108:GLY:N 15 (1,494) 1:A:109:PRO:C 1:	3.55
(1,133) 1:A:84:GLY:C 1:A:85:MET:N 1:A:85:MET:CA 1:A:85:MET:C 11 (1,141) 1:A:107:PRO:C 1:A:108:GLY:N 1:A:108:GLY:CA 1:A:108:GLY:C 13 (1,375) 1:A:88:THR:N 1:A:88:THR:CA 1:A:108:GLY:CA 1:A:108:GLY:C 13 (1,176) 1:A:107:PRO:C 1:A:108:GLY:N 1:A:108:GLY:CA 1:A:108:GLY:C 13 (1,140) 1:A:88:THR:N 1:A:88:THR:CA 1:A:108:GLY:CA 1:A:108:GLY:C 13 (1,140) 1:A:88:THR:N 1:A:88:THR:CA 1:A:88:THR:C 1:A:89:GLU:N 12 (1,394) 1:A:97:SER:C 1:A:98:HIS:N 1:A:98:HIS:CA 1:A:98:HIS:C 17 (1,159) 1:A:97:SER:C 1:A:98:HIS:N 1:A:98:HIS:CA 1:A:98:HIS:C 17 (1,159) 1:A:35:THR:N 1:A:35:THR:CA 1:A:53:THR:CA 1:A:58:THR:C 17 (1,470) 1:A:141:PHE:N 1:A:141:PHE:CA 1:A:53:THR:C 1:A:54:SER:N 1 (1,470) 1:A:141:PHE:N 1:A:141:PHE:CA 1:A:141:PHE:C 1:A:142:ASN:N 11 (1,347) 1:A:72:GLU:N 1:A:72:GLU:CA 1:A:72:GLU:C 1:A:73:GLU:N 5 (1,317) 1:A:53:THR:N 1:A:53:THR:CA 1:A:53:THR:C 1:A:54:SER:N 1 (1,235) 1:A:141:PHE:N 1:A:141:PHE:CA 1:A:141:PHE:C 1:A:142:ASN:N 11 (1,135) 1:A:141:PHE:N 1:A:141:PHE:CA 1:A:141:PHE:C 1:A:142:ASN:N 11 (1,353) 1:A:96:ASP:N 1:A:96:ASP:CA 1:A:96:ASP:C 1:A:97:SER:N 4 (1,156) 1:A:96:ASP:N 1:A:96:ASP:CA 1:A:96:ASP:C 1:A:97:SER:N 4 (1,375) 1:A:88:THR:N 1:A:88:THR:CA 1:A:88:THR:C 1:A:89:GLU:N 5 (1,391) 1:A:96:ASP:C 1:A:97:SER:N 1:A:96:ASP:C 1:A:97:SER:N 5 (1,392) 1:A:96:ASP:C 1:A:97:SER:N 1:A:96:ASP:C 1:A:97:SER:N 5 (1,392) 1:A:96:ASP:N 1:A:96:ASP:CA 1:A:96:ASP:C 1:A:97:SER:N 5 (1,391) 1:A:96:ASP:N 1:A:96:ASP:N 1:A:96:ASP:C 1:A:97:SER:N 5 (1,156) 1:A:96:ASP:N 1:A:96:ASP:N 1:A:96:ASP:C 1:A:97:SER:C 8 (1,157) 1:A:96:ASP:N 1:A:96:ASP:CA 1:A:96:ASP:C 1:A:97:SER:N 5 (1,156) 1:A:96:ASP:N 1:A:96:ASP:C 1:A:97:SER:N 5 (1,156) 1:A:96:ASP:N 1:A:96:ASP:C 1:A:97:SER:N 5 (1,156) 1:A:96:ASP:N 1:A:96:ASP:N 1:A:96:ASP:C 1:A:97:SER:N 5 (1,156) 1:A:96:ASP:N 1:A:96:ASP:N 1:A:96:ASP:N 1:A:96:ASP:N 1:A:9	3.55
(1,411)         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:N         1:A:108:GLY:CA         1:A:108:GLY:C         13           (1,375)         1:A:88:THR:N         1:A:88:THR:CA         1:A:88:THR:C         1:A:89:GLU:N         12           (1,176)         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:N         1:A:188:THR:C         1:A:89:GLU:N         12           (1,140)         1:A:88:THR:N         1:A:88:THR:CA         1:A:88:THR:C         1:A:98:HIS:C         17           (1,394)         1:A:97:SER:C         1:A:98:HIS:N         1:A:98:HIS:CA         1:A:98:HIS:C         17           (1,450)         1:A:53:THR:N         1:A:53:THR:CA         1:A:53:THR:C         1:A:54:SER:N         1           (1,470)         1:A:41:PHE:N         1:A:141:PHE:CA         1:A:141:PHE:C         1:A:142:ASN:N         11           (1,347)         1:A:72:GLU:N         1:A:72:GLU:CA         1:A:72:GLU:C         1:A:73:GUU:N         5           (1,317)         1:A:72:GU:N         1:A:72:GLU:CA         1:A:72:GLU:C         1:A:73:GUU:N         5           (1,317)         1:A:96:ASP:N         1:A:96:ASP:CA         1:A:96:ASP:C         1:A:96:ASP:C         1:A:96:ASP:C           (1,391)         1:A:96:ASP:N         1:A:96:ASP:CA         1:A:96:ASP:C         1:A:96:ASP:C         1:A:97:SER:N	3.55
(1,375)	3.55
(1,176) 1:A:107:PRO:C 1:A:108:GLY:N 1:A:108:GLY:CA 1:A:108:GLY:C 13 (1,140) 1:A:88:THR:N 1:A:88:THR:CA 1:A:88:THR:C 1:A:89:GLU:N 12 (1,394) 1:A:97:SER:C 1:A:98:HIS:N 1:A:98:HIS:CA 1:A:98:HIS:C 17 (1,159) 1:A:97:SER:C 1:A:98:HIS:N 1:A:98:HIS:CA 1:A:98:HIS:C 17 (1,159) 1:A:97:SER:C 1:A:98:HIS:N 1:A:98:HIS:CA 1:A:98:HIS:C 17 (1,470) 1:A:141:PHE:N 1:A:53:THR:CA 1:A:53:THR:C 1:A:54:SER:N 1 (1,470) 1:A:141:PHE:N 1:A:141:PHE:CA 1:A:141:PHE:C 1:A:142:ASN:N 11 (1,347) 1:A:53:THR:N 1:A:53:THR:CA 1:A:53:THR:C 1:A:54:SER:N 1 (1,317) 1:A:72:GLU:N 1:A:72:GLU:CA 1:A:72:GLU:C 1:A:73:GLU:N 5 (1,311) 1:A:72:GLU:N 1:A:72:GLU:CA 1:A:72:GLU:C 1:A:73:GLU:N 5 (1,319) 1:A:96:ASP:N 1:A:96:ASP:CA 1:A:96:ASP:C 1:A:97:SER:N 4 (1,156) 1:A:96:ASP:N 1:A:96:ASP:CA 1:A:96:ASP:C 1:A:97:SER:N 4 (1,156) 1:A:96:ASP:N 1:A:96:ASP:CA 1:A:96:ASP:C 1:A:97:SER:N 4 (1,375) 1:A:88:THR:N 1:A:88:THR:CA 1:A:88:THR:C 1:A:89:GLU:N 5 (1,392) 1:A:96:ASP:C 1:A:97:SER:N 1:A:96:ASP:C 1:A:97:SER:N 5 (1,391) 1:A:96:ASP:C 1:A:97:SER:N 1:A:96:ASP:C 1:A:97:SER:CA 1:A:97:SER:C 8 (1,157) 1:A:96:ASP:C 1:A:97:SER:N 1:A:96:ASP:C 1:A:97:SER:C 8 (1,157) 1:A:96:ASP:C 1:A:97:SER:N 1:A:96:ASP:C 1:A:97:SER:C 8 (1,157) 1:A:96:ASP:N 1:A:96:ASP:CA 1:A:96:ASP:C 1:A:97:SER:C 8 (1,157) 1:A:96:ASP:N 1:A:96:ASP:CA 1:A:96:ASP:C 1:A:97:SER:N 5 (1,166) 1:A:96:ASP:N 1:A:96:ASP:CA 1:A:96:ASP:C 1:A:97:SER:C 8 (1,157) 1:A:96:ASP:N 1:A:96:ASP:CA 1:A:96:ASP:C 1:A:97:SER:C 8 (1,157) 1:A:96:ASP:N 1:A:96:ASP:CA 1:A:96:ASP:C 1:A:97:SER:C 8 (1,156) 1:A:96:ASP:N 1:A:96:ASP:CA 1:A:96:ASP:C 1:A:97:SER:C 8 (1,156) 1:A:96:ASP:N 1:A:96:ASP:CA 1:A:96:ASP:C 1:A:97:SER:C 8 (1,156) 1:A:96:ASP:N 1:A:96:ASP:C 1:A:96:ASP:C 1:A:96:ASP:C 1:A:96:ASP:C 1:A:96:ASP:C 1:A:96:ASP:C 1:A:96:ASP:	3.54
(1,140)         1:A:88:THR:N         1:A:88:THR:CA         1:A:88:THR:C         1:A:98:HIS:C         1:A:98:HIS:C         1:A:98:HIS:C         17           (1,394)         1:A:97:SER:C         1:A:98:HIS:N         1:A:98:HIS:CA         1:A:98:HIS:C         17           (1,459)         1:A:97:SER:C         1:A:98:HIS:N         1:A:98:HIS:CA         1:A:98:HIS:C         17           (1,470)         1:A:41:PHE:N         1:A:53:THR:CA         1:A:53:THR:C         1:A:54:SER:N         1           (1,347)         1:A:72:GLU:N         1:A:72:GLU:CA         1:A:72:GLU:C         1:A:73:GLU:N         5           (1,317)         1:A:53:THR:N         1:A:53:THR:CA         1:A:53:THR:C         1:A:54:SER:N         1           (1,235)         1:A:141:PHE:N         1:A:141:PHE:CA         1:A:141:PHE:C         1:A:442:ASN:N         1           (1,235)         1:A:141:PHE:N         1:A:141:PHE:CA         1:A:472:GLU:C         1:A:73:GLU:N         5           (1,317)         1:A:96:ASP:N         1:A:96:ASP:CA         1:A:96:ASP:C         1:A:97:SER:N         1           (1,317)         1:A:96:ASP:N         1:A:96:ASP:CA         1:A:96:ASP:C         1:A:97:SER:N         4           (1,316)         1:A:96:ASP:N         1:A:96:ASP:CA         1:A:96:ASP:C         <	3.54
1.394	3.54
(1,159)         1:A:97:SER:C         1:A:98:HIS:N         1:A:98:HIS:CA         1:A:98:HIS:C         17           (1,82)         1:A:53:THR:N         1:A:53:THR:CA         1:A:53:THR:C         1:A:54:SER:N         1           (1,470)         1:A:141:PHE:N         1:A:141:PHE:CA         1:A:141:PHE:C         1:A:142:ASN:N         11           (1,347)         1:A:72:GLU:N         1:A:72:GLU:CA         1:A:72:GLU:C         1:A:73:GLU:N         5           (1,317)         1:A:53:THR:N         1:A:53:THR:CA         1:A:53:THR:C         1:A:45:SER:N         1           (1,235)         1:A:141:PHE:N         1:A:141:PHE:CA         1:A:41:PHE:C         1:A:42:ASN:N         11           (1,121)         1:A:72:GLU:N         1:A:26:GLU:CA         1:A:72:GLU:C         1:A:141:PHE:C         1:A:142:ASN:N         11           (1,123)         1:A:411:PHE:N         1:A:26:ASP:CA         1:A:496:ASP:C         1:A:297:SER:N         4           (1,130)         1:A:96:ASP:N         1:A:28:THR:CA         1:A:88:THR:C         1:A:38:GLU:N         5           (1,392)	3.54
(1,82)         1:A:53:THR:N         1:A:53:THR:CA         1:A:53:THR:C         1:A:54:SER:N         1           (1,470)         1:A:141:PHE:N         1:A:141:PHE:CA         1:A:141:PHE:C         1:A:142:ASN:N         11           (1,347)         1:A:72:GLU:N         1:A:72:GLU:CA         1:A:72:GLU:C         1:A:73:GLU:N         5           (1,317)         1:A:53:THR:N         1:A:53:THR:CA         1:A:53:THR:C         1:A:54:SER:N         1           (1,235)         1:A:141:PHE:N         1:A:141:PHE:CA         1:A:141:PHE:C         1:A:142:ASN:N         11           (1,121)         1:A:72:GLU:N         1:A:72:GLU:CA         1:A:72:GLU:C         1:A:73:GLU:N         5           (1,391)         1:A:96:ASP:N         1:A:96:ASP:CA         1:A:96:ASP:C         1:A:97:SER:N         4           (1,156)         1:A:96:ASP:N         1:A:96:ASP:CA         1:A:96:ASP:C         1:A:97:SER:N         4           (1,375)         1:A:88:THR:N         1:A:88:THR:CA         1:A:88:THR:C         1:A:89:GLU:N         5           (1,340)         1:A:96:ASP:C         1:A:97:SER:N         1:A:97:SER:CA         1:A:97:SER:C         8           (1,157)         1:A:96:ASP:N         1:A:96:ASP:CA         1:A:99:ASP:C         1:A:97:SER:N         5	3.51
(1,470)         1:A:141:PHE:N         1:A:141:PHE:CA         1:A:141:PHE:C         1:A:142:ASN:N         11           (1,347)         1:A:72:GLU:N         1:A:72:GLU:CA         1:A:72:GLU:C         1:A:73:GLU:N         5           (1,317)         1:A:53:THR:N         1:A:53:THR:CA         1:A:53:THR:C         1:A:54:SER:N         1           (1,235)         1:A:141:PHE:N         1:A:141:PHE:CA         1:A:412:PHE:C         1:A:412:ASN:N         11           (1,112)         1:A:72:GLU:N         1:A:72:GLU:CA         1:A:72:GLU:C         1:A:73:GLU:N         5           (1,391)         1:A:96:ASP:N         1:A:96:ASP:CA         1:A:96:ASP:C         1:A:97:SER:N         4           (1,156)         1:A:96:ASP:N         1:A:96:ASP:CA         1:A:96:ASP:C         1:A:97:SER:N         4           (1,375)         1:A:88:THR:N         1:A:88:THR:CA         1:A:88:THR:C         1:A:88:GLU:N         5           (1,400)         1:A:88:THR:N         1:A:88:THR:CA         1:A:97:SER:CA         1:A:97:SER:C         8           (1,391)         1:A:96:ASP:C         1:A:97:SER:N         1:A:97:SER:C         8           (1,391)         1:A:96:ASP:N         1:A:96:ASP:C         1:A:97:SER:N         5           (1,468)         1:A:140:LEU:N	3.51
(1,347)         1:A:72:GLU:N         1:A:72:GLU:CA         1:A:72:GLU:C         1:A:73:GLU:N         5           (1,317)         1:A:53:THR:N         1:A:53:THR:CA         1:A:53:THR:C         1:A:54:SER:N         1           (1,235)         1:A:141:PHE:N         1:A:141:PHE:CA         1:A:141:PHE:C         1:A:142:ASN:N         11           (1,112)         1:A:72:GLU:N         1:A:72:GLU:CA         1:A:72:GLU:C         1:A:73:GLU:N         5           (1,391)         1:A:96:ASP:N         1:A:96:ASP:CA         1:A:96:ASP:C         1:A:97:SER:N         4           (1,156)         1:A:96:ASP:N         1:A:96:ASP:CA         1:A:96:ASP:C         1:A:97:SER:N         4           (1,375)         1:A:88:THR:N         1:A:88:THR:CA         1:A:88:THR:C         1:A:89:GLU:N         5           (1,400)         1:A:88:THR:N         1:A:97:SER:N         1:A:97:SER:CA         1:A:97:SER:CA         8           (1,392)         1:A:96:ASP:C         1:A:97:SER:N         1:A:97:SER:CA         1:A:97:SER:CA         8           (1,391)         1:A:96:ASP:C         1:A:96:ASP:CA         1:A:96:ASP:C         1:A:97:SER:N         5           (1,366)         1:A:96:ASP:N         1:A:96:ASP:CA         1:A:96:ASP:C         1:A:149:DE:N         5	3.5
(1,317)         1:A:53:THR:N         1:A:53:THR:CA         1:A:53:THR:C         1:A:54:SER:N         1           (1,235)         1:A:141:PHE:N         1:A:141:PHE:CA         1:A:141:PHE:C         1:A:142:ASN:N         11           (1,112)         1:A:72:GLU:N         1:A:72:GLU:CA         1:A:72:GLU:C         1:A:73:GLU:N         5           (1,391)         1:A:96:ASP:N         1:A:96:ASP:CA         1:A:96:ASP:C         1:A:97:SER:N         4           (1,156)         1:A:96:ASP:N         1:A:96:ASP:CA         1:A:96:ASP:C         1:A:97:SER:N         4           (1,375)         1:A:88:THR:N         1:A:88:THR:CA         1:A:88:THR:C         1:A:89:GLU:N         5           (1,140)         1:A:88:THR:N         1:A:88:THR:CA         1:A:88:THR:C         1:A:89:GLU:N         5           (1,392)         1:A:96:ASP:C         1:A:97:SER:N         1:A:97:SER:CA         1:A:97:SER:C         8           (1,391)         1:A:96:ASP:C         1:A:97:SER:N         1:A:97:SER:CA         1:A:97:SER:C         8           (1,391)         1:A:96:ASP:N         1:A:96:ASP:CA         1:A:96:ASP:C         1:A:97:SER:N         5           (1,468)         1:A:140:LEU:N         1:A:140:LEU:CA         1:A:140:LEU:CA         1:A:140:LEU:CA         1:A:141:PHE:N	3.5
(1,235)         1:A:141:PHE:N         1:A:141:PHE:CA         1:A:141:PHE:C         1:A:142:ASN:N         11           (1,112)         1:A:72:GLU:N         1:A:72:GLU:CA         1:A:72:GLU:C         1:A:73:GLU:N         5           (1,391)         1:A:96:ASP:N         1:A:96:ASP:CA         1:A:96:ASP:C         1:A:97:SER:N         4           (1,156)         1:A:96:ASP:N         1:A:96:ASP:CA         1:A:96:ASP:C         1:A:97:SER:N         4           (1,375)         1:A:88:THR:N         1:A:88:THR:CA         1:A:88:THR:C         1:A:89:GLU:N         5           (1,140)         1:A:88:THR:N         1:A:97:SER:N         1:A:97:SER:CA         1:A:97:SER:C         8           (1,392)         1:A:96:ASP:C         1:A:97:SER:N         1:A:97:SER:CA         1:A:97:SER:C         8           (1,157)         1:A:96:ASP:C         1:A:96:ASP:CA         1:A:96:ASP:C         1:A:97:SER:N         5           (1,391)         1:A:96:ASP:N         1:A:96:ASP:CA         1:A:96:ASP:C         1:A:97:SER:N         5           (1,468)         1:A:140:LEU:N         1:A:140:LEU:CA         1:A:140:LEU:C         1:A:141:PHE:N         15           (1,330)         1:A:140:LEU:N         1:A:140:LEU:CA         1:A:140:LEU:C         1:A:141:PHE:N         15      <	3.5
(1,112)         1:A:72:GLU:N         1:A:72:GLU:CA         1:A:72:GLU:C         1:A:73:GLU:N         5           (1,391)         1:A:96:ASP:N         1:A:96:ASP:CA         1:A:96:ASP:C         1:A:97:SER:N         4           (1,156)         1:A:96:ASP:N         1:A:96:ASP:CA         1:A:96:ASP:C         1:A:97:SER:N         4           (1,375)         1:A:88:THR:N         1:A:88:THR:CA         1:A:88:THR:C         1:A:89:GLU:N         5           (1,140)         1:A:88:THR:N         1:A:97:SER:N         1:A:97:SER:CA         1:A:97:SER:C         8           (1,392)         1:A:96:ASP:C         1:A:97:SER:N         1:A:97:SER:CA         1:A:97:SER:C         8           (1,157)         1:A:96:ASP:C         1:A:97:SER:N         1:A:96:ASP:CA         1:A:97:SER:N         5           (1,391)         1:A:96:ASP:N         1:A:96:ASP:CA         1:A:97:SER:N         5           (1,156)         1:A:96:ASP:N         1:A:96:ASP:CA         1:A:97:SER:N         5           (1,468)         1:A:140:LEU:N         1:A:140:LEU:CA         1:A:140:LEU:C         1:A:141:PHE:N         15           (1,386)         1:A:93:ARG:C         1:A:94:THR:N         1:A:94:THR:CA         1:A:141:PHE:N         15           (1,233)         1:A:140:LEU:N	3.5
(1,391)         1:A:96:ASP:N         1:A:96:ASP:CA         1:A:96:ASP:C         1:A:97:SER:N         4           (1,156)         1:A:96:ASP:N         1:A:96:ASP:CA         1:A:96:ASP:C         1:A:97:SER:N         4           (1,375)         1:A:88:THR:N         1:A:88:THR:CA         1:A:88:THR:C         1:A:89:GLU:N         5           (1,140)         1:A:88:THR:N         1:A:88:THR:CA         1:A:89:GLU:N         5           (1,140)         1:A:96:ASP:C         1:A:97:SER:N         1:A:97:SER:CA         1:A:89:GLU:N         5           (1,392)         1:A:96:ASP:C         1:A:97:SER:N         1:A:97:SER:CA         1:A:97:SER:C         8           (1,157)         1:A:96:ASP:C         1:A:97:SER:N         1:A:97:SER:CA         8         1:A:97:SER:N         5           (1,391)         1:A:96:ASP:N         1:A:96:ASP:CA         1:A:96:ASP:C         1:A:97:SER:N         5           (1,156)         1:A:96:ASP:N         1:A:96:ASP:CA         1:A:96:ASP:C         1:A:97:SER:N         5           (1,468)         1:A:140:LEU:N         1:A:140:LEU:CA         1:A:140:LEU:C         1:A:141:PHE:N         15           (1,386)         1:A:93:ARG:C         1:A:94:THR:N         1:A:94:THR:CA         1:A:141:PHE:N         15           (1,	3.5
(1,156)         1:A:96:ASP:N         1:A:96:ASP:CA         1:A:96:ASP:C         1:A:97:SER:N         4           (1,375)         1:A:88:THR:N         1:A:88:THR:CA         1:A:88:THR:C         1:A:89:GLU:N         5           (1,140)         1:A:88:THR:N         1:A:88:THR:CA         1:A:88:THR:C         1:A:89:GLU:N         5           (1,392)         1:A:96:ASP:C         1:A:97:SER:N         1:A:97:SER:CA         1:A:97:SER:C         8           (1,157)         1:A:96:ASP:C         1:A:97:SER:N         1:A:97:SER:CA         1:A:97:SER:C         8           (1,157)         1:A:96:ASP:C         1:A:96:ASP:CA         1:A:97:SER:C         8           (1,391)         1:A:96:ASP:N         1:A:96:ASP:CA         1:A:97:SER:N         5           (1,156)         1:A:96:ASP:N         1:A:96:ASP:CA         1:A:97:SER:N         5           (1,468)         1:A:140:LEU:N         1:A:140:LEU:CA         1:A:140:LEU:C         1:A:141:PHE:N         15           (1,386)         1:A:93:ARG:C         1:A:94:THR:N         1:A:94:THR:CA         1:A:141:PHE:N         15           (1,233)         1:A:140:LEU:N         1:A:140:LEU:CA         1:A:140:LEU:C         1:A:141:PHE:N         15           (1,151)         1:A:93:ARG:C         1:A:94:THR:N	3.5
(1,375)         1:A:88:THR:N         1:A:88:THR:CA         1:A:88:THR:C         1:A:89:GLU:N         5           (1,140)         1:A:88:THR:N         1:A:88:THR:CA         1:A:88:THR:C         1:A:89:GLU:N         5           (1,392)         1:A:96:ASP:C         1:A:97:SER:N         1:A:97:SER:CA         1:A:97:SER:C         8           (1,157)         1:A:96:ASP:C         1:A:97:SER:N         1:A:97:SER:CA         1:A:97:SER:C         8           (1,391)         1:A:96:ASP:N         1:A:96:ASP:CA         1:A:96:ASP:C         1:A:97:SER:N         5           (1,156)         1:A:96:ASP:N         1:A:96:ASP:CA         1:A:96:ASP:C         1:A:97:SER:N         5           (1,468)         1:A:140:LEU:N         1:A:140:LEU:CA         1:A:140:LEU:C         1:A:141:PHE:N         15           (1,386)         1:A:93:ARG:C         1:A:94:THR:N         1:A:94:THR:CA         1:A:141:PHE:N         15           (1,233)         1:A:140:LEU:N         1:A:140:LEU:CA         1:A:140:LEU:C         1:A:141:PHE:N         15           (1,151)         1:A:93:ARG:C         1:A:94:THR:N         1:A:94:THR:CA         1:A:194:THR:C         5           (1,410)         1:A:107:PRO:N         1:A:107:PRO:CA         1:A:108:GLY:N         15           (1,75)	3.48
(1,140)         1:A:88:THR:N         1:A:88:THR:CA         1:A:88:THR:C         1:A:89:GLU:N         5           (1,392)         1:A:96:ASP:C         1:A:97:SER:N         1:A:97:SER:CA         1:A:97:SER:C         8           (1,157)         1:A:96:ASP:C         1:A:97:SER:N         1:A:97:SER:CA         1:A:97:SER:C         8           (1,391)         1:A:96:ASP:N         1:A:96:ASP:CA         1:A:96:ASP:C         1:A:97:SER:N         5           (1,156)         1:A:96:ASP:N         1:A:96:ASP:CA         1:A:96:ASP:C         1:A:97:SER:N         5           (1,468)         1:A:140:LEU:N         1:A:140:LEU:CA         1:A:140:LEU:C         1:A:141:PHE:N         15           (1,386)         1:A:93:ARG:C         1:A:94:THR:N         1:A:94:THR:CA         1:A:94:THR:C         5           (1,233)         1:A:140:LEU:N         1:A:140:LEU:CA         1:A:140:LEU:C         1:A:141:PHE:N         15           (1,151)         1:A:93:ARG:C         1:A:94:THR:N         1:A:94:THR:CA         1:A:94:THR:C         5           (1,410)         1:A:107:PRO:N         1:A:107:PRO:CA         1:A:108:GLY:N         15           (1,375)         1:A:107:PRO:N         1:A:107:PRO:CA         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:N         15           (1,372) <td>3.48</td>	3.48
(1,392)         1:A:96:ASP:C         1:A:97:SER:N         1:A:97:SER:CA         1:A:97:SER:C         8           (1,157)         1:A:96:ASP:C         1:A:97:SER:N         1:A:97:SER:CA         1:A:97:SER:C         8           (1,391)         1:A:96:ASP:N         1:A:96:ASP:CA         1:A:96:ASP:C         1:A:97:SER:N         5           (1,156)         1:A:96:ASP:N         1:A:96:ASP:CA         1:A:96:ASP:C         1:A:97:SER:N         5           (1,468)         1:A:140:LEU:N         1:A:140:LEU:CA         1:A:140:LEU:C         1:A:141:PHE:N         15           (1,386)         1:A:93:ARG:C         1:A:94:THR:N         1:A:94:THR:CA         1:A:94:THR:C         5           (1,233)         1:A:140:LEU:N         1:A:140:LEU:CA         1:A:140:LEU:C         1:A:141:PHE:N         15           (1,151)         1:A:93:ARG:C         1:A:94:THR:N         1:A:94:THR:CA         1:A:94:THR:C         5           (1,410)         1:A:107:PRO:N         1:A:107:PRO:CA         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:N         15           (1,87)         1:A:56:ASP:C         1:A:57:LYS:N         1:A:57:LYS:CA         1:A:57:LYS:C         17           (1,322)         1:A:56:ASP:C         1:A:110:ASN:N         1:A:110:ASN:CA         1:A:110:ASN:C         13	3.47
(1,157)         1:A:96:ASP:C         1:A:97:SER:N         1:A:97:SER:CA         1:A:97:SER:C         8           (1,391)         1:A:96:ASP:N         1:A:96:ASP:CA         1:A:96:ASP:C         1:A:97:SER:N         5           (1,156)         1:A:96:ASP:N         1:A:96:ASP:CA         1:A:96:ASP:C         1:A:97:SER:N         5           (1,468)         1:A:140:LEU:N         1:A:140:LEU:CA         1:A:140:LEU:C         1:A:141:PHE:N         15           (1,386)         1:A:93:ARG:C         1:A:94:THR:N         1:A:94:THR:CA         1:A:94:THR:C         5           (1,233)         1:A:140:LEU:N         1:A:140:LEU:CA         1:A:140:LEU:C         1:A:141:PHE:N         15           (1,151)         1:A:93:ARG:C         1:A:94:THR:N         1:A:94:THR:CA         1:A:94:THR:C         5           (1,410)         1:A:107:PRO:N         1:A:107:PRO:CA         1:A:108:GLY:N         15           (1,175)         1:A:107:PRO:N         1:A:107:PRO:CA         1:A:108:GLY:N         15           (1,87)         1:A:56:ASP:C         1:A:57:LYS:N         1:A:57:LYS:CA         1:A:57:LYS:C         17           (1,322)         1:A:56:ASP:C         1:A:110:ASN:N         1:A:110:ASN:CA         1:A:110:ASN:C         13           (1,179)         1:A:109:PRO:	3.47
(1,391)         1:A:96:ASP:N         1:A:96:ASP:CA         1:A:96:ASP:C         1:A:97:SER:N         5           (1,156)         1:A:96:ASP:N         1:A:96:ASP:CA         1:A:96:ASP:C         1:A:97:SER:N         5           (1,468)         1:A:140:LEU:N         1:A:140:LEU:CA         1:A:140:LEU:C         1:A:141:PHE:N         15           (1,386)         1:A:93:ARG:C         1:A:94:THR:N         1:A:94:THR:CA         1:A:94:THR:C         5           (1,233)         1:A:140:LEU:N         1:A:140:LEU:CA         1:A:140:LEU:C         1:A:141:PHE:N         15           (1,151)         1:A:93:ARG:C         1:A:94:THR:N         1:A:94:THR:CA         1:A:94:THR:C         5           (1,410)         1:A:107:PRO:N         1:A:107:PRO:CA         1:A:94:THR:CA         1:A:94:THR:C         5           (1,410)         1:A:107:PRO:N         1:A:107:PRO:CA         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:N         15           (1,87)         1:A:56:ASP:C         1:A:57:LYS:N         1:A:57:LYS:CA         1:A:57:LYS:C         17           (1,322)         1:A:56:ASP:C         1:A:10:ASN:N         1:A:10:ASN:CA         1:A:110:ASN:C         13           (1,179)         1:A:109:PRO:C         1:A:110:ASN:N         1:A:110:ASN:CA         1:A:110:ASN:C         13     <	3.45
(1,156)         1:A:96:ASP:N         1:A:96:ASP:CA         1:A:96:ASP:C         1:A:97:SER:N         5           (1,468)         1:A:140:LEU:N         1:A:140:LEU:CA         1:A:140:LEU:C         1:A:141:PHE:N         15           (1,386)         1:A:93:ARG:C         1:A:94:THR:N         1:A:94:THR:CA         1:A:94:THR:C         5           (1,233)         1:A:140:LEU:N         1:A:140:LEU:CA         1:A:140:LEU:C         1:A:141:PHE:N         15           (1,151)         1:A:93:ARG:C         1:A:94:THR:N         1:A:94:THR:CA         1:A:94:THR:C         5           (1,410)         1:A:107:PRO:N         1:A:107:PRO:CA         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:N         15           (1,175)         1:A:107:PRO:N         1:A:107:PRO:CA         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:N         15           (1,87)         1:A:56:ASP:C         1:A:57:LYS:N         1:A:57:LYS:CA         1:A:57:LYS:C         17           (1,322)         1:A:56:ASP:C         1:A:10:ASN:N         1:A:110:ASN:CA         1:A:110:ASN:C         13           (1,179)         1:A:109:PRO:C         1:A:110:ASN:N         1:A:110:ASN:CA         1:A:110:ASN:C         13	3.45
(1,468)         1:A:140:LEU:N         1:A:140:LEU:CA         1:A:140:LEU:C         1:A:141:PHE:N         15           (1,386)         1:A:93:ARG:C         1:A:94:THR:N         1:A:94:THR:CA         1:A:94:THR:C         5           (1,233)         1:A:140:LEU:N         1:A:140:LEU:CA         1:A:140:LEU:C         1:A:141:PHE:N         15           (1,151)         1:A:93:ARG:C         1:A:94:THR:N         1:A:94:THR:CA         1:A:94:THR:C         5           (1,410)         1:A:107:PRO:N         1:A:107:PRO:CA         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:N         15           (1,175)         1:A:107:PRO:N         1:A:107:PRO:CA         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:N         15           (1,87)         1:A:56:ASP:C         1:A:57:LYS:N         1:A:57:LYS:CA         1:A:57:LYS:C         17           (1,322)         1:A:56:ASP:C         1:A:57:LYS:N         1:A:57:LYS:CA         1:A:57:LYS:C         17           (1,414)         1:A:109:PRO:C         1:A:110:ASN:N         1:A:110:ASN:CA         1:A:110:ASN:C         13           (1,179)         1:A:109:PRO:C         1:A:110:ASN:N         1:A:110:ASN:CA         1:A:110:ASN:C         13	3.43
(1,386)         1:A:93:ARG:C         1:A:94:THR:N         1:A:94:THR:CA         1:A:94:THR:C         5           (1,233)         1:A:140:LEU:N         1:A:140:LEU:CA         1:A:140:LEU:C         1:A:141:PHE:N         15           (1,151)         1:A:93:ARG:C         1:A:94:THR:N         1:A:94:THR:CA         1:A:94:THR:C         5           (1,410)         1:A:107:PRO:N         1:A:107:PRO:CA         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:N         15           (1,175)         1:A:107:PRO:N         1:A:107:PRO:CA         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:N         15           (1,87)         1:A:56:ASP:C         1:A:57:LYS:N         1:A:57:LYS:CA         1:A:57:LYS:C         17           (1,322)         1:A:56:ASP:C         1:A:57:LYS:N         1:A:57:LYS:CA         1:A:57:LYS:C         17           (1,414)         1:A:109:PRO:C         1:A:110:ASN:N         1:A:110:ASN:CA         1:A:110:ASN:C         13           (1,179)         1:A:109:PRO:C         1:A:110:ASN:N         1:A:110:ASN:CA         1:A:110:ASN:C         13	3.43
(1,233)         1:A:140:LEU:N         1:A:140:LEU:CA         1:A:140:LEU:C         1:A:141:PHE:N         15           (1,151)         1:A:93:ARG:C         1:A:94:THR:N         1:A:94:THR:CA         1:A:94:THR:C         5           (1,410)         1:A:107:PRO:N         1:A:107:PRO:CA         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:N         15           (1,175)         1:A:107:PRO:N         1:A:107:PRO:CA         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:N         15           (1,87)         1:A:56:ASP:C         1:A:57:LYS:N         1:A:57:LYS:CA         1:A:57:LYS:C         17           (1,322)         1:A:56:ASP:C         1:A:57:LYS:N         1:A:57:LYS:CA         1:A:57:LYS:C         17           (1,414)         1:A:109:PRO:C         1:A:110:ASN:N         1:A:110:ASN:CA         1:A:110:ASN:C         13           (1,179)         1:A:109:PRO:C         1:A:110:ASN:N         1:A:110:ASN:CA         1:A:110:ASN:C         13	3.42
(1,151)         1:A:93:ARG:C         1:A:94:THR:N         1:A:94:THR:CA         1:A:94:THR:C         5           (1,410)         1:A:107:PRO:N         1:A:107:PRO:CA         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:N         15           (1,175)         1:A:107:PRO:N         1:A:107:PRO:CA         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:N         15           (1,87)         1:A:56:ASP:C         1:A:57:LYS:N         1:A:57:LYS:CA         1:A:57:LYS:C         17           (1,322)         1:A:56:ASP:C         1:A:57:LYS:N         1:A:57:LYS:CA         1:A:57:LYS:C         17           (1,414)         1:A:109:PRO:C         1:A:110:ASN:N         1:A:110:ASN:CA         1:A:110:ASN:C         13           (1,179)         1:A:109:PRO:C         1:A:110:ASN:N         1:A:110:ASN:CA         1:A:110:ASN:C         13	3.42
(1,410)         1:A:107:PRO:N         1:A:107:PRO:CA         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:N         15           (1,175)         1:A:107:PRO:N         1:A:107:PRO:CA         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:N         15           (1,87)         1:A:56:ASP:C         1:A:57:LYS:N         1:A:57:LYS:CA         1:A:57:LYS:C         17           (1,322)         1:A:56:ASP:C         1:A:57:LYS:N         1:A:57:LYS:CA         1:A:57:LYS:C         17           (1,414)         1:A:109:PRO:C         1:A:110:ASN:N         1:A:110:ASN:CA         1:A:110:ASN:C         13           (1,179)         1:A:109:PRO:C         1:A:110:ASN:N         1:A:110:ASN:CA         1:A:110:ASN:C         13	3.42
(1,175)         1:A:107:PRO:N         1:A:107:PRO:CA         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:N         15           (1,87)         1:A:56:ASP:C         1:A:57:LYS:N         1:A:57:LYS:CA         1:A:57:LYS:C         17           (1,322)         1:A:56:ASP:C         1:A:57:LYS:N         1:A:57:LYS:CA         1:A:57:LYS:C         17           (1,414)         1:A:109:PRO:C         1:A:110:ASN:N         1:A:110:ASN:CA         1:A:110:ASN:C         13           (1,179)         1:A:109:PRO:C         1:A:110:ASN:N         1:A:110:ASN:CA         1:A:110:ASN:C         13	3.42
(1,87)       1:A:56:ASP:C       1:A:57:LYS:N       1:A:57:LYS:CA       1:A:57:LYS:C       17         (1,322)       1:A:56:ASP:C       1:A:57:LYS:N       1:A:57:LYS:CA       1:A:57:LYS:C       17         (1,414)       1:A:109:PRO:C       1:A:110:ASN:N       1:A:110:ASN:CA       1:A:110:ASN:C       13         (1,179)       1:A:109:PRO:C       1:A:110:ASN:N       1:A:110:ASN:CA       1:A:110:ASN:C       13	3.41
(1,322)       1:A:56:ASP:C       1:A:57:LYS:N       1:A:57:LYS:CA       1:A:57:LYS:C       17         (1,414)       1:A:109:PRO:C       1:A:110:ASN:N       1:A:110:ASN:CA       1:A:110:ASN:C       13         (1,179)       1:A:109:PRO:C       1:A:110:ASN:N       1:A:110:ASN:CA       1:A:110:ASN:C       13	3.41
(1,414)       1:A:109:PRO:C       1:A:110:ASN:N       1:A:110:ASN:CA       1:A:110:ASN:C       13         (1,179)       1:A:109:PRO:C       1:A:110:ASN:N       1:A:110:ASN:CA       1:A:110:ASN:C       13	3.4
(1,179) 1:A:109:PRO:C 1:A:110:ASN:N 1:A:110:ASN:CA 1:A:110:ASN:C 13	3.4
	3.39
(1.400) 1.A.140.I ELLM 1.A.140.I ELLOA 1.A.140.I ELLO 1.A.141.ELLO 1.ELLO	3.39
(1,468)   1:A:140:LEU:N   1:A:140:LEU:CA   1:A:140:LEU:C   1:A:141:PHE:N   18	3.38
(1,340) 1:A:67:PHE:N 1:A:67:PHE:CA 1:A:67:PHE:C 1:A:68:THR:N 8	3.38
(1,233) 1:A:140:LEU:N 1:A:140:LEU:CA 1:A:140:LEU:C 1:A:141:PHE:N 18	3.38
(1,105) 1:A:67:PHE:N 1:A:67:PHE:CA 1:A:67:PHE:C 1:A:68:THR:N 8	3.38
(1,349) 1:A:73:GLU:N 1:A:73:GLU:CA 1:A:73:GLU:C 1:A:74:GLU:N 20	3.37
(1,114) 1:A:73:GLU:N 1:A:73:GLU:CA 1:A:73:GLU:C 1:A:74:GLU:N 20	3.37
(1,392) 1:A:96:ASP:C 1:A:97:SER:N 1:A:97:SER:CA 1:A:97:SER:C 1	3.36
(1,157) 1:A:96:ASP:C 1:A:97:SER:N 1:A:97:SER:CA 1:A:97:SER:C 1	3.36
(1,416) 1:A:111:GLY:C 1:A:112:LEU:N 1:A:112:LEU:CA 1:A:112:LEU:C 8	3.35
(1,388) 1:A:94:THR:C 1:A:95:ALA:N 1:A:95:ALA:CA 1:A:95:ALA:C 9	3.35
(1,387) 1:A:94:THR:N 1:A:94:THR:CA 1:A:94:THR:C 1:A:95:ALA:N 8	3.35
(1,362) 1:A:79:LEU:C 1:A:80:ASP:N 1:A:80:ASP:CA 1:A:80:ASP:C 10	3.35
(1,181) 1:A:111:GLY:C 1:A:112:LEU:N 1:A:112:LEU:CA 1:A:112:LEU:C 8	3.35
(1,153) 1:A:94:THR:C 1:A:95:ALA:N 1:A:95:ALA:C 9	3.35
(1,152) 1:A:94:THR:N 1:A:94:THR:CA 1:A:94:THR:C 1:A:95:ALA:N 8	3.35



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



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



	ed from previous pe					
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation $(\circ)$
(1,277)	1:A:24:GLY:N	1:A:24:GLY:CA	1:A:24:GLY:C	1:A:25:THR:N	1	2.89
(1,128)	1:A:80:ASP:N	1:A:80:ASP:CA	1:A:80:ASP:C	1:A:81:THR:N	9	2.89
(1,101)	1:A:65:PRO:N	1:A:65:PRO:CA	1:A:65:PRO:C	1:A:66:SER:N	20	2.89
(1,367)	1:A:84:GLY:N	1:A:84:GLY:CA	1:A:84:GLY:C	1:A:85:MET:N	20	2.88
(1,132)	1:A:84:GLY:N	1:A:84:GLY:CA	1:A:84:GLY:C	1:A:85:MET:N	20	2.88
(1,464)	1:A:138:LEU:N	1:A:138:LEU:CA	1:A:138:LEU:C	1:A:139:HIS:N	10	2.87
(1,390)	1:A:95:ALA:C	1:A:96:ASP:N	1:A:96:ASP:CA	1:A:96:ASP:C	18	2.87
(1,229)	1:A:138:LEU:N	1:A:138:LEU:CA	1:A:138:LEU:C	1:A:139:HIS:N	10	2.87
(1,155)	1:A:95:ALA:C	1:A:96:ASP:N	1:A:96:ASP:CA	1:A:96:ASP:C	18	2.87
(1,385)	1:A:93:ARG:N	1:A:93:ARG:CA	1:A:93:ARG:C	1:A:94:THR:N	13	2.85
(1,150)	1:A:93:ARG:N	1:A:93:ARG:CA	1:A:93:ARG:C	1:A:94:THR:N	13	2.85
(1,455)	1:A:132:GLU:C	1:A:133:GLY:N	1:A:133:GLY:CA	1:A:133:GLY:C	18	2.84
(1,345)	1:A:70:PRO:N	1:A:70:PRO:CA	1:A:70:PRO:C	1:A:71:ILE:N	9	2.84
(1,220)	1:A:132:GLU:C	1:A:133:GLY:N	1:A:133:GLY:CA	1:A:133:GLY:C	18	2.84
(1,110)	1:A:70:PRO:N	1:A:70:PRO:CA	1:A:70:PRO:C	1:A:71:ILE:N	9	2.84
(1,84)	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	1:A:55:LYS:N	18	2.83
(1,319)	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	1:A:55:LYS:N	18	2.83
(1,338)	1:A:66:SER:N	1:A:66:SER:CA	1:A:66:SER:C	1:A:67:PHE:N	20	2.82
(1,103)	1:A:66:SER:N	1:A:66:SER:CA	1:A:66:SER:C	1:A:67:PHE:N	20	2.82
(1,78)	1:A:50:PRO:N	1:A:50:PRO:CA	1:A:50:PRO:C	1:A:51:LEU:N	16	2.81
(1,458)	1:A:135:GLU:N	1:A:135:GLU:CA	1:A:135:GLU:C	1:A:136:SER:N	12	2.81
(1,313)	1:A:50:PRO:N	1:A:50:PRO:CA	1:A:50:PRO:C	1:A:51:LEU:N	16	2.81
(1,223)	1:A:135:GLU:N	1:A:135:GLU:CA	1:A:135:GLU:C	1:A:136:SER:N	12	2.81
(1,388)	1:A:94:THR:C	1:A:95:ALA:N	1:A:95:ALA:CA	1:A:95:ALA:C	10	2.76
(1,367)	1:A:84:GLY:N	1:A:84:GLY:CA	1:A:84:GLY:C	1:A:85:MET:N	9	2.76
(1,153)	1:A:94:THR:C	1:A:95:ALA:N	1:A:95:ALA:CA	1:A:95:ALA:C	10	2.76
(1,132)	1:A:84:GLY:N	1:A:84:GLY:CA	1:A:84:GLY:C	1:A:85:MET:N	9	2.76
(1,342)	1:A:68:THR:N	1:A:68:THR:CA	1:A:68:THR:C	1:A:69:LYS:N	16	2.75
(1,107)	1:A:68:THR:N	1:A:68:THR:CA	1:A:68:THR:C	1:A:69:LYS:N	16	2.75
(1,464)	1:A:138:LEU:N	1:A:138:LEU:CA	1:A:138:LEU:C	1:A:139:HIS:N	20	2.74
(1,451)	1:A:130:LYS:C	1:A:131:GLU:N	1:A:131:GLU:CA	1:A:131:GLU:C	11	2.74
(1,229)	1:A:138:LEU:N	1:A:138:LEU:CA	1:A:138:LEU:C	1:A:139:HIS:N	20	2.74
(1,216)	1:A:130:LYS:C	1:A:131:GLU:N	1:A:131:GLU:CA	1:A:131:GLU:C	11	2.74
(1,90)	1:A:58:PHE:N	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:C	1:A:59:ASP:N	3	2.73
(1,83)	1:A:53:THR:C	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	13	2.73
(1,83)	1:A:53:THR:C	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	15	2.73
(1,387)	1:A:94:THR:N	1:A:94:THR:CA	1:A:94:THR:C	1:A:95:ALA:N	13	2.73
(1,325)	1:A:58:PHE:N	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:C	1:A:59:ASP:N	3	2.73
(1,318)	1:A:53:THR:C	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	13	2.73
(1,318)	1:A:53:THR:C	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	15	2.73
(1,152)	1:A:94:THR:N	1:A:94:THR:CA	1:A:94:THR:C	1:A:95:ALA:N	13	2.73
(1,345)	1:A:70:PRO:N	1:A:70:PRO:CA	1:A:70:PRO:C	1:A:71:ILE:N	15	2.72
(1,110)	1:A:70:PRO:N	1:A:70:PRO:CA	1:A:70:PRO:C	1:A:71:ILE:N	15	2.72
(1,401)	1:A:101:HIS:N	1:A:101:HIS:CA	1:A:101:HIS:C	1:A:102:VAL:N	5	2.71
(1,166)	1:A:101:HIS:N	1:A:101:HIS:CA	1:A:101:HIS:C	1:A:102:VAL:N	5	2.71
(1,166) $(1,468)$	1:A:140:LEU:N	1:A:140:LEU:CA	1:A:140:LEU:C	1:A:141:PHE:N	13	2.7
(1,408) $(1,416)$	1:A:111:GLY:C	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	12	2.7
(1,410) $(1,233)$	1:A:140:LEU:N	1:A:140:LEU:CA	1:A:140:LEU:C	1:A:141:PHE:N	13	2.7
(1,233) $(1,181)$	1:A:111:GLY:C	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	12	2.7
(1,181) $(1,78)$	1:A:50:PRO:N	1:A:50:PRO:CA	1:A:50:PRO:C	1:A:51:LEU:N	9	2.69
(1,13) $(1,414)$	1:A:109:PRO:C	1:A:110:ASN:N	1:A:110:ASN:CA	1:A:110:ASN:C	10	2.69
(1,414)	1.A.109.F NO:C	1.A.110:A5IV:IV	I.A.IIU.ASIN.UA	1.A.110:A5N:C		2.09



	ed from previous pe	*				
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation $(\circ)$
(1,394)	1:A:97:SER:C	1:A:98:HIS:N	1:A:98:HIS:CA	1:A:98:HIS:C	16	2.69
(1,313)	1:A:50:PRO:N	1:A:50:PRO:CA	1:A:50:PRO:C	1:A:51:LEU:N	9	2.69
(1,179)	1:A:109:PRO:C	1:A:110:ASN:N	1:A:110:ASN:CA	1:A:110:ASN:C	10	2.69
(1,159)	1:A:97:SER:C	1:A:98:HIS:N	1:A:98:HIS:CA	1:A:98:HIS:C	16	2.69
(1,456)	1:A:133:GLY:N	1:A:133:GLY:CA	1:A:133:GLY:C	1:A:134:TYR:N	20	2.66
(1,221)	1:A:133:GLY:N	1:A:133:GLY:CA	1:A:133:GLY:C	1:A:134:TYR:N	20	2.66
(1,388)	1:A:94:THR:C	1:A:95:ALA:N	1:A:95:ALA:CA	1:A:95:ALA:C	2	2.65
(1,153)	1:A:94:THR:C	1:A:95:ALA:N	1:A:95:ALA:CA	1:A:95:ALA:C	2	2.65
(1,385)	1:A:93:ARG:N	1:A:93:ARG:CA	1:A:93:ARG:C	1:A:94:THR:N	9	2.64
(1,150)	1:A:93:ARG:N	1:A:93:ARG:CA	1:A:93:ARG:C	1:A:94:THR:N	9	2.64
(1,435)	1:A:122:ARG:N	1:A:122:ARG:CA	1:A:122:ARG:C	1:A:123:PHE:N	14	2.62
(1,416)	1:A:111:GLY:C	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	10	2.62
(1,200)	1:A:122:ARG:N	1:A:122:ARG:CA	1:A:122:ARG:C	1:A:123:PHE:N	14	2.62
(1,181)	1:A:111:GLY:C	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	10	2.62
(1,416)	1:A:111:GLY:C	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	19	2.6
(1,181)	1:A:111:GLY:C	1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CA	1:A:112:LEU:C	19	2.6
(1,470)	1:A:141:PHE:N	1:A:141:PHE:CA	1:A:141:PHE:C	1:A:142:ASN:N	4	2.59
(1,455)	1:A:132:GLU:C	1:A:133:GLY:N	1:A:133:GLY:CA	1:A:133:GLY:C	7	2.59
(1,235)	1:A:141:PHE:N	1:A:141:PHE:CA	1:A:141:PHE:C	1:A:142:ASN:N	4	2.59
(1,220)	1:A:132:GLU:C	1:A:133:GLY:N	1:A:133:GLY:CA	1:A:133:GLY:C	7	2.59
(1,80)	1:A:52:PHE:N	1:A:52:PHE:CA	1:A:52:PHE:C	1:A:53:THR:N	20	2.58
(1,47)	1:A:27:PRO:N	1:A:27:PRO:CA	1:A:27:PRO:C	1:A:28:PRO:N	7	2.58
(1,386)	1:A:93:ARG:C	1:A:94:THR:N	1:A:94:THR:CA	1:A:94:THR:C	1	2.58
(1,34)	1:A:19:VAL:N	1:A:19:VAL:CA	1:A:19:VAL:C	1:A:20:THR:N	5	2.58
(1,315)	1:A:52:PHE:N	1:A:52:PHE:CA	1:A:52:PHE:C	1:A:53:THR:N	20	2.58
(1,282)	1:A:27:PRO:N	1:A:27:PRO:CA	1:A:27:PRO:C	1:A:28:PRO:N	7	2.58
(1,269)	1:A:19:VAL:N	1:A:19:VAL:CA	1:A:19:VAL:C	1:A:20:THR:N	5	2.58
(1,151)	1:A:93:ARG:C	1:A:94:THR:N	1:A:94:THR:CA	1:A:94:THR:C	1	2.58
(1,419)	1:A:113:ARG:N	1:A:113:ARG:CA	1:A:113:ARG:C	1:A:114:TYR:N	2	2.57
(1,184)	1:A:113:ARG:N	1:A:113:ARG:CA	1:A:113:ARG:C	1:A:114:TYR:N	2	2.57
(1,468)	1:A:140:LEU:N	1:A:140:LEU:CA	1:A:140:LEU:C	1:A:141:PHE:N	12	2.56
(1,386)	1:A:93:ARG:C	1:A:94:THR:N	1:A:94:THR:CA	1:A:94:THR:C	4	2.56
(1,233)	1:A:140:LEU:N	1:A:140:LEU:CA	1:A:140:LEU:C	1:A:141:PHE:N	12	2.56
(1,151)	1:A:93:ARG:C	1:A:94:THR:N	1:A:94:THR:CA	1:A:94:THR:C	4	2.56
(1,456)	1:A:133:GLY:N	1:A:133:GLY:CA	1:A:133:GLY:C	1:A:134:TYR:N	13	2.55
(1,385)	1:A:93:ARG:N	1:A:93:ARG:CA	1:A:93:ARG:C	1:A:94:THR:N	17	2.55
(1,221)	1:A:133:GLY:N	1:A:133:GLY:CA	1:A:133:GLY:C	1:A:134:TYR:N	13	2.55
(1,150)	1:A:93:ARG:N	1:A:93:ARG:CA	1:A:93:ARG:C	1:A:94:THR:N	17	2.55
(1,254)	1:A:11:SER:C	1:A:12:LEU:N	1:A:12:LEU:CA	1:A:12:LEU:C	12	2.54
(1,19)	1:A:11:SER:C	1:A:12:LEU:N	1:A:12:LEU:CA	1:A:12:LEU:C	12	2.54
(1,13) $(1,9)$	1:A:6:GLU:C	1:A:7:GLU:N	1:A:7:GLU:CA	1:A:7:GLU:C	12	2.53
(1,429)	1:A:118:SER:N	1:A:118:SER:CA	1:A:118:SER:C	1:A:119:ALA:N	17	2.53
(1,380)	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	1:A:91:ARG:CA	1:A:91:ARG:C	9	2.53
(1,355)	1:A:76:GLU:N	1:A:76:GLU:CA	1:A:76:GLU:C	1:A:77:GLU:N	11	2.53
(1,333) $(1,244)$	1:A:6:GLU:C	1:A:7:GLU:N	1:A:7:GLU:CA	1:A:7:GLU:C	12	2.53
(1,194)	1:A:118:SER:N	1:A:118:SER:CA	1:A:118:SER:C	1:A:119:ALA:N	17	2.53
(1,134) $(1,145)$	1:A:118.5E1c.N	1:A:118.5ER.CA 1:A:91:ARG:N	1:A:91:ARG:CA	1:A:91:ARG:C	9	2.53
(1,149) $(1,120)$	1:A:76:GLU:N	1:A:76:GLU:CA	1:A:76:GLU:C	1:A:77:GLU:N	11	2.53
(1,120) $(1,65)$	1:A:42:TYR:N	1:A:42:TYR:CA	1:A:42:TYR:C	1:A:43:VAL:N	16	2.52
(1,300)	1:A:42:TYR:N	1:A:42:TYR:CA	1:A:42:TYR:C	1:A:43:VAL:N	16	2.52
(1,300) $(1,95)$	1:A:42:11 K:N 1:A:60:SER:C	1:A:42:11 R:CA 1:A:61:GLN:N	1:A:61:GLN:CA	1:A:61:GLN:C	7	2.52
(1,30)	1.A.00.SEII.O	1.A.01.GLIV.IV	1.A.01.GLIV.OA	1.A.01.GLIV.C		2.31



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



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



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



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



New   Atom-1		ed from previous po	*				
1.45    1.43 2-TYRN   1.43 2-TYRCA   1.43 2-TYRC   1.43 3-MALN   2   1.7   (1.419)   1.43 1-3-ARGN   1.43 1-3-ARGCA   1.43 1-3-ARGC   1.43 1-3-TYRN   17   1.7   (1.300)   1.43 2-TYRN   1.43 2-TYRCA   1.43 2-TYRC   1.43 3-VALEN   2   1.7   (1.300)   1.43 2-TYRCA   1.43 2-TYRC   1.43 3-VALEN   2   1.7   (1.301)   1.43 3-TSRCA   1.43 2-TYRCA   1.43 2-TYRCA   1.43 3-VALEN   2   1.7   (1.301)   1.43 3-TSRCA   1.43 3-TSRCC   1							, ,
(1.40)	· · /						
(1,360)   1:A-32:TYRN   1:A-32:TYRCA   1:A-42:TYRC   1:A-43:VAUN   2   1.7	( ' /						
(1,184)	· · /						
(1,401	· · /						
(1,40)   1:A-101-HISN	· · /						
(1,336)   1:A-35-PRO:N	(1,75)		1:A:47:SER:CA	1:A:47:SER:C	1:A:48:GLY:N		1.69
(1,310)	(1,401)	1:A:101:HIS:N	1:A:101:HIS:CA	1:A:101:HIS:C	1:A:102:VAL:N		1.69
(1,166    1:A:101:HIS:N	(1,336)	1:A:65:PRO:N	1:A:65:PRO:CA	1:A:65:PRO:C	1:A:66:SER:N	16	1.69
(1,464)   1:A:463:PRO:N   1:A:652-PRO:CA   1:A:463:PRO:C   1:A:466:SER:N   16   1.69   (1,464)   1:A:138:LEU:N   1:A:138:LEU	(1,310)	1:A:47:SER:N	1:A:47:SER:CA	1:A:47:SER:C	1:A:48:GLY:N	7	1.69
(1,443   1:A:138:LEU:N   1:A:138:LEU:CA   1:A:136:CYS:C   1:A:116:CYS:N   8   1.68     (1,423   1:A:115:CYS:N   1:A:115:CYS:CA   1:A:115:CYS:C   1:A:116:LE:N   8   1.68     (1,395   1:A:98:HIS:N   1:A:98:HIS:CA   1:A:138:LEU:C   1:A:139:HIS:N   9   1.68     (1,292   1:A:138:LEU:N   1:A:138:LEU:CA   1:A:138:LEU:C   1:A:139:HIS:N   9   1.68     (1,188   1:A:115:CYS:N   1:A:138:LEU:CA   1:A:136:LEU:C   1:A:139:HIS:N   9   1.68     (1,188   1:A:115:CYS:N   1:A:115:CYS:CA   1:A:115:CYS:C   1:A:116:LIE:N   8   1.68     (1,160   1:A:98:HIS:N   1:A:98:HIS:CA   1:A:155:CYS:C   1:A:116:LIE:N   8   1.68     (1,191   1:A:58:PHE:C   1:A:59:ASP:N   1:A:59:ASP:CA   1:A:59:ASP:C   13   1.67     (1,89)   1:A:57:LYS:C   1:A:58:PHE:N   1:A:58:PHE:CA   1:A:58:PHE:C   13   1.67     (1,324)   1:A:57:LYS:C   1:A:58:PHE:N   1:A:58:PHE:CA   1:A:136:SER:C   1:A:137:TYR:N   1   1.67     (1,324)   1:A:57:LYS:C   1:A:58:PHE:N   1:A:58:PHE:CA   1:A:136:SER:C   1:A:137:TYR:N   1   1.67     (1,225)   1:A:136:SER:N   1:A:136:SER:CA   1:A:136:SER:C   1:A:137:TYR:N   1   1.67     (1,224)   1:A:14:TYR:N   1:A:14:TYR:CA   1:A:14:TYR:C   1:A:115:CYS:N   18   1.66     (1,382)   1:A:14:TYR:N   1:A:114:TYR:CA   1:A:114:TYR:C   1:A:115:CYS:N   18   1.66     (1,382)   1:A:136:SER:N   1:A:136:SER:N   1:A:136:SER:C   3   1.66     (1,410)   1:A:107:PRO:N   1:A:107:PRO:CA   1:A:107:PRO:C   1:A:108:GLY:N   9   1.65     (1,410)   1:A:107:PRO:N   1:A:107:PRO:CA   1:A:107:PRO:C   1:A:108:GLY:N   9   1.65     (1,175)   1:A:107:PRO:N   1:A:107:PRO:CA   1:A:107:PRO:C   1:A:108:GLY:N   9   1.65     (1,102)   1:A:65:PRO:C   1:A:66:SER:N   1:A:66:SER:CA   1:A:108:GLY:N   9   1.65     (1,102)   1:A:65:PRO:C   1:A:66:SER:N   1:A:66:SER:CA   1:A:108:GLY:N   9   1.65     (1,102)   1:A:107:PRO:C   1:A:108:GLY:N   1:A:108:GLY:N   9   1.65     (1,102)   1:A:107:PRO:C   1:A:108:GLY:N   1:A:108:GLY:N   9   1.65     (1,104)   1:A:107:PRO:C   1:A:108:GLY:N   1:A:108:GLY:N   1   1.64     (1,144)   1:A:107:PRO:C   1:A:108:GLY:N   1:A:108:GLY:N   1   1.64     (1,144)   1:A:107:P	(1,166)	1:A:101:HIS:N	1:A:101:HIS:CA	1:A:101:HIS:C	1:A:102:VAL:N	18	1.69
(1,423)	(1,101)	1:A:65:PRO:N	1:A:65:PRO:CA	1:A:65:PRO:C	1:A:66:SER:N	16	1.69
(1,395)   1:A:98:HIS:N	(1,464)	1:A:138:LEU:N	1:A:138:LEU:CA	1:A:138:LEU:C	1:A:139:HIS:N	9	1.68
(1,229)         1:A:138:LEU:N         1:A:138:LEU:CA         1:A:138:LEU:C         1:A:139:HIS:N         9         1.68           (1,188)         1:A:115:CYS:N         1:A:115:CYS:CA         1:A:116:CYS:C         1:A:116:LEEN         8         1.68           (1,160)         1:A:398:HIS:N         1:A:398:HIS:C         1:A:394:HIS:C         1:A:394:HIS:C         1:A:395:ASP:C         13         1.67           (1,91)         1:A:58:PHE:C         1:A:59:ASP:N         1:A:59:ASP:CA         1:A:59:ASP:C         13         1.67           (1,460)         1:A:136:SER:N         1:A:36:SER:CA         1:A:36:SER:CA         1:A:36:SER:C         1:A:136:SER:CA         1:A:36:SER:CA         1:A:36:SER:CA <td>(1,423)</td> <td>1:A:115:CYS:N</td> <td>1:A:115:CYS:CA</td> <td>1:A:115:CYS:C</td> <td>1:A:116:ILE:N</td> <td>8</td> <td>1.68</td>	(1,423)	1:A:115:CYS:N	1:A:115:CYS:CA	1:A:115:CYS:C	1:A:116:ILE:N	8	1.68
(1,29)         1:A:138:LEU:N         1:A:138:LEU:CA         1:A:136:CYS:C         1:A:116:CYS:C         1:A:116:CYS:C         1:A:116:CYS:C         1:A:116:CYS:C         1:A:116:CYS:C         1:A:116:LE:N         8         1.68           (1,160)         1:A:398:HIS:N         1:A:398:HIS:C         1:A:394:HIS:N         8         1.68           (1,91)         1:A:58:PHE:C         1:A:59:ASP:N         1:A:59:ASP:C         1:A:59:ASP:C         1:A         1.67           (1,89)         1:A:58:PHE:C         1:A:59:ASP:N         1:A:58:PHE:C         1:A:59:ASP:C         1:A         1.67           (1,326)         1:A:58:PHE:C         1:A:59:ASP:N         1:A:59:ASP:C         1:A:37:TYR:N         1         1.67           (1,324)         1:A:55:AYS:C         1:A:36:SER:CA         1:A:36:SER:C         1:A:136:SER:C         1:A:136:SER:C         1:A:136:SER:N         1:A:136:SER:C         1:A:137:TYR:N         1         1.67           (1,322)         1:A:114:TYR:N         1:A:114:TYR:C         1:A:114:TYR:C         1:A:136:SER:C         1:A:137:TYR:N         1         1.67           (1,322)         1:A:1414:TYR:N         1:A:114:TYR:C         1:A:114:TYR:N         1         1.67           (1,225)         1:A:1314:TYR:N         1:A:114:TYR:N         1:A:114:TYR:N	(1,395)	1:A:98:HIS:N	1:A:98:HIS:CA	1:A:98:HIS:C	1:A:99:LEU:N	8	1.68
(1,188) 1:A:115:CYS:N 1:A:115:CYS:C 1:A:115:CYS:C 1:A:16:ILE:N 8 1.68 (1,160) 1:A:98:HIS:N 1:A:98:HIS:CA 1:A:98:HIS:C 1:A:59:ASP:N 1:A:59:ASP:C 1:A:136:SER:C 1:A:136:SER:C 1:A:136:SER:C 1:A:136:SER:C 1:A:136:SER:C 1:A:136:SER:C 1:A:136:SER:C 1:A:136:SER:C 1:A:136:SER:C 1:A:137:TYR:N 1 1.67 (1,324) 1:A:57:LYS:C 1:A:58:PHE:N 1:A:59:ASP:CA 1:A:59:ASP:C 1:A:136:SER:C		1:A:138:LEU:N	1:A:138:LEU:CA	1:A:138:LEU:C	1:A:139:HIS:N	9	1.68
(1,160)   1:A:98:HIS:N   1:A:98:HIS:CA   1:A:98:HIS:CA   1:A:59:ASP:CA   1:A:59:ASP:CA   1:A:59:ASP:CB   13   1.67   (1,49)   1:A:55:PHE:CA   1:A:59:ASP:CA   1:A:59:ASP:CB   13   1.67   (1,460)   1:A:136:SER:N   1:A:136:SER:CA   1:A:136:SER:C   1:A:137:TYR:N   1   1.67   (1,326)   1:A:55:PHE:C   1:A:55:ASP:DE:N   1:A:59:ASP:CA   1:A:59:ASP:C   13   1.67   (1,324)   1:A:57:LYS:C   1:A:59:ASP:N   1:A:59:ASP:CA   1:A:59:ASP:C   13   1.67   (1,324)   1:A:57:LYS:C   1:A:58:PHE:CA   1:A:58:PHE	· · /	1:A:115:CYS:N	1:A:115:CYS:CA	1:A:115:CYS:C	1:A:116:ILE:N	8	1.68
(1,91)	· · /	1:A:98:HIS:N	1:A:98:HIS:CA	1:A:98:HIS:C	1:A:99:LEU:N	8	1.68
1.89	( , ,					13	
1.460	( ' /						
(1,326)	· · /						
1.324	· · /						
(1,225)         1:A:136:SER:N         1:A:136:SER:CA         1:A:136:SER:C         1:A:137:TYR:N         1         1.67           (1,421)         1:A:114:TYR:N         1:A:114:TYR:CA         1:A:114:TYR:C         1:A:115:CYS:N         18         1.66           (1,382)         1:A:91:ARG:C         1:A:114:TYR:CA         1:A:114:TYR:C         1:A:92:SER:CA         1:A:92:SER:C         3         1.66           (1,147)         1:A:14:TYR:CN         1:A:114:TYR:C         1:A:105:CYS:N         18         1.66           (1,147)         1:A:19:ARG:C         1:A:92:SER:N         1:A:92:SER:CA         1:A:492:SER:C         3         1.66           (1,410)         1:A:107:PRO:N         1:A:107:PRO:CA         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:N         9         1.65           (1,337)         1:A:65:PRO:C         1:A:166:SER:N         1:A:66:SER:CA         1:A:108:GLY:N         9         1.65           (1,175)         1:A:107:PRO:C         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:N         9         1.65           (1,141)         1:A:13:ARG:N         1:A:13:ARG:CA         1:A:13:ARG:C         1:A:108:GLY:N         9         1.65           (1,419)         1:A:13:ARG:N         1:A:108:GLY:N         1:A:108:GLY:CA         1:A:108:GLY:CA         9         1.64<	· · /						
(1,421)         1:A:114:TYR:N         1:A:114:TYR:CA         1:A:114:TYR:C         1:A:115:CYS:N         18         1.66           (1,382)         1:A:91:ARG:C         1:A:92:SER:N         1:A:92:SER:CA         1:A:92:SER:C         3         1.66           (1,186)         1:A:114:TYR:N         1:A:114:TYR:CA         1:A:192:SER:CA         1:A:92:SER:C         3         1.66           (1,147)         1:A:91:ARG:C         1:A:92:SER:N         1:A:92:SER:CA         1:A:92:SER:C         3         1.66           (1,410)         1:A:107:PRO:N         1:A:107:PRO:CA         1:A:107:PRO:C         1:A:408:GLY:N         9         1.65           (1,337)         1:A:66:PRO:C         1:A:66:SER:N         1:A:66:SER:CA         1:A:66:SER:C         2         1.65           (1,175)         1:A:107:PRO:C         1:A:66:SER:CA         1:A:66:SER:C         2         1.65           (1,419)         1:A:113:ARG:N         1:A:113:ARG:CA         1:A:113:ARG:CA         1:A:114:TYR:N         8         1.64           (1,411)         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:CA         1:A:108:GLY:C         9         1.64           (1,144)         1:A:13:ARG:C         1:A:13:ARG:C         1:A:14:TYR:N         8         1.64           (1,176)         1:A:16:	· · /						
(1,382)   1:A:91:ARG:C   1:A:92:SER:N   1:A:92:SER:CA   1:A:92:SER:C   3   1.66   (1,186)   1:A:114:TYR:N   1:A:114:TYR:CA   1:A:114:TYR:C   1:A:115:CYS:N   18   1.66   (1,147)   1:A:91:ARG:C   1:A:92:SER:N   1:A:92:SER:CA   1:A:92:SER:C   3   1.66   (1,410)   1:A:107:PRO:N   1:A:107:PRO:CA   1:A:107:PRO:C   1:A:108:GLY:N   9   1.65   (1,337)   1:A:65:PRO:C   1:A:66:SER:N   1:A:66:SER:CA   1:A:66:SER:C   2   1.65   (1,175)   1:A:107:PRO:N   1:A:107:PRO:CA   1:A:107:PRO:C   1:A:108:GLY:N   9   1.65   (1,175)   1:A:107:PRO:N   1:A:107:PRO:CA   1:A:107:PRO:C   1:A:108:GLY:N   9   1.65   (1,102)   1:A:65:PRO:C   1:A:66:SER:N   1:A:66:SER:CA   1:A:66:SER:C   2   1.65   (1,419)   1:A:113:ARG:N   1:A:113:ARG:CA   1:A:113:ARG:C   1:A:114:TYR:N   8   1.64   (1,141)   1:A:107:PRO:C   1:A:108:GLY:N   1:A:113:ARG:N   1:A:113:ARG:N   1:A:113:ARG:C   1:A:114:TYR:N   8   1.64   (1,184)   1:A:13:ARG:N   1:A:13:ARG:CA   1:A:13:ARG:C   1:A:114:TYR:N   8   1.64   (1,144)   1:A:107:PRO:C   1:A:108:GLY:N   1:A:108:GLY:CA   1:A:108:GLY:C   9   1.64   (1,144)   1:A:13:ARG:N   1:A:13:ARG:CA   1:A:13:ARG:C   1:A:114:TYR:N   8   1.64   (1,144)   1:A:73:GLU:N   1:A:73:GLU:CA   1:A:73:GLU:C   1:A:74:GLU:N   19   1.62   (1,144)   1:A:73:GLU:N   1:A:73:GLU:CA   1:A:73:GLU:C   1:A:74:GLU:N   19   1.62   (1,144)   1:A:107:PRO:N   1:A:107:PRO:CA   1:A:107:PRO:C   1:A:108:GLY:N   10   1.6   (1,367)   1:A:60:SER:C   1:A:61:GLN:N   1:A:61:GLN:CA   1:A:61:GLN:CA   1:A:61:GLN:C   1   1.6   (1,347)   1:A:72:GLU:N   1:A:72:GLU:CA   1:A:107:PRO:C   1:A:108:GLY:N   10   1.6   (1,367)   1:A:46:SER:C   1:A:61:GLN:N   1:A:61:GLN:CA   1:A:61:GLN:C   1   1.6   (1,347)   1:A:72:GLU:N   1:A:72:GLU:CA   1:A:72:GLU:C   1:A:73:GLU:N   18   1.6   (1,347)   1:A:72:GLU:N   1:A:72:GLU:CA   1:A:72:GLU:C   1:A:61:GLN:C   1   1.6   (1,341)   1:A:72:GLU:N   1:A:72:GLU:CA   1:A:61:GLN:CA   1:A:61:GLN:C   1   1.6   (1,341)   1:A:67:PRO:C   1:A:68:THR:N   1:A:68:THR:C   1   1.59   (1,341)   1:A:67:PHE:C   1:A:68:THR:N   1:A:68:THR:C   1   1.59   1.59   (1,341)   1:A:67:P	_ ` '						
(1,186)         1:A:114:TYR:N         1:A:114:TYR:CA         1:A:114:TYR:C         1:A:115:CYS:N         18         1.66           (1,147)         1:A:91:ARG:C         1:A:92:SER:N         1:A:92:SER:CA         1:A:92:SER:C         3         1.66           (1,410)         1:A:107:PRO:N         1:A:107:PRO:CA         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:N         9         1.65           (1,337)         1:A:65:PRO:C         1:A:66:SER:N         1:A:66:SER:CA         1:A:66:SER:C         2         1.65           (1,175)         1:A:107:PRO:N         1:A:107:PRO:CA         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:N         9         1.65           (1,102)         1:A:65:PRO:C         1:A:66:SER:N         1:A:66:SER:CA         1:A:108:GLY:N         9         1.65           (1,419)         1:A:13:ARG:N         1:A:113:ARG:CA         1:A:113:ARG:C         1:A:114:TYR:N         8         1.64           (1,411)         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:N         1:A:108:GLY:CA         1:A:114:TYR:N         8         1.64           (1,141)         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:N         1:A:113:ARG:C         1:A:114:TYR:N         8         1.64           (1,341)         1:A:13:ARG:N         1:A:13:ARG:CA         1:A:113:ARG:C         1:A:114:TYR:N         <	( , ,						
(1,147)         1:A:91:ARG:C         1:A:92:SER:N         1:A:92:SER:CA         1:A:92:SER:C         3         1.66           (1,410)         1:A:107:PRO:N         1:A:107:PRO:CA         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:N         9         1.65           (1,337)         1:A:65:PRO:C         1:A:66:SER:N         1:A:66:SER:CA         1:A:66:SER:C         2         1.65           (1,175)         1:A:107:PRO:N         1:A:107:PRO:CA         1:A:107:PRO:C         1:A:168:GLY:N         9         1.65           (1,175)         1:A:107:PRO:C         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:N         9         1.65           (1,102)         1:A:65:PRO:C         1:A:66:SER:N         1:A:66:SER:CA         1:A:66:SER:C         2         1.65           (1,411)         1:A:113:ARG:N         1:A:113:ARG:CA         1:A:113:ARG:C         1:A:113:ARG:C         1:A:114:TYR:N         8         1.64           (1,411)         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:N         1:A:108:GLY:CA         1:A:108:GLY:C         9         1.64           (1,434)         1:A:113:ARG:N         1:A:113:ARG:CA         1:A:113:ARG:C         1:A:114:TYR:N         8         1.64           (1,141)         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:N         1:A:107:PRO:C         1:A:133:ARG:CA	( / /						
(1,410)         1:A:107:PRO:N         1:A:107:PRO:CA         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:N         9         1.65           (1,337)         1:A:65:PRO:C         1:A:66:SER:N         1:A:66:SER:CA         1:A:66:SER:C         2         1.65           (1,175)         1:A:107:PRO:N         1:A:107:PRO:CA         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:N         9         1.65           (1,102)         1:A:65:PRO:C         1:A:66:SER:N         1:A:66:SER:CA         1:A:66:SER:C         2         1.65           (1,419)         1:A:113:ARG:N         1:A:113:ARG:CA         1:A:113:ARG:C         1:A:114:TYR:N         8         1.64           (1,411)         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:N         1:A:108:GLY:C         9         1.64           (1,184)         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:N         1:A:108:GLY:CA         1:A:114:TYR:N         8         1.64           (1,176)         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:N         1:A:108:GLY:CA         1:A:108:GLY:C         9         1.64           (1,349)         1:A:373:GLU:N         1:A:133:GLU:CA         1:A:73:GLU:CA         1:A:73:GLU:N         19         1.62           (1,114)         1:A:60:SER:C         1:A:61:GLN:N         1:A:61:GLN:CA         1:A:61:GLN:CA         1:A:61:GLN:CA	( / /						
(1,337)         1:A:65:PRO:C         1:A:66:SER:N         1:A:66:SER:CA         1:A:66:SER:C         2         1.65           (1,175)         1:A:107:PRO:N         1:A:107:PRO:CA         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:N         9         1.65           (1,102)         1:A:65:PRO:C         1:A:66:SER:N         1:A:66:SER:CA         1:A:66:SER:C         2         1.65           (1,419)         1:A:113:ARG:N         1:A:113:ARG:CA         1:A:113:ARG:C         1:A:114:TYR:N         8         1.64           (1,411)         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:N         1:A:108:GLY:CA         1:A:108:GLY:C         9         1.64           (1,184)         1:A:113:ARG:N         1:A:113:ARG:CA         1:A:113:ARG:C         1:A:114:TYR:N         8         1.64           (1,176)         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:N         1:A:108:GLY:CA         1:A:108:GLY:C         9         1.64           (1,349)         1:A:37:GLU:N         1:A:108:GLY:CA         1:A:108:GLY:CA         1:A:141:TYR:N         8         1.64           (1,114)         1:A:37:GLU:N         1:A:108:GLY:CA         1:A:4108:GLY:CA         1:A:46:GLU:N         19         1.62           (1,349)         1:A:60:SER:C         1:A:61:GLN:N         1:A:61:GLN:CA         1:A:61:GLN:N							
(1,175)         1:A:107:PRO:N         1:A:107:PRO:CA         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:N         9         1.65           (1,102)         1:A:65:PRO:C         1:A:66:SER:N         1:A:66:SER:CA         1:A:66:SER:C         2         1.65           (1,419)         1:A:113:ARG:N         1:A:113:ARG:CA         1:A:113:ARG:C         1:A:114:TYR:N         8         1.64           (1,411)         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:N         1:A:108:GLY:CA         1:A:108:GLY:C         9         1.64           (1,176)         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:N         1:A:108:GLY:CA         1:A:113:ARG:C         1:A:114:TYR:N         8         1.64           (1,176)         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:N         1:A:108:GLY:CA         1:A:108:GLY:C         9         1.64           (1,349)         1:A:73:GLU:N         1:A:73:GLU:CA         1:A:73:GLU:C         1:A:74:GLU:N         19         1.62           (1,114)         1:A:73:GLU:N         1:A:73:GLU:CA         1:A:73:GLU:C         1:A:74:GLU:N         19         1.62           (1,114)         1:A:107:PRO:N         1:A:107:PRO:CA         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:N         19         1.62           (1,347)         1:A:46:GSER:C         1:A:61:GLN:N         1:A:61:GLN:CA	( ' /						
(1,102)         1:A:65:PRO:C         1:A:66:SER:N         1:A:66:SER:CA         1:A:66:SER:C         2         1.65           (1,419)         1:A:113:ARG:N         1:A:113:ARG:CA         1:A:113:ARG:C         1:A:114:TYR:N         8         1.64           (1,411)         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:N         1:A:108:GLY:CA         1:A:108:GLY:C         9         1.64           (1,184)         1:A:113:ARG:N         1:A:113:ARG:CA         1:A:113:ARG:C         1:A:114:TYR:N         8         1.64           (1,176)         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:N         1:A:108:GLY:CA         1:A:108:GLY:C         9         1.64           (1,349)         1:A:73:GLU:N         1:A:73:GLU:CA         1:A:73:GLU:C         1:A:74:GLU:N         19         1.62           (1,114)         1:A:73:GLU:N         1:A:73:GLU:CA         1:A:73:GLU:C         1:A:74:GLU:N         19         1.62           (1,349)         1:A:60:SER:C         1:A:61:GLN:N         1:A:61:GLN:CA         1:A:61:GLN:C         1         1.6           (1,347)         1:A:60:SER:C         1:A:61:GLN:N         1:A:61:GLN:CA         1:A:61:GLN:C         1         1.6           (1,347)         1:A:72:GLU:N         1:A:72:GLU:CA         1:A:72:GLU:CA         1:A:73:GLU:N         18 <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td>							
(1,419)         1:A:113:ARG:N         1:A:113:ARG:CA         1:A:113:ARG:C         1:A:114:TYR:N         8         1.64           (1,411)         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:N         1:A:108:GLY:CA         1:A:108:GLY:C         9         1.64           (1,184)         1:A:113:ARG:N         1:A:113:ARG:CA         1:A:113:ARG:C         1:A:114:TYR:N         8         1.64           (1,176)         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:N         1:A:108:GLY:CA         1:A:108:GLY:C         9         1.64           (1,349)         1:A:73:GLU:N         1:A:73:GLU:CA         1:A:73:GLU:C         1:A:74:GLU:N         19         1.62           (1,114)         1:A:73:GLU:N         1:A:73:GLU:CA         1:A:73:GLU:C         1:A:74:GLU:N         19         1.62           (1,141)         1:A:60:SER:C         1:A:61:GLN:N         1:A:61:GLN:CA         1:A:61:GLN:C         1         1.6           (1,410)         1:A:107:PRO:N         1:A:107:PRO:CA         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:N         10         1.6           (1,347)         1:A:272:GLU:N         1:A:272:GLU:CA         1:A:472:GLU:C         1:A:473:GLU:N         18         1.6           (1,347)         1:A:60:SER:C         1:A:61:GLN:N         1:A:61:GLN:CA         1:A:61:GLN:C <t< td=""><td>· · /</td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td></t<>	· · /						
(1,411)         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:N         1:A:108:GLY:CA         1:A:108:GLY:C         9         1.64           (1,184)         1:A:113:ARG:N         1:A:113:ARG:CA         1:A:113:ARG:C         1:A:114:TYR:N         8         1.64           (1,176)         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:N         1:A:108:GLY:CA         1:A:108:GLY:C         9         1.64           (1,349)         1:A:73:GLU:N         1:A:73:GLU:CA         1:A:73:GLU:C         1:A:74:GLU:N         19         1.62           (1,114)         1:A:73:GLU:N         1:A:61:GLN:N         1:A:61:GLN:CA         1:A:74:GLU:N         19         1.62           (1,95)         1:A:60:SER:C         1:A:61:GLN:N         1:A:61:GLN:CA         1:A:61:GLN:C         1         1.6           (1,410)         1:A:107:PRO:N         1:A:107:PRO:CA         1:A:484:GLY:N         10         1.6           (1,367)         1:A:84:GLY:N         1:A:461:GLN:N         1:A:461:GLN:CA         1:A:73:GLU:N         18         1.6           (1,347)         1:A:60:SER:C         1:A:61:GLN:N         1:A:61:GLN:CA         1:A:61:GLN:CA         1:A:61:GLN:N         1         1.6           (1,341)         1:A:60:SER:C         1:A:61:GLN:N         1:A:61:GLN:CA         1:A:61:GLN:CA         1:A:6	· · /						
(1,184)         1:A:113:ARG:N         1:A:113:ARG:CA         1:A:113:ARG:C         1:A:114:TYR:N         8         1.64           (1,176)         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:N         1:A:108:GLY:CA         1:A:108:GLY:C         9         1.64           (1,349)         1:A:73:GLU:N         1:A:73:GLU:CA         1:A:73:GLU:C         1:A:74:GLU:N         19         1.62           (1,114)         1:A:73:GLU:N         1:A:73:GLU:CA         1:A:73:GLU:C         1:A:74:GLU:N         19         1.62           (1,95)         1:A:60:SER:C         1:A:61:GLN:N         1:A:61:GLN:CA         1:A:61:GLN:C         1         1.6           (1,410)         1:A:107:PRO:N         1:A:107:PRO:CA         1:A:108:GLY:N         10         1.6           (1,367)         1:A:84:GLY:N         1:A:84:GLY:CA         1:A:84:GLY:C         1:A:85:MET:N         15         1.6           (1,347)         1:A:60:SER:C         1:A:61:GLN:N         1:A:61:GLN:CA         1:A:61:GLN:C         1         1.6           (1,330)         1:A:60:SER:C         1:A:61:GLN:N         1:A:61:GLN:CA         1:A:61:GLN:C         1         1.6           (1,175)         1:A:107:PRO:N         1:A:61:GLN:CA         1:A:61:GLN:C         1         1.6           (1,132)	· · /						
(1,176)         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:N         1:A:108:GLY:CA         1:A:108:GLY:C         9         1.64           (1,349)         1:A:73:GLU:N         1:A:73:GLU:CA         1:A:73:GLU:C         1:A:74:GLU:N         19         1.62           (1,114)         1:A:73:GLU:N         1:A:73:GLU:CA         1:A:73:GLU:C         1:A:74:GLU:N         19         1.62           (1,95)         1:A:60:SER:C         1:A:61:GLN:N         1:A:61:GLN:CA         1:A:61:GLN:C         1         1.6           (1,410)         1:A:107:PRO:N         1:A:107:PRO:CA         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:N         10         1.6           (1,367)         1:A:84:GLY:N         1:A:107:PRO:CA         1:A:107:PRO:C         1:A:84:GLY:N         15         1.6           (1,347)         1:A:72:GLU:N         1:A:72:GLU:CA         1:A:72:GLU:C         1:A:73:GLU:N         18         1.6           (1,347)         1:A:60:SER:C         1:A:61:GLN:N         1:A:61:GLN:CA         1:A:61:GLN:C         1         1.6           (1,340)         1:A:60:SER:C         1:A:61:GLN:N         1:A:61:GLN:CA         1:A:61:GLN:C         1         1.6           (1,175)         1:A:107:PRO:N         1:A:107:PRO:CA         1:A:108:GLY:N         10         1.6	· · /						
(1,349)         1:A:73:GLU:N         1:A:73:GLU:CA         1:A:73:GLU:C         1:A:74:GLU:N         19         1.62           (1,114)         1:A:73:GLU:N         1:A:73:GLU:CA         1:A:73:GLU:C         1:A:74:GLU:N         19         1.62           (1,95)         1:A:60:SER:C         1:A:61:GLN:N         1:A:61:GLN:CA         1:A:61:GLN:C         1         1.6           (1,410)         1:A:107:PRO:N         1:A:107:PRO:CA         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:N         10         1.6           (1,367)         1:A:84:GLY:N         1:A:84:GLY:CA         1:A:84:GLY:C         1:A:85:MET:N         15         1.6           (1,347)         1:A:72:GLU:N         1:A:72:GLU:CA         1:A:72:GLU:C         1:A:73:GLU:N         18         1.6           (1,347)         1:A:60:SER:C         1:A:61:GLN:N         1:A:61:GLN:CA         1:A:61:GLN:C         1         1.6           (1,340)         1:A:60:SER:C         1:A:61:GLN:N         1:A:61:GLN:CA         1:A:61:GLN:C         1         1.6           (1,132)         1:A:60:SER:C         1:A:107:PRO:CA         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:N         10         1.6           (1,132)         1:A:84:GLY:N         1:A:84:GLY:CA         1:A:84:GLY:C         1:A:85:MET:N         15 <t< td=""><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td></t<>							
(1,114)         1:A:73:GLU:N         1:A:73:GLU:CA         1:A:73:GLU:C         1:A:74:GLU:N         19         1.62           (1,95)         1:A:60:SER:C         1:A:61:GLN:N         1:A:61:GLN:CA         1:A:61:GLN:C         1         1.6           (1,410)         1:A:107:PRO:N         1:A:107:PRO:CA         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:N         10         1.6           (1,367)         1:A:84:GLY:N         1:A:84:GLY:CA         1:A:84:GLY:C         1:A:85:MET:N         15         1.6           (1,347)         1:A:72:GLU:N         1:A:72:GLU:CA         1:A:72:GLU:C         1:A:73:GLU:N         18         1.6           (1,330)         1:A:60:SER:C         1:A:61:GLN:N         1:A:61:GLN:CA         1:A:61:GLN:C         1         1.6           (1,175)         1:A:107:PRO:N         1:A:107:PRO:CA         1:A:108:GLY:N         10         1.6           (1,132)         1:A:84:GLY:N         1:A:84:GLY:CA         1:A:84:GLY:C         1:A:85:MET:N         15         1.6           (1,112)         1:A:72:GLU:N         1:A:72:GLU:CA         1:A:72:GLU:C         1:A:73:GLU:N         18         1.6           (1,341)         1:A:67:PHE:C         1:A:68:THR:N         1:A:68:THR:CA         1:A:68:THR:C         19         1.59	· · /						
(1,95)         1:A:60:SER:C         1:A:61:GLN:N         1:A:61:GLN:CA         1:A:61:GLN:C         1         1.6           (1,410)         1:A:107:PRO:N         1:A:107:PRO:CA         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:N         10         1.6           (1,367)         1:A:84:GLY:N         1:A:84:GLY:CA         1:A:84:GLY:C         1:A:85:MET:N         15         1.6           (1,347)         1:A:72:GLU:N         1:A:72:GLU:CA         1:A:72:GLU:C         1:A:73:GLU:N         18         1.6           (1,330)         1:A:60:SER:C         1:A:61:GLN:N         1:A:61:GLN:CA         1:A:61:GLN:C         1         1.6           (1,175)         1:A:107:PRO:N         1:A:107:PRO:CA         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:N         10         1.6           (1,132)         1:A:84:GLY:N         1:A:84:GLY:CA         1:A:84:GLY:C         1:A:84:GLY:N         15         1.6           (1,112)         1:A:72:GLU:N         1:A:72:GLU:CA         1:A:72:GLU:C         1:A:73:GLU:N         18         1.6           (1,341)         1:A:67:PHE:C         1:A:68:THR:N         1:A:68:THR:CA         1:A:68:THR:C         19         1.59           (1,36)         1:A:53:THR:C         1:A:54:SER:CA         1:A:54:SER:C         9         1.58	· · /						
(1,410)         1:A:107:PRO:N         1:A:107:PRO:CA         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:N         10         1.6           (1,367)         1:A:84:GLY:N         1:A:84:GLY:CA         1:A:84:GLY:C         1:A:85:MET:N         15         1.6           (1,347)         1:A:72:GLU:N         1:A:72:GLU:CA         1:A:72:GLU:C         1:A:73:GLU:N         18         1.6           (1,330)         1:A:60:SER:C         1:A:61:GLN:N         1:A:61:GLN:CA         1:A:61:GLN:C         1         1.6           (1,175)         1:A:107:PRO:N         1:A:107:PRO:CA         1:A:108:GLY:N         10         1.6           (1,172)         1:A:84:GLY:N         1:A:84:GLY:CA         1:A:84:GLY:C         1:A:85:MET:N         15         1.6           (1,112)         1:A:72:GLU:N         1:A:72:GLU:CA         1:A:72:GLU:C         1:A:73:GLU:N         18         1.6           (1,341)         1:A:67:PHE:C         1:A:68:THR:N         1:A:68:THR:CA         1:A:68:THR:C         19         1.59           (1,306)         1:A:67:PHE:C         1:A:68:THR:N         1:A:68:THR:CA         1:A:68:THR:C         19         1.59           (1,83)         1:A:53:THR:C         1:A:54:SER:N         1:A:54:SER:CA         1:A:54:SER:C         9         1.58 <tr< td=""><td>· · /</td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td></tr<>	· · /						
(1,367)         1:A:84:GLY:N         1:A:84:GLY:CA         1:A:84:GLY:C         1:A:85:MET:N         15         1.6           (1,347)         1:A:72:GLU:N         1:A:72:GLU:CA         1:A:72:GLU:C         1:A:73:GLU:N         18         1.6           (1,330)         1:A:60:SER:C         1:A:61:GLN:N         1:A:61:GLN:CA         1:A:61:GLN:C         1         1.6           (1,175)         1:A:107:PRO:N         1:A:107:PRO:CA         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:N         10         1.6           (1,132)         1:A:84:GLY:N         1:A:84:GLY:CA         1:A:84:GLY:C         1:A:85:MET:N         15         1.6           (1,112)         1:A:72:GLU:N         1:A:72:GLU:CA         1:A:84:GLY:C         1:A:85:MET:N         15         1.6           (1,341)         1:A:67:PHE:C         1:A:68:THR:N         1:A:68:THR:CA         1:A:68:THR:C         19         1.59           (1,341)         1:A:67:PHE:C         1:A:68:THR:N         1:A:68:THR:CA         1:A:68:THR:C         19         1.59           (1,38)         1:A:53:THR:C         1:A:54:SER:N         1:A:54:SER:CA         1:A:54:SER:C         9         1.58           (1,318)         1:A:51:LEU:C         1:A:52:PHE:N         1:A:52:PHE:CA         1:A:55:PHE:C         14 <th< td=""><td>· · /</td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td></th<>	· · /						
(1,347)         1:A:72:GLU:N         1:A:72:GLU:CA         1:A:72:GLU:C         1:A:73:GLU:N         18         1.6           (1,330)         1:A:60:SER:C         1:A:61:GLN:N         1:A:61:GLN:CA         1:A:61:GLN:C         1         1.6           (1,175)         1:A:107:PRO:N         1:A:107:PRO:CA         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:N         10         1.6           (1,132)         1:A:84:GLY:N         1:A:84:GLY:CA         1:A:84:GLY:C         1:A:85:MET:N         15         1.6           (1,112)         1:A:72:GLU:N         1:A:72:GLU:CA         1:A:72:GLU:C         1:A:73:GLU:N         18         1.6           (1,341)         1:A:67:PHE:C         1:A:68:THR:N         1:A:68:THR:CA         1:A:68:THR:C         19         1.59           (1,106)         1:A:67:PHE:C         1:A:68:THR:N         1:A:68:THR:CA         1:A:68:THR:C         19         1.59           (1,83)         1:A:53:THR:C         1:A:54:SER:N         1:A:54:SER:CA         1:A:54:SER:C         9         1.58           (1,318)         1:A:53:THR:C         1:A:54:SER:N         1:A:54:SER:CA         1:A:54:SER:C         9         1.58           (1,79)         1:A:51:LEU:C         1:A:52:PHE:N         1:A:52:PHE:CA         1:A:552:PHE:CA         1:A:552:PHE:C	· · /						
(1,330)         1:A:60:SER:C         1:A:61:GLN:N         1:A:61:GLN:CA         1:A:61:GLN:C         1         1.6           (1,175)         1:A:107:PRO:N         1:A:107:PRO:CA         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:N         10         1.6           (1,132)         1:A:84:GLY:N         1:A:84:GLY:CA         1:A:84:GLY:C         1:A:85:MET:N         15         1.6           (1,112)         1:A:72:GLU:N         1:A:72:GLU:CA         1:A:72:GLU:C         1:A:73:GLU:N         18         1.6           (1,341)         1:A:67:PHE:C         1:A:68:THR:N         1:A:68:THR:CA         1:A:68:THR:C         19         1.59           (1,106)         1:A:67:PHE:C         1:A:68:THR:N         1:A:68:THR:CA         1:A:68:THR:C         19         1.59           (1,83)         1:A:53:THR:C         1:A:54:SER:N         1:A:54:SER:CA         1:A:54:SER:C         9         1.58           (1,318)         1:A:53:THR:C         1:A:54:SER:N         1:A:52:PHE:CA         1:A:52:PHE:C         14         1.56	_ ` ' /						
(1,175)         1:A:107:PRO:N         1:A:107:PRO:CA         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:N         10         1.6           (1,132)         1:A:84:GLY:N         1:A:84:GLY:CA         1:A:84:GLY:C         1:A:85:MET:N         15         1.6           (1,112)         1:A:72:GLU:N         1:A:72:GLU:CA         1:A:73:GLU:N         18         1.6           (1,341)         1:A:67:PHE:C         1:A:68:THR:N         1:A:68:THR:CA         1:A:68:THR:C         19         1.59           (1,106)         1:A:67:PHE:C         1:A:68:THR:N         1:A:68:THR:CA         1:A:68:THR:C         19         1.59           (1,83)         1:A:53:THR:C         1:A:54:SER:N         1:A:54:SER:CA         1:A:54:SER:C         9         1.58           (1,318)         1:A:53:THR:C         1:A:54:SER:N         1:A:54:SER:CA         1:A:54:SER:C         9         1.58           (1,79)         1:A:51:LEU:C         1:A:52:PHE:N         1:A:52:PHE:CA         1:A:52:PHE:C         14         1.56	· · /						
(1,132)         1:A:84:GLY:N         1:A:84:GLY:CA         1:A:84:GLY:C         1:A:85:MET:N         15         1.6           (1,112)         1:A:72:GLU:N         1:A:72:GLU:CA         1:A:72:GLU:C         1:A:73:GLU:N         18         1.6           (1,341)         1:A:67:PHE:C         1:A:68:THR:N         1:A:68:THR:CA         1:A:68:THR:C         19         1.59           (1,106)         1:A:67:PHE:C         1:A:68:THR:N         1:A:68:THR:CA         1:A:68:THR:C         19         1.59           (1,83)         1:A:53:THR:C         1:A:54:SER:N         1:A:54:SER:CA         1:A:54:SER:C         9         1.58           (1,318)         1:A:53:THR:C         1:A:54:SER:N         1:A:54:SER:CA         1:A:54:SER:C         9         1.58           (1,79)         1:A:51:LEU:C         1:A:52:PHE:N         1:A:52:PHE:CA         1:A:52:PHE:C         14         1.56	_ ` ' /						
(1,112)         1:A:72:GLU:N         1:A:72:GLU:CA         1:A:72:GLU:C         1:A:73:GLU:N         18         1.6           (1,341)         1:A:67:PHE:C         1:A:68:THR:N         1:A:68:THR:CA         1:A:68:THR:C         19         1.59           (1,106)         1:A:67:PHE:C         1:A:68:THR:N         1:A:68:THR:CA         1:A:68:THR:C         19         1.59           (1,83)         1:A:53:THR:C         1:A:54:SER:N         1:A:54:SER:CA         1:A:54:SER:C         9         1.58           (1,318)         1:A:53:THR:C         1:A:54:SER:N         1:A:54:SER:CA         1:A:54:SER:C         9         1.58           (1,79)         1:A:51:LEU:C         1:A:52:PHE:N         1:A:52:PHE:CA         1:A:52:PHE:C         14         1.56	_ ` '						
(1,341)         1:A:67:PHE:C         1:A:68:THR:N         1:A:68:THR:CA         1:A:68:THR:C         19         1.59           (1,106)         1:A:67:PHE:C         1:A:68:THR:N         1:A:68:THR:CA         1:A:68:THR:C         19         1.59           (1,83)         1:A:53:THR:C         1:A:54:SER:N         1:A:54:SER:CA         1:A:54:SER:C         9         1.58           (1,318)         1:A:53:THR:C         1:A:54:SER:N         1:A:54:SER:CA         1:A:54:SER:C         9         1.58           (1,79)         1:A:51:LEU:C         1:A:52:PHE:N         1:A:52:PHE:CA         1:A:52:PHE:C         14         1.56	( ' /						
(1,106)         1:A:67:PHE:C         1:A:68:THR:N         1:A:68:THR:CA         1:A:68:THR:C         19         1.59           (1,83)         1:A:53:THR:C         1:A:54:SER:N         1:A:54:SER:CA         1:A:54:SER:C         9         1.58           (1,318)         1:A:53:THR:C         1:A:54:SER:N         1:A:54:SER:CA         1:A:54:SER:C         9         1.58           (1,79)         1:A:51:LEU:C         1:A:52:PHE:N         1:A:52:PHE:CA         1:A:52:PHE:C         14         1.56	( / /						
(1,83)       1:A:53:THR:C       1:A:54:SER:N       1:A:54:SER:CA       1:A:54:SER:C       9       1.58         (1,318)       1:A:53:THR:C       1:A:54:SER:N       1:A:54:SER:CA       1:A:54:SER:C       9       1.58         (1,79)       1:A:51:LEU:C       1:A:52:PHE:N       1:A:52:PHE:CA       1:A:52:PHE:C       14       1.56							
(1,318)         1:A:53:THR:C         1:A:54:SER:N         1:A:54:SER:CA         1:A:54:SER:C         9         1.58           (1,79)         1:A:51:LEU:C         1:A:52:PHE:N         1:A:52:PHE:CA         1:A:52:PHE:C         14         1.56							
(1,79) 1:A:51:LEU:C 1:A:52:PHE:N 1:A:52:PHE:CA 1:A:52:PHE:C 14 1.56							
	· · /						
(1,455)   1:A:132:GLU:C   1:A:133:GLY:N   1:A:133:GLY:CA   1:A:133:GLY:C   16   1.56	· · /						
Continued on next page	(1,455)	1:A:132:GLU:C	1:A:133:GLY:N	1:A:133:GLY:CA	1:A:133:GLY:C		



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



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



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



New   Atom-1		ed from previous pe					
(1.88)							, ,
(1,323)   1:A:3571NSNN	· · /						
1.75  1.4.50-PRON	( ' /						
(1.46)   1.4.138.LEUCN   1.4.138.LEUCA   1.4.138.LEUC   1.4.139.HISN   11   1.16   (1.229)   1.4.138.LEUCN   1.4.130.PRO.N   1.4.50.PRO.C   1.4.50.PRO.C   1.4.51.LEUN   12   1.16   (1.229)   1.4.138.LEUN   1.4.138.LEUCA   1.4.138.LEUCC   1.4.139.HISN   11   1.16   (1.468)   1.4.140.LEUN   1.4.140.LEUCA   1.4.140.LEUC   1.4.140.LEUC	· · /					I	
	(1,78)	1:A:50:PRO:N	1:A:50:PRO:CA	1:A:50:PRO:C	1:A:51:LEU:N	12	1.16
(1,29)	· · /						
(1,468)   1:A:140:LEUN	( ' /		l e				
(1,233)   1:A-140-LEUUN	· · /						
(1,286)   1:A:32:GLUN	· · /						
(1,286)	· · /						
(1,6)	( / /						
(1,241)   1:A:5:LYS:N							
(1,87)							
(1,410)   1:A:107:PRO:N   1:A:107:PRO:CA   1:A:107:PRO:C   1:A:108:GLYN   2   1.11   (1,322)   1:A:56:ASP:C   1:A:57:LYS:N   1:A:57:LYS:C   4   1.11   (1,475)   1:A:107:PRO:N   1:A:107:PRO:CA   1:A:107:PRO:C   1:A:108:GLYN   2   1.11   (1,475)   1:A:107:PRO:N   1:A:107:PRO:CA   1:A:107:PRO:C   1:A:108:GLYN   2   1.11   (1,475)   1:A:107:PRO:C   1:A:107:PRO:CA   1:A:107:PRO:C   1:A:108:GLYN   2   1.11   (1,475)   1:A:107:PRO:C   1:A:122:ARG:C   1:A:122:PRE:N   8   1.1   (1,430)   1:A:101:HIS:N   1:A:101:HIS:CA   1:A:102:VAL:N   19   1.1   (1,322)   1:A:56:ASP:C   1:A:57:LYS:N   1:A:37:LYS:CA   1:A:57:LYS:C   2   1.1   (1,327)   1:A:37:YR:N   1:A:37:YR:CA   1:A:37:YR:CA   1:A:43SN:N   9   1.1   (1,200)   1:A:32:PRE:N   8   1.1   (1,200)   1:A:32:PRE:N   8   1.1   (1,200)   1:A:32:PRE:N   1:A:122:ARG:CA   1:A:37:YR:C   1:A:43SN:N   9   1.1   (1,437)   1:A:37:YR:N   1:A:37:YR:CA   1:A:37:YR:C   1:A:43SN:N   9   1.1   (1,437)   1:A:123:PRE:N   1:A:101:HIS:CA   1:A:101:HIS:C   1:A:102:PRE:N   8   1.1   (1,437)   1:A:123:PRE:N   1:A:123:PRE:CA   1:A:123:PRE:C   1:A:123:PRE:N   1:A:123:PRE:CA   1:A:123:PRE:C   1:A:123:PRE:	· · /					5	
	· · /						
(1,175)	· · · /						
(1,87)	· · /						
1.4.122:ARG:N	· · /					I	
(1,401)   1:A:101:HIS:N   1:A:101:HIS:CA   1:A:101:HIS:C   1:A:102:VAL:N   19   1.1   (1,322)   1:A:56:ASP:C   1:A:57:LYS:N   1:A:57:LYS:CA   1:A:57:LYS:C   2   1.1   (1,237)   1:A:3:TYR:N   1:A:3:TYR:CA   1:A:3:TYR:C   1:A:4:ASN:N   9   1.1   (1,200)   1:A:122:ARG:N   1:A:122:ARG:CA   1:A:22:ARG:C   1:A:4:ASN:N   9   1.1   (1,200)   1:A:122:ARG:N   1:A:122:ARG:CA   1:A:22:ARG:C   1:A:4:ASN:N   9   1.1   (1,201)   1:A:101:HIS:N   1:A:3:TYR:CA   1:A:3:TYR:C   1:A:4:ASN:N   9   1.1   (1,437)   1:A:3:TYR:N   1:A:101:HIS:CA   1:A:101:HIS:C   1:A:102:VAL:N   19   1.1   (1,437)   1:A:123:PHE:N   1:A:123:PHE:CA   1:A:123:PHE:C   1:A:124:VAL:N   11   1.09   (1,406)   1:A:104:ASN:C   1:A:105:ASP:N   1:A:123:PHE:C   1:A:124:VAL:N   11   1.09   (1,406)   1:A:104:ASN:C   1:A:105:ASP:N   1:A:105:ASP:CA   1:A:105:ASP:C   12   1.08   (1,374)   1:A:87:ARG:C   1:A:88:THR:N   1:A:88:THR:CA   1:A:88:THR:C   6   1.08   (1,374)   1:A:87:ARG:C   1:A:105:ASP:N   1:A:105:ASP:CA   1:A:105:ASP:C   12   1.08   (1,139)   1:A:35:ARG:C   1:A:94:THR:N   1:A:88:THR:CA   1:A:88:THR:C   6   1.08   (1,36)   1:A:93:ARG:C   1:A:94:THR:N   1:A:94:THR:CA   1:A:94:THR:C   11   1.07   (1,151)   1:A:93:ARG:C   1:A:94:THR:N   1:A:94:THR:CA   1:A:94:THR:C   11   1.07   (1,151)   1:A:93:ARG:C   1:A:94:THR:N   1:A:94:THR:CA   1:A:94:THR:C   11   1.07   (1,151)   1:A:96:ASP:C   1:A:97:SER:N   1:A:97:SER:CA   1:A:97:SER:C   2   1.06   (1,157)   1:A:96:ASP:C   1:A:95:LYS:N   1:A:97:SER:CA   1:A:97:SER:C   2   1.06   (1,157)   1:A:96:ASP:C   1:A:108:GLY:N   1:A:108:GLY:C   6   1.05   (1,321)   1:A:15:ASP:C   1:A:108:GLY:N   1:A:197:SER:C   2   1.06   (1,471)   1:A:107:PRO:C   1:A:108:GLY:N   1:A:197:SER:C   1:A:108:GLY:C   6   1.05   (1,321)   1:A:16:ASP:C   1:A:198:GLY:N   1:A:197:SER:C   2   1.06   (1,471)   1:A:107:PRO:C   1:A:108:GLY:N   1:A:1198:GLY:C   6   1.05   (1,411)   1:A:107:PRO:C   1:A:108:GLY:N   1:A:1198:GLY:C   6   1.05   (1,411)   1:A:107:PRO:C   1:A:1198:GLY:N   1:A:1198:GLY:C   6   1.05   (1,411)   1:A:107:PRO:C   1:A:1198:GLY:N   1:A:1198	( ' /						
(1,322)         1:A:56:ASP:C         1:A:57:LYS:N         1:A:57:LYS:CA         1:A:57:LYS:C         2         1.1           (1,237)         1:A:3:TYR:N         1:A:3:TYR:CA         1:A:3:TYR:C         1:A:4:ASN:N         9         1.1           (1,200)         1:A:122:ARG:N         1:A:122:ARG:CA         1:A:123:PHE:N         8         1.1           (1,20)         1:A:3:TYR:N         1:A:3:TYR:CA         1:A:123:PHE:N         1:A:123:PHE:N         1:A:13:TYR:CA         1:A:123:PHE:N         1:A:101:HIS:CA         1:A:101:HIS:C         1:A:102:VAL:N         19         1.1           (1,466)         1:A:123:PHE:N         1:A:123:PHE:CA         1:A:123:PHE:C         1:A:124:VAL:N         11         1.09           (1,202)         1:A:123:PHE:N         1:A:123:PHE:CA         1:A:123:PHE:C         1:A:124:VAL:N         11         1.09           (1,202)         1:A:123:PHE:N         1:A:123:PHE:CA         1:A:123:PHE:C         1:A:124:VAL:N         11         1.09           (1,202)         1:A:144:ASN:C         1:A:105:ASP:N         1:A:105:ASP:CA         1:A:124:VAL:N         11         1.09           (1,202)         1:A:24:ASN:C         1:A:35:ASP:N         1:A:105:ASP:CA         1:A:105:ASP:C         12         1.08           (1,374)	(1,435)	1:A:122:ARG:N	1:A:122:ARG:CA	1:A:122:ARG:C	1:A:123:PHE:N		1.1
(1,237)   1:A:3:TYR:N   1:A:3:TYR:CA   1:A:3:TYR:C   1:A:4:ASN:N   9   1.1	(1,401)	1:A:101:HIS:N	1:A:101:HIS:CA		1:A:102:VAL:N		1.1
(1,200   1;A:122;ARG;N   1;A:122;ARG;CA   1;A:122;ARG;C   1;A:123;PHE;N   8	(1,322)	1:A:56:ASP:C	1:A:57:LYS:N	1:A:57:LYS:CA	1:A:57:LYS:C	2	1.1
(1,2)         1:A:3:TYR:N         1:A:3:TYR:CA         1:A:3:TYR:C         1:A:4:ASN:N         9         1.1           (1,166)         1:A:101:HIS:N         1:A:101:HIS:CA         1:A:101:HIS:C         1:A:102:VAL:N         19         1.1           (1,437)         1:A:123:PHE:N         1:A:123:PHE:CA         1:A:123:PHE:C         1:A:124:VAL:N         11         1.09           (1,202)         1:A:123:PHE:N         1:A:123:PHE:CA         1:A:123:PHE:C         1:A:124:VAL:N         11         1.09           (1,406)         1:A:144:ASN:C         1:A:105:ASP:N         1:A:105:ASP:CA         1:A:105:ASP:C         12         1.08           (1,374)         1:A:87:ARG:C         1:A:88:THR:N         1:A:88:THR:CA         1:A:88:THR:C         6         1.08           (1,171)         1:A:104:ASN:C         1:A:105:ASP:N         1:A:105:ASP:CA         1:A:105:ASP:CD         12         1.08           (1,171)         1:A:104:ASR:C         1:A:105:ASP:N         1:A:105:ASP:CA         1:A:105:ASP:CD         12         1.08           (1,139)         1:A:36:ASR:C         1:A:494:THR:N         1:A:488:THR:CA         1:A:488:THR:C         6         1.08           (1,380)         1:A:39:ARG:C         1:A:494:THR:N         1:A:494:THR:CA         1:A:499:THR:C	(1,237)	1:A:3:TYR:N	1:A:3:TYR:CA	1:A:3:TYR:C	1:A:4:ASN:N		1.1
(1,166)         1:A:101:HIS:N         1:A:101:HIS:CA         1:A:101:HIS:C         1:A:102:VAL:N         19         1.1           (1,437)         1:A:123:PHE:N         1:A:123:PHE:CA         1:A:123:PHE:C         1:A:124:VAL:N         11         1.09           (1,202)         1:A:123:PHE:N         1:A:123:PHE:CA         1:A:123:PHE:C         1:A:124:VAL:N         11         1.09           (1,406)         1:A:104:ASN:C         1:A:105:ASP:N         1:A:105:ASP:CA         1:A:105:ASP:C         12         1.08           (1,374)         1:A:87:ARG:C         1:A:88:THR:N         1:A:88:THR:CA         1:A:88:THR:C         6         1.08           (1,171)         1:A:404:ASN:C         1:A:105:ASP:N         1:A:105:ASP:CA         1:A:105:ASP:C         12         1.08           (1,139)         1:A:87:ARG:C         1:A:88:THR:N         1:A:88:THR:CA         1:A:88:THR:C         6         1.08           (1,339)         1:A:94:THR:N         1:A:94:THR:CA         1:A:494:THR:C         11         1.07           (1,151)         1:A:93:ARG:C         1:A:97:THR:N         1:A:94:THR:CA         1:A:494:THR:C         11         1.07           (1,351)         1:A:93:ARG:C         1:A:97:TRR:N         1:A:97:TRR:CA         1:A:49:TRR:C         11         1.07<	(1,200)	1:A:122:ARG:N	1:A:122:ARG:CA	1:A:122:ARG:C	1:A:123:PHE:N	8	1.1
(1,437)         1:A:123:PHE:N         1:A:123:PHE:CA         1:A:123:PHE:C         1:A:124:VAL:N         11         1.09           (1,202)         1:A:123:PHE:N         1:A:123:PHE:CA         1:A:123:PHE:C         1:A:124:VAL:N         11         1.09           (1,406)         1:A:104:ASN:C         1:A:105:ASP:N         1:A:105:ASP:CA         1:A:105:ASP:C         12         1.08           (1,374)         1:A:88:THR:N         1:A:88:THR:N         1:A:88:THR:CA         1:A:88:THR:C         6         1.08           (1,171)         1:A:104:ASN:C         1:A:105:ASP:N         1:A:105:ASP:CA         1:A:88:THR:C         6         1.08           (1,139)         1:A:87:ARG:C         1:A:94:THR:N         1:A:94:THR:CA         1:A:88:THR:C         6         1.08           (1,386)         1:A:93:ARG:C         1:A:94:THR:N         1:A:94:THR:CA         1:A:94:THR:C         11         1.07           (1,392)         1:A:96:ASP:C         1:A:97:SER:N         1:A:97:SER:CA         1:A:97:SER:C         2         1.06           (1,87)         1:A:66:ASP:C         1:A:97:SER:N         1:A:57:LYS:CA         1:A:57:LYS:C         20         1.05           (1,411)         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:N         1:A:108:GLY:CA         1:A:75:LYS:C         2	(1,2)	1:A:3:TYR:N	1:A:3:TYR:CA	1:A:3:TYR:C	1:A:4:ASN:N	9	1.1
(1,202)         1:A:123:PHE:N         1:A:123:PHE:CA         1:A:123:PHE:C         1:A:124:VAL:N         11         1.09           (1,406)         1:A:104:ASN:C         1:A:105:ASP:N         1:A:105:ASP:CA         1:A:105:ASP-C         12         1.08           (1,374)         1:A:87:ARG:C         1:A:88:THR:N         1:A:88:THR:CA         1:A:88:THR:C         6         1.08           (1,171)         1:A:104:ASN:C         1:A:105:ASP:N         1:A:105:ASP:CA         1:A:105:ASP:C         12         1.08           (1,139)         1:A:24:ARG:C         1:A:48:THR:N         1:A:48:THR:CA         1:A:48:THR:C         6         1.08           (1,386)         1:A:33:ARG:C         1:A:94:THR:N         1:A:94:THR:CA         1:A:494:THR:C         11         1.07           (1,151)         1:A:93:ARG:C         1:A:94:THR:N         1:A:94:THR:CA         1:A:34:THR:C         11         1.07           (1,151)         1:A:93:ARG:C         1:A:94:THR:N         1:A:94:THR:CA         1:A:34:THR:C         11         1.07           (1,151)         1:A:96:ASP:C         1:A:97:SER:N         1:A:97:SER:CA         1:A:49:THR:C         11         1.07           (1,351)         1:A:16:GASP:C         1:A:17:SER:CA         1:A:497:SER:C         2         1.06	(1,166)	1:A:101:HIS:N	1:A:101:HIS:CA	1:A:101:HIS:C	1:A:102:VAL:N	19	1.1
(1,406)         1:A:104:ASN;C         1:A:105:ASP;N         1:A:105:ASP;CA         1:A:105:ASP;C         12         1.08           (1,374)         1:A:87:ARG;C         1:A:88:THR;N         1:A:88:THR;CA         1:A:88:THR;C         6         1.08           (1,171)         1:A:104:ASN;C         1:A:105:ASP;N         1:A:105:ASP;CA         1:A:88:THR;C         6         1.08           (1,139)         1:A:87:ARG;C         1:A:88:THR;N         1:A:88:THR;CA         1:A:88:THR;C         1         1.08           (1,386)         1:A:93:ARG;C         1:A:94:THR;N         1:A:94:THR;CA         1:A:94:THR;C         11         1.07           (1,351)         1:A:96:ASP;C         1:A:97:SER;N         1:A:94:THR;CA         1:A:94:THR;C         11         1.07           (1,392)         1:A:96:ASP;C         1:A:97:SER;N         1:A:97:SER;CA         1:A:97:SER;C         2         1.06           (1,57)         1:A:96:ASP;C         1:A:97:SER;N         1:A:97:SER;CA         1:A:97:SER;C         2         1.06           (1,411)         1:A:106:ASP;C         1:A:497:SER;N         1:A:97:SER;CA         1:A:97:SER;C         2         1.06           (1,471)         1:A:166:ASP;C         1:A:497:SER;N         1:A:97:SER;CA         1:A:497:SER;C         2	(1,437)	1:A:123:PHE:N	1:A:123:PHE:CA	1:A:123:PHE:C	1:A:124:VAL:N	11	1.09
(1,374)         1:A:87:ARG:C         1:A:88:THR:N         1:A:88:THR:CA         1:A:88:THR:C         6         1.08           (1,171)         1:A:104:ASN:C         1:A:105:ASP:N         1:A:105:ASP:CA         1:A:105:ASP:C         12         1.08           (1,139)         1:A:87:ARG:C         1:A:88:THR:N         1:A:88:THR:CA         1:A:88:THR:C         6         1.08           (1,386)         1:A:93:ARG:C         1:A:94:THR:N         1:A:94:THR:CA         1:A:94:THR:C         11         1.07           (1,311)         1:A:93:ARG:C         1:A:94:THR:N         1:A:94:THR:CA         1:A:94:THR:C         11         1.07           (1,392)         1:A:96:ASP:C         1:A:97:SER:N         1:A:97:SER:CA         1:A:97:SER:C         2         1.06           (1,157)         1:A:96:ASP:C         1:A:97:SER:N         1:A:77:SER:CA         1:A:97:SER:C         2         1.06           (1,87)         1:A:56:ASP:C         1:A:108:GLY:N         1:A:108:GLY:CA         1:A:108:GLY:C         6         1.05           (1,311)         1:A:74:GLU:N         1:A:74:GLU:CA         1:A:74:GLU:C         1:A:75:VAL:N         3         1.05           (1,322)         1:A:56:ASP:C         1:A:108:GLY:N         1:A:108:GLY:CA         1:A:108:GLY:C         6	(1,202)	1:A:123:PHE:N	1:A:123:PHE:CA	1:A:123:PHE:C	1:A:124:VAL:N	11	1.09
(1,171)         1:A:104:ASN:C         1:A:105:ASP:N         1:A:105:ASP:CA         1:A:105:ASP:C         12         1.08           (1,139)         1:A:87:ARG:C         1:A:88:THR:N         1:A:88:THR:CA         1:A:88:THR:C         6         1.08           (1,386)         1:A:93:ARG:C         1:A:94:THR:N         1:A:94:THR:CA         1:A:94:THR:C         11         1.07           (1,151)         1:A:93:ARG:C         1:A:94:THR:N         1:A:94:THR:CA         1:A:94:THR:C         11         1.07           (1,392)         1:A:96:ASP:C         1:A:97:SER:N         1:A:97:SER:CA         1:A:97:SER:C         2         1.06           (1,157)         1:A:96:ASP:C         1:A:47:SER:N         1:A:97:SER:CA         1:A:97:SER:C         2         1.06           (1,87)         1:A:56:ASP:C         1:A:57:LYS:N         1:A:57:LYS:CA         1:A:57:LYS:C         20         1.05           (1,411)         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:N         1:A:108:GLY:CA         1:A:75:VAL:N         3         1.05           (1,351)         1:A:74:GLU:N         1:A:74:GLU:CA         1:A:74:GLU:CA         1:A:75:VAL:N         3         1.05           (1,176)         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:N         1:A:108:GLY:CA         1:A:108:GLY:CA         1:A:108	(1,406)	1:A:104:ASN:C	1:A:105:ASP:N	1:A:105:ASP:CA	1:A:105:ASP:C	I	1.08
(1,139)         1:A:87:ARG:C         1:A:88:THR:N         1:A:88:THR:CA         1:A:88:THR:C         6         1.08           (1,386)         1:A:93:ARG:C         1:A:94:THR:N         1:A:94:THR:CA         1:A:94:THR:C         11         1.07           (1,151)         1:A:93:ARG:C         1:A:94:THR:N         1:A:94:THR:CA         1:A:94:THR:C         11         1.07           (1,392)         1:A:96:ASP:C         1:A:97:SER:N         1:A:97:SER:CA         1:A:97:SER:C         2         1.06           (1,157)         1:A:96:ASP:C         1:A:97:SER:N         1:A:97:SER:CA         1:A:97:SER:C         2         1.06           (1,87)         1:A:56:ASP:C         1:A:97:SER:N         1:A:57:LYS:CA         1:A:57:LYS:C         20         1.05           (1,411)         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:N         1:A:4108:GLY:CA         1:A:408:GLY:C         6         1.05           (1,351)         1:A:74:GLU:N         1:A:74:GLU:CA         1:A:74:GLU:C         1:A:75:LYS:C         20         1.05           (1,176)         1:A:141:PHE:N         1:A:141:PHE:CA         1:A:141:PHE:C         1:A:141:PHE:C         1:A:141:PHE:C         1:A:141:PHE:C         1:A:141:PHE:C         1:A:141:PHE:C         1:A:141:PHE:C         1:A:141:PHE:C         1:A:141:PHE:C	(1,374)		1:A:88:THR:N	1:A:88:THR:CA	1:A:88:THR:C		1.08
(1,386)         1:A:93:ARG:C         1:A:94:THR:N         1:A:94:THR:CA         1:A:94:THR:C         11         1.07           (1,151)         1:A:93:ARG:C         1:A:94:THR:N         1:A:94:THR:CA         1:A:94:THR:C         11         1.07           (1,392)         1:A:96:ASP:C         1:A:97:SER:N         1:A:97:SER:CA         1:A:97:SER:C         2         1.06           (1,157)         1:A:96:ASP:C         1:A:97:SER:N         1:A:97:SER:CA         1:A:97:SER:C         2         1.06           (1,87)         1:A:56:ASP:C         1:A:57:LYS:N         1:A:57:LYS:CA         1:A:57:LYS:C         20         1.05           (1,411)         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:N         1:A:108:GLY:CA         1:A:108:GLY:C         6         1.05           (1,351)         1:A:74:GLU:N         1:A:74:GLU:CA         1:A:74:GLU:C         1:A:75:LYS:C         20         1.05           (1,322)         1:A:56:ASP:C         1:A:108:GLY:N         1:A:108:GLY:C         6         1.05           (1,176)         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:N         1:A:108:GLY:CA         1:A:108:GLY:C         6         1.05           (1,176)         1:A:141:PHE:N         1:A:141:PHE:CA         1:A:141:PHE:N         1:A:141:PHE:CA         1:A:141:PHE:CA         1:A:	(1,171)			1:A:105:ASP:CA	1:A:105:ASP:C	12	1.08
(1,151)         1:A:93:ARG:C         1:A:94:THR:N         1:A:94:THR:CA         1:A:94:THR:C         11         1.07           (1,392)         1:A:96:ASP:C         1:A:97:SER:N         1:A:97:SER:CA         1:A:97:SER:C         2         1.06           (1,157)         1:A:96:ASP:C         1:A:97:SER:N         1:A:97:SER:CA         1:A:97:SER:C         2         1.06           (1,87)         1:A:56:ASP:C         1:A:57:LYS:N         1:A:57:LYS:CA         1:A:57:LYS:C         20         1.05           (1,411)         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:N         1:A:108:GLY:CA         1:A:4108:GLY:C         6         1.05           (1,351)         1:A:74:GLU:N         1:A:74:GLU:CA         1:A:74:GLU:C         1:A:75:LYS:C         20         1.05           (1,352)         1:A:56:ASP:C         1:A:57:LYS:N         1:A:57:LYS:CA         1:A:57:LYS:C         20         1.05           (1,322)         1:A:56:ASP:C         1:A:108:GLY:N         1:A:4108:GLY:CA         1:A:4108:GLY:C         20         1.05           (1,176)         1:A:141:PHE:C         1:A:1408:GLY:CA         1:A:47:GLU:C         1:A:47:GLU:C         1:A:4108:GLY:C         6         1.05           (1,176)         1:A:141:PHE:N         1:A:141:PHE:CA         1:A:441:PHE:C         1	(1,139)	1:A:87:ARG:C	1:A:88:THR:N		1:A:88:THR:C		1.08
(1,392)         1:A:96:ASP:C         1:A:97:SER:N         1:A:97:SER:CA         1:A:97:SER:C         2         1.06           (1,157)         1:A:96:ASP:C         1:A:97:SER:N         1:A:97:SER:CA         1:A:97:SER:C         2         1.06           (1,87)         1:A:56:ASP:C         1:A:57:LYS:N         1:A:57:LYS:CA         1:A:57:LYS:C         20         1.05           (1,411)         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:N         1:A:108:GLY:CA         1:A:108:GLY:C         6         1.05           (1,351)         1:A:74:GLU:N         1:A:74:GLU:CA         1:A:74:GLU:C         1:A:75:VAL:N         3         1.05           (1,322)         1:A:56:ASP:C         1:A:57:LYS:N         1:A:57:LYS:CA         1:A:57:LYS:C         20         1.05           (1,176)         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:N         1:A:108:GLY:CA         1:A:108:GLY:C         6         1.05           (1,16)         1:A:74:GLU:N         1:A:108:GLY:N         1:A:108:GLY:CA         1:A:108:GLY:C         6         1.05           (1,470)         1:A:141:PHE:N         1:A:141:PHE:CA         1:A:141:PHE:C         1:A:142:ASN:N         19         1.04           (1,470)         1:A:141:PHE:N         1:A:141:PHE:CA         1:A:141:PHE:C         1:A:142:ASN:N         17<	(1,386)	1:A:93:ARG:C	1:A:94:THR:N	1:A:94:THR:CA	1:A:94:THR:C	11	1.07
(1,157)         1:A:96:ASP:C         1:A:97:SER:N         1:A:97:SER:CA         1:A:97:SER:C         2         1.06           (1,87)         1:A:56:ASP:C         1:A:57:LYS:N         1:A:57:LYS:CA         1:A:57:LYS:C         20         1.05           (1,411)         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:N         1:A:108:GLY:CA         1:A:108:GLY:C         6         1.05           (1,351)         1:A:74:GLU:N         1:A:74:GLU:CA         1:A:74:GLU:C         1:A:75:VAL:N         3         1.05           (1,322)         1:A:56:ASP:C         1:A:57:LYS:N         1:A:57:LYS:CA         1:A:57:LYS:C         20         1.05           (1,176)         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:N         1:A:108:GLY:CA         1:A:108:GLY:C         6         1.05           (1,16)         1:A:74:GLU:N         1:A:108:GLY:N         1:A:108:GLY:CA         1:A:108:GLY:C         6         1.05           (1,16)         1:A:141:PHE:N         1:A:141:PHE:CA         1:A:141:PHE:C         1:A:74:GLU:C         1:A:75:VAL:N         3         1.05           (1,470)         1:A:141:PHE:N         1:A:141:PHE:CA         1:A:141:PHE:C         1:A:141:PHE:C         1:A:142:ASN:N         19         1.04           (1,379)         1:A:90:VAL:N         1:A:90:VAL:CA         1:A:		1:A:93:ARG:C			1:A:94:THR:C	11	1.07
(1,87)         1:A:56:ASP:C         1:A:57:LYS:N         1:A:57:LYS:CA         1:A:57:LYS:C         20         1.05           (1,411)         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:N         1:A:108:GLY:CA         1:A:108:GLY:C         6         1.05           (1,351)         1:A:74:GLU:N         1:A:74:GLU:CA         1:A:74:GLU:C         1:A:75:VAL:N         3         1.05           (1,352)         1:A:56:ASP:C         1:A:57:LYS:N         1:A:57:LYS:CA         1:A:57:LYS:C         20         1.05           (1,176)         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:N         1:A:108:GLY:CA         1:A:108:GLY:C         6         1.05           (1,176)         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:N         1:A:108:GLY:CA         1:A:108:GLY:CA         1:A:108:GLY:CA         1:A:108:GLY:CA         1:A:108:GLY:CA         1:A:105           (1,176)         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:N         1:A:108:GLY:CA         1:A:108:GLY:CA         1:A:108:GLY:CA         1:A:108:GLY:CA         1:A:105           (1,176)         1:A:141:PHE:N         1:A:141:PHE:CA         1:A:141:PHE:C         1:A:141:PHE:CA							
(1,411)         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:N         1:A:108:GLY:CA         1:A:108:GLY:C         6         1.05           (1,351)         1:A:74:GLU:N         1:A:74:GLU:CA         1:A:74:GLU:C         1:A:75:VAL:N         3         1.05           (1,322)         1:A:56:ASP:C         1:A:57:LYS:N         1:A:57:LYS:CA         1:A:57:LYS:C         20         1.05           (1,176)         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:N         1:A:108:GLY:CA         1:A:108:GLY:C         6         1.05           (1,176)         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:N         1:A:108:GLY:C         1:A:57:LYS:C         20         1.05           (1,176)         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:N         1:A:108:GLY:C         6         1.05           (1,176)         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:CA         1:A:108:GLY:CA         1:A:108:GLY:CA         1:A:105:ASP:C         6         1.05           (1,176)         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:CA         1:A:108:GLY:CA         1:A:108:GLY:CA         1:A:108:GLY:CA         1:A:105:ASP:C         6         1.05           (1,116)         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:CA         1:A:108:GLY:CA         1:A:108:GLY:CA         1:A:108:GLY:CA         1:A:105:ASP:N         1         1.09           (1,470) <td>(1,157)</td> <td>1:A:96:ASP:C</td> <td>1:A:97:SER:N</td> <td>1:A:97:SER:CA</td> <td>1:A:97:SER:C</td> <td>2</td> <td>1.06</td>	(1,157)	1:A:96:ASP:C	1:A:97:SER:N	1:A:97:SER:CA	1:A:97:SER:C	2	1.06
(1,351)         1:A:74:GLU:N         1:A:74:GLU:CA         1:A:74:GLU:C         1:A:75:VAL:N         3         1.05           (1,322)         1:A:56:ASP:C         1:A:57:LYS:N         1:A:57:LYS:CA         1:A:57:LYS:C         20         1.05           (1,176)         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:N         1:A:108:GLY:CA         1:A:108:GLY:C         6         1.05           (1,116)         1:A:74:GLU:N         1:A:74:GLU:CA         1:A:75:VAL:N         3         1.05           (1,470)         1:A:141:PHE:N         1:A:141:PHE:CA         1:A:141:PHE:C         1:A:142:ASN:N         19         1.04           (1,470)         1:A:141:PHE:N         1:A:141:PHE:CA         1:A:141:PHE:C         1:A:142:ASN:N         19         1.04           (1,470)         1:A:141:PHE:N         1:A:141:PHE:CA         1:A:141:PHE:C         1:A:142:ASN:N         17         1.03           (1,379)         1:A:90:VAL:N         1:A:90:VAL:CA         1:A:91:ARG:N         14         1.03           (1,235)         1:A:141:PHE:N         1:A:141:PHE:CA         1:A:141:PHE:C         1:A:142:ASN:N         17         1.03           (1,379)         1:A:90:VAL:N         1:A:90:VAL:CA         1:A:90:VAL:C         1:A:91:ARG:N         14         1.03	(1,87)	1:A:56:ASP:C		1:A:57:LYS:CA	1:A:57:LYS:C	20	1.05
(1,322)         1:A:56:ASP:C         1:A:57:LYS:N         1:A:57:LYS:CA         1:A:57:LYS:C         20         1.05           (1,176)         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:N         1:A:108:GLY:CA         1:A:108:GLY:C         6         1.05           (1,116)         1:A:74:GLU:N         1:A:74:GLU:CA         1:A:74:GLU:C         1:A:75:VAL:N         3         1.05           (1,470)         1:A:141:PHE:N         1:A:141:PHE:CA         1:A:141:PHE:C         1:A:142:ASN:N         19         1.04           (1,235)         1:A:141:PHE:N         1:A:141:PHE:CA         1:A:141:PHE:C         1:A:142:ASN:N         19         1.04           (1,470)         1:A:141:PHE:N         1:A:141:PHE:CA         1:A:141:PHE:C         1:A:142:ASN:N         17         1.03           (1,379)         1:A:90:VAL:N         1:A:90:VAL:CA         1:A:90:VAL:C         1:A:91:ARG:N         14         1.03           (1,235)         1:A:141:PHE:N         1:A:141:PHE:CA         1:A:141:PHE:C         1:A:142:ASN:N         17         1.03           (1,379)         1:A:90:VAL:N         1:A:90:VAL:CA         1:A:90:VAL:C         1:A:91:ARG:N         17         1.03           (1,406)         1:A:104:ASN:C         1:A:105:ASP:N         1:A:105:ASP:CA         1:A:105:ASP:C						1	
(1,176)         1:A:107:PRO:C         1:A:108:GLY:N         1:A:108:GLY:CA         1:A:108:GLY:C         6         1.05           (1,116)         1:A:74:GLU:N         1:A:74:GLU:CA         1:A:74:GLU:C         1:A:75:VAL:N         3         1.05           (1,470)         1:A:141:PHE:N         1:A:141:PHE:CA         1:A:141:PHE:C         1:A:142:ASN:N         19         1.04           (1,235)         1:A:141:PHE:N         1:A:141:PHE:CA         1:A:141:PHE:C         1:A:142:ASN:N         19         1.04           (1,470)         1:A:141:PHE:N         1:A:141:PHE:CA         1:A:141:PHE:C         1:A:142:ASN:N         17         1.03           (1,379)         1:A:90:VAL:N         1:A:90:VAL:CA         1:A:90:VAL:C         1:A:91:ARG:N         14         1.03           (1,235)         1:A:141:PHE:N         1:A:141:PHE:CA         1:A:141:PHE:C         1:A:142:ASN:N         17         1.03           (1,235)         1:A:141:PHE:N         1:A:141:PHE:CA         1:A:141:PHE:C         1:A:142:ASN:N         17         1.03           (1,235)         1:A:141:PHE:N         1:A:141:PHE:CA         1:A:141:PHE:C         1:A:141:PHE:C         1:A:142:ASN:N         17         1.03           (1,235)         1:A:141:PHE:N         1:A:141:PHE:CA         1:A:141:PHE:C </td <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td>							
(1,116)         1:A:74:GLU:N         1:A:74:GLU:CA         1:A:74:GLU:C         1:A:75:VAL:N         3         1.05           (1,470)         1:A:141:PHE:N         1:A:141:PHE:CA         1:A:141:PHE:C         1:A:142:ASN:N         19         1.04           (1,235)         1:A:141:PHE:N         1:A:141:PHE:CA         1:A:141:PHE:C         1:A:142:ASN:N         19         1.04           (1,470)         1:A:141:PHE:N         1:A:141:PHE:CA         1:A:141:PHE:C         1:A:142:ASN:N         17         1.03           (1,379)         1:A:90:VAL:N         1:A:90:VAL:CA         1:A:90:VAL:C         1:A:91:ARG:N         14         1.03           (1,235)         1:A:141:PHE:N         1:A:141:PHE:CA         1:A:141:PHE:C         1:A:142:ASN:N         17         1.03           (1,235)         1:A:141:PHE:N         1:A:141:PHE:CA         1:A:141:PHE:C         1:A:142:ASN:N         17         1.03           (1,235)         1:A:141:PHE:N         1:A:141:PHE:CA         1:A:141:PHE:C         1:A:141:PHE:C         1:A:91:ARG:N         14         1.03           (1,236)         1:A:141:PHE:N         1:A:141:PHE:CA         1:A:141:PHE:C         1:A:91:ARG:N         14         1.03           (1,236)         1:A:141:PHE:N         1:A:141:PHE:CA         1:A:141:PHE:CA </td <td> /</td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td>	/						
(1,470)         1:A:141:PHE:N         1:A:141:PHE:CA         1:A:141:PHE:C         1:A:142:ASN:N         19         1.04           (1,235)         1:A:141:PHE:N         1:A:141:PHE:CA         1:A:141:PHE:C         1:A:142:ASN:N         19         1.04           (1,470)         1:A:141:PHE:N         1:A:141:PHE:CA         1:A:141:PHE:C         1:A:142:ASN:N         17         1.03           (1,379)         1:A:90:VAL:N         1:A:90:VAL:CA         1:A:90:VAL:C         1:A:91:ARG:N         14         1.03           (1,235)         1:A:141:PHE:N         1:A:141:PHE:CA         1:A:141:PHE:C         1:A:142:ASN:N         17         1.03           (1,144)         1:A:90:VAL:N         1:A:90:VAL:CA         1:A:90:VAL:C         1:A:91:ARG:N         14         1.03           (1,406)         1:A:104:ASN:C         1:A:105:ASP:N         1:A:105:ASP:CA         1:A:91:ARG:C         9         1.01           (1,380)         1:A:90:VAL:C         1:A:91:ARG:N         1:A:105:ASP:CA         1:A:91:ARG:C         3         1.01           (1,171)         1:A:90:VAL:C         1:A:91:ARG:N         1:A:91:ARG:CA         1:A:91:ARG:C         3         1.01           (1,445)         1:A:90:VAL:C         1:A:91:ARG:N         1:A:91:ARG:CA         1:A:91:ARG:C         <	/						
(1,235)         1:A:141:PHE:N         1:A:141:PHE:CA         1:A:141:PHE:C         1:A:142:ASN:N         19         1.04           (1,470)         1:A:141:PHE:N         1:A:141:PHE:CA         1:A:141:PHE:C         1:A:142:ASN:N         17         1.03           (1,379)         1:A:90:VAL:N         1:A:90:VAL:CA         1:A:90:VAL:C         1:A:91:ARG:N         14         1.03           (1,235)         1:A:141:PHE:N         1:A:141:PHE:CA         1:A:141:PHE:C         1:A:142:ASN:N         17         1.03           (1,144)         1:A:90:VAL:N         1:A:90:VAL:CA         1:A:90:VAL:C         1:A:91:ARG:N         14         1.03           (1,406)         1:A:104:ASN:C         1:A:105:ASP:N         1:A:105:ASP:CA         1:A:105:ASP:C         9         1.01           (1,380)         1:A:90:VAL:C         1:A:105:ASP:N         1:A:105:ASP:CA         1:A:91:ARG:C         3         1.01           (1,171)         1:A:90:VAL:C         1:A:91:ARG:N         1:A:91:ARG:CA         1:A:91:ARG:C         3         1.01           (1,145)         1:A:90:VAL:C         1:A:91:ARG:N         1:A:91:ARG:CA         1:A:91:ARG:C         3         1.01	/						
(1,470)         1:A:141:PHE:N         1:A:141:PHE:CA         1:A:141:PHE:C         1:A:142:ASN:N         17         1.03           (1,379)         1:A:90:VAL:N         1:A:90:VAL:CA         1:A:90:VAL:C         1:A:91:ARG:N         14         1.03           (1,235)         1:A:141:PHE:N         1:A:141:PHE:CA         1:A:141:PHE:C         1:A:142:ASN:N         17         1.03           (1,144)         1:A:90:VAL:N         1:A:90:VAL:CA         1:A:90:VAL:C         1:A:91:ARG:N         14         1.03           (1,406)         1:A:104:ASN:C         1:A:105:ASP:N         1:A:105:ASP:CA         1:A:105:ASP:C         9         1.01           (1,380)         1:A:90:VAL:C         1:A:105:ASP:N         1:A:105:ASP:CA         1:A:91:ARG:C         3         1.01           (1,171)         1:A:90:VAL:C         1:A:91:ARG:N         1:A:91:ARG:CA         1:A:91:ARG:C         3         1.01           (1,145)         1:A:90:VAL:C         1:A:91:ARG:N         1:A:91:ARG:CA         1:A:91:ARG:C         3         1.01	/						
(1,379)         1:A:90:VAL:N         1:A:90:VAL:CA         1:A:90:VAL:C         1:A:91:ARG:N         14         1.03           (1,235)         1:A:141:PHE:N         1:A:141:PHE:CA         1:A:141:PHE:C         1:A:142:ASN:N         17         1.03           (1,144)         1:A:90:VAL:N         1:A:90:VAL:CA         1:A:90:VAL:C         1:A:91:ARG:N         14         1.03           (1,406)         1:A:104:ASN:C         1:A:105:ASP:N         1:A:105:ASP:CA         1:A:105:ASP:C         9         1.01           (1,380)         1:A:90:VAL:C         1:A:91:ARG:N         1:A:91:ARG:CA         1:A:91:ARG:C         3         1.01           (1,171)         1:A:104:ASN:C         1:A:105:ASP:N         1:A:105:ASP:CA         1:A:105:ASP:C         9         1.01           (1,145)         1:A:90:VAL:C         1:A:91:ARG:N         1:A:91:ARG:CA         1:A:91:ARG:C         3         1.01	/						
(1,235)         1:A:141:PHE:N         1:A:141:PHE:CA         1:A:141:PHE:C         1:A:142:ASN:N         17         1.03           (1,144)         1:A:90:VAL:N         1:A:90:VAL:CA         1:A:90:VAL:C         1:A:91:ARG:N         14         1.03           (1,406)         1:A:104:ASN:C         1:A:105:ASP:N         1:A:105:ASP:CA         1:A:105:ASP:C         9         1.01           (1,380)         1:A:90:VAL:C         1:A:91:ARG:N         1:A:91:ARG:CA         1:A:91:ARG:C         3         1.01           (1,171)         1:A:104:ASN:C         1:A:91:ARG:N         1:A:91:ARG:CA         1:A:91:ARG:C         3         1.01           (1,145)         1:A:90:VAL:C         1:A:91:ARG:N         1:A:91:ARG:CA         1:A:91:ARG:C         3         1.01							
(1,144)         1:A:90:VAL:N         1:A:90:VAL:CA         1:A:90:VAL:C         1:A:91:ARG:N         14         1.03           (1,406)         1:A:104:ASN:C         1:A:105:ASP:N         1:A:105:ASP:CA         1:A:105:ASP:C         9         1.01           (1,380)         1:A:90:VAL:C         1:A:91:ARG:N         1:A:91:ARG:CA         1:A:91:ARG:C         3         1.01           (1,171)         1:A:104:ASN:C         1:A:105:ASP:N         1:A:105:ASP:CA         1:A:105:ASP:C         9         1.01           (1,145)         1:A:90:VAL:C         1:A:91:ARG:N         1:A:91:ARG:CA         1:A:91:ARG:C         3         1.01	· · /						
(1,406)         1:A:104:ASN:C         1:A:105:ASP:N         1:A:105:ASP:CA         1:A:105:ASP:C         9         1.01           (1,380)         1:A:90:VAL:C         1:A:91:ARG:N         1:A:91:ARG:CA         1:A:91:ARG:C         3         1.01           (1,171)         1:A:104:ASN:C         1:A:105:ASP:N         1:A:105:ASP:CA         1:A:105:ASP:C         9         1.01           (1,145)         1:A:90:VAL:C         1:A:91:ARG:N         1:A:91:ARG:CA         1:A:91:ARG:C         3         1.01	· · /						
(1,380)     1:A:90:VAL:C     1:A:91:ARG:N     1:A:91:ARG:CA     1:A:91:ARG:C     3     1.01       (1,171)     1:A:104:ASN:C     1:A:105:ASP:N     1:A:105:ASP:CA     1:A:105:ASP:C     9     1.01       (1,145)     1:A:90:VAL:C     1:A:91:ARG:N     1:A:91:ARG:CA     1:A:91:ARG:C     3     1.01	` ' /						
(1,171)         1:A:104:ASN:C         1:A:105:ASP:N         1:A:105:ASP:CA         1:A:105:ASP:C         9         1.01           (1,145)         1:A:90:VAL:C         1:A:91:ARG:N         1:A:91:ARG:CA         1:A:91:ARG:C         3         1.01	· · /						
(1,145) 1:A:90:VAL:C 1:A:91:ARG:N 1:A:91:ARG:CA 1:A:91:ARG:C 3 1.01	· · /						
	· · · /						1.01
Continued on next nage	(1,145)	1:A:90:VAL:C	1:A:91:ARG:N	1:A:91:ARG:CA	1:A:91:ARG:C		



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



	ed from previous pe	•			36 11	<b>T70 1 10</b> ( )
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation ( $\circ$ )
(1,260)	1:A:14:ARG:C	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	12	0.86
(1,25)	1:A:14:ARG:C	1:A:15:MET:N	1:A:15:MET:CA	1:A:15:MET:C	12	0.86
(1,120)	1:A:76:GLU:N	1:A:76:GLU:CA	1:A:76:GLU:C	1:A:77:GLU:N	7	0.86
(1,78)	1:A:50:PRO:N	1:A:50:PRO:CA	1:A:50:PRO:C	1:A:51:LEU:N	14	0.85
(1,466)	1:A:139:HIS:N	1:A:139:HIS:CA	1:A:139:HIS:C	1:A:140:LEU:N	15	0.85
(1,396)	1:A:98:HIS:C	1:A:99:LEU:N	1:A:99:LEU:CA	1:A:99:LEU:C	19	0.85
(1,385)	1:A:93:ARG:N	1:A:93:ARG:CA	1:A:93:ARG:C	1:A:94:THR:N	4	0.85
(1,375)	1:A:88:THR:N	1:A:88:THR:CA	1:A:88:THR:C	1:A:89:GLU:N	3	0.85
(1,355)	1:A:76:GLU:N	1:A:76:GLU:CA	1:A:76:GLU:C	1:A:77:GLU:N	19	0.85
(1,313)	1:A:50:PRO:N	1:A:50:PRO:CA	1:A:50:PRO:C	1:A:51:LEU:N	14	0.85
(1,237)	1:A:3:TYR:N	1:A:3:TYR:CA	1:A:3:TYR:C	1:A:4:ASN:N	6	0.85
(1,231)	1:A:139:HIS:N	1:A:139:HIS:CA	1:A:139:HIS:C	1:A:140:LEU:N	15	0.85
(1,2)	1:A:3:TYR:N	1:A:3:TYR:CA	1:A:3:TYR:C	1:A:4:ASN:N	6	0.85
(1,161)	1:A:98:HIS:C	1:A:99:LEU:N	1:A:99:LEU:CA	1:A:99:LEU:C	19	0.85
(1,150)	1:A:93:ARG:N	1:A:93:ARG:CA	1:A:93:ARG:C	1:A:94:THR:N	4	0.85
(1,140)	1:A:88:THR:N	1:A:88:THR:CA	1:A:88:THR:C	1:A:89:GLU:N	3	0.85
(1,120)	1:A:76:GLU:N	1:A:76:GLU:CA	1:A:76:GLU:C	1:A:77:GLU:N	19	0.85
(1,347)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:GLU:N	4	0.84
(1,112)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:GLU:N	4	0.84
(1,470)	1:A:141:PHE:N	1:A:141:PHE:CA	1:A:141:PHE:C	1:A:142:ASN:N	14	0.83
(1,347)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:GLU:N	20	0.83
(1,235)	1:A:141:PHE:N	1:A:141:PHE:CA	1:A:141:PHE:C	1:A:142:ASN:N	14	0.83
(1,112)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:GLU:N	20	0.83
(1,86)	1:A:55:LYS:N	1:A:55:LYS:CA	1:A:55:LYS:C	1:A:56:ASP:N	7	0.82
(1,321)	1:A:55:LYS:N	1:A:55:LYS:CA	1:A:55:LYS:C	1:A:56:ASP:N	7	0.82
(1,468)	1:A:140:LEU:N	1:A:140:LEU:CA	1:A:140:LEU:C	1:A:141:PHE:N	10	0.81
(1,456)	1:A:133:GLY:N	1:A:133:GLY:CA	1:A:133:GLY:C	1:A:134:TYR:N	6	0.81
(1,384)	1:A:92:SER:C	1:A:93:ARG:N	1:A:93:ARG:CA	1:A:93:ARG:C	11	0.81
(1,233)	1:A:140:LEU:N	1:A:140:LEU:CA	1:A:140:LEU:C	1:A:141:PHE:N	10	0.81
(1,221)	1:A:133:GLY:N	1:A:133:GLY:CA	1:A:133:GLY:C	1:A:134:TYR:N	6	0.81
(1,149)	1:A:92:SER:C	1:A:93:ARG:N	1:A:93:ARG:CA	1:A:93:ARG:C	11	0.81
(1,391)	1:A:96:ASP:N	1:A:96:ASP:CA	1:A:96:ASP:C	1:A:97:SER:N	10	0.8
(1,156)	1:A:96:ASP:N	1:A:96:ASP:CA	1:A:96:ASP:C	1:A:97:SER:N	10	0.8
(1,65)	1:A:42:TYR:N	1:A:42:TYR:CA	1:A:42:TYR:C	1:A:43:VAL:N	17	0.79
(1,47)	1:A:27:PRO:N	1:A:27:PRO:CA	1:A:27:PRO:C	1:A:28:PRO:N	9	0.79
(1,350)	1:A:73:GLU:C	1:A:74:GLU:N	1:A:74:GLU:CA	1:A:74:GLU:C	15	0.79
(1,300)	1:A:42:TYR:N	1:A:42:TYR:CA	1:A:42:TYR:C	1:A:43:VAL:N	17	0.79
(1,282)	1:A:27:PRO:N	1:A:27:PRO:CA	1:A:27:PRO:C	1:A:28:PRO:N	9	0.79
(1,115)	1:A:73:GLU:C	1:A:74:GLU:N	1:A:74:GLU:CA	1:A:74:GLU:C	15	0.79
(1,349)	1:A:73:GLU:N	1:A:73:GLU:CA	1:A:73:GLU:C	1:A:74:GLU:N	8	0.78
(1,114)	1:A:73:GLU:N	1:A:73:GLU:CA	1:A:73:GLU:C	1:A:74:GLU:N	8	0.78
(1,336)	1:A:65:PRO:N	1:A:65:PRO:CA	1:A:65:PRO:C	1:A:66:SER:N	4	0.77
(1,336)	1:A:65:PRO:N	1:A:65:PRO:CA	1:A:65:PRO:C	1:A:66:SER:N	10	0.77
(1,330) $(1,27)$	1:A:15:MET:C	1:A:16:GLN:N	1:A:16:GLN:CA	1:A:16:GLN:C	17	0.77
(1,262)	1:A:15:MET:C	1:A:16:GLN:N	1:A:16:GLN:CA	1:A:16:GLN:C	17	0.77
(1,202) $(1,101)$	1:A:65:PRO:N	1:A:65:PRO:CA	1:A:65:PRO:C	1:A:66:SER:N	4	0.77
(1,101) $(1,101)$	1:A:65:PRO:N	1:A:65:PRO:CA	1:A:65:PRO:C	1:A:66:SER:N	10	0.77
(1,355)	1:A:76:GLU:N	1:A:76:GLU:CA	1:A:76:GLU:C	1:A:77:GLU:N	20	0.76
(1,330) $(1,120)$	1:A:76:GLU:N	1:A:76:GLU:CA	1:A:76:GLU:C	1:A:77:GLU:N	20	0.76
(1,120) $(1,468)$	1:A:140:LEU:N	1:A:140:LEU:CA	1:A:140:LEU:C	1:A:141:PHE:N	17	0.75
(1,347)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:GLU:N	3	0.75
(1,941)	1.11.12.GLU.N	1.11.12.GLU.UA	1.11.12.010.0	1.11.10.GLU.IN		0.10



	ed from previous pe					
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation $(\circ)$
(1,347)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:GLU:N	14	0.75
(1,233)	1:A:140:LEU:N	1:A:140:LEU:CA	1:A:140:LEU:C	1:A:141:PHE:N	17	0.75
(1,112)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:GLU:N	3	0.75
(1,112)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:GLU:N	14	0.75
(1,61)	1:A:39:GLU:N	1:A:39:GLU:CA	1:A:39:GLU:C	1:A:40:GLY:N	9	0.74
(1,459)	1:A:135:GLU:C	1:A:136:SER:N	1:A:136:SER:CA	1:A:136:SER:C	16	0.74
(1,375)	1:A:88:THR:N	1:A:88:THR:CA	1:A:88:THR:C	1:A:89:GLU:N	19	0.74
(1,350)	1:A:73:GLU:C	1:A:74:GLU:N	1:A:74:GLU:CA	1:A:74:GLU:C	3	0.74
(1,296)	1:A:39:GLU:N	1:A:39:GLU:CA	1:A:39:GLU:C	1:A:40:GLY:N	9	0.74
(1,224)	1:A:135:GLU:C	1:A:136:SER:N	1:A:136:SER:CA	1:A:136:SER:C	16	0.74
(1,140)	1:A:88:THR:N	1:A:88:THR:CA	1:A:88:THR:C	1:A:89:GLU:N	19	0.74
(1,115)	1:A:73:GLU:C	1:A:74:GLU:N	1:A:74:GLU:CA	1:A:74:GLU:C	3	0.74
(1,82)	1:A:53:THR:N	1:A:53:THR:CA	1:A:53:THR:C	1:A:54:SER:N	2	0.73
(1,404)	1:A:102:VAL:C	1:A:103:PHE:N	1:A:103:PHE:CA	1:A:103:PHE:C	17	0.73
(1,317)	1:A:53:THR:N	1:A:53:THR:CA	1:A:53:THR:C	1:A:54:SER:N	2	0.73
(1,169)	1:A:102:VAL:C	1:A:103:PHE:N	1:A:103:PHE:CA	1:A:103:PHE:C	17	0.73
(1,339)	1:A:66:SER:C	1:A:67:PHE:N	1:A:67:PHE:CA	1:A:67:PHE:C	8	0.71
(1,104)	1:A:66:SER:C	1:A:67:PHE:N	1:A:67:PHE:CA	1:A:67:PHE:C	8	0.71
(1,419)	1:A:113:ARG:N	1:A:113:ARG:CA	1:A:113:ARG:C	1:A:114:TYR:N	4	0.7
(1,184)	1:A:113:ARG:N	1:A:113:ARG:CA	1:A:113:ARG:C	1:A:114:TYR:N	4	0.7
(1,460)	1:A:136:SER:N	1:A:136:SER:CA	1:A:136:SER:C	1:A:137:TYR:N	8	0.69
(1,385)	1:A:93:ARG:N	1:A:93:ARG:CA	1:A:93:ARG:C	1:A:94:THR:N	15	0.69
(1,225)	1:A:136:SER:N	1:A:136:SER:CA	1:A:136:SER:C	1:A:137:TYR:N	8	0.69
(1,150)	1:A:93:ARG:N	1:A:93:ARG:CA	1:A:93:ARG:C	1:A:94:THR:N	15	0.69
(1,77)	1:A:49:LYS:N	1:A:49:LYS:CA	1:A:49:LYS:C	1:A:50:PRO:N	16	0.67
(1,421)	1:A:114:TYR:N	1:A:114:TYR:CA	1:A:114:TYR:C	1:A:115:CYS:N	4	0.67
(1,406)	1:A:104:ASN:C	1:A:105:ASP:N	1:A:105:ASP:CA	1:A:105:ASP:C	17	0.67
(1,396)	1:A:98:HIS:C	1:A:99:LEU:N	1:A:99:LEU:CA	1:A:99:LEU:C	18	0.67
(1,312)	1:A:49:LYS:N	1:A:49:LYS:CA	1:A:49:LYS:C	1:A:50:PRO:N	16	0.67
(1,186)	1:A:114:TYR:N	1:A:114:TYR:CA	1:A:114:TYR:C	1:A:115:CYS:N	4	0.67
(1,171)	1:A:104:ASN:C	1:A:105:ASP:N	1:A:105:ASP:CA	1:A:105:ASP:C	17	0.67
(1,161)	1:A:98:HIS:C	1:A:99:LEU:N	1:A:99:LEU:CA	1:A:99:LEU:C	18	0.67
(1,384)	1:A:92:SER:C	1:A:93:ARG:N	1:A:93:ARG:CA	1:A:93:ARG:C	2	0.66
(1,374)	1:A:87:ARG:C	1:A:88:THR:N	1:A:88:THR:CA	1:A:88:THR:C	5	0.66
(1,149)	1:A:92:SER:C	1:A:93:ARG:N	1:A:93:ARG:CA	1:A:93:ARG:C	2	0.66
(1,139)	1:A:87:ARG:C	1:A:88:THR:N	1:A:88:THR:CA	1:A:88:THR:C	5	0.66
(1,414)	1:A:109:PRO:C	1:A:110:ASN:N	1:A:110:ASN:CA	1:A:110:ASN:C	1	0.65
(1,406)	1:A:104:ASN:C	1:A:105:ASP:N	1:A:105:ASP:CA	1:A:105:ASP:C	6	0.65
(1,349)	1:A:73:GLU:N	1:A:73:GLU:CA	1:A:73:GLU:C	1:A:74:GLU:N	9	0.65
(1,313) $(1,179)$	1:A:109:PRO:C	1:A:110:ASN:N	1:A:110:ASN:CA	1:A:110:ASN:C	1	0.65
(1,171) $(1,171)$	1:A:104:ASN:C	1:A:105:ASP:N	1:A:105:ASP:CA	1:A:105:ASP:C	6	0.65
(1,114)	1:A:73:GLU:N	1:A:73:GLU:CA	1:A:73:GLU:C	1:A:74:GLU:N	9	0.65
(1,355)	1:A:76:GLU:N	1:A:76:GLU:CA	1:A:76:GLU:C	1:A:77:GLU:N	9	0.64
(1,349)	1:A:73:GLU:N	1:A:73:GLU:CA	1:A:73:GLU:C	1:A:74:GLU:N	12	0.64
(1,120)	1:A:76:GLU:N	1:A:76:GLU:CA	1:A:76:GLU:C	1:A:77:GLU:N	9	0.64
(1,120) $(1,114)$	1:A:73:GLU:N	1:A:73:GLU:CA	1:A:73:GLU:C	1:A:74:GLU:N	12	0.64
(1,114) $(1,87)$	1:A:56:ASP:C	1:A:57:LYS:N	1:A:57:LYS:CA	1:A:57:LYS:C	6	0.62
(1,322)	1:A:56:ASP:C	1:A:57:LYS:N	1:A:57:LYS:CA	1:A:57:LYS:C	6	0.62
(1,322) $(1,97)$	1:A:61:GLN:C	1:A:62:CYS:N	1:A:62:CYS:CA	1:A:62:CYS:C	3	0.62
(1,97) $(1,78)$	1:A:50:PRO:N	1:A:50:PRO:CA	1:A:50:PRO:C	1:A:51:LEU:N	7	0.61
(1,78) $(1,332)$	1:A:61:GLN:C	1:A:62:CYS:N	1:A:62:CYS:CA	1:A:62:CYS:C	3	0.61
(1,552)	1.A.01.GLN.C	1.A.02.O I S.N	1.A.02.O I S.OA	1.A.02.015.0		0.01



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



Key	$rac{d\ from\ previous\ po}{\mathbf{Atom-1}}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation ( o )
(1,381)	1:A:91:ARG:N	1:A:91:ARG:CA	1:A:91:ARG:C	1:A:92:SER:N	7	0.48
(1,364)	1:A:81:THR:C	1:A:82:SER:N	1:A:82:SER:CA	1:A:82:SER:C	9	0.48
(1,328)	1:A:59:ASP:C	1:A:60:SER:N	1:A:60:SER:CA	1:A:60:SER:C	2	0.48
(1,324)	1:A:57:LYS:C	1:A:58:PHE:N	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:C	4	0.48
(1,287)	1:A:32:GLU:C	1:A:33:TYR:N	1:A:33:TYR:CA	1:A:33:TYR:C	17	0.48
/	1:A:138:LEU:N	1:A:138:LEU:CA	1:A:138:LEU:C	1:A:139:HIS:N	8	0.48
(1,146)	1:A:91:ARG:N	1:A:91:ARG:CA	1:A:91:ARG:C	1:A:92:SER:N	7	0.48
(1,129)	1:A:81:THR:C	1:A:82:SER:N	1:A:82:SER:CA	1:A:82:SER:C	9	0.48
(1,341)	1:A:67:PHE:C	1:A:68:THR:N	1:A:68:THR:CA	1:A:68:THR:C	4	0.47
(1,34)	1:A:19:VAL:N	1:A:19:VAL:CA	1:A:19:VAL:C	1:A:20:THR:N	14	0.47
(1,269)	1:A:19:VAL:N	1:A:19:VAL:CA	1:A:19:VAL:C	1:A:20:THR:N	14	0.47
(1,106)	1:A:67:PHE:C	1:A:68:THR:N	1:A:68:THR:CA	1:A:68:THR:C	4	0.47
(1,78)	1:A:50:PRO:N	1:A:50:PRO:CA	1:A:50:PRO:C	1:A:51:LEU:N	19	0.46
(1,345)	1:A:70:PRO:N	1:A:70:PRO:CA	1:A:70:PRO:C	1:A:71:ILE:N	12	0.46
(1,313)	1:A:50:PRO:N	1:A:50:PRO:CA	1:A:50:PRO:C	1:A:51:LEU:N	19	0.46
(1,110)	1:A:70:PRO:N	1:A:70:PRO:CA	1:A:70:PRO:C	1:A:71:ILE:N	12	0.46
(1,56)	1:A:36:HIS:C	1:A:37:LYS:N	1:A:37:LYS:CA	1:A:37:LYS:C	4	0.45
(1,291)	1:A:36:HIS:C	1:A:37:LYS:N	1:A:37:LYS:CA	1:A:37:LYS:C	4	0.45
` '	1:A:135:GLU:C	1:A:136:SER:N	1:A:136:SER:CA	1:A:136:SER:C	4	0.44
/	1:A:135:GLU:C	1:A:136:SER:N	1:A:136:SER:CA	1:A:136:SER:C	4	0.44
(1,83)	1:A:53:THR:C	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	20	0.42
(1,65)	1:A:42:TYR:N	1:A:42:TYR:CA	1:A:42:TYR:C	1:A:43:VAL:N	11	0.42
(1,347)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:GLU:N	10	0.42
(1,318)	1:A:53:THR:C	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	20	0.42
(1,300)	1:A:42:TYR:N	1:A:42:TYR:CA	1:A:42:TYR:C	1:A:43:VAL:N	11	0.42
(1,112)	1:A:72:GLU:N	1:A:72:GLU:CA	1:A:72:GLU:C	1:A:73:GLU:N	10	0.42
(1,61)	1:A:39:GLU:N	1:A:39:GLU:CA	1:A:39:GLU:C	1:A:40:GLY:N	8	0.4
(1,396)	1:A:98:HIS:C	1:A:99:LEU:N	1:A:99:LEU:CA	1:A:99:LEU:C	9	0.4
(1,3)	1:A:3:TYR:C	1:A:4:ASN:N	1:A:4:ASN:CA	1:A:4:ASN:C	10	0.4
(1,296)	1:A:39:GLU:N	1:A:39:GLU:CA	1:A:39:GLU:C	1:A:40:GLY:N	8	0.4
(1,238)	1:A:3:TYR:C	1:A:4:ASN:N	1:A:4:ASN:CA	1:A:4:ASN:C	10	0.4
(1,161)	1:A:98:HIS:C	1:A:99:LEU:N	1:A:99:LEU:CA	1:A:99:LEU:C	9	0.4
(1,469)	1:A:140:LEU:C	1:A:141:PHE:N	1:A:141:PHE:CA	1:A:141:PHE:C	16	0.39
(1,419)	1:A:113:ARG:N	1:A:113:ARG:CA	1:A:113:ARG:C	1:A:114:TYR:N	15	0.39
(1,234)	1:A:140:LEU:C	1:A:141:PHE:N	1:A:141:PHE:CA	1:A:141:PHE:C	16	0.39
	1:A:113:ARG:N	1:A:113:ARG:CA	1:A:113:ARG:C	1:A:114:TYR:N	15	0.39
(1,89)	1:A:57:LYS:C	1:A:58:PHE:N	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:C	2	0.38
(1,324)	1:A:57:LYS:C	1:A:58:PHE:N	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:C	2	0.38
(1,52)	1:A:32:GLU:C	1:A:33:TYR:N	1:A:33:TYR:CA	1:A:33:TYR:C	6	0.36
(1,457)	1:A:134:TYR:C	1:A:135:GLU:N	1:A:135:GLU:CA	1:A:135:GLU:C	5	0.36
(1,410)	1:A:107:PRO:N	1:A:107:PRO:CA	1:A:107:PRO:C	1:A:108:GLY:N	17	0.36
(1,287)	1:A:32:GLU:C	1:A:33:TYR:N	1:A:33:TYR:CA	1:A:33:TYR:C	6	0.36
(1,222)	1:A:134:TYR:C	1:A:135:GLU:N	1:A:135:GLU:CA	1:A:135:GLU:C	5	0.36
(1,175)	1:A:107:PRO:N	1:A:107:PRO:CA	1:A:107:PRO:C	1:A:108:GLY:N	17	0.36
(1,90)	1:A:58:PHE:N	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:C	1:A:59:ASP:N	14	0.35
(1,325)	1:A:58:PHE:N	1:A:58:PHE:CA	1:A:58:PHE:C	1:A:59:ASP:N	14	0.35
(1,79)	1:A:51:LEU:C	1:A:52:PHE:N	1:A:52:PHE:CA	1:A:52:PHE:C	2	0.34
(1,406)	1:A:104:ASN:C	1:A:105:ASP:N	1:A:105:ASP:CA	1:A:105:ASP:C	14	0.34
			1 A 70 OLLI O	1. A.77.OTTINI	C	0.34
(1,355)	1:A:76:GLU:N	1:A:76:GLU:CA	1:A:76:GLU:C	1:A:77:GLU:N	6	0.34
(1,355) (1,314)	1:A:76:GLU:N 1:A:51:LEU:C	1:A:76:GLU:CA 1:A:52:PHE:N	1:A:76:GLU:C 1:A:52:PHE:CA	1:A:77:GLU:N 1:A:52:PHE:C	2	0.34



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



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



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

