

wwPDB NMR Structure Validation Summary Report (i)

Feb 25, 2020 – 04:41 PM CST

PDB ID : 2LOY

Title : Refined Miminal Constraint Solution NMR Structure of Translationally-contro

lled tumor protein (TCTP) from Caenorhabditis elegans, Northeast Structural

Genomics Consortium Target WR73

Authors: Aramini, J.M.; Rossi, P.; Cort, J.R.; Lee, H.; Janjua, H.; Maglaqui, M.;

Cooper, B.; Xiao, R.; Acton, T.B.; Everett, J.K.; Montelione, G.T.; Northeast

Structural Genomics Consortium (NESG)

Deposited on : 2012-01-27

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

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

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

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

Cyrange : Kirchner and Güntert (2011)

NmrClust : Kelley et al. (1996)

MolProbity: 4.02b-467

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

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

PANAV : Wang et al. (2010)

ShiftChecker : 2.6.dev1

BMRB Restraints Analalysis : v1.2

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

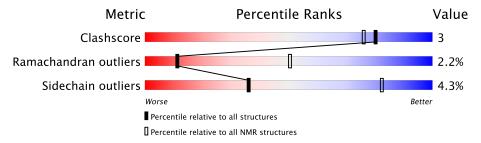
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : 2.6.dev1

1 Overall quality at a glance (i)

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

The overall completeness of chemical shifts assignment is 43%.

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



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

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

Mol	Chain	Length	Quality of chain			
1	A	189	82%	•	11%	•



2 Ensemble composition and analysis (i)

This entry contains 20 models. Model 5 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 as representative, based on the following criterion: *lowest energy*.

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

Well-defined (core) protein residues				
Well-defined core Residue range (total) Backbone RMSD (Å) Medoid mode				
1	A:1-A:42, A:64-A:183 (162)	0.95	5	

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 4 clusters and 2 single-model clusters were found.

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



3 Entry composition (i)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 2902 atoms, of which 1445 are hydrogens and 0 are deuteriums.

• Molecule 1 is a protein called Translationally-controlled tumor protein homolog.

Mol	Chain	Residues	Atoms				Trace		
1	Λ	183	Total	С	Н	N	О	S	0
1	А	100	2902	922	1445	239	287	9	U

There are 8 discrepancies between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	182	LEU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q93573
A	183	GLU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q93573
A	184	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q93573
A	185	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q93573
A	186	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q93573
A	187	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q93573
A	188	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q93573
A	189	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q93573

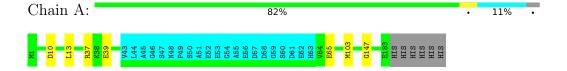


4 Residue-property plots (i)

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.

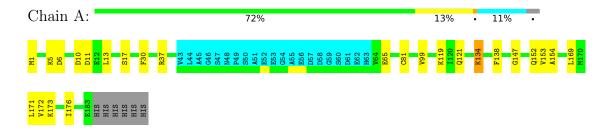
• Molecule 1: Translationally-controlled tumor protein homolog



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

The representative model is number 5. Colouring as in section 4.1 above.

• Molecule 1: Translationally-controlled tumor protein homolog





5 Refinement protocol and experimental data overview (i)

The models were refined using the following method: simulated annealing.

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

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

Software name	Classification	Version
CNS	refinement	1.3
CNS	structure solution	1.3
CNS	geometry optimization	1.3
CYANA	structure solution	3.0

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

Chemical shift file(s)	2loy_nmr.cif
Number of chemical shift lists	1
Total number of shifts	1267
Number of shifts mapped to atoms	996
Number of unparsed shifts	147
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	124
Assignment completeness (well-defined parts)	43%

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



6 Model quality (i)

6.1 Standard geometry (i)

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

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

6.2 Too-close contacts (i)

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	1312	1329	1326	8±2
All	All	26240	26580	26520	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 3.

5 of 101 unique clashes are listed below, sorted by their clash magnitude.

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	$Distance(\mathring{A})$	${f Models}$	
Atom-1	Atom-2	Clash(A)	Distance(A)	Worst	Total
1:A:103:MET:SD	1:A:113:VAL:HG12	0.65	2.31	20	3
1:A:4:TYR:HB3	1:A:20:MET:SD	0.62	2.35	18	1
1:A:37:ARG:HB3	1:A:65:GLU:HB2	0.60	1.73	9	3
1:A:77:VAL:HG11	1:A:145:ALA:HB2	0.59	1.74	6	3
1:A:68:ILE:HD11	1:A:70:ILE:HD12	0.58	1.73	17	2

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	160/189 (85%)	144±3 (90±2%)	12±3 (8±2%)	4±1 (2±1%)	11	50
All	All	3200/3780 (85%)	2881 (90%)	248 (8%)	71 (2%)	11	50

5 of 23 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	13	LEU	13
1	A	147	GLY	12
1	A	39	GLU	8
1	A	16	ASP	5
1	A	134	LYS	5

6.3.2 Protein sidechains (i)

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles		
1	A	143/164 (87%)	137±2 (96±2%)	6±2 (4±2%)	36	82	
All	All	2860/3280 (87%)	2738 (96%)	122 (4%)	36	82	

5 of 51 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	143	ARG	6
1	A	178	GLU	6
1	A	20	MET	6
1	A	152	GLN	6
1	A	31	LYS	5

6.3.3 RNA (i)

There are no RNA molecules in this entry.



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

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

6.5 Carbohydrates (i)

There are no carbohydrates in this entry.

6.6 Ligand geometry (i)

There are no ligands in this entry.

6.7 Other polymers (i)

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues (i)

There are no chain breaks in this entry.



7 Chemical shift validation (i)

The completeness of assignment taking into account all chemical shift lists is 43% for the well-defined parts and 44% for the entire structure.

7.1 Chemical shift list 1

File name: 2loy nmr.cif

Chemical shift list name: nef_chemical_shift_list_2loy.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	1267
Number of shifts mapped to atoms	996
Number of unparsed shifts	147
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	124
Number of shift outliers (ShiftChecker)	1

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

• Chemical shift has been reported more than once. First 5 (of 147) occurrences are reported below.

Shift ID	Chain	Res	Type	Atom	Shift Data			
	Chain	rtes	Type	Type Atom		Uncertainty	Ambiguity	
6	A	2	LEU	HD1%	0.691	0.000	1	
7	A	2	LEU	HD1%	0.691	0.000	1	
9	A	2	LEU	HD2%	0.566	0.000	1	
10	A	2	LEU	HD2%	0.566	0.000	1	
19	A	3	ILE	HD1%	0.767	0.000	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 124) occurrences are reported below.

	Chain Ros Typo		Type Atom		Shift Data Value Uncertainty Ambiguit			
	Chain	nes	Type	Atom	Value	Uncertainty	Ambiguity	
ĺ	A	88	PHE	HBy	3.097	0.0	2	
	A	73	ASN	HD2x	7.119	0.0	2	



Continued from previous page...

Chain	Pag	Ттто	Atom		Shift Dat	
Chain	nes	Туре	Atom	Value	Uncertainty	Ambiguity
A	95	PHE	HBy	2.538	0.0	2
A	44	LEU	HD1%	0.923	0.0	1
A	106	ASN	HD2x	6.967	0.0	2

7.1.2 Chemical shift referencing (i)

The following table shows the suggested chemical shift referencing corrections.

Nucleus	# values	Correction \pm precision, ppm	Suggested action
$^{13}\mathrm{C}_{\alpha}$	182	-0.62 ± 0.12	Should be applied
$^{13}C_{\beta}$	171	0.52 ± 0.09	Should be applied
¹³ C′	180	-0.48 ± 0.10	None needed (< 0.5 ppm)
^{15}N	178	-0.15 ± 0.35	None needed (< 0.5 ppm)

7.1.3 Completeness of resonance assignments (i)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the well-defined regions of the structure. The overall completeness is 43%, i.e. 894 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 2064. 27 out of 27 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	$^{1}\mathrm{H}$	$^{13}\mathbf{C}$	$^{15}{ m N}$
Backbone	637/806 (79%)	158/322 (49%)	321/324 (99%)	158/160 (99%)
Sidechain	229/1101 (21%)	0/640 (0%)	220/415 (53%)	9/46 (20%)
Aromatic	28/157 (18%)	27/83 (33%)	0/67 (0%)	1/7 (14%)
Overall	894/2064 (43%)	185/1045 (18%)	541/806 (67%)	168/213 (79%)

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	143	ARG	Н	11.73	11.29 - 5.19	5.7

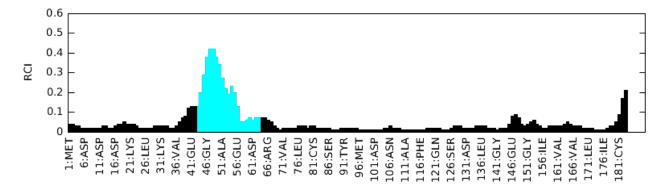
7.1.5 Random Coil Index (RCI) plots (i)

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

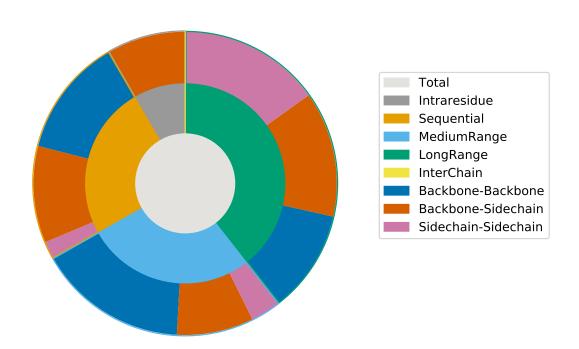
8.1 Distance restraints summary

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

Doctors into tom o	D D1(II4)	D C2(TT4)	C C3(TT4)	Total		
Restraints type	$\mathbf{B}\text{-}\mathbf{B}^1(\mathbf{H}^4)$	$\mathbf{B}\text{-}\mathbf{S}^2(\mathbf{H}^4)$	$S-S^3(H^4)$	$Total(H^4)$	RR^5	% 6
Intraresidue ($ i-j =0$)	0(0)	95(0)	0(0)	95(0)	0.5	8.4
Sequential (i-j =1)	144(0)	117(0)	21(0)	282(0)	1.6	24.8
Medium range ($ i-j >1$ and $ i-j <5$)	181(62)	93(0)	37(0)	311(62)	1.7	27.4
Long range (i-j ≥5)	124(64)	152(0)	172(0)	448(64)	2.5	39.4
Inter chain	0(0)	0(0)	0(0)	0(0)	0.0	0.0
Total	449(126)	457(0)	230(0)	1136(126)	6.3	100.0

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

8.1.1 Pie chart: Distance restraints summary





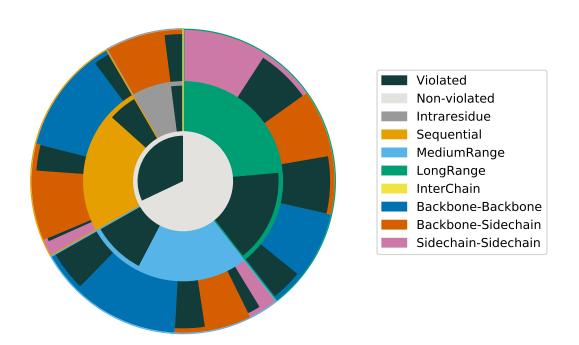
8.2 Distance violations summary

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

Doctroints true	$B-B^{1}(\%^{4})$	$B-S^2(\%^4)$	$S-S^3(\%^4)$	Total		
Restraints type	D-D (%)	D-3 (%)	S-S'(%)	$Total(\%^4)$	RR^5	$\%^6$
Intraresidue ($ i-j =0$)	0(0.0)	23(24.2)	0(0.0)	23(24.2)	0.1	6.3
Sequential (i-j =1)	21(14.6)	32(27.4)	4(19.0)	57(20.2)	0.3	15.7
Medium range ($ i-j >1$ and $ i-j <5$)	51(28.2)	37(39.8)	16(43.2)	104(33.4)	0.6	28.6
Long range (i-j ≥5)	41(33.1)	71(46.7)	68(39.5)	180(40.2)	1.0	49.5
Inter chain	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0.0	0.0
Total	113(25.2)	163(35.7)	88(38.3)	364(32.0)	2.0	100.0

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

8.2.1 Pie-chart: Distance violations summary





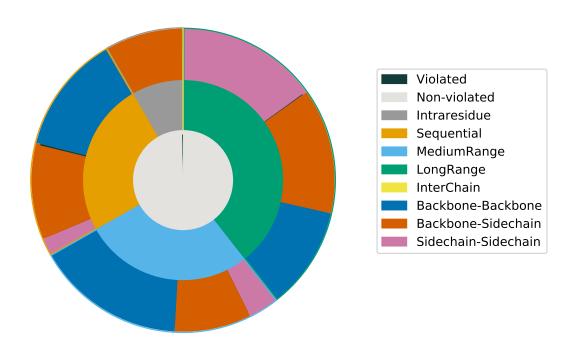
8.3 Consistent distance violations summary

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

Dogtrojeta temo	$B-B^{1}(\%^{4})$	$B-S^2(\%^4)$	$S-S^3(\%^4)$	To	otal	
Restraints type	D-D (%)	D-3 (%)	S-S'(%)	$Total(\%^4)$	RR^5	$\%^6$
Intraresidue (i-j =0)	0(0.0)	1(1.1)	0(0.0)	1(1.1)	0.0	25.0
Sequential (i-j =1)	0(0.0)	2(1.7)	0(0.0)	2(0.7)	0.0	50.0
Medium range ($ i-j >1$ and $ i-j <5$)	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0.0	0.0
Long range (i-j ≥5)	0(0.0)	0(0.0)	1(0.6)	1(0.2)	0.0	25.0
Inter chain	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0.0	0.0
Total	0(0.0)	3(0.7)	1(0.4)	4(0.4)	0.0	100.0

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

8.3.1 Pie-chart: Consistent distance violations





8.4 Residual distance violations

Violation are counted in different bin sizes and listed below

Range (Å)	No. of violated restraints per model	Max violation (Å)
0-0.2	61.7	0.2
0.2-0.5	9.1	0.5
0.5-1.0	11.0	1.0
1.0-2.0	10.4	1.99
2.0-5.0	4.5	3.76
5.0<	None	None

8.5 Distance violations in ensemble

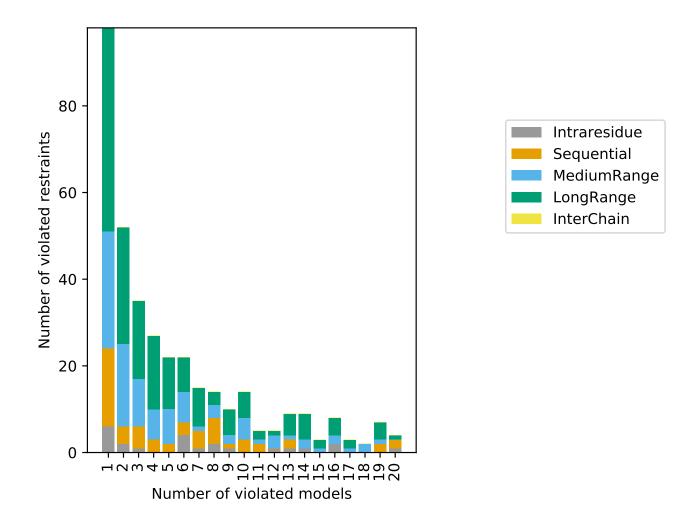
The restraints are grouped based on the number of violated models and listed here.

I		f violat			nts	No. of violated models
IR^1	SQ^2	MR^3	$ LR^4 $	IC^5	Total	No. of violated models
6	18	27	47	0	98	1
2	4	19	27	0	52	2
1	5	11	18	0	35	3
0	3	7	17	0	27	4
0	2	8	12	0	22	5
4	3	7	8	0	22	6
1	4	1	9	0	15	7
2	6	3	3	0	14	8
1	1	2	6	0	10	9
0	3	5	6	0	14	10
0	2	1	2	0	5	11
1	0	3	1	0	5	12
1	2	1	5	0	9	13
1	0	2	6	0	9	14
0	0	1	2	0	3	15
2	0	2	4	0	8	16
0	0	1	2	0	3	17
0	0	2	0	0	2	18
0	2	1	4	0	7	19
1	2	0	1	0	4	20

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



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



72 intraresidue restraints, 225 sequential restraints, 207 medium range restraints,268 long range restraints and 0 inter chain restraints are not violated. There are totally 772 restrains not violated in any of the models

8.6 Violations in each model

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

Model ID		N	o. of v	iolati	Mean (Å)	Max (Å)		
Model 1D	IR^1	SQ^2	$ m MR^3$	LR^4	IC^5	Total	Mean (A)	Max (A)
1	7	19	28	46	0	100	0.49	2.99
2	10	17	35	54	0	116	0.39	2.68
3	12	16	29	43	0	100	0.48	2.86
4	6	25	26	46	0	103	0.36	3.08
5	8	12	19	43	0	82	0.37	2.66



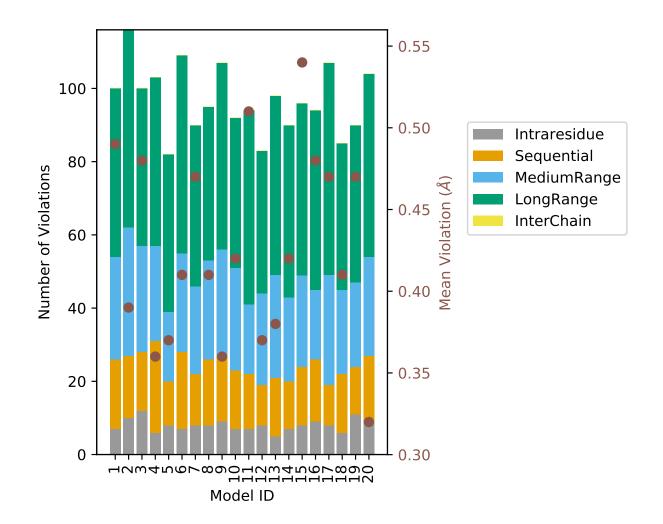
Continued from previous page...

Model ID		N	o. of v	violati	ons		Mean (Å)	Max (Å)
Wiodei 1D	IR^1	SQ^2	MR^3	LR^4	IC^5	Total	Mean (A)	Max (A)
6	7	21	27	54	0	109	0.41	2.8
7	8	14	24	44	0	90	0.47	2.67
8	8	18	27	42	0	95	0.41	3.76
9	9	18	29	51	0	107	0.36	3.3
10	7	16	28	41	0	92	0.42	2.99
11	7	15	19	53	0	94	0.51	3.3
12	8	11	25	39	0	83	0.37	2.92
13	5	16	28	49	0	98	0.38	2.98
14	7	13	23	47	0	90	0.42	3.15
15	8	16	25	47	0	96	0.54	3.5
16	9	17	19	49	0	94	0.48	3.14
17	8	11	30	58	0	107	0.47	3.46
18	6	16	23	40	0	85	0.41	2.53
19	11	13	23	43	0	90	0.47	2.87
20	9	18	27	50	0	104	0.32	2.36

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



8.6.1 Bar graph: Violations in each model

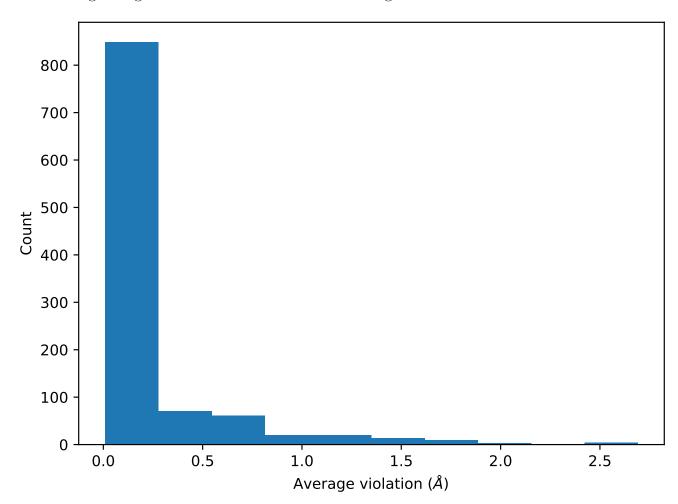




8.7 Most violated distance restraints

8.7.1 Histogram : Distribution of mean distance 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)
(1,561)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD11	20	1.9	3.5
(1,561)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD12	20	1.9	3.5
(1,561)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD13	20	1.9	3.5
(1,44)	1:A:82:TYR:H	1:A:82:TYR:HE1	20	0.86	1.33
(1,436)	1:A:82:TYR:HD1	1:A:83:GLU:H	20	1.03	1.29
(1,350)	1:A:116:PHE:HE1	1:A:117:LYS:H	20	1.44	1.75



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,923)	1:A:30:PHE:HB2	1:A:169:LEU:H	19	0.58	1.28
(1,850)	1:A:112:ASP:H	1:A:113:VAL:HG21	19	0.05	0.1
(1,850)	1:A:112:ASP:H	1:A:113:VAL:HG22	19	0.05	0.1
(1,850)	1:A:112:ASP:H	1:A:113:VAL:HG23	19	0.05	0.1
(1,601)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:171:LEU:HD11	19	1.88	2.99
(1,601)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:171:LEU:HD12	19	1.88	2.99
(1,601)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:171:LEU:HD13	19	1.88	2.99
(1,572)	1:A:100:ILE:HD11	1:A:116:PHE:HE1	19	1.8	3.38
(1,572)	1:A:100:ILE:HD12	1:A:116:PHE:HE1	19	1.8	3.38
(1,572)	1:A:100:ILE:HD13	1:A:116:PHE:HE1	19	1.8	3.38
(1,498)	1:A:27:VAL:HG11	1:A:28:TYR:HD1	19	0.63	1.01
(1,498)	1:A:27:VAL:HG12	1:A:28:TYR:HD1	19	0.63	1.01
(1,498)	1:A:27:VAL:HG13	1:A:28:TYR:HD1	19	0.63	1.01
(1,322)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:171:LEU:H	19	1.68	2.27
(1,1129)	1:A:122:GLY:O	1:A:126:SER:H	19	0.04	0.07
(1,559)	1:A:92:ILE:HD11	1:A:95:PHE:HE1	18	1.12	2.33
(1,559)	1:A:92:ILE:HD12	1:A:95:PHE:HE1	18	1.12	2.33
(1,559)	1:A:92:ILE:HD13	1:A:95:PHE:HE1	18	1.12	2.33
(1,391)	1:A:23:VAL:HG11	1:A:26:LEU:H	18	0.09	0.16
(1,391)	1:A:23:VAL:HG12	1:A:26:LEU:H	18	0.09	0.16
(1,391)	1:A:23:VAL:HG13	1:A:26:LEU:H	18	0.09	0.16
(1,874)	1:A:64:VAL:HG21	1:A:66:ARG:H	17	0.12	0.31
(1,874)	1:A:64:VAL:HG22	1:A:66:ARG:H	17	0.12	0.31
(1,874)	1:A:64:VAL:HG23	1:A:66:ARG:H	17	0.12	0.31
(1,525)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG11	17	1.32	1.97
(1,525)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG12	17	1.32	1.97
(1,525)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG13	17	1.32	1.97
(1,523)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG21	17	2.69	3.46
(1,523)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG22	17	2.69	3.46
(1,523)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG23	17	2.69	3.46
(1,950)	1:A:160:ASP:H	1:A:166:VAL:HG11	16	1.4	2.18
(1,950)	1:A:160:ASP:H	1:A:166:VAL:HG12	16	1.4	2.18
(1,950)	1:A:160:ASP:H	1:A:166:VAL:HG13	16	1.4	2.18
(1,76)	1:A:4:TYR:HD1	1:A:14:SER:H	16	1.73	2.68
(1,58)	1:A:8:PHE:H	1:A:8:PHE:HE1	16	0.37	0.77
(1,4)	1:A:28:TYR:H	1:A:28:TYR:HD1	16	0.47	0.66
(1,1099)	1:A:96:MET:O	1:A:100:ILE:H	16	0.03	0.05
(1,1093)	1:A:93:LYS:O	1:A:97:LYS:H	16	0.03	0.06
(1,1045)	1:A:155:ILE:H	1:A:170:MET:O	16	0.08	0.14
(1,1015)	1:A:4:TYR:O	1:A:14:SER:H	16	0.03	0.07
(1,829)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:128:LEU:H	15	0.06	0.12
(1,829)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:128:LEU:H	15	0.06	0.12



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,829)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:128:LEU:H	15	0.06	0.12
(1,537)	1:A:99:VAL:HG21	1:A:116:PHE:HE1	15	0.34	1.58
(1,537)	1:A:99:VAL:HG22	1:A:116:PHE:HE1	15	0.34	1.58
(1,537)	1:A:99:VAL:HG23	1:A:116:PHE:HE1	15	0.34	1.58
(1,1031)	1:A:79:MET:O	1:A:138:PHE:H	15	0.06	0.12
(1,983)	1:A:100:ILE:HD11	1:A:113:VAL:HG11	14	0.07	0.12
(1,983)	1:A:100:ILE:HD11	1:A:113:VAL:HG12	14	0.07	0.12
(1,983)	1:A:100:ILE:HD11	1:A:113:VAL:HG13	14	0.07	0.12
(1,983)	1:A:100:ILE:HD12	1:A:113:VAL:HG11	14	0.07	0.12
(1,983)	1:A:100:ILE:HD12	1:A:113:VAL:HG12	14	0.07	0.12
(1,983)	1:A:100:ILE:HD12	1:A:113:VAL:HG13	14	0.07	0.12
(1,983)	1:A:100:ILE:HD13	1:A:113:VAL:HG11	14	0.07	0.12
(1,983)	1:A:100:ILE:HD13	1:A:113:VAL:HG12	14	0.07	0.12
(1,983)	1:A:100:ILE:HD13	1:A:113:VAL:HG13	14	0.07	0.12
(1,977)	1:A:113:VAL:HG11	1:A:100:ILE:HD11	14	0.07	0.12
(1,977)	1:A:113:VAL:HG11	1:A:100:ILE:HD12	14	0.07	0.12
(1,977)	1:A:113:VAL:HG11	1:A:100:ILE:HD13	14	0.07	0.12
(1,977)	1:A:113:VAL:HG12	1:A:100:ILE:HD11	14	0.07	0.12
(1,977)	1:A:113:VAL:HG12	1:A:100:ILE:HD12	14	0.07	0.12
(1,977)	1:A:113:VAL:HG12	1:A:100:ILE:HD13	14	0.07	0.12
(1,977)	1:A:113:VAL:HG13	1:A:100:ILE:HD11	14	0.07	0.12
(1,977)	1:A:113:VAL:HG13	1:A:100:ILE:HD12	14	0.07	0.12
(1,977)	1:A:113:VAL:HG13	1:A:100:ILE:HD13	14	0.07	0.12
(1,860)	1:A:139:PHE:H	1:A:153:VAL:HG21	14	0.07	0.14
(1,860)	1:A:139:PHE:H	1:A:153:VAL:HG22	14	0.07	0.14
(1,860)	1:A:139:PHE:H	1:A:153:VAL:HG23	14	0.07	0.14
(1,775)	1:A:71:VAL:HG11	1:A:77:VAL:H	14	0.03	0.1
(1,775)	1:A:71:VAL:HG12	1:A:77:VAL:H	14	0.03	0.1
(1,775)	1:A:71:VAL:HG13	1:A:77:VAL:H	14	0.03	0.1
(1,570)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:120:ILE:HD11	14	0.67	1.25
(1,570)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:120:ILE:HD12	14	0.67	1.25
(1,570)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:120:ILE:HD13	14	0.67	1.25
(1,538)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:99:VAL:HG21	14	0.71	1.2
(1,538)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:99:VAL:HG22	14	0.71	1.2
(1,538)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:99:VAL:HG23	14	0.71	1.2
(1,165)	1:A:8:PHE:HE1	1:A:152:GLN:H	14	1.04	2.94
(1,160)	1:A:44:LEU:H	1:A:44:LEU:HD11	14	0.06	0.16
(1,160)	1:A:44:LEU:H	1:A:44:LEU:HD12	14	0.06	0.16
(1,160)	1:A:44:LEU:H	1:A:44:LEU:HD13	14	0.06	0.16
(1,109)	1:A:15:SER:H	1:A:18:PHE:HE1	14	1.75	3.76
(1,942)	1:A:135:ASN:HD21	1:A:136:LEU:H	13	0.39	0.58
(1,936)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:125:VAL:HG11	13	0.67	1.25



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,936)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:125:VAL:HG12	13	0.67	1.25
(1,936)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:125:VAL:HG13	13	0.67	1.25
(1,936)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:125:VAL:HG11	13	0.67	1.25
(1,936)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:125:VAL:HG12	13	0.67	1.25
(1,936)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:125:VAL:HG13	13	0.67	1.25
(1,936)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:125:VAL:HG11	13	0.67	1.25
(1,936)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:125:VAL:HG12	13	0.67	1.25
(1,936)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:125:VAL:HG13	13	0.67	1.25
(1,920)	1:A:28:TYR:HB2	1:A:171:LEU:H	13	0.51	0.8
(1,912)	1:A:13:LEU:H	1:A:13:LEU:HD11	13	0.29	0.7
(1,912)	1:A:13:LEU:H	1:A:13:LEU:HD12	13	0.29	0.7
(1,912)	1:A:13:LEU:H	1:A:13:LEU:HD13	13	0.29	0.7
(1,599)	1:A:91:TYR:HD1	1:A:153:VAL:HG11	13	0.66	1.19
(1,599)	1:A:91:TYR:HD1	1:A:153:VAL:HG12	13	0.66	1.19
(1,599)	1:A:91:TYR:HD1	1:A:153:VAL:HG13	13	0.66	1.19
(1,509)	1:A:71:VAL:HG11	1:A:139:PHE:HE1	13	0.69	1.04
(1,509)	1:A:71:VAL:HG12	1:A:139:PHE:HE1	13	0.69	1.04
(1,509)	1:A:71:VAL:HG13	1:A:139:PHE:HE1	13	0.69	1.04
(1,449)	1:A:4:TYR:HD1	1:A:15:SER:H	13	1.56	2.72
(1,415)	1:A:131:ASP:H	1:A:134:LYS:H	13	0.07	0.21
(1,144)	1:A:78:GLU:H	1:A:139:PHE:HE1	13	2.54	2.71
(1,455)	1:A:8:PHE:H	1:A:11:ASP:H	12	0.22	0.32
(1,43)	1:A:82:TYR:H	1:A:82:TYR:HD1	12	0.1	0.34
(1,1087)	1:A:90:ALA:O	1:A:94:LYS:H	12	0.04	0.1
(1,1079)	1:A:86:SER:O	1:A:90:ALA:H	12	0.03	0.05
(1,1013)	1:A:2:LEU:H	1:A:16:ASP:O	12	0.04	0.13
(1,951)	1:A:161:VAL:H	1:A:166:VAL:HG11	11	0.43	2.27
(1,951)	1:A:161:VAL:H	1:A:166:VAL:HG12	11	0.43	2.27
(1,951)	1:A:161:VAL:H	1:A:166:VAL:HG13	11	0.43	2.27
(1,949)	1:A:159:ARG:H	1:A:166:VAL:HG11	11	1.32	1.85
(1,949)	1:A:159:ARG:H	1:A:166:VAL:HG12	11	1.32	1.85
(1,949)	1:A:159:ARG:H	1:A:166:VAL:HG13	11	1.32	1.85
(1,929)	1:A:106:ASN:HD21	1:A:107:ASN:H	11	0.19	0.41
(1,265)	1:A:70:ILE:H	1:A:72:LEU:HD11	11	0.06	0.12
(1,265)	1:A:70:ILE:H	1:A:72:LEU:HD12	11	0.06	0.12
(1,265)	1:A:70:ILE:H	1:A:72:LEU:HD13	11	0.06	0.12
(1,186)	1:A:158:TYR:HD1	1:A:159:ARG:H	11	0.55	0.83
(1,940)	1:A:125:VAL:HG11	1:A:128:LEU:HD11	10	0.77	1.3
(1,940)	1:A:125:VAL:HG11	1:A:128:LEU:HD12	10	0.77	1.3
(1,940)	1:A:125:VAL:HG11	1:A:128:LEU:HD13	10	0.77	1.3
(1,940)	1:A:125:VAL:HG12	1:A:128:LEU:HD11	10	0.77	1.3
(1,040)	1.71.120. VALD.11012	1.71.120.111011	10	0.11	1.0



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,940)	1:A:125:VAL:HG12	1:A:128:LEU:HD13	10	0.77	1.3
(1,940)	1:A:125:VAL:HG13	1:A:128:LEU:HD11	10	0.77	1.3
(1,940)	1:A:125:VAL:HG13	1:A:128:LEU:HD12	10	0.77	1.3
(1,940)	1:A:125:VAL:HG13	1:A:128:LEU:HD13	10	0.77	1.3
(1,93)	1:A:39:GLU:H	1:A:40:GLY:H	10	0.11	0.17
(1,922)	1:A:30:PHE:HB2	1:A:70:ILE:HD11	10	0.39	0.72
(1,922)	1:A:30:PHE:HB2	1:A:70:ILE:HD12	10	0.39	0.72
(1,922)	1:A:30:PHE:HB2	1:A:70:ILE:HD13	10	0.39	0.72
(1,918)	1:A:18:PHE:HE1	1:A:73:ASN:HD21	10	1.28	2.48
(1,888)	1:A:123:TRP:H	1:A:124:VAL:HG21	10	0.04	0.09
(1,888)	1:A:123:TRP:H	1:A:124:VAL:HG22	10	0.04	0.09
(1,888)	1:A:123:TRP:H	1:A:124:VAL:HG23	10	0.04	0.09
(1,862)	1:A:62:GLU:H	1:A:64:VAL:HG21	10	0.08	0.15
(1,862)	1:A:62:GLU:H	1:A:64:VAL:HG22	10	0.08	0.15
(1,862)	1:A:62:GLU:H	1:A:64:VAL:HG23	10	0.08	0.15
(1,751)	1:A:36:VAL:HG11	1:A:44:LEU:HD21	10	0.1	0.25
(1,751)	1:A:36:VAL:HG11	1:A:44:LEU:HD22	10	0.1	0.25
(1,751)	1:A:36:VAL:HG11	1:A:44:LEU:HD23	10	0.1	0.25
(1,751)	1:A:36:VAL:HG12	1:A:44:LEU:HD21	10	0.1	0.25
(1,751)	1:A:36:VAL:HG12	1:A:44:LEU:HD22	10	0.1	0.25
(1,751)	1:A:36:VAL:HG12	1:A:44:LEU:HD23	10	0.1	0.25
(1,751)	1:A:36:VAL:HG13	1:A:44:LEU:HD21	10	0.1	0.25
(1,751)	1:A:36:VAL:HG13	1:A:44:LEU:HD22	10	0.1	0.25
(1,751)	1:A:36:VAL:HG13	1:A:44:LEU:HD23	10	0.1	0.25
(1,502)	1:A:91:TYR:HE1	1:A:153:VAL:HG21	10	0.58	1.21
(1,502)	1:A:91:TYR:HE1	1:A:153:VAL:HG22	10	0.58	1.21
(1,502)	1:A:91:TYR:HE1	1:A:153:VAL:HG23	10	0.58	1.21
(1,341)	1:A:95:PHE:HD1	1:A:98:ASN:H	10	0.07	0.12
(1,341)	1:A:95:PHE:HD2	1:A:98:ASN:H	10	0.07	0.12
(1,222)	1:A:109:ASP:H	1:A:113:VAL:HG21	10	0.05	0.12
(1,222)	1:A:109:ASP:H	1:A:113:VAL:HG22	10	0.05	0.12
(1,222)	1:A:109:ASP:H	1:A:113:VAL:HG23	10	0.05	0.12
(1,148)	1:A:71:VAL:HG11	1:A:78:GLU:H	10	0.06	0.12
(1,148)	1:A:71:VAL:HG12	1:A:78:GLU:H	10	0.06	0.12
(1,148)	1:A:71:VAL:HG13	1:A:78:GLU:H	10	0.06	0.12
(1,146)	1:A:78:GLU:H	1:A:139:PHE:HZ	10	0.04	0.07
(1,135)	1:A:23:VAL:H	1:A:26:LEU:H	10	0.03	0.07
(1,105)	1:A:127:LEU:HD21	1:A:128:LEU:H	10	0.05	0.12
(1,105)	1:A:127:LEU:HD22	1:A:128:LEU:H	10	0.05	0.12
(1,105)	1:A:127:LEU:HD23	1:A:128:LEU:H	10	0.05	0.12
(1,932)	1:A:121:GLN:HE21	1:A:125:VAL:HG11	9	0.38	0.88
(1,932)	1:A:121:GLN:HE21	1:A:125:VAL:HG12	9	0.38	0.88



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,932)	1:A:121:GLN:HE21	1:A:125:VAL:HG13	9	0.38	0.88
(1,932)	1:A:121:GLN:HE22	1:A:125:VAL:HG11	9	0.38	0.88
(1,932)	1:A:121:GLN:HE22	1:A:125:VAL:HG12	9	0.38	0.88
(1,932)	1:A:121:GLN:HE22	1:A:125:VAL:HG13	9	0.38	0.88
(1,917)	1:A:13:LEU:HD11	1:A:177:ILE:H	9	1.16	1.85
(1,917)	1:A:13:LEU:HD12	1:A:177:ILE:H	9	1.16	1.85
(1,917)	1:A:13:LEU:HD13	1:A:177:ILE:H	9	1.16	1.85
(1,897)	1:A:36:VAL:HG21	1:A:44:LEU:H	9	0.05	0.09
(1,897)	1:A:36:VAL:HG22	1:A:44:LEU:H	9	0.05	0.09
(1,897)	1:A:36:VAL:HG23	1:A:44:LEU:H	9	0.05	0.09
(1,79)	1:A:13:LEU:H	1:A:14:SER:H	9	0.15	0.26
(1,730)	1:A:27:VAL:HG11	1:A:120:ILE:HD11	9	0.07	0.17
(1,730)	1:A:27:VAL:HG11	1:A:120:ILE:HD12	9	0.07	0.17
(1,730)	1:A:27:VAL:HG11	1:A:120:ILE:HD13	9	0.07	0.17
(1,730)	1:A:27:VAL:HG12	1:A:120:ILE:HD11	9	0.07	0.17
(1,730)	1:A:27:VAL:HG12	1:A:120:ILE:HD12	9	0.07	0.17
(1,730)	1:A:27:VAL:HG12	1:A:120:ILE:HD13	9	0.07	0.17
(1,730)	1:A:27:VAL:HG13	1:A:120:ILE:HD11	9	0.07	0.17
(1,730)	1:A:27:VAL:HG13	1:A:120:ILE:HD12	9	0.07	0.17
(1,730)	1:A:27:VAL:HG13	1:A:120:ILE:HD13	9	0.07	0.17
(1,566)	1:A:68:ILE:HD11	1:A:139:PHE:HE1	9	0.76	2.26
(1,566)	1:A:68:ILE:HD12	1:A:139:PHE:HE1	9	0.76	2.26
(1,566)	1:A:68:ILE:HD13	1:A:139:PHE:HE1	9	0.76	2.26
(1,553)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:128:LEU:HD21	9	0.07	0.12
(1,553)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:128:LEU:HD22	9	0.07	0.12
(1,553)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:128:LEU:HD23	9	0.07	0.12
(1,553)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:128:LEU:HD21	9	0.07	0.12
(1,553)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:128:LEU:HD22	9	0.07	0.12
(1,553)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:128:LEU:HD23	9	0.07	0.12
(1,553)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:128:LEU:HD21	9	0.07	0.12
(1,553)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:128:LEU:HD22	9	0.07	0.12
(1,553)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:128:LEU:HD23	9	0.07	0.12
(1,443)	1:A:91:TYR:H	1:A:91:TYR:HE1	9	0.27	0.54
(1,159)	1:A:2:LEU:HD11	1:A:179:GLU:H	9	0.05	0.12
(1,159)	1:A:2:LEU:HD12	1:A:179:GLU:H	9	0.05	0.12
(1,159)	1:A:2:LEU:HD13	1:A:179:GLU:H	9	0.05	0.12
(1,1027)	1:A:77:VAL:O	1:A:140:ILE:H	9	0.04	0.09
(1,930)	1:A:107:ASN:H	1:A:107:ASN:HD21	8	0.2	0.38
(1,927)	1:A:105:LYS:H	1:A:106:ASN:HD21	8	0.59	0.97
(1,921)	1:A:30:PHE:HB2	1:A:31:LYS:H	8	0.09	0.18
(1,814)	1:A:27:VAL:HG11	1:A:173:LYS:H	8	0.07	0.12
(1,814)	1:A:27:VAL:HG12	1:A:173:LYS:H	8	0.07	0.12



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,814)	1:A:27:VAL:HG13	1:A:173:LYS:H	8	0.07	0.12
(1,798)	1:A:169:LEU:HD21	1:A:170:MET:H	8	0.06	0.11
(1,798)	1:A:169:LEU:HD22	1:A:170:MET:H	8	0.06	0.11
(1,798)	1:A:169:LEU:HD23	1:A:170:MET:H	8	0.06	0.11
(1,797)	1:A:92:ILE:HD11	1:A:96:MET:H	8	0.06	0.13
(1,797)	1:A:92:ILE:HD12	1:A:96:MET:H	8	0.06	0.13
(1,797)	1:A:92:ILE:HD13	1:A:96:MET:H	8	0.06	0.13
(1,562)	1:A:4:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD11	8	0.97	1.64
(1,562)	1:A:4:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD12	8	0.97	1.64
(1,562)	1:A:4:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD13	8	0.97	1.64
(1,500)	1:A:138:PHE:HD1	1:A:153:VAL:HG21	8	0.08	0.13
(1,500)	1:A:138:PHE:HD1	1:A:153:VAL:HG22	8	0.08	0.13
(1,500)	1:A:138:PHE:HD1	1:A:153:VAL:HG23	8	0.08	0.13
(1,500)	1:A:138:PHE:HD2	1:A:153:VAL:HG21	8	0.08	0.13
(1,500)	1:A:138:PHE:HD2	1:A:153:VAL:HG22	8	0.08	0.13
(1,500)	1:A:138:PHE:HD2	1:A:153:VAL:HG23	8	0.08	0.13
(1,409)	1:A:22:LEU:HD21	1:A:25:ASP:H	8	0.04	0.07
(1,409)	1:A:22:LEU:HD22	1:A:25:ASP:H	8	0.04	0.07
(1,409)	1:A:22:LEU:HD23	1:A:25:ASP:H	8	0.04	0.07
(1,40)	1:A:158:TYR:H	1:A:158:TYR:HD1	8	0.51	1.03
(1,288)	1:A:2:LEU:HD11	1:A:3:ILE:H	8	0.05	0.14
(1,288)	1:A:2:LEU:HD12	1:A:3:ILE:H	8	0.05	0.14
(1,288)	1:A:2:LEU:HD13	1:A:3:ILE:H	8	0.05	0.14
(1,218)	1:A:4:TYR:HD1	1:A:5:LYS:H	8	0.64	0.82
(1,191)	1:A:64:VAL:HG11	1:A:65:GLU:H	8	0.06	0.18
(1,191)	1:A:64:VAL:HG12	1:A:65:GLU:H	8	0.06	0.18
(1,191)	1:A:64:VAL:HG13	1:A:65:GLU:H	8	0.06	0.18
(1,1105)	1:A:99:VAL:O	1:A:103:MET:H	8	0.04	0.08
(1,941)	1:A:135:ASN:H	1:A:135:ASN:HD21	7	0.25	0.35
(1,939)	1:A:125:VAL:HG11	1:A:126:SER:H	7	0.25	0.34
(1,939)	1:A:125:VAL:HG12	1:A:126:SER:H	7	0.25	0.34
(1,939)	1:A:125:VAL:HG13	1:A:126:SER:H	7	0.25	0.34
(1,937)	1:A:124:VAL:HG21	1:A:125:VAL:HG11	7	0.54	0.75
(1,937)	1:A:124:VAL:HG21	1:A:125:VAL:HG12	7	0.54	0.75
(1,937)	1:A:124:VAL:HG21	1:A:125:VAL:HG13	7	0.54	0.75
(1,937)	1:A:124:VAL:HG22	1:A:125:VAL:HG11	7	0.54	0.75
(1,937)	1:A:124:VAL:HG22	1:A:125:VAL:HG12	7	0.54	0.75
(1,937)	1:A:124:VAL:HG22	1:A:125:VAL:HG13	7	0.54	0.75
(1,937)	1:A:124:VAL:HG23	1:A:125:VAL:HG11	7	0.54	0.75
(1,937)	1:A:124:VAL:HG23	1:A:125:VAL:HG12	7	0.54	0.75
(1,937)	1:A:124:VAL:HG23	1:A:125:VAL:HG13	7	0.54	0.75
(1,916)	1:A:13:LEU:HD11	1:A:176:ILE:HD11	7	0.49	1.03



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

(1,916)	1:A:13:LEU:HD11	1 A 150 H D HD10			
(' /		1:A:176:ILE:HD12	7	0.49	1.03
(1.01.0)	1:A:13:LEU:HD11	1:A:176:ILE:HD13	7	0.49	1.03
(1,916)	1:A:13:LEU:HD12	1:A:176:ILE:HD11	7	0.49	1.03
(1,916)	1:A:13:LEU:HD12	1:A:176:ILE:HD12	7	0.49	1.03
(1,916)	1:A:13:LEU:HD12	1:A:176:ILE:HD13	7	0.49	1.03
(1,916)	1:A:13:LEU:HD13	1:A:176:ILE:HD11	7	0.49	1.03
(1,916)	1:A:13:LEU:HD13	1:A:176:ILE:HD12	7	0.49	1.03
(1,916)	1:A:13:LEU:HD13	1:A:176:ILE:HD13	7	0.49	1.03
(1,911)	1:A:5:LYS:H	1:A:13:LEU:HD11	7	1.23	1.52
(1,911)	1:A:5:LYS:H	1:A:13:LEU:HD12	7	1.23	1.52
(1,911)	1:A:5:LYS:H	1:A:13:LEU:HD13	7	1.23	1.52
(1,833)	1:A:75:LYS:H	1:A:76:LEU:HD11	7	0.05	0.09
(1,833)	1:A:75:LYS:H	1:A:76:LEU:HD12	7	0.05	0.09
(1,833)	1:A:75:LYS:H	1:A:76:LEU:HD13	7	0.05	0.09
(1,66)	1:A:137:ALA:H	1:A:156:ILE:H	7	0.04	0.08
(1,592)	1:A:128:LEU:HD21	1:A:136:LEU:HD21	7	0.06	0.1
(1,592)	1:A:128:LEU:HD21	1:A:136:LEU:HD22	7	0.06	0.1
	1:A:128:LEU:HD21	1:A:136:LEU:HD23	7	0.06	0.1
	1:A:128:LEU:HD22	1:A:136:LEU:HD21	7	0.06	0.1
(1,592)	1:A:128:LEU:HD22	1:A:136:LEU:HD22	7	0.06	0.1
(1,592)	1:A:128:LEU:HD22	1:A:136:LEU:HD23	7	0.06	0.1
(1,592)	1:A:128:LEU:HD23	1:A:136:LEU:HD21	7	0.06	0.1
(1,592)	1:A:128:LEU:HD23	1:A:136:LEU:HD22	7	0.06	0.1
(1,592)	1:A:128:LEU:HD23	1:A:136:LEU:HD23	7	0.06	0.1
(1,577)	1:A:128:LEU:HD21	1:A:155:ILE:HD11	7	0.04	0.07
(1,577)	1:A:128:LEU:HD21	1:A:155:ILE:HD12	7	0.04	0.07
(1,577)	1:A:128:LEU:HD21	1:A:155:ILE:HD13	7	0.04	0.07
(1,577)	1:A:128:LEU:HD22	1:A:155:ILE:HD11	7	0.04	0.07
(1,577)	1:A:128:LEU:HD22	1:A:155:ILE:HD12	7	0.04	0.07
(1,577)	1:A:128:LEU:HD22	1:A:155:ILE:HD13	7	0.04	0.07
(1,577)	1:A:128:LEU:HD23	1:A:155:ILE:HD11	7	0.04	0.07
(1,577)	1:A:128:LEU:HD23	1:A:155:ILE:HD12	7	0.04	0.07
· · /	1:A:128:LEU:HD23	1:A:155:ILE:HD13	7	0.04	0.07
(1,489)	1:A:139:PHE:HE1	1:A:156:ILE:HD11	7	1.41	1.53
(1,489)	1:A:139:PHE:HE1	1:A:156:ILE:HD12	7	1.41	1.53
(1,489)	1:A:139:PHE:HE1	1:A:156:ILE:HD13	7	1.41	1.53
(1,389)	1:A:172:VAL:HG21	1:A:174:GLU:H	7	0.04	0.07
(1,389)	1:A:172:VAL:HG22	1:A:174:GLU:H	7	0.04	0.07
	1:A:172:VAL:HG23	1:A:174:GLU:H	7	0.04	0.07
(1,241)	1:A:37:ARG:H	1:A:66:ARG:H	7	0.1	0.2
(1,240)	1:A:65:GLU:H	1:A:66:ARG:H	7	0.05	0.09
(1,178)	1:A:91:TYR:HD1	1:A:153:VAL:H	7	0.51	0.95



Continued from previous page...

(1,1009) 1:A:4:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD12 7 1.06 1.6 (1,1009) 1:A:4:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD13 7 1.06 1.6 (1,1009) 1:A:4:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD13 7 1.06 1.6 (1,938) 1:A:125:VAL:H 1:A:125:VAL:HG11 6 0.81 0.82 (1,938) 1:A:125:VAL:H 1:A:125:VAL:HG13 6 0.81 0.82 (1,938) 1:A:124:VAL:H 1:A:125:VAL:HG11 6 1.41 1.47 (1,935) 1:A:124:VAL:H 1:A:125:VAL:HG12 6 1.41 1.47 (1,935) 1:A:124:VAL:H 1:A:125:VAL:HG13 6 1.41 1.47 (1,935) 1:A:124:VAL:H 1:A:125:VAL:HG13 6 1.41 1.47 (1,934) 1:A:123:TRP:H 1:A:125:VAL:HG13 6 0.84 1.12 (1,934) 1:A:122:GIY:H 1:A:125:VAL:HG13 6 0.84 1.12 (1,933) 1:A:122:GIY:H 1:A:125:VAL:HG13 6 0.12	Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,1009) 1:A:4:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD13 7 1.06 1.6 (1,938) 1:A:125:VAL:H 1:A:125:VAL:HG11 6 0.81 0.82 (1,938) 1:A:125:VAL:H 1:A:125:VAL:HG12 6 0.81 0.82 (1,938) 1:A:125:VAL:H 1:A:125:VAL:HG13 6 0.81 0.82 (1,938) 1:A:124:VAL:H 1:A:125:VAL:HG11 6 1.41 1.47 (1,935) 1:A:124:VAL:H 1:A:125:VAL:HG12 6 1.41 1.47 (1,935) 1:A:124:VAL:H 1:A:125:VAL:HG13 6 1.41 1.47 (1,934) 1:A:123:TRP:H 1:A:125:VAL:HG13 6 0.84 1.12 (1,934) 1:A:123:TRP:H 1:A:125:VAL:HG12 6 0.84 1.12 (1,934) 1:A:123:TRP:H 1:A:125:VAL:HG13 6 0.84 1.12 (1,934) 1:A:123:TRP:H 1:A:125:VAL:HG13 6 1.12 1.31 (1,933) 1:A:122:GIV:H 1:A:125:VAL:HG14 6 1.12	(1,1009)	1:A:4:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD11	7	1.06	1.6
(1,938) 1:A:125:VAL:H 1:A:125:VAL:HGI1 6 0.81 0.82 (1,938) 1:A:125:VAL:H 1:A:125:VAL:HGI2 6 0.81 0.82 (1,938) 1:A:125:VAL:H 1:A:125:VAL:HGI3 6 0.81 0.82 (1,935) 1:A:124:VAL:H 1:A:125:VAL:HGI1 6 1.41 1.47 (1,935) 1:A:124:VAL:H 1:A:125:VAL:HGI3 6 1.41 1.47 (1,934) 1:A:123:TRP:H 1:A:125:VAL:HGI1 6 0.84 1.12 (1,934) 1:A:123:TRP:H 1:A:125:VAL:HGI2 6 0.84 1.12 (1,934) 1:A:123:TRP:H 1:A:125:VAL:HGI2 6 0.84 1.12 (1,934) 1:A:123:TRP:H 1:A:125:VAL:HGI2 6 0.84 1.12 (1,934) 1:A:123:TRP:H 1:A:125:VAL:HGI3 6 0.84 1.12 (1,933) 1:A:122:GLY:H 1:A:125:VAL:HGI3 6 0.84 1.12 (1,933) 1:A:122:GLY:H 1:A:125:VAL:HGI3 6 1.12	(1,1009)	1:A:4:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD12	7	1.06	1.6
(1,938) 1:A:125:VAL:H 1:A:125:VAL:HG12 6 0.81 0.82 (1,938) 1:A:125:VAL:H 1:A:125:VAL:HG13 6 0.81 0.82 (1,935) 1:A:124:VAL:H 1:A:125:VAL:HG11 6 1.41 1.47 (1,935) 1:A:124:VAL:H 1:A:125:VAL:HG11 6 1.41 1.47 (1,935) 1:A:124:VAL:H 1:A:125:VAL:HG12 6 1.41 1.47 (1,935) 1:A:124:VAL:H 1:A:125:VAL:HG13 6 1.41 1.47 (1,934) 1:A:123:TRP:H 1:A:125:VAL:HG13 6 0.84 1.12 (1,934) 1:A:123:TRP:H 1:A:125:VAL:HG11 6 0.84 1.12 (1,934) 1:A:123:TRP:H 1:A:125:VAL:HG12 6 0.84 1.12 (1,934) 1:A:123:TRP:H 1:A:125:VAL:HG13 6 0.84 1.12 (1,933) 1:A:122:GLY:H 1:A:125:VAL:HG13 6 0.84 1.12 (1,933) 1:A:122:GLY:H 1:A:125:VAL:HG13 6 1.12 1.31 (1,933) 1:A:122:GLY:H 1:A:125:VAL:HG14 6 1.12 1.31 (1,933) 1:A:122:GLY:H 1:A:125:VAL:HG14 6 1.12 1.31 (1,933) 1:A:122:GLY:H 1:A:125:VAL:HG15 6 1.12 1.31 (1,931) 1:A:121:GLN:H 1:A:125:VAL:HG16 6 1.37 1.63 (1,931) 1:A:121:GLN:H 1:A:125:VAL:HG16 6 1.37 1.63 (1,931) 1:A:121:GLN:H 1:A:125:VAL:HG16 6 1.37 1.63 (1,931) 1:A:121:GLN:H 1:A:125:VAL:HG17 6 0.41 0.77 (1,896) 1:A:2:LEU:HD11 1:A:180:LYS:H 6 0.05 0.09 (1,896) 1:A:2:LEU:HD12 1:A:180:LYS:H 6 0.05 0.09 (1,896) 1:A:2:LEU:HD13 1:A:180:LYS:H 6 0.05 0.09 (1,896) 1:A:2:LEU:HD13 1:A:180:LYS:H 6 0.05 0.09 (1,861) 1:A:139:PHE:H 1:A:156:ILE:HD11 6 0.03 0.07 (1,861) 1:A:139:PHE:H 1:A:156:ILE:HD11 6 0.03 0.07 (1,861) 1:A:139:PHE:H 1:A:156:ILE:HD11 6 0.03 0.07 (1,861) 1:A:120:ILE:HD11 1:A:174:GLU:H 6 0.05 0.12 (1,832) 1:A:120:ILE:HD13 1:A:120:ILE:HD13 6 0.18 0.27 (1,569) 1:A:116:PHE:HE1 1:A:120:ILE:HD13 6 0.03 0.05 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD13 6 0	(1,1009)	1:A:4:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD13	7	1.06	1.6
(1,938) 1:A:125:VAL:H 1:A:125:VAL:HGI3 6 0.81 0.82 (1,935) 1:A:124:VAL:H 1:A:125:VAL:HGI1 6 1.41 1.47 (1,935) 1:A:124:VAL:H 1:A:125:VAL:HGI2 6 1.41 1.47 (1,935) 1:A:124:VAL:H 1:A:125:VAL:HGI3 6 1.41 1.47 (1,934) 1:A:123:TRP:H 1:A:125:VAL:HGI1 6 0.84 1.12 (1,934) 1:A:123:TRP:H 1:A:125:VAL:HGI2 6 0.84 1.12 (1,934) 1:A:123:TRP:H 1:A:125:VAL:HGI3 6 0.84 1.12 (1,933) 1:A:122:GLY:H 1:A:125:VAL:HGI1 6 1.12 1.31 (1,933) 1:A:122:GLN:H 1:A:125:VAL:HGI2 6 1.12 1.31 (1,933) 1:A:121:GLN:H 1:A:125:VAL:HGI3 6 1.12 1.31 (1,931) 1:A:121:GLN:H 1:A:125:VAL:HGI3 6 1.37 1.63 (1,931) 1:A:12:GLN:H 1:A:125:VAL:HGI3 6 1.37 1	(1,938)	1:A:125:VAL:H	1:A:125:VAL:HG11	6	0.81	0.82
(1,935) 1:A:124:VAL:H 1:A:125:VAL:HG11 6 1.41 1.47 (1,935) 1:A:124:VAL:H 1:A:125:VAL:HG12 6 1.41 1.47 (1,935) 1:A:124:VAL:H 1:A:125:VAL:HG13 6 1.41 1.47 (1,934) 1:A:123:TRP:H 1:A:125:VAL:HG11 6 0.84 1.12 (1,934) 1:A:123:TRP:H 1:A:125:VAL:HG12 6 0.84 1.12 (1,934) 1:A:123:TRP:H 1:A:125:VAL:HG13 6 0.84 1.12 (1,934) 1:A:123:TRP:H 1:A:125:VAL:HG13 6 0.84 1.12 (1,934) 1:A:122:GLY:H 1:A:125:VAL:HG11 6 1.12 1.31 (1,933) 1:A:122:GLY:H 1:A:125:VAL:HG12 6 1.12 1.31 (1,933) 1:A:121:GLN:H 1:A:125:VAL:HG11 6 1.37 1.63 (1,931) 1:A:121:GLN:H 1:A:125:VAL:HG12 6 1.37 1.63 (1,931) 1:A:121:GLN:H 1:A:125:VAL:HG13 6 1.37	(1,938)	1:A:125:VAL:H	1:A:125:VAL:HG12	6	0.81	0.82
(1,935) 1:A:124:VAL:H 1:A:125:VAL:HG12 6 1.41 1.47 (1,935) 1:A:124:VAL:H 1:A:125:VAL:HG13 6 1.41 1.47 (1,934) 1:A:123:TRP:H 1:A:125:VAL:HG11 6 0.84 1.12 (1,934) 1:A:123:TRP:H 1:A:125:VAL:HG12 6 0.84 1.12 (1,934) 1:A:123:TRP:H 1:A:125:VAL:HG13 6 0.84 1.12 (1,934) 1:A:122:GLY:H 1:A:125:VAL:HG11 6 0.84 1.12 (1,933) 1:A:122:GLY:H 1:A:125:VAL:HG12 6 1.12 1.31 (1,933) 1:A:122:GLY:H 1:A:125:VAL:HG13 6 1.12 1.31 (1,931) 1:A:121:GLN:H 1:A:125:VAL:HG13 6 1.12 1.31 (1,931) 1:A:121:GLN:H 1:A:125:VAL:HG13 6 1.37 1.63 (1,931) 1:A:4:121:GLN:H 1:A:125:VAL:HG13 6 1.37 1.63 (1,931) 1:A:4:121:GLN:H 1:A:125:VAL:HG13 6 0.37	(1,938)	1:A:125:VAL:H	1:A:125:VAL:HG13	6	0.81	0.82
(1,935) 1:A:124:VAL:H 1:A:125:VAL:HG13 6 1.41 1.47 (1,934) 1:A:123:TRP:H 1:A:125:VAL:HG11 6 0.84 1.12 (1,934) 1:A:123:TRP:H 1:A:125:VAL:HG12 6 0.84 1.12 (1,934) 1:A:123:TRP:H 1:A:125:VAL:HG13 6 0.84 1.12 (1,933) 1:A:122:GLY:H 1:A:125:VAL:HG11 6 1.12 1.31 (1,933) 1:A:122:GLY:H 1:A:125:VAL:HG13 6 1.12 1.31 (1,933) 1:A:121:GLN:H 1:A:125:VAL:HG13 6 1.12 1.31 (1,931) 1:A:121:GLN:H 1:A:125:VAL:HG11 6 1.37 1.63 (1,931) 1:A:121:GLN:H 1:A:125:VAL:HG12 6 1.37 1.63 (1,931) 1:A:121:GLN:H 1:A:125:VAL:HG13 6 1.37 1.63 (1,931) 1:A:121:GLN:H 1:A:125:VAL:HG13 6 1.37 1.63 (1,931) 1:A:121:GLN:H 1:A:125:VAL:HG13 6 0.137 <th< td=""><td>(1,935)</td><td>1:A:124:VAL:H</td><td>1:A:125:VAL:HG11</td><td>6</td><td>1.41</td><td>1.47</td></th<>	(1,935)	1:A:124:VAL:H	1:A:125:VAL:HG11	6	1.41	1.47
(1,934) 1:A:123:TRP:H 1:A:125:VAL:HG11 6 0.84 1.12 (1,934) 1:A:123:TRP:H 1:A:125:VAL:HG12 6 0.84 1.12 (1,934) 1:A:123:TRP:H 1:A:125:VAL:HG13 6 0.84 1.12 (1,933) 1:A:122:GLY:H 1:A:125:VAL:HG11 6 1.12 1.31 (1,933) 1:A:122:GLY:H 1:A:125:VAL:HG12 6 1.12 1.31 (1,933) 1:A:121:GLN:H 1:A:125:VAL:HG13 6 1.12 1.31 (1,931) 1:A:121:GLN:H 1:A:125:VAL:HG11 6 1.37 1.63 (1,931) 1:A:121:GLN:H 1:A:125:VAL:HG12 6 1.37 1.63 (1,931) 1:A:121:GLN:H 1:A:125:VAL:HG13 6 1.37 1.63 (1,931) 1:A:121:GLN:H 1:A:125:VAL:HG13 6 1.37 1.63 (1,931) 1:A:121:GLN:H 1:A:125:VAL:HG13 6 1.37 1.63 (1,931) 1:A:120:LE:UHD13 1:A:14:SER:H 6 0.41 0	(1,935)	1:A:124:VAL:H	1:A:125:VAL:HG12	6	1.41	1.47
(1,934) 1:A:123:TRP:H 1:A:125:VAL:HG12 6 0.84 1.12 (1,934) 1:A:123:TRP:H 1:A:125:VAL:HG13 6 0.84 1.12 (1,933) 1:A:122:GLY:H 1:A:125:VAL:HG11 6 1.12 1.31 (1,933) 1:A:122:GLY:H 1:A:125:VAL:HG12 6 1.12 1.31 (1,933) 1:A:121:GLN:H 1:A:125:VAL:HG13 6 1.12 1.31 (1,931) 1:A:121:GLN:H 1:A:125:VAL:HG11 6 1.37 1.63 (1,931) 1:A:121:GLN:H 1:A:125:VAL:HG12 6 1.37 1.63 (1,931) 1:A:121:GLN:H 1:A:125:VAL:HG13 6 1.37 1.63 (1,931) 1:A:121:GLN:H 1:A:125:VAL:HG13 6 1.37 1.63 (1,931) 1:A:4:TYR:HB2 1:A:14:SER:H 6 0.41 0.77 (1,896) 1:A:4:TYR:HB2 1:A:14:SER:H 6 0.05 0.09 (1,896) 1:A:139:PHE:H 1:A:180:LYS:H 6 0.05 0.09	(1,935)	1:A:124:VAL:H	1:A:125:VAL:HG13	6	1.41	1.47
(1,934) 1:A:123:TRP:H 1:A:125:VAL:HG13 6 0.84 1.12 (1,933) 1:A:122:GLY:H 1:A:125:VAL:HG11 6 1.12 1.31 (1,933) 1:A:122:GLY:H 1:A:125:VAL:HG12 6 1.12 1.31 (1,933) 1:A:121:GLN:H 1:A:125:VAL:HG13 6 1.12 1.31 (1,931) 1:A:121:GLN:H 1:A:125:VAL:HG12 6 1.37 1.63 (1,931) 1:A:121:GLN:H 1:A:125:VAL:HG13 6 0.41 0.77 (1,896) 1:A:4:TYR:HB2 1:A:14:SER:H 6 0.41 0.77 (1,896) 1:A:2:LEU:HD13 1:A:180:LYS:H 6 0.05 0.09 </td <td>(1,934)</td> <td>1:A:123:TRP:H</td> <td>1:A:125:VAL:HG11</td> <td>6</td> <td>0.84</td> <td>1.12</td>	(1,934)	1:A:123:TRP:H	1:A:125:VAL:HG11	6	0.84	1.12
(1,933) 1:A:122:GLY:H 1:A:125:VAL:HG11 6 1.12 1.31 (1,933) 1:A:122:GLY:H 1:A:125:VAL:HG12 6 1.12 1.31 (1,933) 1:A:122:GLY:H 1:A:125:VAL:HG13 6 1.12 1.31 (1,931) 1:A:121:GLN:H 1:A:125:VAL:HG11 6 1.37 1.63 (1,931) 1:A:121:GLN:H 1:A:125:VAL:HG13 6 1.37 1.63 (1,931) 1:A:121:GLN:H 1:A:125:VAL:HG13 6 1.37 1.63 (1,910) 1:A:4:TYR:HB2 1:A:14:SER:H 6 0.41 0.77 (1,896) 1:A:2:LEU:HD11 1:A:180:LYS:H 6 0.05 0.09 (1,896) 1:A:2:LEU:HD12 1:A:180:LYS:H 6 0.05 0.09 (1,861) 1:A:139:PHE:H 1:A:156:ILE:HD11 6 0.03 0.07 (1,861) 1:A:139:PHE:H 1:A:156:ILE:HD12 6 0.03 0.07 (1,832) 1:A:120:ILE:HD11 1:A:174:GLU:H 6 0.05 0.12 <td>(1,934)</td> <td>1:A:123:TRP:H</td> <td>1:A:125:VAL:HG12</td> <td>6</td> <td>0.84</td> <td>1.12</td>	(1,934)	1:A:123:TRP:H	1:A:125:VAL:HG12	6	0.84	1.12
(1,933) 1:A:122:GLY:H 1:A:125:VAL:HG12 6 1.12 1.31 (1,933) 1:A:122:GLY:H 1:A:125:VAL:HG13 6 1.12 1.31 (1,931) 1:A:121:GLN:H 1:A:125:VAL:HG11 6 1.37 1.63 (1,931) 1:A:121:GLN:H 1:A:125:VAL:HG13 6 1.37 1.63 (1,931) 1:A:121:GLN:H 1:A:125:VAL:HG13 6 1.37 1.63 (1,931) 1:A:21:GLN:H 1:A:14:SER:H 6 0.41 0.77 (1,896) 1:A:4:TYR:HB2 1:A:14:SER:H 6 0.41 0.77 (1,896) 1:A:2:LEU:HD11 1:A:180:LYS:H 6 0.05 0.09 (1,896) 1:A:2:LEU:HD12 1:A:180:LYS:H 6 0.05 0.09 (1,896) 1:A:2:LEU:HD13 1:A:180:LYS:H 6 0.05 0.09 (1,861) 1:A:139:PHE:H 1:A:156:ILE:HD11 6 0.03 0.07 (1,861) 1:A:120:ILE:HD11 1:A:174:GLU:H 6 0.05 0.12 <	(1,934)	1:A:123:TRP:H	1:A:125:VAL:HG13	6	0.84	1.12
(1,933) 1:A:122:GLY:H 1:A:125:VAL:HG13 6 1.12 1.31 (1,931) 1:A:121:GLN:H 1:A:125:VAL:HG11 6 1.37 1.63 (1,931) 1:A:121:GLN:H 1:A:125:VAL:HG12 6 1.37 1.63 (1,931) 1:A:121:GLN:H 1:A:125:VAL:HG13 6 1.37 1.63 (1,930) 1:A:21:EU:HD12 1:A:14:SER:H 6 0.41 0.77 (1,896) 1:A:2:LEU:HD11 1:A:180:LYS:H 6 0.05 0.09 (1,896) 1:A:2:LEU:HD12 1:A:180:LYS:H 6 0.05 0.09 (1,896) 1:A:2:LEU:HD13 1:A:180:LYS:H 6 0.05 0.09 (1,896) 1:A:2:LEU:HD13 1:A:180:LYS:H 6 0.05 0.09 (1,861) 1:A:139:PHE:H 1:A:156:ILE:HD11 6 0.03 0.07 (1,861) 1:A:139:PHE:H 1:A:156:ILE:HD13 6 0.03 0.07 (1,861) 1:A:120:ILE:HD11 1:A:174:GLU:H 6 0.05 0.12	(1,933)	1:A:122:GLY:H	1:A:125:VAL:HG11	6	1.12	1.31
(1,931) 1:A:121:GLN:H 1:A:125:VAL:HG11 6 1.37 1.63 (1,931) 1:A:121:GLN:H 1:A:125:VAL:HG12 6 1.37 1.63 (1,931) 1:A:121:GLN:H 1:A:125:VAL:HG13 6 1.37 1.63 (1,910) 1:A:127:KHB2 1:A:14:SER:H 6 0.41 0.77 (1,896) 1:A:2:LEU:HD11 1:A:180:LYS:H 6 0.05 0.09 (1,896) 1:A:2:LEU:HD12 1:A:180:LYS:H 6 0.05 0.09 (1,896) 1:A:2:LEU:HD13 1:A:180:LYS:H 6 0.05 0.09 (1,896) 1:A:139:PHE:H 1:A:156:ILE:HD11 6 0.03 0.07 (1,861) 1:A:139:PHE:H 1:A:156:ILE:HD12 6 0.03 0.07 (1,861) 1:A:139:PHE:H 1:A:156:ILE:HD13 6 0.03 0.07 (1,832) 1:A:120:ILE:HD11 1:A:174:GLU:H 6 0.05 0.12 (1,832) 1:A:14:120:ILE:HD13 1:A:174:GLU:H 6 0.05 0.12 <td>(1,933)</td> <td>1:A:122:GLY:H</td> <td>1:A:125:VAL:HG12</td> <td>6</td> <td>1.12</td> <td>1.31</td>	(1,933)	1:A:122:GLY:H	1:A:125:VAL:HG12	6	1.12	1.31
(1,931) 1:A:121:GLN:H 1:A:125:VAL:HG12 6 1.37 1.63 (1,931) 1:A:121:GLN:H 1:A:125:VAL:HG13 6 1.37 1.63 (1,910) 1:A:4:TYR:HB2 1:A:14:SER:H 6 0.41 0.77 (1,896) 1:A:2:LEU:HD11 1:A:180:LYS:H 6 0.05 0.09 (1,896) 1:A:2:LEU:HD12 1:A:180:LYS:H 6 0.05 0.09 (1,896) 1:A:2:LEU:HD13 1:A:180:LYS:H 6 0.05 0.09 (1,896) 1:A:139:PHE:H 1:A:156:ILE:HD11 6 0.03 0.07 (1,861) 1:A:139:PHE:H 1:A:156:ILE:HD12 6 0.03 0.07 (1,861) 1:A:139:PHE:H 1:A:156:ILE:HD13 6 0.03 0.07 (1,861) 1:A:120:ILE:HD11 1:A:174:GLU:H 6 0.05 0.12 (1,832) 1:A:120:ILE:HD11 1:A:174:GLU:H 6 0.05 0.12 (1,832) 1:A:120:ILE:HD13 1:A:174:GLU:H 6 0.05 0.12	(1,933)	1:A:122:GLY:H	1:A:125:VAL:HG13	6	1.12	1.31
(1,931) 1:A:121:GLN:H 1:A:125:VAL:HG13 6 1.37 1.63 (1,910) 1:A:4:TYR:HB2 1:A:14:SER:H 6 0.41 0.77 (1,896) 1:A:2:LEU:HD11 1:A:180:LYS:H 6 0.05 0.09 (1,896) 1:A:2:LEU:HD12 1:A:180:LYS:H 6 0.05 0.09 (1,896) 1:A:2:LEU:HD13 1:A:180:LYS:H 6 0.05 0.09 (1,896) 1:A:139:PHE:H 1:A:156:ILE:HD11 6 0.03 0.07 (1,861) 1:A:139:PHE:H 1:A:156:ILE:HD12 6 0.03 0.07 (1,861) 1:A:139:PHE:H 1:A:156:ILE:HD13 6 0.03 0.07 (1,882) 1:A:120:ILE:HD11 1:A:174:GLU:H 6 0.05 0.12 (1,832) 1:A:120:ILE:HD12 1:A:174:GLU:H 6 0.05 0.12 (1,832) 1:A:120:ILE:HD13 1:A:174:GLU:H 6 0.05 0.12 (1,832) 1:A:120:ILE:HD13 1:A:174:GLU:H 6 0.05 0.12	(1,931)	1:A:121:GLN:H	1:A:125:VAL:HG11	6	1.37	1.63
(1,910) 1:A:4:TYR:HB2 1:A:14:SER:H 6 0.41 0.77 (1,896) 1:A:2:LEU:HD11 1:A:180:LYS:H 6 0.05 0.09 (1,896) 1:A:2:LEU:HD12 1:A:180:LYS:H 6 0.05 0.09 (1,896) 1:A:2:LEU:HD13 1:A:180:LYS:H 6 0.05 0.09 (1,861) 1:A:139:PHE:H 1:A:156:ILE:HD11 6 0.03 0.07 (1,861) 1:A:139:PHE:H 1:A:156:ILE:HD12 6 0.03 0.07 (1,861) 1:A:139:PHE:H 1:A:156:ILE:HD13 6 0.03 0.07 (1,861) 1:A:120:ILE:HD11 1:A:174:GLU:H 6 0.03 0.07 (1,832) 1:A:120:ILE:HD12 1:A:174:GLU:H 6 0.05 0.12 (1,832) 1:A:120:ILE:HD13 1:A:174:GLU:H 6 0.05 0.12 (1,832) 1:A:116:PHE:HE1 1:A:174:GLU:H 6 0.05 0.12 (1,83) 1:A:16:PHE:HE1 1:A:120:ILE:HD11 6 0.06 0.41	(1,931)	1:A:121:GLN:H	1:A:125:VAL:HG12	6	1.37	1.63
(1,896) 1:A:2:LEU:HD11 1:A:180:LYS:H 6 0.05 0.09 (1,896) 1:A:2:LEU:HD12 1:A:180:LYS:H 6 0.05 0.09 (1,896) 1:A:2:LEU:HD13 1:A:180:LYS:H 6 0.05 0.09 (1,861) 1:A:139:PHE:H 1:A:156:ILE:HD11 6 0.03 0.07 (1,861) 1:A:139:PHE:H 1:A:156:ILE:HD12 6 0.03 0.07 (1,861) 1:A:139:PHE:H 1:A:156:ILE:HD13 6 0.03 0.07 (1,861) 1:A:139:PHE:H 1:A:174:GLU:H 6 0.03 0.07 (1,882) 1:A:120:ILE:HD11 1:A:174:GLU:H 6 0.05 0.12 (1,832) 1:A:120:ILE:HD12 1:A:174:GLU:H 6 0.05 0.12 (1,832) 1:A:120:ILE:HD13 1:A:174:GLU:H 6 0.05 0.12 (1,832) 1:A:116:PHE:HE1 1:A:174:GLU:H 6 0.05 0.12 (1,83) 1:A:116:PHE:HE1 1:A:120:ILE:HD11 6 0.18 0.27	· · /	1:A:121:GLN:H	1:A:125:VAL:HG13	6	1.37	1.63
(1,896) 1:A:2:LEU:HD12 1:A:180:LYS:H 6 0.05 0.09 (1,896) 1:A:2:LEU:HD13 1:A:180:LYS:H 6 0.05 0.09 (1,861) 1:A:139:PHE:H 1:A:156:ILE:HD11 6 0.03 0.07 (1,861) 1:A:139:PHE:H 1:A:156:ILE:HD12 6 0.03 0.07 (1,861) 1:A:139:PHE:H 1:A:156:ILE:HD13 6 0.03 0.07 (1,832) 1:A:120:ILE:HD11 1:A:174:GLU:H 6 0.05 0.12 (1,832) 1:A:120:ILE:HD12 1:A:174:GLU:H 6 0.05 0.12 (1,832) 1:A:120:ILE:HD13 1:A:174:GLU:H 6 0.05 0.12 (1,832) 1:A:120:ILE:HD13 1:A:174:GLU:H 6 0.05 0.12 (1,832) 1:A:120:ILE:HD13 1:A:120:ILE:HD11 6 0.05 0.12 (1,832) 1:A:116:PHE:HE1 1:A:120:ILE:HD11 6 0.18 0.27 (1,569) 1:A:116:PHE:HE1 1:A:120:ILE:HD13 6 0.18 <	(1,910)	1:A:4:TYR:HB2	1:A:14:SER:H	6	0.41	0.77
(1,896) 1:A:2:LEU:HD13 1:A:180:LYS:H 6 0.05 0.09 (1,861) 1:A:139:PHE:H 1:A:156:ILE:HD11 6 0.03 0.07 (1,861) 1:A:139:PHE:H 1:A:156:ILE:HD12 6 0.03 0.07 (1,861) 1:A:139:PHE:H 1:A:156:ILE:HD13 6 0.03 0.07 (1,861) 1:A:139:PHE:H 1:A:156:ILE:HD13 6 0.03 0.07 (1,832) 1:A:120:ILE:HD11 1:A:174:GLU:H 6 0.05 0.12 (1,832) 1:A:120:ILE:HD13 1:A:174:GLU:H 6 0.05 0.12 (1,83) 1:A:120:ILE:HD13 1:A:174:GLU:H 6 0.05 0.12 (1,83) 1:A:4:TYR:H 1:A:174:GLU:H 6 0.05 0.12 (1,83) 1:A:14:TYR:H 1:A:174:GLU:H 6 0.05 0.12 (1,83) 1:A:16:PHE:HE1 1:A:120:ILE:HD11 6 0.26 0.41 (1,569) 1:A:116:PHE:HE1 1:A:120:ILE:HD12 6 0.18 0.27	(1,896)	1:A:2:LEU:HD11	1:A:180:LYS:H	6	0.05	0.09
(1,861) 1:A:139:PHE:H 1:A:156:ILE:HD11 6 0.03 0.07 (1,861) 1:A:139:PHE:H 1:A:156:ILE:HD12 6 0.03 0.07 (1,861) 1:A:139:PHE:H 1:A:156:ILE:HD13 6 0.03 0.07 (1,861) 1:A:139:PHE:H 1:A:156:ILE:HD13 6 0.03 0.07 (1,861) 1:A:139:PHE:H 1:A:156:ILE:HD13 6 0.03 0.07 (1,832) 1:A:120:ILE:HD11 1:A:174:GLU:H 6 0.05 0.12 (1,832) 1:A:120:ILE:HD13 1:A:174:GLU:H 6 0.05 0.12 (1,833) 1:A:120:ILE:HD13 1:A:14:TYR:HD1 6 0.06 0.41 (1,569) 1:A:116:PHE:HE1 1:A:120:ILE:HD11 6 0.18 0.27 (1,569) 1:A:116:PHE:HE1 1:A:120:ILE:HD13 6 0.18 0.27 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD11 6 0.03 0.05 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD13 6 0.03	(1,896)	1:A:2:LEU:HD12	1:A:180:LYS:H	6	0.05	0.09
(1,861) 1:A:139:PHE:H 1:A:156:ILE:HD12 6 0.03 0.07 (1,861) 1:A:139:PHE:H 1:A:156:ILE:HD13 6 0.03 0.07 (1,832) 1:A:120:ILE:HD11 1:A:174:GLU:H 6 0.05 0.12 (1,832) 1:A:120:ILE:HD12 1:A:174:GLU:H 6 0.05 0.12 (1,832) 1:A:120:ILE:HD13 1:A:174:GLU:H 6 0.05 0.12 (1,83) 1:A:4:TYR:H 1:A:174:GLU:H 6 0.05 0.12 (1,83) 1:A:16:PHE:HE1 1:A:4:TYR:HD1 6 0.26 0.41 (1,569) 1:A:116:PHE:HE1 1:A:120:ILE:HD11 6 0.18 0.27 (1,569) 1:A:116:PHE:HE1 1:A:120:ILE:HD13 6 0.18 0.27 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD11 6 0.03 0.05 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD13 6 0.03 0.05 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD13 6 0.03	(1,896)	1:A:2:LEU:HD13	1:A:180:LYS:H	6	0.05	0.09
(1,861) 1:A:139:PHE:H 1:A:156:ILE:HD13 6 0.03 0.07 (1,832) 1:A:120:ILE:HD11 1:A:174:GLU:H 6 0.05 0.12 (1,832) 1:A:120:ILE:HD12 1:A:174:GLU:H 6 0.05 0.12 (1,832) 1:A:120:ILE:HD13 1:A:174:GLU:H 6 0.05 0.12 (1,83) 1:A:120:ILE:HD13 1:A:174:GLU:H 6 0.05 0.12 (1,83) 1:A:4:TYR:H 1:A:174:GLU:H 6 0.05 0.12 (1,83) 1:A:4:TYR:H 1:A:174:GLU:H 6 0.05 0.12 (1,83) 1:A:14:TYR:H 1:A:120:ILE:HD11 6 0.26 0.41 (1,569) 1:A:116:PHE:HE1 1:A:120:ILE:HD12 6 0.18 0.27 (1,569) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD11 6 0.03 0.05 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD12 6 0.03 0.05 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD13 6 0.03 0.05	(1,861)	1:A:139:PHE:H	1:A:156:ILE:HD11	6	0.03	0.07
(1,832) 1:A:120:ILE:HD11 1:A:174:GLU:H 6 0.05 0.12 (1,832) 1:A:120:ILE:HD12 1:A:174:GLU:H 6 0.05 0.12 (1,832) 1:A:120:ILE:HD13 1:A:174:GLU:H 6 0.05 0.12 (1,83) 1:A:4:TYR:H 1:A:4:TYR:HD1 6 0.26 0.41 (1,569) 1:A:116:PHE:HE1 1:A:120:ILE:HD11 6 0.18 0.27 (1,569) 1:A:116:PHE:HE1 1:A:120:ILE:HD12 6 0.18 0.27 (1,569) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD13 6 0.18 0.27 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD12 6 0.03 0.05 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD13 6 0.03 0.05 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD13 6 0.03 0.05	(1,861)	1:A:139:PHE:H	1:A:156:ILE:HD12	6	0.03	0.07
(1,832) 1:A:120:ILE:HD12 1:A:174:GLU:H 6 0.05 0.12 (1,832) 1:A:120:ILE:HD13 1:A:174:GLU:H 6 0.05 0.12 (1,83) 1:A:4:TYR:H 1:A:4:TYR:HD1 6 0.26 0.41 (1,569) 1:A:116:PHE:HE1 1:A:120:ILE:HD11 6 0.18 0.27 (1,569) 1:A:116:PHE:HE1 1:A:120:ILE:HD12 6 0.18 0.27 (1,569) 1:A:116:PHE:HE1 1:A:120:ILE:HD13 6 0.18 0.27 (1,569) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD11 6 0.03 0.05 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD12 6 0.03 0.05 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD13 6 0.03 0.05	(1,861)	1:A:139:PHE:H	1:A:156:ILE:HD13	6	0.03	0.07
(1,832) 1:A:120:ILE:HD13 1:A:174:GLU:H 6 0.05 0.12 (1,83) 1:A:4:TYR:H 1:A:4:TYR:HD1 6 0.26 0.41 (1,569) 1:A:116:PHE:HE1 1:A:120:ILE:HD11 6 0.18 0.27 (1,569) 1:A:116:PHE:HE1 1:A:120:ILE:HD12 6 0.18 0.27 (1,569) 1:A:116:PHE:HE1 1:A:120:ILE:HD13 6 0.18 0.27 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD11 6 0.03 0.05 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD12 6 0.03 0.05 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD13 6 0.03 0.05	(1,832)	1:A:120:ILE:HD11	1:A:174:GLU:H	6	0.05	0.12
(1,83) 1:A:4:TYR:H 1:A:4:TYR:HD1 6 0.26 0.41 (1,569) 1:A:116:PHE:HE1 1:A:120:ILE:HD11 6 0.18 0.27 (1,569) 1:A:116:PHE:HE1 1:A:120:ILE:HD12 6 0.18 0.27 (1,569) 1:A:116:PHE:HE1 1:A:120:ILE:HD13 6 0.18 0.27 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD11 6 0.03 0.05 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD12 6 0.03 0.05 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD13 6 0.03 0.05	(1,832)	1:A:120:ILE:HD12	1:A:174:GLU:H	6	0.05	0.12
(1,569) 1:A:116:PHE:HE1 1:A:120:ILE:HD11 6 0.18 0.27 (1,569) 1:A:116:PHE:HE1 1:A:120:ILE:HD12 6 0.18 0.27 (1,569) 1:A:116:PHE:HE1 1:A:120:ILE:HD13 6 0.18 0.27 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD11 6 0.03 0.05 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD12 6 0.03 0.05 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD13 6 0.03 0.05	(1,832)	1:A:120:ILE:HD13	1:A:174:GLU:H	6	0.05	0.12
(1,569) 1:A:116:PHE:HE1 1:A:120:ILE:HD12 6 0.18 0.27 (1,569) 1:A:116:PHE:HE1 1:A:120:ILE:HD13 6 0.18 0.27 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD11 6 0.03 0.05 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD12 6 0.03 0.05 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD13 6 0.03 0.05	(1,83)	1:A:4:TYR:H	1:A:4:TYR:HD1	6	0.26	0.41
(1,569) 1:A:116:PHE:HE1 1:A:120:ILE:HD13 6 0.18 0.27 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD11 6 0.03 0.05 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD12 6 0.03 0.05 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD13 6 0.03 0.05	(1,569)	1:A:116:PHE:HE1	1:A:120:ILE:HD11	6	0.18	0.27
(1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD11 6 0.03 0.05 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD12 6 0.03 0.05 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD13 6 0.03 0.05	(1,569)	1:A:116:PHE:HE1	1:A:120:ILE:HD12	6	0.18	0.27
(1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD12 6 0.03 0.05 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD13 6 0.03 0.05	(1,569)	1:A:116:PHE:HE1	1:A:120:ILE:HD13	6	0.18	0.27
(1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD12 6 0.03 0.05 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD13 6 0.03 0.05	(1,554)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:128:LEU:HD11	6	0.03	0.05
(1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD13 6 0.03 0.05		1:A:124:VAL:HG11	1:A:128:LEU:HD12	6	0.03	0.05
, , , ,		1:A:124:VAL:HG11	1:A:128:LEU:HD13	6	0.03	0.05
(1,554) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD11 6 0.03 0.05	, , ,	1:A:124:VAL:HG12	1:A:128:LEU:HD11	6	0.03	0.05
(1,554) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD12 6 0.03 0.05		1:A:124:VAL:HG12	1:A:128:LEU:HD12	6	0.03	0.05
(1,554) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD13 6 0.03 0.05		1:A:124:VAL:HG12	1:A:128:LEU:HD13	6	0.03	0.05
(1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD11 6 0.03 0.05		1:A:124:VAL:HG13	1:A:128:LEU:HD11	6	0.03	0.05
(1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD12 6 0.03 0.05	(1,554)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:128:LEU:HD12	6	0.03	0.05
(1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD13 6 0.03 0.05	(1,554)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:128:LEU:HD13	6	0.03	0.05
(1,492) 1:A:7:ILE:HD11 1:A:8:PHE:HE1 6 0.81 1.36	(1,492)	1:A:7:ILE:HD11	1:A:8:PHE:HE1	6	0.81	1.36



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,492)	1:A:7:ILE:HD12	1:A:8:PHE:HE1	6	0.81	1.36
(1,492)	1:A:7:ILE:HD13	1:A:8:PHE:HE1	6	0.81	1.36
(1,439)	1:A:140:ILE:HD11	1:A:144:ALA:H	6	0.06	0.09
(1,439)	1:A:140:ILE:HD12	1:A:144:ALA:H	6	0.06	0.09
(1,439)	1:A:140:ILE:HD13	1:A:144:ALA:H	6	0.06	0.09
(1,41)	1:A:158:TYR:H	1:A:158:TYR:HE1	6	0.67	1.19
(1,225)	1:A:95:PHE:HD1	1:A:99:VAL:H	6	0.04	0.08
(1,225)	1:A:95:PHE:HD2	1:A:99:VAL:H	6	0.04	0.08
(1,223)	1:A:6:ASP:H	1:A:13:LEU:HD11	6	0.07	0.12
(1,223)	1:A:6:ASP:H	1:A:13:LEU:HD12	6	0.07	0.12
(1,223)	1:A:6:ASP:H	1:A:13:LEU:HD13	6	0.07	0.12
(1,183)	1:A:171:LEU:HD21	1:A:172:VAL:H	6	0.07	0.11
(1,183)	1:A:171:LEU:HD22	1:A:172:VAL:H	6	0.07	0.11
(1,183)	1:A:171:LEU:HD23	1:A:172:VAL:H	6	0.07	0.11
(1,174)	1:A:22:LEU:H	1:A:28:TYR:HD1	6	0.56	2.92
(1,120)	1:A:91:TYR:H	1:A:91:TYR:HD1	6	0.13	0.3
(1,1069)	1:A:35:VAL:O	1:A:67:GLY:H	6	0.05	0.11
(1,1011)	1:A:2:LEU:O	1:A:16:ASP:H	6	0.04	0.09
(1,985)	1:A:99:VAL:HG11	1:A:172:VAL:HG11	5	0.04	0.06
(1,985)	1:A:99:VAL:HG11	1:A:172:VAL:HG12	5	0.04	0.06
(1,985)	1:A:99:VAL:HG11	1:A:172:VAL:HG13	5	0.04	0.06
(1,985)	1:A:99:VAL:HG12	1:A:172:VAL:HG11	5	0.04	0.06
(1,985)	1:A:99:VAL:HG12	1:A:172:VAL:HG12	5	0.04	0.06
(1,985)	1:A:99:VAL:HG12	1:A:172:VAL:HG13	5	0.04	0.06
(1,985)	1:A:99:VAL:HG13	1:A:172:VAL:HG11	5	0.04	0.06
(1,985)	1:A:99:VAL:HG13	1:A:172:VAL:HG12	5	0.04	0.06
(1,985)	1:A:99:VAL:HG13	1:A:172:VAL:HG13	5	0.04	0.06
(1,901)	1:A:156:ILE:H	1:A:169:LEU:HD11	5	0.08	0.14
(1,901)	1:A:156:ILE:H	1:A:169:LEU:HD12	5	0.08	0.14
(1,901)	1:A:156:ILE:H	1:A:169:LEU:HD13	5	0.08	0.14
(1,837)	1:A:33:LYS:H	1:A:35:VAL:HG11	5	0.04	0.1
(1,837)	1:A:33:LYS:H	1:A:35:VAL:HG12	5	0.04	0.1
(1,837)	1:A:33:LYS:H	1:A:35:VAL:HG13	5	0.04	0.1
(1,804)	1:A:75:LYS:H	1:A:76:LEU:HD21	5	0.04	0.09
(1,804)	1:A:75:LYS:H	1:A:76:LEU:HD22	5	0.04	0.09
(1,804)	1:A:75:LYS:H	1:A:76:LEU:HD23	5	0.04	0.09
(1,725)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:172:VAL:HG11	5	0.03	0.05
(1,725)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:172:VAL:HG12	5	0.03	0.05
(1,725)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:172:VAL:HG13	5	0.03	0.05
(1,725)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:172:VAL:HG11	5	0.03	0.05
(1,725)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:172:VAL:HG12	5	0.03	0.05
(1,725)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:172:VAL:HG13	5	0.03	0.05



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,725)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:172:VAL:HG11	5	0.03	0.05
(1,725)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:172:VAL:HG12	5	0.03	0.05
(1,725)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:172:VAL:HG13	5	0.03	0.05
(1,663)	1:A:149:GLU:H	1:A:151:GLY:H	5	0.08	0.11
(1,62)	1:A:27:VAL:HG11	1:A:123:TRP:HE1	5	0.05	0.06
(1,62)	1:A:27:VAL:HG12	1:A:123:TRP:HE1	5	0.05	0.06
(1,62)	1:A:27:VAL:HG13	1:A:123:TRP:HE1	5	0.05	0.06
(1,540)	1:A:133:PHE:HD1	1:A:136:LEU:HD21	5	0.1	0.12
(1,540)	1:A:133:PHE:HD1	1:A:136:LEU:HD22	5	0.1	0.12
(1,540)	1:A:133:PHE:HD1	1:A:136:LEU:HD23	5	0.1	0.12
(1,540)	1:A:133:PHE:HD2	1:A:136:LEU:HD21	5	0.1	0.12
(1,540)	1:A:133:PHE:HD2	1:A:136:LEU:HD22	5	0.1	0.12
(1,540)	1:A:133:PHE:HD2	1:A:136:LEU:HD23	5	0.1	0.12
(1,532)	1:A:99:VAL:HG11	1:A:172:VAL:HG11	5	0.04	0.06
(1,532)	1:A:99:VAL:HG11	1:A:172:VAL:HG12	5	0.04	0.06
(1,532)	1:A:99:VAL:HG11	1:A:172:VAL:HG13	5	0.04	0.06
(1,532)	1:A:99:VAL:HG12	1:A:172:VAL:HG11	5	0.04	0.06
(1,532)	1:A:99:VAL:HG12	1:A:172:VAL:HG12	5	0.04	0.06
(1,532)	1:A:99:VAL:HG12	1:A:172:VAL:HG13	5	0.04	0.06
(1,532)	1:A:99:VAL:HG13	1:A:172:VAL:HG11	5	0.04	0.06
(1,532)	1:A:99:VAL:HG13	1:A:172:VAL:HG12	5	0.04	0.06
(1,532)	1:A:99:VAL:HG13	1:A:172:VAL:HG13	5	0.04	0.06
(1,513)	1:A:127:LEU:HD21	1:A:133:PHE:HD1	5	0.07	0.1
(1,513)	1:A:127:LEU:HD21	1:A:133:PHE:HD2	5	0.07	0.1
(1,513)	1:A:127:LEU:HD22	1:A:133:PHE:HD1	5	0.07	0.1
(1,513)	1:A:127:LEU:HD22	1:A:133:PHE:HD2	5	0.07	0.1
(1,513)	1:A:127:LEU:HD23	1:A:133:PHE:HD1	5	0.07	0.1
(1,513)	1:A:127:LEU:HD23	1:A:133:PHE:HD2	5	0.07	0.1
(1,512)	1:A:127:LEU:HD21	1:A:136:LEU:HD21	5	0.04	0.09
(1,512)	1:A:127:LEU:HD21	1:A:136:LEU:HD22	5	0.04	0.09
(1,512)	1:A:127:LEU:HD21	1:A:136:LEU:HD23	5	0.04	0.09
(1,512)	1:A:127:LEU:HD22	1:A:136:LEU:HD21	5	0.04	0.09
(1,512)	1:A:127:LEU:HD22	1:A:136:LEU:HD22	5	0.04	0.09
(1,512)	1:A:127:LEU:HD22	1:A:136:LEU:HD23	5	0.04	0.09
(1,512)	1:A:127:LEU:HD23	1:A:136:LEU:HD21	5	0.04	0.09
(1,512)	1:A:127:LEU:HD23	1:A:136:LEU:HD22	5	0.04	0.09
(1,512)	1:A:127:LEU:HD23	1:A:136:LEU:HD23	5	0.04	0.09
(1,484)	1:A:116:PHE:HE1	1:A:175:ALA:H	5	0.31	0.69
(1,441)	1:A:146:GLU:H	1:A:148:ALA:H	5	0.03	0.06
(1,388)	1:A:116:PHE:HD1	1:A:174:GLU:H	5	0.07	0.13
(1,388)	1:A:116:PHE:HD2	1:A:174:GLU:H	5	0.07	0.13
(1,360)	1:A:161:VAL:H	1:A:164:THR:H	5	0.05	0.1



Continued from previous page...

(1,252) 1:A:68:ILE:H 1:A:72:LEU:HD21 5 (1,252) 1:A:68:ILE:H 1:A:72:LEU:HD23 5 (1,252) 1:A:68:ILE:H 1:A:72:LEU:HD23 5 (1,108) 1:A:15:SER:H 1:A:18:PHE:HD1 5 (1,108) 1:A:15:SER:H 1:A:18:PHE:HD2 5 (1,1077) 1:A:85:ALA:O 1:A:89:LYS:H 5 (1,1046) 1:A:155:ILE:N 1:A:170:MET:O 5 (1,1046) 1:A:4:TYR:O 1:A:14:SER:N 5 (1,100) 1:A:58:ASP:H 1:A:59:GLY:H 5 (1,10 1:A:36:VAL:HG11 1:A:67:GLY:H 5 (1,98) 1:A:36:VAL:HG11 1:A:67:GLY:H 4 (1,98) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:67:GLY:H 4 (1,984) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD21 4 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD22 4 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD22 4 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD23 4 (0.03 0.03 0.03 0.07 0.07 0.03 0.02 0.02 0.1 0.06 0.08 0.08	0.06 0.06 0.07 0.17 0.17 0.06 0.05 0.05 0.21 0.09 0.14
(1,252) 1:A:68:ILE:H 1:A:72:LEU:HD23 5 (1,108) 1:A:15:SER:H 1:A:18:PHE:HD1 5 (1,108) 1:A:15:SER:H 1:A:18:PHE:HD2 5 (1,1077) 1:A:85:ALA:O 1:A:89:LYS:H 5 (1,1046) 1:A:155:ILE:N 1:A:170:MET:O 5 (1,1016) 1:A:4:TYR:O 1:A:14:SER:N 5 (1,100) 1:A:58:ASP:H 1:A:59:GLY:H 5 (1,1) 1:A:3:ILE:H 1:A:179:GLU:H 5 (1,98) 1:A:36:VAL:HG11 1:A:67:GLY:H 4 (1,98) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:67:GLY:H 4 (1,98) 1:A:36:VAL:HG13 1:A:67:GLY:H 4 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD21 4 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD23 4 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD21 4 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD22 4 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD22 4	0.03 0.07 0.07 0.03 0.02 0.02 0.1 0.06 0.08 0.08	0.06 0.17 0.17 0.06 0.05 0.05 0.21 0.09
(1,108) 1:A:15:SER:H 1:A:18:PHE:HD1 5 (1,108) 1:A:15:SER:H 1:A:18:PHE:HD2 5 (1,1077) 1:A:85:ALA:O 1:A:89:LYS:H 5 (1,1046) 1:A:155:ILE:N 1:A:170:MET:O 5 (1,1016) 1:A:4:TYR:O 1:A:14:SER:N 5 (1,100) 1:A:58:ASP:H 1:A:59:GLY:H 5 (1,1) 1:A:3:ILE:H 1:A:179:GLU:H 5 (1,98) 1:A:36:VAL:HG11 1:A:67:GLY:H 4 (1,98) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:67:GLY:H 4 (1,98) 1:A:36:VAL:HG13 1:A:67:GLY:H 4 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD21 4 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD23 4 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD21 4 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD21 4 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD22 4 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD22 4	0.07 0.07 0.03 0.02 0.02 0.1 0.06 0.08 0.08	0.17 0.17 0.06 0.05 0.05 0.21 0.09
(1,108) 1:A:15:SER:H 1:A:18:PHE:HD2 5 (1,1077) 1:A:85:ALA:O 1:A:89:LYS:H 5 (1,1046) 1:A:155:ILE:N 1:A:170:MET:O 5 (1,1016) 1:A:4:TYR:O 1:A:14:SER:N 5 (1,100) 1:A:58:ASP:H 1:A:59:GLY:H 5 (1,1) 1:A:3:ILE:H 1:A:179:GLU:H 5 (1,98) 1:A:36:VAL:HG11 1:A:67:GLY:H 4 (1,98) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:67:GLY:H 4 (1,98) 1:A:36:VAL:HG13 1:A:67:GLY:H 4 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD21 4 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD23 4 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD21 4 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD21 4 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD22 4 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD22 4	0.07 0.03 0.02 0.02 0.1 0.06 0.08 0.08	0.17 0.06 0.05 0.05 0.21 0.09
(1,1077) 1:A:85:ALA:O 1:A:89:LYS:H 5 (1,1046) 1:A:155:ILE:N 1:A:170:MET:O 5 (1,1016) 1:A:4:TYR:O 1:A:14:SER:N 5 (1,100) 1:A:58:ASP:H 1:A:59:GLY:H 5 (1,1) 1:A:3:ILE:H 1:A:179:GLU:H 5 (1,98) 1:A:36:VAL:HG11 1:A:67:GLY:H 4 (1,98) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:67:GLY:H 4 (1,98) 1:A:36:VAL:HG13 1:A:67:GLY:H 4 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD21 4 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD23 4 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD21 4 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD22 4 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD22 4	0.03 0.02 0.02 0.1 0.06 0.08 0.08	0.06 0.05 0.05 0.21 0.09
(1,1046) 1:A:155:ILE:N 1:A:170:MET:O 5 (1,1016) 1:A:4:TYR:O 1:A:14:SER:N 5 (1,100) 1:A:58:ASP:H 1:A:59:GLY:H 5 (1,1) 1:A:3:ILE:H 1:A:179:GLU:H 5 (1,98) 1:A:36:VAL:HG11 1:A:67:GLY:H 4 (1,98) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:67:GLY:H 4 (1,98) 1:A:36:VAL:HG13 1:A:67:GLY:H 4 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD21 4 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD23 4 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD21 4 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD21 4 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD22 4	0.02 0.02 0.1 0.06 0.08 0.08 0.08	0.05 0.05 0.21 0.09
(1,1016) 1:A:4:TYR:O 1:A:14:SER:N 5 (1,100) 1:A:58:ASP:H 1:A:59:GLY:H 5 (1,1) 1:A:3:ILE:H 1:A:179:GLU:H 5 (1,98) 1:A:36:VAL:HG11 1:A:67:GLY:H 4 (1,98) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:67:GLY:H 4 (1,98) 1:A:36:VAL:HG13 1:A:67:GLY:H 4 (1,98) 1:A:36:VAL:HG13 1:A:67:GLY:H 4 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD21 4 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD23 4 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD21 4 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD22 4	0.02 0.1 0.06 0.08 0.08 0.08	0.05 0.21 0.09
(1,100) 1:A:58:ASP:H 1:A:59:GLY:H 5 (1,1) 1:A:3:ILE:H 1:A:179:GLU:H 5 (1,98) 1:A:36:VAL:HG11 1:A:67:GLY:H 4 (1,98) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:67:GLY:H 4 (1,98) 1:A:36:VAL:HG13 1:A:67:GLY:H 4 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD21 4 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD23 4 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD21 4 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD21 4 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD22 4	0.1 0.06 0.08 0.08 0.08	0.21 0.09
(1,1) 1:A:3:ILE:H 1:A:179:GLU:H 5 (1,98) 1:A:36:VAL:HG11 1:A:67:GLY:H 4 (1,98) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:67:GLY:H 4 (1,98) 1:A:36:VAL:HG13 1:A:67:GLY:H 4 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD21 4 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD23 4 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD21 4 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD22 4 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD22 4	0.06 0.08 0.08 0.08	0.09
(1,98) 1:A:36:VAL:HG11 1:A:67:GLY:H 4 (1,98) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:67:GLY:H 4 (1,98) 1:A:36:VAL:HG13 1:A:67:GLY:H 4 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD21 4 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD22 4 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD23 4 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD21 4 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD22 4	0.08 0.08 0.08	
(1,98) 1:A:36:VAL:HG12 1:A:67:GLY:H 4 (1,98) 1:A:36:VAL:HG13 1:A:67:GLY:H 4 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD21 4 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD22 4 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD23 4 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD21 4 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD22 4	0.08	0.14
(1,98) 1:A:36:VAL:HG13 1:A:67:GLY:H 4 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD21 4 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD22 4 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD23 4 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD21 4 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD22 4	0.08	i .
(1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD21 4 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD22 4 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD23 4 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD21 4 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD22 4		0.14
(1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD22 4 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD23 4 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD21 4 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD22 4	0.04	0.14
(1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD23 4 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD21 4 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD22 4	0.04	0.06
(1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD21 4 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD22 4	0.04	0.06
(1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD22 4	0.04	0.06
()	0.04	0.06
(1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD23 4	0.04	0.06
	0.04	0.06
(1,919) 1:A:18:PHE:HZ 1:A:73:ASN:HD21 4	0.76	0.92
(1,834) 1:A:71:VAL:HG11 1:A:75:LYS:H 4	0.06	0.1
(1,834) 1:A:71:VAL:HG12 1:A:75:LYS:H 4	0.06	0.1
(1,834) 1:A:71:VAL:HG13 1:A:75:LYS:H 4	0.06	0.1
(1,816) 1:A:67:GLY:H 1:A:72:LEU:HD21 4	0.06	0.1
(1,816) 1:A:67:GLY:H 1:A:72:LEU:HD22 4	0.06	0.1
(1,816) 1:A:67:GLY:H 1:A:72:LEU:HD23 4	0.06	0.1
(1,774) 1:A:23:VAL:HG11 1:A:28:TYR:H 4	0.03	0.04
(1,774) 1:A:23:VAL:HG12 1:A:28:TYR:H 4	0.03	0.04
(1,774) 1:A:23:VAL:HG13 1:A:28:TYR:H 4	0.03	0.04
(1,684) 1:A:132:ARG:H 1:A:135:ASN:H 4	0.04	0.08
(1,655) 1:A:52:GLU:H 1:A:53:GLU:H 4	0.06	0.15
(1,648) 1:A:56:GLU:H 1:A:57:ASP:H 4	0.08	0.12
(1,574) 1:A:30:PHE:HD1 1:A:70:ILE:HD11 4	0.03	0.05
(1,574) 1:A:30:PHE:HD1 1:A:70:ILE:HD12 4	0.03	0.05
(1,574) 1:A:30:PHE:HD1 1:A:70:ILE:HD13 4	0.03	0.05
(1,574) 1:A:30:PHE:HD2 1:A:70:ILE:HD11 4	0.03	0.05
(1,574) 1:A:30:PHE:HD2 1:A:70:ILE:HD12 4	0.03	0.05
(1,574) 1:A:30:PHE:HD2 1:A:70:ILE:HD13 4	0.03	0.05
(1,557) 1:A:92:ILE:HD11 1:A:124:VAL:HG21 4	0.07	0.1
(1,557) 1:A:92:ILE:HD11 1:A:124:VAL:HG22 4	0.07	0.1
(1,557) 1:A:92:ILE:HD11 1:A:124:VAL:HG23 4	2.2.	
(1,557) 1:A:92:ILE:HD12 1:A:124:VAL:HG21 4	0.07	0.1



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,557)	1:A:92:ILE:HD12	1:A:124:VAL:HG22	4	0.07	0.1
(1,557)	1:A:92:ILE:HD12	1:A:124:VAL:HG23	4	0.07	0.1
(1,557)	1:A:92:ILE:HD13	1:A:124:VAL:HG21	4	0.07	0.1
(1,557)	1:A:92:ILE:HD13	1:A:124:VAL:HG22	4	0.07	0.1
(1,557)	1:A:92:ILE:HD13	1:A:124:VAL:HG23	4	0.07	0.1
(1,55)	1:A:30:PHE:H	1:A:70:ILE:HD11	4	0.05	0.1
(1,55)	1:A:30:PHE:H	1:A:70:ILE:HD12	4	0.05	0.1
(1,55)	1:A:30:PHE:H	1:A:70:ILE:HD13	4	0.05	0.1
(1,517)	1:A:127:LEU:HD11	1:A:133:PHE:HD1	4	0.1	0.13
(1,517)	1:A:127:LEU:HD11	1:A:133:PHE:HD2	4	0.1	0.13
(1,517)	1:A:127:LEU:HD12	1:A:133:PHE:HD1	4	0.1	0.13
(1,517)	1:A:127:LEU:HD12	1:A:133:PHE:HD2	4	0.1	0.13
(1,517)	1:A:127:LEU:HD13	1:A:133:PHE:HD1	4	0.1	0.13
(1,517)	1:A:127:LEU:HD13	1:A:133:PHE:HD2	4	0.1	0.13
(1,463)	1:A:16:ASP:H	1:A:18:PHE:H	4	0.07	0.18
(1,379)	1:A:33:LYS:H	1:A:35:VAL:HG21	4	0.05	0.07
(1,379)	1:A:33:LYS:H	1:A:35:VAL:HG22	4	0.05	0.07
(1,379)	1:A:33:LYS:H	1:A:35:VAL:HG23	4	0.05	0.07
(1,376)	1:A:33:LYS:H	1:A:35:VAL:H	4	0.07	0.09
(1,291)	1:A:182:LEU:HD21	1:A:183:GLU:H	4	0.1	0.13
(1,291)	1:A:182:LEU:HD22	1:A:183:GLU:H	4	0.1	0.13
(1,291)	1:A:182:LEU:HD23	1:A:183:GLU:H	4	0.1	0.13
(1,253)	1:A:68:ILE:H	1:A:72:LEU:HD11	4	0.03	0.05
(1,253)	1:A:68:ILE:H	1:A:72:LEU:HD12	4	0.03	0.05
(1,253)	1:A:68:ILE:H	1:A:72:LEU:HD13	4	0.03	0.05
(1,224)	1:A:6:ASP:H	1:A:13:LEU:HD21	4	0.06	0.08
(1,224)	1:A:6:ASP:H	1:A:13:LEU:HD22	4	0.06	0.08
(1,224)	1:A:6:ASP:H	1:A:13:LEU:HD23	4	0.06	0.08
(1,1100)	1:A:96:MET:O	1:A:100:ILE:N	4	0.02	0.03
(1,1075)	1:A:37:ARG:H	1:A:65:GLU:O	4	0.06	0.09
(1,1073)	1:A:37:ARG:O	1:A:65:GLU:H	4	0.04	0.09
(1,1059)	1:A:28:TYR:O	1:A:171:LEU:H	4	0.03	0.06
(1,1040)	1:A:139:PHE:O	1:A:154:ALA:N	4	0.01	0.01
(1,1035)	1:A:137:ALA:O	1:A:156:ILE:H	4	0.02	0.05
(1,1019)	1:A:3:ILE:O	1:A:179:GLU:H	4	0.02	0.04
(1,1010)	1:A:18:PHE:HE1	1:A:73:ASN:HD22	4	1.03	1.26
(1,996)	1:A:35:VAL:HG21	1:A:72:LEU:HD11	3	0.03	0.04
(1,996)	1:A:35:VAL:HG21	1:A:72:LEU:HD12	3	0.03	0.04
(1,996)	1:A:35:VAL:HG21	1:A:72:LEU:HD13	3	0.03	0.04
(1,996)	1:A:35:VAL:HG22	1:A:72:LEU:HD11	3	0.03	0.04
(1,996)	1:A:35:VAL:HG22	1:A:72:LEU:HD12	3	0.03	0.04
(1,996)	1:A:35:VAL:HG22	1:A:72:LEU:HD13	3	0.03	0.04



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,996)	1:A:35:VAL:HG23	1:A:72:LEU:HD11	3	0.03	0.04
(1,996)	1:A:35:VAL:HG23	1:A:72:LEU:HD12	3	0.03	0.04
(1,996)	1:A:35:VAL:HG23	1:A:72:LEU:HD13	3	0.03	0.04
(1,948)	1:A:158:TYR:H	1:A:158:TYR:HB2	3	0.08	0.13
(1,947)	1:A:152:GLN:HE21	1:A:176:ILE:HD11	3	0.09	0.15
(1,947)	1:A:152:GLN:HE21	1:A:176:ILE:HD12	3	0.09	0.15
(1,947)	1:A:152:GLN:HE21	1:A:176:ILE:HD13	3	0.09	0.15
(1,947)	1:A:152:GLN:HE22	1:A:176:ILE:HD11	3	0.09	0.15
(1,947)	1:A:152:GLN:HE22	1:A:176:ILE:HD12	3	0.09	0.15
(1,947)	1:A:152:GLN:HE22	1:A:176:ILE:HD13	3	0.09	0.15
(1,945)	1:A:152:GLN:HE21	1:A:172:VAL:H	3	0.02	0.03
(1,945)	1:A:152:GLN:HE22	1:A:172:VAL:H	3	0.02	0.03
(1,90)	1:A:161:VAL:H	1:A:163:GLY:H	3	0.08	0.14
(1,891)	1:A:36:VAL:HG11	1:A:45:ALA:H	3	0.06	0.08
(1,891)	1:A:36:VAL:HG12	1:A:45:ALA:H	3	0.06	0.08
(1,891)	1:A:36:VAL:HG13	1:A:45:ALA:H	3	0.06	0.08
(1,89)	1:A:162:ASP:H	1:A:163:GLY:H	3	0.11	0.16
(1,842)	1:A:113:VAL:HG11	1:A:117:LYS:H	3	0.05	0.06
(1,842)	1:A:113:VAL:HG12	1:A:117:LYS:H	3	0.05	0.06
(1,842)	1:A:113:VAL:HG13	1:A:117:LYS:H	3	0.05	0.06
(1,835)	1:A:140:ILE:HD11	1:A:146:GLU:H	3	0.05	0.09
(1,835)	1:A:140:ILE:HD12	1:A:146:GLU:H	3	0.05	0.09
(1,835)	1:A:140:ILE:HD13	1:A:146:GLU:H	3	0.05	0.09
(1,819)	1:A:76:LEU:HD11	1:A:140:ILE:H	3	0.01	0.02
(1,819)	1:A:76:LEU:HD12	1:A:140:ILE:H	3	0.01	0.02
(1,819)	1:A:76:LEU:HD13	1:A:140:ILE:H	3	0.01	0.02
(1,808)	1:A:121:GLN:HE22	1:A:125:VAL:HG11	3	0.08	0.14
(1,808)	1:A:121:GLN:HE22	1:A:125:VAL:HG12	3	0.08	0.14
(1,808)	1:A:121:GLN:HE22	1:A:125:VAL:HG13	3	0.08	0.14
(1,766)	1:A:77:VAL:HG11	1:A:140:ILE:HD11	3	0.06	0.14
(1,766)	1:A:77:VAL:HG11	1:A:140:ILE:HD12	3	0.06	0.14
(1,766)	1:A:77:VAL:HG11	1:A:140:ILE:HD13	3	0.06	0.14
(1,766)	1:A:77:VAL:HG12	1:A:140:ILE:HD11	3	0.06	0.14
(1,766)	1:A:77:VAL:HG12	1:A:140:ILE:HD12	3	0.06	0.14
(1,766)	1:A:77:VAL:HG12	1:A:140:ILE:HD13	3	0.06	0.14
(1,766)	1:A:77:VAL:HG13	1:A:140:ILE:HD11	3	0.06	0.14
(1,766)	1:A:77:VAL:HG13	1:A:140:ILE:HD12	3	0.06	0.14
(1,766)	1:A:77:VAL:HG13	1:A:140:ILE:HD13	3	0.06	0.14
(1,756)	1:A:2:LEU:HD21	1:A:182:LEU:HD21	3	0.08	0.13
(1,756)	1:A:2:LEU:HD21	1:A:182:LEU:HD22	3	0.08	0.13
(1,756)	1:A:2:LEU:HD21	1:A:182:LEU:HD23	3	0.08	0.13
(1,756)	1:A:2:LEU:HD22	1:A:182:LEU:HD21	3	0.08	0.13



Continued from previous page...

1,756	Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,756) 1:A:2:LEU:HD23 1:A:182:LEU:HD21 3 0.08 0.13 (1,756) 1:A:2:LEU:HD23 1:A:182:LEU:HD23 3 0.08 0.13 (1,756) 1:A:2:LEU:HD23 1:A:182:LEU:HD123 3 0.08 0.13 (1,743) 1:A:42:LLE:HD11 1:A:44:LEU:HD12 3 0.1 0.13 (1,743) 1:A:42:LLE:HD11 1:A:44:LEU:HD12 3 0.1 0.13 (1,743) 1:A:42:LLE:HD12 1:A:44:LEU:HD13 3 0.1 0.13 (1,743) 1:A:42:LE:HD12 1:A:44:LEU:HD13 3 0.1 0.13 (1,743) 1:A:42:LE:HD13 1:A:44:LEU:HD13 3 0.1 0.	(1,756)	1:A:2:LEU:HD22	1:A:182:LEU:HD22	3	0.08	0.13
(1,756) 1:A:2:LEU:HD23 1:A:182:LEU:HD23 3 0.08 0.13 (1,756) 1:A:2:LEU:HD23 3 0.08 0.13 (1,743) 1:A:42:LE:HD11 1:A:44:LEU:HD12 3 0.1 0.13 (1,743) 1:A:42:LE:HD11 1:A:44:LEU:HD12 3 0.1 0.13 (1,743) 1:A:42:LE:HD11 1:A:44:LEU:HD13 3 0.1 0.13 (1,743) 1:A:42:LE:HD12 1:A:44:LEU:HD12 3 0.1 0.13 (1,743) 1:A:42:LE:HD12 1:A:44:LEU:HD12 3 0.1 0.13 (1,743) 1:A:42:LE:HD13 1:A:44:LEU:HD12 3 0.1 0.13 (1,743) 1:A:42:LE:HD13 1:A:44:LEU:HD13 3 0.1 0.13 ((1,756)	1:A:2:LEU:HD22	1:A:182:LEU:HD23	3	0.08	0.13
(1,756) 1:A:2:LEU:HD23 1:A:182:LEU:HD23 3 0.08 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD11 1:A:44:LEU:HD11 3 0.1 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD11 1:A:44:LEU:HD12 3 0.1 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD11 1:A:44:LEU:HD11 3 0.1 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD12 1:A:44:LEU:HD11 3 0.1 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD12 1:A:44:LEU:HD12 3 0.1 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD12 1:A:44:LEU:HD12 3 0.1 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD12 1:A:44:LEU:HD13 3 0.1 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD13 1:A:44:LEU:HD13 3 0.1 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD13 1:A:44:LEU:HD13 3 0.1 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD13 1:A:44:LEU:HD11 3 0.1 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD13 1:A:44:LEU:HD13 3 0.1 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD13 1:A:44:LEU:HD13 3 0.1 0.13 (1,743) 1:A:6:ASP:H 1:A:11:ASP:H 3 0.04 0.06 (1,668) 1:A:55:ALA:H 1:A:56:GLU:H 3 0.04 0.06 (1,668) 1:A:55:ALA:H 1:A:56:GLU:H 3 0.04 0.06 (1,668) 1:A:55:ALA:H 1:A:56:GLU:H 3 0.00 0.1 (1,600) 1:A:80:ASN:H 1:A:82:TYR:H 3 0.1 0.13 (1,600) 1:A:27:VAL:HG21 1:A:123:TRP:HE1 3 0.02 0.03 (1,600) 1:A:27:VAL:HG22 1:A:123:TRP:HE1 3 0.02 0.03 (1,59) 1:A:123:TRP:HE1 1:A:127:LEU:HD21 3 0.06 0.08 (1,59) 1:A:123:TRP:HE1 1:A:127:LEU:HD21 3 0.06 0.08 (1,59) 1:A:123:TRP:HE1 1:A:127:LEU:HD22 3 0.06 0.08 (1,59) 1:A:123:TRP:HE1 1:A:127:LEU:HD23 3 0.06 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD11 1:A:155:ILE:HD11 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD11 1:A:155:ILE:HD11 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD11 1:A:155:ILE:HD11 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD12 1:A:155:ILE:HD11 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD12 1:A:155:ILE:HD11 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD12 1:A:155:ILE:HD11 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD11 1:A:139:PHE:HZ 3 0.07 0.1 (1,560) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:139:PHE:HZ 3 0.07 0.1 (1,560) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD11 3 0.03 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD	(1,756)	1:A:2:LEU:HD23	1:A:182:LEU:HD21	3	0.08	0.13
(1,743) 1:A:42:ILE:HD11 1:A:44:LEU:HD11 3 0.1 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD11 1:A:44:LEU:HD12 3 0.1 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD11 1:A:44:LEU:HD13 3 0.1 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD12 1:A:44:LEU:HD11 3 0.1 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD12 1:A:44:LEU:HD12 3 0.1 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD12 1:A:44:LEU:HD13 3 0.1 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD12 1:A:44:LEU:HD13 3 0.1 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD13 1:A:44:LEU:HD13 3 0.1 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD13 1:A:44:LEU:HD12 3 0.1 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD13 1:A:44:LEU:HD12 3 0.1 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD13 1:A:44:LEU:HD13 3 0.1 0.13 (1,691) 1:A:6:ASP:H 1:A:11:ASP:H 3 0.04 0.06 (1,668) 1:A:55:ALA:H 1:A:56:GLU:H 3 0.06 0.1 (1,609) 1:A:80:ASN:H 1:A:82:TYR:H 3 0.1 0.13 (1,600) 1:A:27:VAL:HG21 1:A:123:TRP:HE1 3 0.02 0.03 (1,600) 1:A:27:VAL:HG22 1:A:123:TRP:HE1 3 0.02 0.03 (1,500) 1:A:27:VAL:HG22 1:A:123:TRP:HE1 3 0.02 0.03 (1,59) 1:A:123:TRP:HE1 1:A:127:LEU:HD21 3 0.06 0.08 (1,59) 1:A:123:TRP:HE1 1:A:127:LEU:HD21 3 0.06 0.08 (1,59) 1:A:123:TRP:HE1 1:A:127:LEU:HD22 3 0.06 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD11 1:A:155:ILE:HD11 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD12 1:A:155:ILE:HD13 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD11 1:A:155:ILE:HD11 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD11 1:A:155:ILE:HD11 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD11 1:A:155:ILE:HD13 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD11 1:A:155:ILE:HD13 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD11 1:A:139:PHE:HZ 3 0.07 0.1 (1,565) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:139:PHE:HZ 3 0.07 0.1 (1,566) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:139:PHE:HZ 3 0.07 0.1 (1,566) 1:A:	(1,756)	1:A:2:LEU:HD23	1:A:182:LEU:HD22	3	0.08	0.13
(1,743) 1:A:42:ILE:HD11 1:A:44:LEU:HD12 3 0.1 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD11 1:A:44:LEU:HD13 3 0.1 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD12 1:A:44:LEU:HD11 3 0.1 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD12 1:A:44:LEU:HD13 3 0.1 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD13 1:A:44:LEU:HD11 3 0.1 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD13 1:A:44:LEU:HD12 3 0.1 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD13 1:A:44:LEU:HD13 3 0.1 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD13 1:A:44:LEU:HD13 3 0.1 0.13 (1,691) 1:A:6:ASP:H 1:A:1:ASP:H 3 0.0 0.01 (1,601) 1:A:6:ASP:H 1:A:1:ASP:H 3 0.06 0.1 (1,609) 1:A:2:A:CA:HG21 1:A:123:TRP:HE1 3 0.02 0.03 (1,500) 1:A:2:A:HG22 1:A:123:TRP:HE1 3 0.02 0.03 <td>(1,756)</td> <td>1:A:2:LEU:HD23</td> <td>1:A:182:LEU:HD23</td> <td>3</td> <td>0.08</td> <td>0.13</td>	(1,756)	1:A:2:LEU:HD23	1:A:182:LEU:HD23	3	0.08	0.13
(1,743) 1:A:42:ILE:HD11 1:A:44:LEU:HD13 3 0.1 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD12 1:A:44:LEU:HD11 3 0.1 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD12 1:A:44:LEU:HD12 3 0.1 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD12 1:A:44:LEU:HD13 3 0.1 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD13 1:A:44:LEU:HD12 3 0.1 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD13 1:A:44:LEU:HD13 3 0.1 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD13 1:A:44:LEU:HD13 3 0.1 0.13 (1,743) 1:A:6:ASP:H 1:A:1:ASP:H 3 0.04 0.06 (1,691) 1:A:6:ASP:H 1:A:1:ASP:H 3 0.04 0.06 (1,609) 1:A:2:ASO:ASN:H 1:A:1:A:56:GLU:H 3 0.06 0.1 (1,600) 1:A:2:TAHG21 1:A:123:TRP:HE1 3 0.02 0.03 (1,50) 1:A:123:TRP:HE1 1:A:123:TRP:HE1 3 0.02 0.03 <	(1,743)	1:A:42:ILE:HD11	1:A:44:LEU:HD11	3	0.1	0.13
(1,743) 1:A:42:ILE:HD12 1:A:44:LEU:HD12 3 0.1 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD12 1:A:44:LEU:HD13 3 0.1 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD12 1:A:44:LEU:HD13 3 0.1 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD13 1:A:44:LEU:HD12 3 0.1 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD13 1:A:44:LEU:HD13 3 0.1 0.13 (1,743) 1:A:6:ASP:H 1:A:11:ASP:H 3 0.1 0.13 (1,691) 1:A:6:ASP:H 1:A:11:ASP:H 3 0.04 0.06 (1,609) 1:A:80:ASN:H 1:A:82:TYR:H 3 0.06 0.1 (1,609) 1:A:27:VAL:HG21 1:A:123:TRP:HE1 3 0.02 0.03 (1,60) 1:A:27:VAL:HG22 1:A:123:TRP:HE1 3 0.02 0.03 (1,509) 1:A:123:TRP:HE1 1:A:123:TRP:HE1 3 0.02 0.03 (1,59) 1:A:123:TRP:HE1 1:A:122:LEU:HD23 3 0.06 0.08 </td <td>(1,743)</td> <td>1:A:42:ILE:HD11</td> <td>1:A:44:LEU:HD12</td> <td>3</td> <td>0.1</td> <td>0.13</td>	(1,743)	1:A:42:ILE:HD11	1:A:44:LEU:HD12	3	0.1	0.13
(1,743) 1:A:42:ILE:HD12 1:A:44:LEU:HD12 3 0.1 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD12 1:A:44:LEU:HD13 3 0.1 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD13 1:A:44:LEU:HD12 3 0.1 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD13 1:A:44:LEU:HD13 3 0.1 0.13 (1,6743) 1:A:42:ILE:HD13 1:A:44:LEU:HD13 3 0.1 0.13 (1,691) 1:A:6:ASP:H 1:A:11:ASP:H 3 0.04 0.06 (1,668) 1:A:55:ALA:H 1:A:56:GLU:H 3 0.06 0.1 (1,609) 1:A:80:ASN:H 1:A:82:TYR:HE1 3 0.02 0.03 (1,60) 1:A:27:VAL:HG21 1:A:123:TRP:HE1 3 0.02 0.03 (1,60) 1:A:27:VAL:HG23 1:A:123:TRP:HE1 3 0.02 0.03 (1,59) 1:A:123:TRP:HE1 1:A:127:LEU:HD21 3 0.06 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD11 1:A:155:ILE:HD11 3 0.04 0.08	(1,743)	1:A:42:ILE:HD11	1:A:44:LEU:HD13	3	0.1	0.13
(1,743) 1:A:42:ILE:HD12 1:A:44:LEU:HD13 3 0.1 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD13 1:A:44:LEU:HD11 3 0.1 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD13 1:A:44:LEU:HD12 3 0.1 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD13 1:A:44:LEU:HD13 3 0.1 0.13 (1,691) 1:A:6:ASP:H 1:A:11:ASP:H 3 0.04 0.06 (1,691) 1:A:6:ASP:H 1:A:11:ASP:HB 3 0.04 0.06 (1,609) 1:A:80:ASN:H 1:A:82:TYR:H 3 0.1 0.13 (1,600) 1:A:27:VAL:HG21 1:A:123:TRP:HE1 3 0.02 0.03 (1,500) 1:A:27:VAL:HG23 1:A:123:TRP:HE1 3 0.02 0.03 (1,500) 1:A:123:TRP:HE1 1:A:127:LEU:HD21 3 0.06 0.08 (1,59) 1:A:123:TRP:HE1 1:A:127:LEU:HD21 3 0.06 0.08 (1,59) 1:A:128:LEU:HD11 1:A:155:ILE:HD12 3 0.06 0.08	(1,743)	1:A:42:ILE:HD12	1:A:44:LEU:HD11	3	0.1	0.13
(1,743) 1:A:42:ILE:HD13 1:A:44:LEU:HD11 3 0.1 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD13 1:A:44:LEU:HD12 3 0.1 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD13 1:A:44:LEU:HD13 3 0.1 0.13 (1,691) 1:A:6:ASP:H 1:A:11:ASP:H 3 0.04 0.06 (1,668) 1:A:5:ALA:H 1:A:56:GLU:H 3 0.06 0.1 (1,609) 1:A:80:ASN:H 1:A:82:TYR:H 3 0.1 0.13 (1,600) 1:A:7:VAL:HG21 1:A:123:TRP:HE1 3 0.02 0.03 (1,60) 1:A:27:VAL:HG22 1:A:123:TRP:HE1 3 0.02 0.03 (1,50) 1:A:123:TRP:HE1 1:A:127:LEU:HD21 3 0.06 0.08 (1,59) 1:A:123:TRP:HE1 1:A:127:LEU:HD22 3 0.06 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD11 1:A:155:ILE:HD12 3 0.06 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD11 1:A:155:ILE:HD13 3 0.04 0.08	(1,743)	1:A:42:ILE:HD12	1:A:44:LEU:HD12	3	0.1	0.13
(1,743) 1:A:42:ILE:HD13 1:A:44:LEU:HD12 3 0.1 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD13 1:A:44:LEU:HD13 3 0.1 0.13 (1,691) 1:A:6:ASP:H 1:A:11:ASP:H 3 0.04 0.06 (1,668) 1:A:55:ALA:H 1:A:56:GLU:H 3 0.06 0.1 (1,609) 1:A:80:ASN:H 1:A:23:TRP:HE1 3 0.02 0.03 (1,600) 1:A:27:VAL:HG21 1:A:123:TRP:HE1 3 0.02 0.03 (1,600) 1:A:27:VAL:HG22 1:A:123:TRP:HE1 3 0.02 0.03 (1,600) 1:A:123:TRP:HE1 1:A:123:TRP:HE1 3 0.02 0.03 (1,59) 1:A:123:TRP:HE1 1:A:127:LEU:HD21 3 0.06 0.08 (1,59) 1:A:123:TRP:HE1 1:A:127:LEU:HD22 3 0.06 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD11 1:A:155:ILE:HD11 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD12 1:A:155:ILE:HD13 3 0.04 0.08	(1,743)	1:A:42:ILE:HD12	1:A:44:LEU:HD13	3	0.1	0.13
(1,743) 1:A:42:ILE:HD13 1:A:44:LEU:HD13 3 0.1 0.13 (1,691) 1:A:6:ASP:H 1:A:11:ASP:H 3 0.04 0.06 (1,668) 1:A:55:ALA:H 1:A:56:GLU:H 3 0.06 0.1 (1,609) 1:A:25:ALA:H 1:A:82:TYR:H 3 0.1 0.13 (1,600) 1:A:27:VAL:HG21 1:A:123:TRP:HE1 3 0.02 0.03 (1,60) 1:A:27:VAL:HG22 1:A:123:TRP:HE1 3 0.02 0.03 (1,60) 1:A:23:TRP:HE21 1:A:123:TRP:HE1 3 0.02 0.03 (1,60) 1:A:23:TRP:HE1 1:A:123:TRP:HE1 3 0.02 0.03 (1,50) 1:A:123:TRP:HE1 1:A:127:LEU:HD21 3 0.06 0.08 (1,59) 1:A:123:TRP:HE1 1:A:127:LEU:HD22 3 0.06 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD11 1:A:155:ILE:HD11 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD12 1:A:155:ILE:HD13 3 0.04 0.08	(1,743)	1:A:42:ILE:HD13	1:A:44:LEU:HD11	3	0.1	0.13
(1,691) 1:A:6:ASP:H 1:A:11:ASP:H 3 0.04 0.06 (1,668) 1:A:55:ALA:H 1:A:56:GLU:H 3 0.06 0.1 (1,609) 1:A:80:ASN:H 1:A:82:TYR:H 3 0.1 0.13 (1,60) 1:A:27:VAL:HG21 1:A:123:TRP:HE1 3 0.02 0.03 (1,60) 1:A:27:VAL:HG22 1:A:123:TRP:HE1 3 0.02 0.03 (1,60) 1:A:123:TRP:HE1 1:A:123:TRP:HE1 3 0.02 0.03 (1,59) 1:A:123:TRP:HE1 1:A:127:LEU:HD21 3 0.06 0.08 (1,59) 1:A:123:TRP:HE1 1:A:127:LEU:HD22 3 0.06 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD11 1:A:155:ILE:HD13 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD11 1:A:155:ILE:HD12 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD12 1:A:155:ILE:HD13 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD13 1:A:155:ILE:HD13 3 0.04 0.08	(1,743)	1:A:42:ILE:HD13	1:A:44:LEU:HD12	3	0.1	0.13
(1,691) 1:A:6:ASP:H 1:A:11:ASP:H 3 0.04 0.06 (1,668) 1:A:55:ALA:H 1:A:56:GLU:H 3 0.06 0.1 (1,609) 1:A:80:ASN:H 1:A:82:TYR:H 3 0.1 0.13 (1,60) 1:A:27:VAL:HG21 1:A:123:TRP:HE1 3 0.02 0.03 (1,60) 1:A:27:VAL:HG22 1:A:123:TRP:HE1 3 0.02 0.03 (1,50) 1:A:123:TRP:HE1 1:A:123:TRP:HE1 3 0.02 0.03 (1,50) 1:A:123:TRP:HE1 1:A:127:LEU:HD21 3 0.06 0.08 (1,59) 1:A:123:TRP:HE1 1:A:127:LEU:HD22 3 0.06 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD11 1:A:155:LE:HD13 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD11 1:A:155:LE:HD13 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD12 1:A:155:LE:HD13 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD13 1:A:155:LE:HD13 3 0.04 0.08 <td>(1,743)</td> <td>1:A:42:ILE:HD13</td> <td>1:A:44:LEU:HD13</td> <td>3</td> <td>0.1</td> <td>0.13</td>	(1,743)	1:A:42:ILE:HD13	1:A:44:LEU:HD13	3	0.1	0.13
(1,609) 1:A:80:ASN:H 1:A:82:TYR:H 3 0.1 0.13 (1,60) 1:A:27:VAL:HG21 1:A:123:TRP:HE1 3 0.02 0.03 (1,60) 1:A:27:VAL:HG22 1:A:123:TRP:HE1 3 0.02 0.03 (1,60) 1:A:27:VAL:HG23 1:A:123:TRP:HE1 3 0.02 0.03 (1,59) 1:A:123:TRP:HE1 1:A:127:LEU:HD21 3 0.06 0.08 (1,59) 1:A:123:TRP:HE1 1:A:127:LEU:HD22 3 0.06 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD11 1:A:155:LE:HD13 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD11 1:A:155:LE:HD12 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD11 1:A:155:LE:HD13 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD12 1:A:155:LE:HD11 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD13 1:A:155:LE:HD13 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD13 1:A:155:LE:HD13 3 0.04		1:A:6:ASP:H	1:A:11:ASP:H	3	0.04	0.06
(1,60) 1:A:27:VAL:HG21 1:A:123:TRP:HE1 3 0.02 0.03 (1,60) 1:A:27:VAL:HG22 1:A:123:TRP:HE1 3 0.02 0.03 (1,60) 1:A:27:VAL:HG23 1:A:123:TRP:HE1 3 0.02 0.03 (1,59) 1:A:123:TRP:HE1 1:A:127:LEU:HD21 3 0.06 0.08 (1,59) 1:A:123:TRP:HE1 1:A:127:LEU:HD22 3 0.06 0.08 (1,59) 1:A:123:TRP:HE1 1:A:127:LEU:HD23 3 0.06 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD11 1:A:125:LE:HD13 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD11 1:A:155:LE:HD12 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD12 1:A:155:LE:HD13 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD12 1:A:155:LE:HD11 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD12 1:A:155:LE:HD13 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD13 1:A:155:LE:HD13 3 0.04 <td>(1,668)</td> <td>1:A:55:ALA:H</td> <td>1:A:56:GLU:H</td> <td>3</td> <td>0.06</td> <td>0.1</td>	(1,668)	1:A:55:ALA:H	1:A:56:GLU:H	3	0.06	0.1
(1,60) 1:A:27:VAL:HG22 1:A:123:TRP:HE1 3 0.02 0.03 (1,60) 1:A:27:VAL:HG23 1:A:123:TRP:HE1 3 0.02 0.03 (1,59) 1:A:123:TRP:HE1 1:A:127:LEU:HD21 3 0.06 0.08 (1,59) 1:A:123:TRP:HE1 1:A:127:LEU:HD22 3 0.06 0.08 (1,59) 1:A:128:LEU:HD11 1:A:127:LEU:HD23 3 0.06 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD11 1:A:125:ILE:HD11 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD11 1:A:155:ILE:HD12 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD11 1:A:155:ILE:HD13 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD12 1:A:155:ILE:HD11 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD12 1:A:155:ILE:HD13 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD13 1:A:155:ILE:HD13 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD13 1:A:155:ILE:HD13 3 <	(1,609)	1:A:80:ASN:H	1:A:82:TYR:H	3	0.1	0.13
(1,60) 1:A:27:VAL:HG23 1:A:123:TRP:HE1 3 0.02 0.03 (1,59) 1:A:123:TRP:HE1 1:A:127:LEU:HD21 3 0.06 0.08 (1,59) 1:A:123:TRP:HE1 1:A:127:LEU:HD22 3 0.06 0.08 (1,59) 1:A:123:TRP:HE1 1:A:127:LEU:HD23 3 0.06 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD11 1:A:155:ILE:HD11 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD11 1:A:155:ILE:HD12 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD11 1:A:155:ILE:HD13 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD12 1:A:155:ILE:HD11 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD12 1:A:155:ILE:HD12 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD13 1:A:155:ILE:HD13 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD13 1:A:155:ILE:HD11 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:155:ILE:HD13 3		1:A:27:VAL:HG21	1:A:123:TRP:HE1	3	0.02	0.03
(1,59) 1:A:123:TRP:HE1 1:A:127:LEU:HD21 3 0.06 0.08 (1,59) 1:A:123:TRP:HE1 1:A:127:LEU:HD22 3 0.06 0.08 (1,59) 1:A:123:TRP:HE1 1:A:127:LEU:HD23 3 0.06 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD11 1:A:155:ILE:HD11 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD11 1:A:155:ILE:HD13 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD12 1:A:155:ILE:HD13 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD12 1:A:155:ILE:HD11 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD12 1:A:155:ILE:HD12 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD12 1:A:155:ILE:HD13 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD13 1:A:155:ILE:HD13 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD13 1:A:155:ILE:HD12 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:155:ILE:HD13 3	(1,60)	1:A:27:VAL:HG22	1:A:123:TRP:HE1	3	0.02	0.03
(1,59) 1:A:123:TRP:HE1 1:A:127:LEU:HD22 3 0.06 0.08 (1,59) 1:A:123:TRP:HE1 1:A:127:LEU:HD23 3 0.06 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD11 1:A:155:ILE:HD11 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD11 1:A:155:ILE:HD12 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD12 1:A:155:ILE:HD11 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD12 1:A:155:ILE:HD11 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD12 1:A:155:ILE:HD12 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD12 1:A:155:ILE:HD13 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD13 1:A:155:ILE:HD11 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD13 1:A:155:ILE:HD12 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD13 1:A:155:ILE:HD12 3 0.04 0.08 (1,565) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:139:PHE:HZ 3	(1,60)	1:A:27:VAL:HG23	1:A:123:TRP:HE1	3	0.02	0.03
(1,59) 1:A:123:TRP:HE1 1:A:127:LEU:HD23 3 0.06 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD11 1:A:155:ILE:HD11 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD11 1:A:155:ILE:HD12 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD11 1:A:155:ILE:HD13 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD12 1:A:155:ILE:HD11 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD12 1:A:155:ILE:HD12 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD12 1:A:155:ILE:HD13 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD13 1:A:155:ILE:HD11 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD13 1:A:155:ILE:HD12 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD13 1:A:155:ILE:HD12 3 0.04 0.08 (1,565) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:155:ILE:HD13 3 0.07 0.1 (1,565) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:139:PHE:HZ 3	(1,59)	1:A:123:TRP:HE1	1:A:127:LEU:HD21	3	0.06	0.08
(1,576) 1:A:128:LEU:HD11 1:A:155:ILE:HD11 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD11 1:A:155:ILE:HD12 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD11 1:A:155:ILE:HD13 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD12 1:A:155:ILE:HD11 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD12 1:A:155:ILE:HD12 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD12 1:A:155:ILE:HD13 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD13 1:A:155:ILE:HD11 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD13 1:A:155:ILE:HD12 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD13 1:A:155:ILE:HD13 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:139:PHE:HZ 3 0.07 0.1 (1,565) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:139:PHE:HZ 3 0.07 0.1 (1,560) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD11 3	(1,59)	1:A:123:TRP:HE1	1:A:127:LEU:HD22	3	0.06	0.08
(1,576) 1:A:128:LEU:HD11 1:A:155:ILE:HD12 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD11 1:A:155:ILE:HD13 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD12 1:A:155:ILE:HD11 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD12 1:A:155:ILE:HD12 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD12 1:A:155:ILE:HD13 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD13 1:A:155:ILE:HD11 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD13 1:A:155:ILE:HD12 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD13 1:A:155:ILE:HD13 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:139:PHE:HZ 3 0.07 0.1 (1,565) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:139:PHE:HZ 3 0.07 0.1 (1,565) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:176:ILE:HD11 3 0.03 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD13 3	(1,59)	1:A:123:TRP:HE1	1:A:127:LEU:HD23	3	0.06	0.08
(1,576) 1:A:128:LEU:HD11 1:A:155:ILE:HD13 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD12 1:A:155:ILE:HD11 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD12 1:A:155:ILE:HD12 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD12 1:A:155:ILE:HD13 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD13 1:A:155:ILE:HD11 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD13 1:A:155:ILE:HD12 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD13 1:A:155:ILE:HD13 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:139:PHE:HZ 3 0.07 0.1 (1,565) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:139:PHE:HZ 3 0.07 0.1 (1,565) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:176:ILE:HD11 3 0.03 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD12 3 0.03 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD11 3	(1,576)	1:A:128:LEU:HD11	1:A:155:ILE:HD11	3	0.04	0.08
(1,576) 1:A:128:LEU:HD12 1:A:155:ILE:HD11 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD12 1:A:155:ILE:HD12 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD12 1:A:155:ILE:HD13 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD13 1:A:155:ILE:HD11 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD13 1:A:155:ILE:HD12 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD13 1:A:155:ILE:HD13 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:139:PHE:HZ 3 0.07 0.1 (1,565) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:139:PHE:HZ 3 0.07 0.1 (1,565) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:176:ILE:HD11 3 0.03 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD12 3 0.03 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD11 3 0.03 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD12 3	(1,576)	1:A:128:LEU:HD11	1:A:155:ILE:HD12	3	0.04	0.08
(1,576) 1:A:128:LEU:HD12 1:A:155:ILE:HD12 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD12 1:A:155:ILE:HD13 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD13 1:A:155:ILE:HD11 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD13 1:A:155:ILE:HD12 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:139:PHE:HZ 3 0.07 0.1 (1,565) 1:A:68:ILE:HD11 1:A:139:PHE:HZ 3 0.07 0.1 (1,565) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:139:PHE:HZ 3 0.07 0.1 (1,560) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD11 3 0.03 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD13 3 0.03 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD11 3 0.03 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD12 3 0.03 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD13 3 <t< td=""><td>(1,576)</td><td>1:A:128:LEU:HD11</td><td>1:A:155:ILE:HD13</td><td>3</td><td>0.04</td><td>0.08</td></t<>	(1,576)	1:A:128:LEU:HD11	1:A:155:ILE:HD13	3	0.04	0.08
(1,576) 1:A:128:LEU:HD12 1:A:155:ILE:HD13 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD13 1:A:155:ILE:HD11 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD13 1:A:155:ILE:HD12 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD13 1:A:155:ILE:HD13 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:139:PHE:HZ 3 0.07 0.1 (1,565) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:139:PHE:HZ 3 0.07 0.1 (1,565) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:139:PHE:HZ 3 0.07 0.1 (1,560) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD11 3 0.03 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD13 3 0.03 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD11 3 0.03 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD12 3 0.03 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD13 3 <t< td=""><td>(1,576)</td><td>1:A:128:LEU:HD12</td><td>1:A:155:ILE:HD11</td><td>3</td><td>0.04</td><td>0.08</td></t<>	(1,576)	1:A:128:LEU:HD12	1:A:155:ILE:HD11	3	0.04	0.08
(1,576) 1:A:128:LEU:HD13 1:A:155:ILE:HD11 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD13 1:A:155:ILE:HD12 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD13 1:A:155:ILE:HD13 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD13 1:A:155:ILE:HD13 3 0.04 0.08 (1,565) 1:A:68:ILE:HD11 1:A:139:PHE:HZ 3 0.07 0.1 (1,565) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:139:PHE:HZ 3 0.07 0.1 (1,565) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:176:ILE:HD11 3 0.03 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD12 3 0.03 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD11 3 0.03 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD12 3 0.03 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD13 3 0.03 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD13 3	(1,576)	1:A:128:LEU:HD12	1:A:155:ILE:HD12	3	0.04	0.08
(1,576) 1:A:128:LEU:HD13 1:A:155:ILE:HD12 3 0.04 0.08 (1,576) 1:A:128:LEU:HD13 1:A:155:ILE:HD13 3 0.04 0.08 (1,565) 1:A:68:ILE:HD11 1:A:139:PHE:HZ 3 0.07 0.1 (1,565) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:139:PHE:HZ 3 0.07 0.1 (1,565) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:139:PHE:HZ 3 0.07 0.1 (1,565) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:176:ILE:HD11 3 0.03 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD12 3 0.03 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD11 3 0.03 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD12 3 0.03 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD12 3 0.03 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD13 3 0.03 0.04	(1,576)	1:A:128:LEU:HD12	1:A:155:ILE:HD13	3	0.04	0.08
(1,576) 1:A:128:LEU:HD13 1:A:155:ILE:HD13 3 0.04 0.08 (1,565) 1:A:68:ILE:HD11 1:A:139:PHE:HZ 3 0.07 0.1 (1,565) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:139:PHE:HZ 3 0.07 0.1 (1,565) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:139:PHE:HZ 3 0.07 0.1 (1,560) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD11 3 0.03 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD13 3 0.03 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD11 3 0.03 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD12 3 0.03 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD12 3 0.03 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD13 3 0.03 0.04	(1,576)	1:A:128:LEU:HD13	1:A:155:ILE:HD11	3	0.04	0.08
(1,565) 1:A:68:ILE:HD11 1:A:139:PHE:HZ 3 0.07 0.1 (1,565) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:139:PHE:HZ 3 0.07 0.1 (1,565) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:139:PHE:HZ 3 0.07 0.1 (1,560) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD11 3 0.03 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD12 3 0.03 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD11 3 0.03 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD12 3 0.03 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD12 3 0.03 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD13 3 0.03 0.04	(1,576)	1:A:128:LEU:HD13	1:A:155:ILE:HD12	3	0.04	0.08
(1,565) 1:A:68:ILE:HD11 1:A:139:PHE:HZ 3 0.07 0.1 (1,565) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:139:PHE:HZ 3 0.07 0.1 (1,565) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:139:PHE:HZ 3 0.07 0.1 (1,560) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD11 3 0.03 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD12 3 0.03 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD11 3 0.03 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD12 3 0.03 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD12 3 0.03 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD13 3 0.03 0.04	\ ' /	1:A:128:LEU:HD13	1:A:155:ILE:HD13		0.04	
(1,565) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:139:PHE:HZ 3 0.07 0.1 (1,565) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:139:PHE:HZ 3 0.07 0.1 (1,560) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD11 3 0.03 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD12 3 0.03 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD11 3 0.03 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD12 3 0.03 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD12 3 0.03 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD13 3 0.03 0.04	· · · /	1:A:68:ILE:HD11	1:A:139:PHE:HZ	3	0.07	0.1
(1,565) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:139:PHE:HZ 3 0.07 0.1 (1,560) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD11 3 0.03 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD12 3 0.03 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD13 3 0.03 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD11 3 0.03 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD12 3 0.03 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD13 3 0.03 0.04		1:A:68:ILE:HD12	1:A:139:PHE:HZ		0.07	0.1
(1,560) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD11 3 0.03 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD12 3 0.03 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD13 3 0.03 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD11 3 0.03 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD12 3 0.03 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD13 3 0.03 0.04		1:A:68:ILE:HD13	1:A:139:PHE:HZ		0.07	0.1
(1,560) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD12 3 0.03 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD13 3 0.03 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD11 3 0.03 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD12 3 0.03 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD13 3 0.03 0.04	` ′	1:A:171:LEU:HD11	1:A:176:ILE:HD11		0.03	0.04
(1,560) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD13 3 0.03 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD11 3 0.03 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD12 3 0.03 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD13 3 0.03 0.04		1:A:171:LEU:HD11	1:A:176:ILE:HD12	3	0.03	0.04
(1,560) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD11 3 0.03 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD12 3 0.03 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD13 3 0.03 0.04		1:A:171:LEU:HD11	1:A:176:ILE:HD13	3	0.03	0.04
(1,560) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD12 3 0.03 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD13 3 0.03 0.04		1:A:171:LEU:HD12	1:A:176:ILE:HD11		0.03	0.04
(1,560) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD13 3 0.03 0.04	` ′	1:A:171:LEU:HD12	1:A:176:ILE:HD12	3	0.03	0.04
	(1,560)	1:A:171:LEU:HD12	1:A:176:ILE:HD13	3	0.03	0.04
	(1,560)	1:A:171:LEU:HD13				0.04



Continued from previous page...

(1,560) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:176:ILE:HD13 3 0.03 0.04 (1,542) 1:A:35:VAL:HG21 1:A:72:LEU:HD11 3 0.03 0.04 (1,542) 1:A:35:VAL:HG21 1:A:72:LEU:HD12 3 0.03 0.04 (1,542) 1:A:35:VAL:HG21 1:A:72:LEU:HD12 3 0.03 0.04 (1,542) 1:A:35:VAL:HG21 1:A:72:LEU:HD13 3 0.03 0.04 (1,542) 1:A:35:VAL:HG22 1:A:72:LEU:HD13 3 0.03 0.04 (1,542) 1:A:35:VAL:HG22 1:A:72:LEU:HD11 3 0.03 0.04 (1,542) 1:A:35:VAL:HG22 1:A:72:LEU:HD11 3 0.03 0.04 (1,542) 1:A:35:VAL:HG22 1:A:72:LEU:HD12 3 0.03 0.04 (1,542) 1:A:35:VAL:HG22 1:A:72:LEU:HD13 3 0.03 0.04 (1,542) 1:A:35:VAL:HG23 1:A:72:LEU:HD13 3 0.03 0.04 (1,520) 1:A:22:LEU:HD22 1:A:28:TYR:HD1 3 1.02 2.83 (1,520) 1:A:22:LEU:HD22 1:A:28:TYR:HD1 3 1.02 2.83 (1,520) 1:A:22:LEU:HD23 1:A:28:TYR:HD1 3 1.02 2.83 (1,520) 1:A:22:LEU:HD23 1:A:28:TYR:HD1 3 1.02 2.83 (1,333) 1:A:98:ASN:H 1:A:100:ILE:HD11 3 0.05 0.05 (1,343) 1:A:98:ASN:H 1:A:100:ILE:HD11 3 0.05 0.05 (1,343) 1:A:98:ASN:H 1:A:100:ILE:HD12 3 0.05 0.05 (1,343) 1:A:98:ASN:H 1:A:100:ILE:HD12 3 0.05 0.05 (1,343) 1:A:63:HIS:H 1:A:64:VAL:HG22 3 0.05 0.08 (1,309) 1:A:63:HIS:H 1:A:64:VAL:HG22 3 0.05 0.08 (1,309) 1:A:63:HIS:H 1:A:64:VAL:HG22 3 0.05 0.08 (1,309) 1:A:63:HIS:H 1:A:64:VAL:HG23 3 0.05 0.08 (1,248) 1:A:76:LEU:HD11 1:A:77:VAL:H 3 0.04 0.08 (1,248) 1:A:76:LEU:HD11 1:A:77:VAL:H 3 0.04 0.08 (1,243) 1:A:66:ARG:H 1:A:72:LEU:HD22 3 0.04 0.09 (1,243) 1:A:66:ARG:H 1:A:72:LEU:HD22 3 0.04 0.09 (1,243) 1:A:66:ARG:H 1:A:72:LEU:HD22 3 0.04 0.09 (1,243) 1:A:66:ARG:H 1:A:72:LEU:HD23 3 0.04 0.09 (1,243) 1:A:66:ARG:H 1:A:72:LEU:HD21 3 0.04 0.09 (1,243) 1:A:66:ARG:H 1:A:72:LEU:HD22 3 0.04 0.09 (1,243) 1:A:66:ARG:H 1:A:72:LEU:HD22 3 0.04 0.09 (1,243) 1:A:66:ARG:H 1:A:72:LEU:HD23 3 0.04 0.09 (1,243) 1:A:66:ARG:H 1:A:72:LEU:HD23 3 0.04 0.09 (1,243) 1:A:66:ARG:H 1:A:72:LEU:HD23 3 0.04 0.04 0.05 (1,118) 1:A:71:VAL:HG13 1:A:74:HIS:H 3 0.04 0.09 (1,243) 1:A:66:ARG:H 1	Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,542) 1:A:35:VAL:HG21 1:A:72:LEU:HD11 3 0.03 0.04 (1,542) 1:A:35:VAL:HG21 1:A:72:LEU:HD12 3 0.03 0.04 (1,542) 1:A:35:VAL:HG21 1:A:72:LEU:HD13 3 0.03 0.04 (1,542) 1:A:35:VAL:HG22 1:A:72:LEU:HD12 3 0.03 0.04 (1,542) 1:A:35:VAL:HG22 1:A:72:LEU:HD13 3 0.03 0.04 (1,542) 1:A:35:VAL:HG23 1:A:72:LEU:HD13 3 0.03 0.04 (1,542) 1:A:35:VAL:HG23 1:A:72:LEU:HD13 3 0.03 0.04 (1,542) 1:A:35:VAL:HG23 1:A:72:LEU:HD13 3 0.03 0.04 (1,520) 1:A:22:LEU:HD21 1:A:28:TYR:HD1 3 1.02 2.83 (1,520) 1:A:22:LEU:HD23 1:A:28:TYR:HD1 3 1.02 2.83 (1,520) 1:A:22:LEU:HD23 1:A:28:TYR:HD1 3 1.02 2.83 (1,333) 1:A:36:ASN:H 1:A:106:RG:H 3 0.05 <	(1,560)	1:A:171:LEU:HD13	1:A:176:ILE:HD12	3	0.03	0.04
(1,542) 1:A:35:VAL:HG21 1:A:72:LEU:HD12 3 0.03 0.04 (1,542) 1:A:35:VAL:HG21 1:A:72:LEU:HD13 3 0.03 0.04 (1,542) 1:A:35:VAL:HG22 1:A:72:LEU:HD11 3 0.03 0.04 (1,542) 1:A:35:VAL:HG22 1:A:72:LEU:HD11 3 0.03 0.04 (1,542) 1:A:35:VAL:HG22 1:A:72:LEU:HD13 3 0.03 0.04 (1,542) 1:A:35:VAL:HG22 1:A:72:LEU:HD13 3 0.03 0.04 (1,542) 1:A:35:VAL:HG22 1:A:72:LEU:HD13 3 0.03 0.04 (1,542) 1:A:35:VAL:HG23 1:A:72:LEU:HD11 3 0.03 0.04 (1,542) 1:A:35:VAL:HG23 1:A:72:LEU:HD12 3 0.03 0.04 (1,542) 1:A:35:VAL:HG23 1:A:72:LEU:HD12 3 0.03 0.04 (1,520) 1:A:22:LEU:HD21 1:A:28:TYR:HD1 3 0.03 0.04 (1,520) 1:A:22:LEU:HD21 1:A:28:TYR:HD1 3 1.02 2.83 (1,520) 1:A:22:LEU:HD22 1:A:28:TYR:HD1 3 1.02 2.83 (1,520) 1:A:22:LEU:HD23 1:A:28:TYR:HD1 3 1.02 2.83 (1,383) 1:A:106:ASN:H 1:A:100:ILE:HD13 3 0.05 0.05 (1,343) 1:A:98:ASN:H 1:A:100:ILE:HD11 3 0.05 0.05 (1,343) 1:A:98:ASN:H 1:A:100:ILE:HD11 3 0.05 0.05 (1,343) 1:A:98:ASN:H 1:A:100:ILE:HD12 3 0.05 0.05 (1,343) 1:A:63:HIS:H 1:A:64:VAL:HG22 3 0.05 0.08 (1,309) 1:A:63:HIS:H 1:A:64:VAL:HG22 3 0.05 0.08 (1,309) 1:A:63:HIS:H 1:A:64:VAL:HG23 3 0.05 0.08 (1,248) 1:A:76:LEU:HD11 1:A:77:VAL:H 3 0.04 0.08 (1,243) 1:A:66:ARG:H 1:A:72:LEU:HD22 3 0.14 0.19 (1,243) 1:A:66:ARG:H 1:A:72:LEU:HD21 3 0.04 0.08 (1,243) 1:A:66:ARG:H 1:A:72:LEU:HD21 3 0.04 0.05 (1,118) 1:A:71:VAL:HG11 1:A:77:VAL:H 3 0.04 0.05 (1,118) 1:A:71:VAL:HG11 1:A:77:LEU:HD22 3 0.14 0.19 (1,243) 1:A:66:ARG:H 1:A:72:LEU:HD21 3 0.04 0.05 0.12 (1,116) 1:A:74:HIS:H 1:A:76:LEU:HD11 3 0.05 0.12 (1,116) 1:A:74:HIS:H 1:A:76:LEU:HD1	(1,560)	1:A:171:LEU:HD13	1:A:176:ILE:HD13	3	0.03	0.04
(1,542) 1:A:35:VAL:HG21 1:A:72:LEU:HD13 3 0.03 0.04 (1,542) 1:A:35:VAL:HG22 1:A:72:LEU:HD11 3 0.03 0.04 (1,542) 1:A:35:VAL:HG22 1:A:72:LEU:HD12 3 0.03 0.04 (1,542) 1:A:35:VAL:HG23 1:A:72:LEU:HD11 3 0.03 0.04 (1,542) 1:A:35:VAL:HG23 1:A:72:LEU:HD12 3 0.03 0.04 (1,542) 1:A:35:VAL:HG23 1:A:72:LEU:HD13 3 0.03 0.04 (1,520) 1:A:22:LEU:HD21 1:A:28:TYR:HD1 3 1.02 2.83 (1,520) 1:A:22:LEU:HD23 1:A:28:TYR:HD1 3 1.02 2.83 (1,520) 1:A:22:LEU:HD23 1:A:28:TYR:HD1 3 1.02 2.83 (1,520) 1:A:22:LEU:HD23 1:A:28:TYR:HD1 3 1.02 2.83 (1,520) 1:A:26:LEU:HD23 1:A:28:TYR:HD1 3 1.02 2.83 (1,520) 1:A:343 1:A:28:ASN:H 1:A:108:LEU:HD11 3	(1,542)	1:A:35:VAL:HG21	1:A:72:LEU:HD11	3	0.03	0.04
(1,542) 1:A:35:VAL:HG22 1:A:72:LEU:HD11 3 0.03 0.04 (1,542) 1:A:35:VAL:HG22 1:A:72:LEU:HD12 3 0.03 0.04 (1,542) 1:A:35:VAL:HG22 1:A:72:LEU:HD13 3 0.03 0.04 (1,542) 1:A:35:VAL:HG22 1:A:72:LEU:HD11 3 0.03 0.04 (1,542) 1:A:35:VAL:HG23 1:A:72:LEU:HD11 3 0.03 0.04 (1,542) 1:A:35:VAL:HG23 1:A:72:LEU:HD12 3 0.03 0.04 (1,542) 1:A:35:VAL:HG23 1:A:72:LEU:HD12 3 0.03 0.04 (1,542) 1:A:35:VAL:HG23 1:A:72:LEU:HD13 3 0.03 0.04 (1,520) 1:A:22:LEU:HD21 1:A:28:TYR:HD1 3 1.02 2.83 (1,520) 1:A:22:LEU:HD22 1:A:28:TYR:HD1 3 1.02 2.83 (1,520) 1:A:22:LEU:HD22 1:A:28:TYR:HD1 3 1.02 2.83 (1,520) 1:A:22:LEU:HD23 1:A:28:TYR:HD1 3 0.05 0.05 (1,343) 1:A:98:ASN:H 1:A:108:ARG:H 3 0.05 0.05 (1,343) 1:A:98:ASN:H 1:A:100:LE:HD11 3 0.05 0.05 (1,343) 1:A:98:ASN:H 1:A:100:LE:HD11 3 0.05 0.05 (1,343) 1:A:98:ASN:H 1:A:100:LE:HD12 3 0.05 0.05 (1,343) 1:A:98:ASN:H 1:A:100:LE:HD13 3 0.05 0.05 (1,349) 1:A:63:HIS:H 1:A:64:VAL:HG21 3 0.05 0.05 (1,309) 1:A:63:HIS:H 1:A:64:VAL:HG22 3 0.05 0.08 (1,309) 1:A:63:HIS:H 1:A:64:VAL:HG22 3 0.05 0.08 (1,309) 1:A:63:HIS:H 1:A:64:VAL:HG23 3 0.05 0.08 (1,248) 1:A:76:LEU:HD11 1:A:77:VAL:H 3 0.04 0.08 (1,248) 1:A:76:LEU:HD12 1:A:77:VAL:H 3 0.04 0.08 (1,248) 1:A:76:LEU:HD13 1:A:77:VAL:H 3 0.04 0.08 (1,248) 1:A:76:LEU:HD13 1:A:77:VAL:H 3 0.04 0.08 (1,248) 1:A:76:LEU:HD13 1:A:77:VAL:H 3 0.04 0.08 (1,243) 1:A:66:ARG:H 1:A:72:LEU:HD22 3 0.14 0.19 (1,243) 1:A:66:ARG:H 1:A:72:LEU:HD22 3 0.14 0.19 (1,118) 1:A:71:VAL:HG11 1:A:74:HIS:H 3 0.04 0.05 (1,118) 1:A:71:VAL:HG11 1:A:74:HIS:H 3 0.04 0.05 (1,118) 1:A:71:VAL:HG11 1:A:74:HIS:H 3 0.04 0.05 (1,116) 1:A:74:HIS:H 1:A:76:LEU:HD13 3 0.05 0.12 (1,116)	(1,542)	1:A:35:VAL:HG21	1:A:72:LEU:HD12	3	0.03	0.04
(1,542) 1:A:35:VAL:HG22 1:A:72:LEU:HD12 3 0.03 0.04 (1,542) 1:A:35:VAL:HG22 1:A:72:LEU:HD13 3 0.03 0.04 (1,542) 1:A:35:VAL:HG23 1:A:72:LEU:HD11 3 0.03 0.04 (1,542) 1:A:35:VAL:HG23 1:A:72:LEU:HD12 3 0.03 0.04 (1,542) 1:A:35:VAL:HG23 1:A:72:LEU:HD12 3 0.03 0.04 (1,542) 1:A:35:VAL:HG23 1:A:72:LEU:HD13 3 0.03 0.04 (1,520) 1:A:22:LEU:HD21 1:A:28:TYR:HD1 3 1.02 2.83 (1,520) 1:A:22:LEU:HD22 1:A:28:TYR:HD1 3 1.02 2.83 (1,520) 1:A:22:LEU:HD23 1:A:28:TYR:HD1 3 1.02 2.83 (1,520) 1:A:22:LEU:HD23 1:A:28:TYR:HD1 3 1.02 2.83 (1,383) 1:A:106:ASN:H 1:A:108:ARG:H 3 0.05 0.05 (1,343) 1:A:98:ASN:H 1:A:100:ILE:HD11 3 0.05 0.05 (1,343) 1:A:98:ASN:H 1:A:100:ILE:HD11 3 0.05 0.05 (1,343) 1:A:98:ASN:H 1:A:100:ILE:HD12 3 0.05 0.05 (1,343) 1:A:98:ASN:H 1:A:100:ILE:HD13 3 0.05 0.05 (1,309) 1:A:63:HIS:H 1:A:64:VAL:HG22 3 0.05 0.08 (1,309) 1:A:63:HIS:H 1:A:64:VAL:HG22 3 0.05 0.08 (1,309) 1:A:63:HIS:H 1:A:64:VAL:HG22 3 0.05 0.08 (1,309) 1:A:63:HIS:H 1:A:64:VAL:HG23 3 0.05 0.08 (1,248) 1:A:76:LEU:HD11 1:A:77:VAL:H 3 0.04 0.08 (1,248) 1:A:76:LEU:HD12 1:A:77:VAL:H 3 0.04 0.08 (1,248) 1:A:76:LEU:HD13 1:A:77:VAL:H 3 0.04 0.05 (1,309) 1:A:63:ARG:H 1:A:72:LEU:HD22 3 0.14 0.19 (1,243) 1:A:66:ARG:H 1:A:72:LEU:HD23 3 0.14 0.19 (1,243) 1:A:66:ARG:H 1:A:72:LEU:HD23 3 0.14 0.19 (1,243) 1:A:66:ARG:H 1:A:72:LEU:HD23 3 0.14 0.19 (1,118) 1:A:71:VAL:HG11 1:A:74:HIS:H 3 0.04 0.05 (1,116) 1:A:74:HIS:H 1:A:76:LEU:HD11 3 0.05 0.12 (1,116) 1:A:74:HIS:H 1:A:76:LEU:HD13 1:A:76:LEU:H	(1,542)	1:A:35:VAL:HG21	1:A:72:LEU:HD13	3	0.03	0.04
(1,542) 1:A:35:VAL:HG22 1:A:72:LEU:HD13 3 0.03 0.04 (1,542) 1:A:35:VAL:HG23 1:A:72:LEU:HD11 3 0.03 0.04 (1,542) 1:A:35:VAL:HG23 1:A:72:LEU:HD12 3 0.03 0.04 (1,542) 1:A:35:VAL:HG23 1:A:72:LEU:HD13 3 0.03 0.04 (1,520) 1:A:22:LEU:HD22 1:A:28:TYR:HD1 3 1.02 2.83 (1,520) 1:A:22:LEU:HD23 1:A:28:TYR:HD1 3 1.02 2.83 (1,520) 1:A:29:LEU:HD23 1:A:28:TYR:HD1 3 1.02 2.83 (1,520) 1:A:29:LEU:HD23 1:A:28:TYR:HD1 3 1.02 2.83 (1,333) 1:A:106:ASN:H 1:A:108:ARG:H 3 0.05 0.05 (1,343) 1:A:98:ASN:H 1:A:100:ILE:HD11 3 0.05 0.05 (1,343) 1:A:98:ASN:H 1:A:100:ILE:HD13 3 0.05 0.05 (1,348) 1:A:63:HIS:H 1:A:64:VAL:HG21 3 0.05 0.0	(1,542)	1:A:35:VAL:HG22	1:A:72:LEU:HD11	3	0.03	0.04
(1,542) 1:A:35:VAL:HG23 1:A:72:LEU:HD11 3 0.03 0.04 (1,542) 1:A:35:VAL:HG23 1:A:72:LEU:HD12 3 0.03 0.04 (1,542) 1:A:35:VAL:HG23 1:A:72:LEU:HD13 3 0.03 0.04 (1,520) 1:A:22:LEU:HD21 1:A:28:TYR:HD1 3 1.02 2.83 (1,520) 1:A:22:LEU:HD23 1:A:28:TYR:HD1 3 1.02 2.83 (1,520) 1:A:29:LEU:HD23 1:A:28:TYR:HD1 3 1.02 2.83 (1,383) 1:A:106:ASN:H 1:A:108:ARG:H 3 0.05 0.05 (1,343) 1:A:98:ASN:H 1:A:100:ILE:HD11 3 0.05 0.05 (1,343) 1:A:98:ASN:H 1:A:100:ILE:HD13 3 0.05 0.05 (1,343) 1:A:69:ASN:H 1:A:100:ILE:HD13 3 0.05 0.05 (1,343) 1:A:69:ASN:H 1:A:100:ILE:HD13 3 0.05 0.05 (1,343) 1:A:63:HIS:H 1:A:64:VAL:HG21 3 0.05 0.08 </td <td>(1,542)</td> <td>1:A:35:VAL:HG22</td> <td>1:A:72:LEU:HD12</td> <td>3</td> <td>0.03</td> <td>0.04</td>	(1,542)	1:A:35:VAL:HG22	1:A:72:LEU:HD12	3	0.03	0.04
(1,542) 1:A:35:VAL:HG23 1:A:72:LEU:HD12 3 0.03 0.04 (1,542) 1:A:35:VAL:HG23 1:A:72:LEU:HD13 3 0.03 0.04 (1,520) 1:A:22:LEU:HD21 1:A:28:TYR:HD1 3 1.02 2.83 (1,520) 1:A:22:LEU:HD22 1:A:28:TYR:HD1 3 1.02 2.83 (1,520) 1:A:26:EU:HD23 1:A:28:TYR:HD1 3 1.02 2.83 (1,520) 1:A:2106:ASN:H 1:A:28:TYR:HD1 3 1.02 2.83 (1,383) 1:A:106:ASN:H 1:A:108:ARG:H 3 0.05 0.05 (1,343) 1:A:98:ASN:H 1:A:100:ILE:HD12 3 0.05 0.05 (1,343) 1:A:98:ASN:H 1:A:100:ILE:HD13 3 0.05 0.05 (1,343) 1:A:98:ASN:H 1:A:100:ILE:HD13 3 0.05 0.05 (1,343) 1:A:63:HIS:H 1:A:64:VAL:HG21 3 0.05 0.05 (1,309) 1:A:63:HIS:H 1:A:64:VAL:HG21 3 0.05 0.08	(1,542)	1:A:35:VAL:HG22	1:A:72:LEU:HD13	3	0.03	0.04
(1,542) 1:A:35:VAL:HG23 1:A:72:LEU:HD13 3 0.03 0.04 (1,520) 1:A:22:LEU:HD21 1:A:28:TYR:HD1 3 1.02 2.83 (1,520) 1:A:22:LEU:HD22 1:A:28:TYR:HD1 3 1.02 2.83 (1,520) 1:A:22:LEU:HD23 1:A:28:TYR:HD1 3 1.02 2.83 (1,383) 1:A:106:ASN:H 1:A:108:ARG:H 3 0.05 0.05 (1,343) 1:A:98:ASN:H 1:A:100:ILE:HD11 3 0.05 0.05 (1,343) 1:A:98:ASN:H 1:A:100:ILE:HD13 3 0.05 0.05 (1,343) 1:A:63:HIS:H 1:A:64:VAL:HG21 3 0.05 0.05 (1,343) 1:A:63:HIS:H 1:A:64:VAL:HG22 3 0.05 0.08 (1,309) 1:A:63:HIS:H 1:A:64:VAL:HG22 3 0.05 0.08 (1,309) 1:A:63:HIS:H 1:A:64:VAL:HG22 3 0.05 0.08 (1,309) 1:A:66:HIS:H 1:A:64:VAL:HG23 3 0.05 0.08	(1,542)	1:A:35:VAL:HG23	1:A:72:LEU:HD11		0.03	0.04
(1,520) 1:A:22:LEU:HD21 1:A:28:TYR:HD1 3 1.02 2.83 (1,520) 1:A:22:LEU:HD22 1:A:28:TYR:HD1 3 1.02 2.83 (1,520) 1:A:22:LEU:HD23 1:A:28:TYR:HD1 3 1.02 2.83 (1,383) 1:A:106:ASN:H 1:A:108:ARG:H 3 0.05 0.05 (1,343) 1:A:98:ASN:H 1:A:100:ILE:HD11 3 0.05 0.05 (1,343) 1:A:98:ASN:H 1:A:100:ILE:HD13 3 0.05 0.05 (1,343) 1:A:98:ASN:H 1:A:100:ILE:HD13 3 0.05 0.05 (1,343) 1:A:98:ASN:H 1:A:100:ILE:HD13 3 0.05 0.05 (1,343) 1:A:98:ASN:H 1:A:60:ILEU:HD13 3 0.05 0.05 (1,309) 1:A:63:HIS:H 1:A:64:VAL:HG21 3 0.05 0.08 (1,309) 1:A:63:HIS:H 1:A:64:VAL:HG22 3 0.05 0.08 (1,309) 1:A:65:LEU:HD11 1:A:76:LEU:HG23 3 0.05 0.08	(1,542)	1:A:35:VAL:HG23	1:A:72:LEU:HD12	3	0.03	0.04
(1,520) 1:A:22:LEU:HD22 1:A:28:TYR:HD1 3 1.02 2.83 (1,520) 1:A:22:LEU:HD23 1:A:28:TYR:HD1 3 1.02 2.83 (1,383) 1:A:106:ASN:H 1:A:108:ARG:H 3 0.05 0.05 (1,343) 1:A:98:ASN:H 1:A:100:ILE:HD11 3 0.05 0.05 (1,343) 1:A:98:ASN:H 1:A:100:ILE:HD12 3 0.05 0.05 (1,343) 1:A:98:ASN:H 1:A:100:ILE:HD13 3 0.05 0.05 (1,343) 1:A:63:HIS:H 1:A:64:VAL:HG21 3 0.05 0.05 (1,309) 1:A:63:HIS:H 1:A:64:VAL:HG22 3 0.05 0.08 (1,309) 1:A:63:HIS:H 1:A:64:VAL:HG23 3 0.05 0.08 (1,309) 1:A:63:HIS:H 1:A:64:VAL:HG23 3 0.05 0.08 (1,309) 1:A:63:HIS:H 1:A:64:VAL:HG23 3 0.05 0.08 (1,248) 1:A:76:LEU:HD11 1:A:77:VAL:H 3 0.04 0.08 <td>(1,542)</td> <td>1:A:35:VAL:HG23</td> <td>1:A:72:LEU:HD13</td> <td>3</td> <td>0.03</td> <td>0.04</td>	(1,542)	1:A:35:VAL:HG23	1:A:72:LEU:HD13	3	0.03	0.04
(1,520) 1:A:22:LEU:HD23 1:A:28:TYR:HD1 3 1.02 2.83 (1,383) 1:A:106:ASN:H 1:A:108:ARG:H 3 0.05 0.05 (1,343) 1:A:98:ASN:H 1:A:100:ILE:HD11 3 0.05 0.05 (1,343) 1:A:98:ASN:H 1:A:100:ILE:HD12 3 0.05 0.05 (1,343) 1:A:69:ASN:H 1:A:100:ILE:HD13 3 0.05 0.05 (1,343) 1:A:69:ASN:H 1:A:100:ILE:HD13 3 0.05 0.05 (1,343) 1:A:69:ASN:H 1:A:100:ILE:HD13 3 0.05 0.05 (1,309) 1:A:63:HIS:H 1:A:64:VAL:HG21 3 0.05 0.08 (1,309) 1:A:63:HIS:H 1:A:64:VAL:HG23 3 0.05 0.08 (1,309) 1:A:63:HIS:H 1:A:64:VAL:HG23 3 0.05 0.08 (1,309) 1:A:63:HIS:H 1:A:64:VAL:HG23 3 0.05 0.08 (1,248) 1:A:76:LEU:HD11 1:A:77:VAL:H 3 0.04 0.08 <td>(1,520)</td> <td>1:A:22:LEU:HD21</td> <td>1:A:28:TYR:HD1</td> <td>3</td> <td>1.02</td> <td>2.83</td>	(1,520)	1:A:22:LEU:HD21	1:A:28:TYR:HD1	3	1.02	2.83
(1,383) 1:A:106:ASN:H 1:A:108:ARG:H 3 0.05 0.05 (1,343) 1:A:98:ASN:H 1:A:100:ILE:HD11 3 0.05 0.05 (1,343) 1:A:98:ASN:H 1:A:100:ILE:HD12 3 0.05 0.05 (1,343) 1:A:98:ASN:H 1:A:100:ILE:HD13 3 0.05 0.05 (1,309) 1:A:63:HIS:H 1:A:64:VAL:HG21 3 0.05 0.08 (1,309) 1:A:63:HIS:H 1:A:64:VAL:HG22 3 0.05 0.08 (1,248) 1:A:76:LEU:HD11 1:A:77:VAL:H 3 0.05 0.08 (1,248) 1:A:76:LEU:HD12 1:A:77:VAL:H 3 0.04 0.08 (1,248) 1:A:76:LEU:HD13 1:A:77:VAL:H 3 0.04 0.08 (1,248) 1:A:76:LEU:HD13 1:A:77:VAL:H 3 0.04 0.08 (1,248) 1:A:76:LEU:HD13 1:A:77:VAL:H 3 0.04 0.08 (1,243) 1:A:66:ARG:H 1:A:72:LEU:HD23 3 0.14 0.19	(1,520)	1:A:22:LEU:HD22	1:A:28:TYR:HD1	3	1.02	2.83
(1,343) 1:A:98:ASN:H 1:A:100:ILE:HD11 3 0.05 0.05 (1,343) 1:A:98:ASN:H 1:A:100:ILE:HD12 3 0.05 0.05 (1,343) 1:A:98:ASN:H 1:A:100:ILE:HD13 3 0.05 0.05 (1,309) 1:A:63:HIS:H 1:A:64:VAL:HG21 3 0.05 0.08 (1,309) 1:A:63:HIS:H 1:A:64:VAL:HG22 3 0.05 0.08 (1,309) 1:A:63:HIS:H 1:A:64:VAL:HG22 3 0.05 0.08 (1,309) 1:A:63:HIS:H 1:A:64:VAL:HG23 3 0.05 0.08 (1,248) 1:A:76:LEU:HD11 1:A:77:VAL:H 3 0.04 0.08 (1,248) 1:A:76:LEU:HD12 1:A:77:VAL:H 3 0.04 0.08 (1,248) 1:A:76:LEU:HD12 1:A:77:VAL:H 3 0.04 0.08 (1,248) 1:A:66:ARG:H 1:A:72:LEU:HD21 3 0.14 0.19 (1,243) 1:A:66:ARG:H 1:A:72:LEU:HD22 3 0.14 0.19 (1,243) 1:A:66:ARG:H 1:A:72:LEU:HD22 3 0.14 0.19 (1,243) 1:A:66:ARG:H 1:A:72:LEU:HD23 3 0.14 0.19 (1,118) 1:A:71:VAL:HG11 1:A:74:HIS:H 3 0.04 0.05 (1,118) 1:A:71:VAL:HG12 1:A:74:HIS:H 3 0.04 0.05 (1,118) 1:A:71:VAL:HG13 1:A:74:HIS:H 3 0.04 0.05 (1,116) 1:A:74:HIS:H 1:A:76:LEU:HD11 3 0.05 0.12 (1,116) 1:A:74:HIS:H 1:A:76:LEU:HD12 3 0.05 0.12 (1,116) 1:A:74:HIS:H 1:A:76:LEU:HD13 3 0.05 0.12 (1,116) 1:A:74:HIS:H 1:A:76:LEU:HD14 3 0.05 0.00 0.00 0.00 0.00 0.00 0.00 0.	(1,520)	1:A:22:LEU:HD23	1:A:28:TYR:HD1	3	1.02	2.83
(1,343) 1:A:98:ASN:H 1:A:100:ILE:HD12 3 0.05 0.05 (1,343) 1:A:98:ASN:H 1:A:100:ILE:HD13 3 0.05 0.05 (1,309) 1:A:63:HIS:H 1:A:64:VAL:HG21 3 0.05 0.08 (1,309) 1:A:63:HIS:H 1:A:64:VAL:HG23 3 0.05 0.08 (1,309) 1:A:63:HIS:H 1:A:64:VAL:HG23 3 0.05 0.08 (1,248) 1:A:76:LEU:HD11 1:A:77:VAL:H 3 0.04 0.08 (1,248) 1:A:76:LEU:HD12 1:A:77:VAL:H 3 0.04 0.08 (1,248) 1:A:76:LEU:HD13 1:A:77:VAL:H 3 0.04 0.08 (1,248) 1:A:76:LEU:HD13 1:A:77:VAL:H 3 0.04 0.08 (1,243) 1:A:66:ARG:H 1:A:72:LEU:HD21 3 0.14 0.19 (1,243) 1:A:66:ARG:H 1:A:72:LEU:HD23 3 0.14 0.19 (1,118) 1:A:71:VAL:HG11 1:A:74:HIS:H 3 0.04 0.05	(1,383)	1:A:106:ASN:H	1:A:108:ARG:H	3	0.05	0.05
(1,343) 1:A:98:ASN:H 1:A:100:ILE:HD13 3 0.05 0.05 (1,309) 1:A:63:HIS:H 1:A:64:VAL:HG21 3 0.05 0.08 (1,309) 1:A:63:HIS:H 1:A:64:VAL:HG22 3 0.05 0.08 (1,309) 1:A:63:HIS:H 1:A:64:VAL:HG23 3 0.05 0.08 (1,248) 1:A:76:LEU:HD11 1:A:77:VAL:H 3 0.04 0.08 (1,248) 1:A:76:LEU:HD12 1:A:77:VAL:H 3 0.04 0.08 (1,248) 1:A:76:LEU:HD13 1:A:77:VAL:H 3 0.04 0.08 (1,248) 1:A:76:LEU:HD13 1:A:77:VAL:H 3 0.04 0.08 (1,248) 1:A:66:ARG:H 1:A:72:LEU:HD21 3 0.14 0.19 (1,243) 1:A:66:ARG:H 1:A:72:LEU:HD22 3 0.14 0.19 (1,243) 1:A:66:ARG:H 1:A:74:HIS:H 3 0.04 0.05 (1,118) 1:A:71:VAL:HG11 1:A:74:HIS:H 3 0.04 0.05 <t< td=""><td>(1,343)</td><td>1:A:98:ASN:H</td><td>1:A:100:ILE:HD11</td><td>3</td><td>0.05</td><td>0.05</td></t<>	(1,343)	1:A:98:ASN:H	1:A:100:ILE:HD11	3	0.05	0.05
(1,309) 1:A:63:HIS:H 1:A:64:VAL:HG21 3 0.05 0.08 (1,309) 1:A:63:HIS:H 1:A:64:VAL:HG22 3 0.05 0.08 (1,309) 1:A:63:HIS:H 1:A:64:VAL:HG23 3 0.05 0.08 (1,248) 1:A:76:LEU:HD11 1:A:77:VAL:H 3 0.04 0.08 (1,248) 1:A:76:LEU:HD12 1:A:77:VAL:H 3 0.04 0.08 (1,248) 1:A:76:LEU:HD13 1:A:77:VAL:H 3 0.04 0.08 (1,248) 1:A:76:LEU:HD13 1:A:77:VAL:H 3 0.04 0.08 (1,243) 1:A:66:ARG:H 1:A:72:LEU:HD21 3 0.14 0.19 (1,243) 1:A:66:ARG:H 1:A:72:LEU:HD22 3 0.14 0.19 (1,243) 1:A:66:ARG:H 1:A:72:LEU:HD23 3 0.14 0.19 (1,243) 1:A:66:ARG:H 1:A:74:HIS:H 3 0.04 0.05 (1,118) 1:A:71:VAL:HG11 1:A:74:HIS:H 3 0.04 0.05 <tr< td=""><td>(1,343)</td><td>1:A:98:ASN:H</td><td>1:A:100:ILE:HD12</td><td>3</td><td>0.05</td><td>0.05</td></tr<>	(1,343)	1:A:98:ASN:H	1:A:100:ILE:HD12	3	0.05	0.05
(1,309) 1:A:63:HIS:H 1:A:64:VAL:HG22 3 0.05 0.08 (1,309) 1:A:63:HIS:H 1:A:64:VAL:HG23 3 0.05 0.08 (1,248) 1:A:76:LEU:HD11 1:A:77:VAL:H 3 0.04 0.08 (1,248) 1:A:76:LEU:HD12 1:A:77:VAL:H 3 0.04 0.08 (1,248) 1:A:76:LEU:HD13 1:A:77:VAL:H 3 0.04 0.08 (1,248) 1:A:76:LEU:HD13 1:A:77:VAL:H 3 0.04 0.08 (1,248) 1:A:76:LEU:HD13 1:A:77:VAL:H 3 0.04 0.08 (1,243) 1:A:66:ARG:H 1:A:72:LEU:HD22 3 0.14 0.19 (1,243) 1:A:66:ARG:H 1:A:72:LEU:HD23 3 0.14 0.19 (1,243) 1:A:66:ARG:H 1:A:72:LEU:HD23 3 0.14 0.19 (1,118) 1:A:71:VAL:HG11 1:A:74:HIS:H 3 0.04 0.05 (1,118) 1:A:71:VAL:HG12 1:A:74:HIS:H 3 0.04 0.05	(1,343)	1:A:98:ASN:H	1:A:100:ILE:HD13	3	0.05	0.05
(1,309) 1:A:63:HIS:H 1:A:64:VAL:HG23 3 0.05 0.08 (1,248) 1:A:76:LEU:HD11 1:A:77:VAL:H 3 0.04 0.08 (1,248) 1:A:76:LEU:HD12 1:A:77:VAL:H 3 0.04 0.08 (1,248) 1:A:76:LEU:HD13 1:A:77:VAL:H 3 0.04 0.08 (1,243) 1:A:66:ARG:H 1:A:72:LEU:HD21 3 0.14 0.19 (1,243) 1:A:66:ARG:H 1:A:72:LEU:HD22 3 0.14 0.19 (1,243) 1:A:66:ARG:H 1:A:72:LEU:HD23 3 0.14 0.19 (1,18) 1:A:71:VAL:HG11 1:A:74:HIS:H 3 0.04 0.05 <	(1,309)	1:A:63:HIS:H	1:A:64:VAL:HG21	3	0.05	0.08
(1,248) 1:A:76:LEU:HD11 1:A:77:VAL:H 3 0.04 0.08 (1,248) 1:A:76:LEU:HD12 1:A:77:VAL:H 3 0.04 0.08 (1,248) 1:A:76:LEU:HD13 1:A:77:VAL:H 3 0.04 0.08 (1,243) 1:A:66:ARG:H 1:A:72:LEU:HD21 3 0.14 0.19 (1,243) 1:A:66:ARG:H 1:A:72:LEU:HD22 3 0.14 0.19 (1,243) 1:A:66:ARG:H 1:A:72:LEU:HD23 3 0.14 0.19 (1,118) 1:A:71:VAL:HG11 1:A:74:HIS:H 3 0.04 0.05	(1,309)	1:A:63:HIS:H	1:A:64:VAL:HG22	3	0.05	0.08
(1,248) 1:A:76:LEU:HD12 1:A:77:VAL:H 3 0.04 0.08 (1,248) 1:A:76:LEU:HD13 1:A:77:VAL:H 3 0.04 0.08 (1,243) 1:A:66:ARG:H 1:A:72:LEU:HD21 3 0.14 0.19 (1,243) 1:A:66:ARG:H 1:A:72:LEU:HD22 3 0.14 0.19 (1,243) 1:A:66:ARG:H 1:A:72:LEU:HD23 3 0.14 0.19 (1,243) 1:A:66:ARG:H 1:A:72:LEU:HD23 3 0.14 0.19 (1,18) 1:A:71:VAL:HG11 1:A:74:HIS:H 3 0.04 0.05 (1,118) 1:A:71:VAL:HG12 1:A:74:HIS:H 3 0.04 0.05 (1,118) 1:A:71:VAL:HG13 1:A:74:HIS:H 3 0.04 0.05 (1,118) 1:A:74:HIS:H 1:A:76:LEU:HD11 3 0.05 0.12 (1,116) 1:A:74:HIS:H 1:A:76:LEU:HD12 3 0.05 0.12 (1,116) 1:A:17:HIS:H 1:A:76:LEU:HD13 3 0.05 0.12 <	(1,309)	1:A:63:HIS:H	1:A:64:VAL:HG23	3	0.05	0.08
(1,248) 1:A:76:LEU:HD13 1:A:77:VAL:H 3 0.04 0.08 (1,243) 1:A:66:ARG:H 1:A:72:LEU:HD21 3 0.14 0.19 (1,243) 1:A:66:ARG:H 1:A:72:LEU:HD22 3 0.14 0.19 (1,243) 1:A:66:ARG:H 1:A:72:LEU:HD23 3 0.14 0.19 (1,118) 1:A:71:VAL:HG11 1:A:74:HIS:H 3 0.04 0.05 (1,118) 1:A:71:VAL:HG12 1:A:74:HIS:H 3 0.04 0.05 (1,118) 1:A:71:VAL:HG13 1:A:74:HIS:H 3 0.04 0.05 (1,118) 1:A:74:HIS:H 1:A:76:LEU:HD11 3 0.05 0.12 (1,116) 1:A:74:HIS:H 1:A:76:LEU:HD12 3 0.05 0.12 (1,116) 1:A:74:HIS:H 1:A:76:LEU:HD13 3 0.05 0.12 (1,116) 1:A:74:HIS:H 1:A:76:LEU:HD13 3 0.05 0.12 (1,116) 1:A:15:AA:O 1:A:119:LYS:H 3 0.02 0.03 <tr< td=""><td>(1,248)</td><td>1:A:76:LEU:HD11</td><td>1:A:77:VAL:H</td><td>3</td><td>0.04</td><td>0.08</td></tr<>	(1,248)	1:A:76:LEU:HD11	1:A:77:VAL:H	3	0.04	0.08
(1,243) 1:A:66:ARG:H 1:A:72:LEU:HD21 3 0.14 0.19 (1,243) 1:A:66:ARG:H 1:A:72:LEU:HD22 3 0.14 0.19 (1,243) 1:A:66:ARG:H 1:A:72:LEU:HD23 3 0.14 0.19 (1,118) 1:A:66:ARG:H 1:A:72:LEU:HD23 3 0.14 0.19 (1,118) 1:A:66:ARG:H 1:A:72:LEU:HD23 3 0.14 0.19 (1,118) 1:A:66:ARG:H 1:A:74:HIS:H 3 0.04 0.05 (1,118) 1:A:71:VAL:HG11 1:A:74:HIS:H 3 0.04 0.05 (1,118) 1:A:71:VAL:HG13 1:A:74:HIS:H 3 0.04 0.05 (1,118) 1:A:71:VAL:HG13 1:A:76:LEU:HD11 3 0.04 0.05 (1,116) 1:A:74:HIS:H 1:A:76:LEU:HD12 3 0.05 0.12 (1,116) 1:A:74:HIS:H 1:A:76:LEU:HD13 3 0.05 0.12 (1,116) 1:A:74:HIS:H 1:A:76:LEU:HD13 3 0.05 0.12	(1,248)	1:A:76:LEU:HD12	1:A:77:VAL:H	3	0.04	0.08
(1,243) 1:A:66:ARG:H 1:A:72:LEU:HD21 3 0.14 0.19 (1,243) 1:A:66:ARG:H 1:A:72:LEU:HD22 3 0.14 0.19 (1,243) 1:A:66:ARG:H 1:A:72:LEU:HD23 3 0.14 0.19 (1,118) 1:A:66:ARG:H 1:A:74:HIS:H 3 0.04 0.05 (1,118) 1:A:71:VAL:HG12 1:A:74:HIS:H 3 0.04 0.05 (1,118) 1:A:71:VAL:HG13 1:A:76:LEU:HD11 3 0.04 0.05 (1,116) 1:A:74:HIS:H 1:A:76:LEU:HD12 3 0.05 0.12 (1,116) 1:A:74:HIS:H 1:A:76:LEU:HD13 3 0.05 0.12 (1,116) 1:A:74:HIS:H 1:A:76:LEU:HD13 3 0.05 0.12	(1,248)	1:A:76:LEU:HD13	1:A:77:VAL:H	3	0.04	0.08
(1,243) 1:A:66:ARG:H 1:A:72:LEU:HD23 3 0.14 0.19 (1,118) 1:A:71:VAL:HG11 1:A:74:HIS:H 3 0.04 0.05 (1,118) 1:A:71:VAL:HG12 1:A:74:HIS:H 3 0.04 0.05 (1,118) 1:A:71:VAL:HG13 1:A:74:HIS:H 3 0.04 0.05 (1,116) 1:A:74:HIS:H 1:A:76:LEU:HD11 3 0.05 0.12 (1,116) 1:A:74:HIS:H 1:A:76:LEU:HD12 3 0.05 0.12 (1,116) 1:A:74:HIS:H 1:A:76:LEU:HD13 3 0.05 0.12 (1,116) 1:A:15:ALA:O 1:A:19:LE:O 3 0.04 0.07	(1,243)	1:A:66:ARG:H	1:A:72:LEU:HD21	3	0.14	0.19
(1,118) 1:A:71:VAL:HG11 1:A:74:HIS:H 3 0.04 0.05 (1,118) 1:A:71:VAL:HG12 1:A:74:HIS:H 3 0.04 0.05 (1,118) 1:A:71:VAL:HG13 1:A:74:HIS:H 3 0.04 0.05 (1,116) 1:A:74:HIS:H 1:A:76:LEU:HD11 3 0.05 0.12 (1,116) 1:A:74:HIS:H 1:A:76:LEU:HD12 3 0.05 0.12 (1,116) 1:A:74:HIS:H 1:A:76:LEU:HD13 3 0.05 0.12 (1,116) 1:A:15:ALA:O 1:A:119:LYS:H 3 0.05 0.03	(1,243)	1:A:66:ARG:H	1:A:72:LEU:HD22	3	0.14	0.19
(1,118) 1:A:71:VAL:HG12 1:A:74:HIS:H 3 0.04 0.05 (1,118) 1:A:71:VAL:HG13 1:A:74:HIS:H 3 0.04 0.05 (1,116) 1:A:74:HIS:H 1:A:76:LEU:HD11 3 0.05 0.12 (1,116) 1:A:74:HIS:H 1:A:76:LEU:HD12 3 0.05 0.12 (1,116) 1:A:74:HIS:H 1:A:76:LEU:HD13 3 0.05 0.12 (1,116) 1:A:74:HIS:H 1:A:76:LEU:HD13 3 0.05 0.12 (1,116) 1:A:15:ALA:O 1:A:119:LYS:H 3 0.05 0.12 (1,116) 1:A:15:ALA:O 1:A:119:LYS:H 3 0.05 0.12 (1,116) 1:A:15:ALA:O 1:A:119:LYS:H 3 0.02 0.03 (1,1015) 1:A:15:ALA:O 1:A:166:VAL:O 3 0.04 0.07 (1,1037) 1:A:137:ALA:H 1:A:156:ILE:O 3 0.03 0.04 (1,101) 1:A:120:AS:N:H 1:A:151:GLY:H 3 0.14 0.25	(1,243)	1:A:66:ARG:H	1:A:72:LEU:HD23	3	0.14	0.19
(1,118) 1:A:71:VAL:HG13 1:A:74:HIS:H 3 0.04 0.05 (1,116) 1:A:74:HIS:H 1:A:76:LEU:HD11 3 0.05 0.12 (1,116) 1:A:74:HIS:H 1:A:76:LEU:HD12 3 0.05 0.12 (1,116) 1:A:74:HIS:H 1:A:76:LEU:HD13 3 0.05 0.12 (1,116) 1:A:715:ALA:O 1:A:119:LYS:H 3 0.02 0.03 (1,1015) 1:A:159:ARG:H 1:A:166:VAL:O 3 0.04 0.07 (1,1037) 1:A:137:ALA:H 1:A:156:ILE:O 3 0.03 0.04 (1,101) 1:A:150:ASN:H 1:A:151:GLY:H 3 0.14 0.25 (1,999) 1:A:120:ILE:HD11 1:A:172:VAL:HG21 2 0.01 0.02	(1,118)	1:A:71:VAL:HG11	1:A:74:HIS:H	3	0.04	0.05
(1,116) 1:A:74:HIS:H 1:A:76:LEU:HD11 3 0.05 0.12 (1,116) 1:A:74:HIS:H 1:A:76:LEU:HD12 3 0.05 0.12 (1,116) 1:A:74:HIS:H 1:A:76:LEU:HD13 3 0.05 0.12 (1,1115) 1:A:115:ALA:O 1:A:119:LYS:H 3 0.02 0.03 (1,1053) 1:A:159:ARG:H 1:A:166:VAL:O 3 0.04 0.07 (1,1037) 1:A:137:ALA:H 1:A:156:ILE:O 3 0.03 0.04 (1,101) 1:A:150:ASN:H 1:A:151:GLY:H 3 0.14 0.25 (1,999) 1:A:120:ILE:HD11 1:A:172:VAL:HG21 2 0.01 0.02 (1,999) 1:A:120:ILE:HD11 1:A:172:VAL:HG23 2 0.01 0.02 (1,999) 1:A:120:ILE:HD12 1:A:172:VAL:HG21 2 0.01 0.02 (1,999) 1:A:120:ILE:HD12 1:A:172:VAL:HG21 2 0.01 0.02	(1,118)	1:A:71:VAL:HG12	1:A:74:HIS:H	3	0.04	0.05
(1,116) 1:A:74:HIS:H 1:A:76:LEU:HD11 3 0.05 0.12 (1,116) 1:A:74:HIS:H 1:A:76:LEU:HD12 3 0.05 0.12 (1,116) 1:A:74:HIS:H 1:A:76:LEU:HD13 3 0.05 0.12 (1,1115) 1:A:115:ALA:O 1:A:119:LYS:H 3 0.02 0.03 (1,1053) 1:A:159:ARG:H 1:A:166:VAL:O 3 0.04 0.07 (1,1037) 1:A:137:ALA:H 1:A:156:ILE:O 3 0.03 0.04 (1,101) 1:A:150:ASN:H 1:A:151:GLY:H 3 0.14 0.25 (1,999) 1:A:120:ILE:HD11 1:A:172:VAL:HG21 2 0.01 0.02 (1,999) 1:A:120:ILE:HD11 1:A:172:VAL:HG23 2 0.01 0.02 (1,999) 1:A:120:ILE:HD12 1:A:172:VAL:HG21 2 0.01 0.02 (1,999) 1:A:120:ILE:HD12 1:A:172:VAL:HG21 2 0.01 0.02	(1,118)	1:A:71:VAL:HG13	1:A:74:HIS:H	3	0.04	0.05
(1,116) 1:A:74:HIS:H 1:A:76:LEU:HD13 3 0.05 0.12 (1,1115) 1:A:115:ALA:O 1:A:119:LYS:H 3 0.02 0.03 (1,1053) 1:A:159:ARG:H 1:A:166:VAL:O 3 0.04 0.07 (1,1037) 1:A:137:ALA:H 1:A:156:ILE:O 3 0.03 0.04 (1,101) 1:A:150:ASN:H 1:A:151:GLY:H 3 0.14 0.25 (1,999) 1:A:120:ILE:HD11 1:A:172:VAL:HG21 2 0.01 0.02 (1,999) 1:A:120:ILE:HD11 1:A:172:VAL:HG23 2 0.01 0.02 (1,999) 1:A:120:ILE:HD12 1:A:172:VAL:HG21 2 0.01 0.02 (1,999) 1:A:120:ILE:HD12 1:A:172:VAL:HG21 2 0.01 0.02		1:A:74:HIS:H	1:A:76:LEU:HD11	3	0.05	0.12
(1,1115) 1:A:115:ALA:O 1:A:119:LYS:H 3 0.02 0.03 (1,1053) 1:A:159:ARG:H 1:A:166:VAL:O 3 0.04 0.07 (1,1037) 1:A:137:ALA:H 1:A:156:ILE:O 3 0.03 0.04 (1,101) 1:A:150:ASN:H 1:A:151:GLY:H 3 0.14 0.25 (1,999) 1:A:120:ILE:HD11 1:A:172:VAL:HG21 2 0.01 0.02 (1,999) 1:A:120:ILE:HD11 1:A:172:VAL:HG23 2 0.01 0.02 (1,999) 1:A:120:ILE:HD12 1:A:172:VAL:HG21 2 0.01 0.02 (1,999) 1:A:120:ILE:HD12 1:A:172:VAL:HG21 2 0.01 0.02	(1,116)	1:A:74:HIS:H	1:A:76:LEU:HD12	3	0.05	0.12
(1,1053) 1:A:159:ARG:H 1:A:166:VAL:O 3 0.04 0.07 (1,1037) 1:A:137:ALA:H 1:A:156:ILE:O 3 0.03 0.04 (1,101) 1:A:150:ASN:H 1:A:151:GLY:H 3 0.14 0.25 (1,999) 1:A:120:ILE:HD11 1:A:172:VAL:HG21 2 0.01 0.02 (1,999) 1:A:120:ILE:HD11 1:A:172:VAL:HG22 2 0.01 0.02 (1,999) 1:A:120:ILE:HD11 1:A:172:VAL:HG23 2 0.01 0.02 (1,999) 1:A:120:ILE:HD12 1:A:172:VAL:HG21 2 0.01 0.02	(1,116)	1:A:74:HIS:H	1:A:76:LEU:HD13	3	0.05	0.12
(1,1053) 1:A:159:ARG:H 1:A:166:VAL:O 3 0.04 0.07 (1,1037) 1:A:137:ALA:H 1:A:156:ILE:O 3 0.03 0.04 (1,101) 1:A:150:ASN:H 1:A:151:GLY:H 3 0.14 0.25 (1,999) 1:A:120:ILE:HD11 1:A:172:VAL:HG21 2 0.01 0.02 (1,999) 1:A:120:ILE:HD11 1:A:172:VAL:HG22 2 0.01 0.02 (1,999) 1:A:120:ILE:HD11 1:A:172:VAL:HG23 2 0.01 0.02 (1,999) 1:A:120:ILE:HD12 1:A:172:VAL:HG21 2 0.01 0.02	(1,1115)	1:A:115:ALA:O	1:A:119:LYS:H	3	0.02	0.03
(1,101) 1:A:150:ASN:H 1:A:151:GLY:H 3 0.14 0.25 (1,999) 1:A:120:ILE:HD11 1:A:172:VAL:HG21 2 0.01 0.02 (1,999) 1:A:120:ILE:HD11 1:A:172:VAL:HG22 2 0.01 0.02 (1,999) 1:A:120:ILE:HD11 1:A:172:VAL:HG23 2 0.01 0.02 (1,999) 1:A:120:ILE:HD12 1:A:172:VAL:HG21 2 0.01 0.02		1:A:159:ARG:H	1:A:166:VAL:O	3	0.04	0.07
(1,101) 1:A:150:ASN:H 1:A:151:GLY:H 3 0.14 0.25 (1,999) 1:A:120:ILE:HD11 1:A:172:VAL:HG21 2 0.01 0.02 (1,999) 1:A:120:ILE:HD11 1:A:172:VAL:HG22 2 0.01 0.02 (1,999) 1:A:120:ILE:HD11 1:A:172:VAL:HG23 2 0.01 0.02 (1,999) 1:A:120:ILE:HD12 1:A:172:VAL:HG21 2 0.01 0.02	(1,1037)	1:A:137:ALA:H	1:A:156:ILE:O	3	0.03	0.04
(1,999) 1:A:120:ILE:HD11 1:A:172:VAL:HG21 2 0.01 0.02 (1,999) 1:A:120:ILE:HD11 1:A:172:VAL:HG22 2 0.01 0.02 (1,999) 1:A:120:ILE:HD11 1:A:172:VAL:HG23 2 0.01 0.02 (1,999) 1:A:120:ILE:HD12 1:A:172:VAL:HG21 2 0.01 0.02	(1,101)	1:A:150:ASN:H	1:A:151:GLY:H	3	0.14	0.25
(1,999) 1:A:120:ILE:HD11 1:A:172:VAL:HG22 2 0.01 0.02 (1,999) 1:A:120:ILE:HD11 1:A:172:VAL:HG23 2 0.01 0.02 (1,999) 1:A:120:ILE:HD12 1:A:172:VAL:HG21 2 0.01 0.02		1:A:120:ILE:HD11	1:A:172:VAL:HG21	2	0.01	0.02
(1,999) 1:A:120:ILE:HD12 1:A:172:VAL:HG21 2 0.01 0.02		1:A:120:ILE:HD11	1:A:172:VAL:HG22	2	0.01	0.02
	(1,999)	1:A:120:ILE:HD11	1:A:172:VAL:HG23	2	0.01	0.02
(1,999) 1:A:120:ILE:HD12 1:A:172:VAL:HG22 2 0.01 0.02	(1,999)	1:A:120:ILE:HD12	1:A:172:VAL:HG21	2	0.01	0.02
	(1,999)	1:A:120:ILE:HD12	1:A:172:VAL:HG22	2	0.01	0.02



Continued from previous page...

(1,999) 1:A:120:ILE:HD12 1:A:172:VAL:HG23 2 0.01 0.02 (1,999) 1:A:120:ILE:HD13 1:A:172:VAL:HG22 2 0.01 0.02 (1,999) 1:A:120:ILE:HD13 1:A:172:VAL:HG23 2 0.01 0.02 (1,998) 1:A:68:ILE:HD11 1:A:156:ILE:HD11 2 0.01 0.02 (1,998) 1:A:68:ILE:HD11 1:A:156:ILE:HD12 2 0.01 0.02 (1,998) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,998) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,998) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,998) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD13 2	Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,999) 1:A:120:ILE:HD13 1:A:172:VAL:HG22 2 0.01 0.02 (1,998) 1:A:68:ILE:HD11 1:A:156:ILE:HD11 2 0.01 0.02 (1,998) 1:A:68:ILE:HD11 1:A:156:ILE:HD11 2 0.01 0.02 (1,998) 1:A:68:ILE:HD11 1:A:156:ILE:HD11 2 0.01 0.02 (1,998) 1:A:68:ILE:HD11 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,998) 1:A:68:ILE:HD11 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,998) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:156:ILE:HD11 2 0.01 0.02 (1,998) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,998) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,998) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD11 2 0.01 0.02 (1,998) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD12 2 0.01 0.02 (1,998) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD12 2 0.01 0.02 (1,998) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD11 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD11 1:A:156:ILE:HD11 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD11 1:A:156:ILE:HD11 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD11 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:156:ILE:HD11 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:156:ILE:HD11 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:156:ILE:HD11 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:166:VAL:H 1:A:166:VAL:H 1 2 0.03 7 0.67 (1,953) 1:A:166:VAL:H 1:A:166:VAL:H 1 2 0.04 0.02 (1,914) 1:A:13:ILEU:HD11 1:A:169:ILEU:HD22 2 0.43 0.62 (1,914) 1:A:13:ILEU:HD11 1:A:169:ILEU:HD23 2 0.43 0.62 (1,914) 1:A:13:ILEU:HD11 1:A:16	(1,999)	1:A:120:ILE:HD12	1:A:172:VAL:HG23	2	0.01	0.02
(1,999) 1:A:120:ILE:HD13 1:A:172:VAL:HG23 2 0.01 0.02 (1,998) 1:A:68:ILE:HD11 1:A:156:ILE:HD11 2 0.01 0.02 (1,998) 1:A:68:ILE:HD11 1:A:156:ILE:HD11 2 0.01 0.02 (1,998) 1:A:68:ILE:HD11 1:A:156:ILE:HD12 2 0.01 0.02 (1,998) 1:A:68:ILE:HD11 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,998) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,998) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:156:ILE:HD11 2 0.01 0.02 (1,998) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,998) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,998) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,998) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,998) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD11 2 0.01 0.02 (1,998) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD11 2 0.01 0.02 (1,998) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD12 2 0.01 0.02 (1,998) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD12 2 0.01 0.02 (1,998) 1:A:68:ILE:HD11 1:A:156:ILE:HD12 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD11 1:A:156:ILE:HD11 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD11 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD11 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:166:VAL:H 1:A:166:VAL:H 1:A:166:VAL:H 12 0.04 0.02 (1,981) 1:A:166:VAL:H 1:A:166:VAL:H 12 0.04 0.02 (1,981) 1:A:136:ILE:HD13 1 0.04 0.02 (1,981) 1:A:136	(1,999)	1:A:120:ILE:HD13	1:A:172:VAL:HG21	2	0.01	0.02
(1,998) 1:A:68:ILE:HD11 1:A:156:ILE:HD12 2 0.01 0.02 (1,998) 1:A:68:ILE:HD11 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,998) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,998) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:156:ILE:HD11 2 0.01 0.02 (1,998) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:156:ILE:HD11 2 0.01 0.02 (1,998) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:156:ILE:HD11 2 0.01 0.02 (1,998) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,998) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD11 2 0.01 0.02 (1,998) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD11 2 0.01 0.02 (1,998) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD11 2 0.01 0.02 (1,998) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD12 2 0.01 0.02 (1,998) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD12 2 0.01 0.02 (1,998) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,998) 1:A:68:ILE:HD11 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD11 1:A:156:ILE:HD11 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD11 1:A:156:ILE:HD11 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD11 1:A:156:ILE:HD12 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:166:VAL:H 1:A:160:VAL:H 1:A:1	(1,999)	1:A:120:ILE:HD13	1:A:172:VAL:HG22	2	0.01	0.02
(1,998) 1:A:68:ILE:HD11 1:A:156:ILE:HD12 2 0.01 0.02 (1,998) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:156:ILE:HD11 2 0.01 0.02 (1,998) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:156:ILE:HD11 2 0.01 0.02 (1,998) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:156:ILE:HD12 2 0.01 0.02 (1,998) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,998) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,998) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD11 2 0.01 0.02 (1,998) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD12 2 0.01 0.02 (1,998) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD12 2 0.01 0.02 (1,998) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD12 2 0.01 0.02 (1,998) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD11 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD11 1:A:156:ILE:HD12 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD11 1:A:156:ILE:HD12 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD11 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:166:VAL:H 1:A:166:VAL:HG12 2 0.37 0.67 (1,953) 1:A:166:VAL:H 1:A:166:VAL:HG12 2 0.37 0.67 (1,953) 1:A:166:VAL:H 1:A:166:VAL:HG12 2 0.37 0.67 (1,914) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:169:LEU:HD22 2 0.43 0.62 (1,914) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:169:LEU:HD	(1,999)	1:A:120:ILE:HD13	1:A:172:VAL:HG23	2	0.01	0.02
(1,998) 1:A:68:ILE:HD11 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,998) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:156:ILE:HD12 2 0.01 0.02 (1,998) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:156:ILE:HD12 2 0.01 0.02 (1,998) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,998) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,998) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD11 2 0.01 0.02 (1,998) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD12 2 0.01 0.02 (1,998) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD12 2 0.01 0.02 (1,998) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD12 2 0.01 0.02 (1,998) 1:A:68:ILE:HD11 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD11 1:A:156:ILE:HD11 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD11 1:A:156:ILE:HD12 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD11 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD11 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:156:ILE:HD11 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:156:ILE:HD12 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD12 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:166:VAL:H 1:A:166:VAL:HG11 2 0.37 0.67 (1,953) 1:A:166:VAL:H 1:A:166:VAL:HG11 2 0.37 0.67 (1,953) 1:A:166:VAL:H 1:A:166:VAL:HG12 2 0.37 0.67 (1,953) 1:A:166:VAL:H 1:A:166:VAL:HG12 2 0.43 0.62 (1,914) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:169:LEU:HD23 2 0.43 0.62 (1,914) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:169:LEU:HD23	(1,998)	1:A:68:ILE:HD11	1:A:156:ILE:HD11	2	0.01	0.02
(1,998) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:156:ILE:HD11 2 0.01 0.02 (1,998) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:156:ILE:HD12 2 0.01 0.02 (1,998) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,998) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD11 2 0.01 0.02 (1,998) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD12 2 0.01 0.02 (1,998) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,998) 1:A:68:ILE:HD11 1:A:156:ILE:HD11 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD11 1:A:156:ILE:HD12 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD11 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD13 2 <t< td=""><td>(1,998)</td><td>1:A:68:ILE:HD11</td><td>1:A:156:ILE:HD12</td><td>2</td><td>0.01</td><td>0.02</td></t<>	(1,998)	1:A:68:ILE:HD11	1:A:156:ILE:HD12	2	0.01	0.02
(1,998) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,998) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,998) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD11 2 0.01 0.02 (1,998) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD12 2 0.01 0.02 (1,998) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD11 1:A:156:ILE:HD12 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD11 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:156:ILE:HD12 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD13 2 <t< td=""><td>(1,998)</td><td>1:A:68:ILE:HD11</td><td>1:A:156:ILE:HD13</td><td>2</td><td>0.01</td><td>0.02</td></t<>	(1,998)	1:A:68:ILE:HD11	1:A:156:ILE:HD13	2	0.01	0.02
(1,998) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,998) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD11 2 0.01 0.02 (1,998) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD12 2 0.01 0.02 (1,998) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD11 1:A:156:ILE:HD11 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD11 1:A:156:ILE:HD12 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD11 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD11 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD13 2 <t< td=""><td>(1,998)</td><td>1:A:68:ILE:HD12</td><td>1:A:156:ILE:HD11</td><td>2</td><td>0.01</td><td>0.02</td></t<>	(1,998)	1:A:68:ILE:HD12	1:A:156:ILE:HD11	2	0.01	0.02
(1,998) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD12 2 0.01 0.02 (1,998) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD12 2 0.01 0.02 (1,998) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD11 1:A:156:ILE:HD11 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD11 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD11 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:156:ILE:HD12 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD11 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:66:VAL:H 1:A:166:VAL:H 1:A:166:VAL:H	(1,998)	1:A:68:ILE:HD12	1:A:156:ILE:HD12		0.01	0.02
(1,998) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,998) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD11 1:A:156:ILE:HD11 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD11 1:A:156:ILE:HD12 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD11 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:156:ILE:HD11 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:66:VAL:H 1:A:166:VAL:HG11 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:66:VAL:H 1:A:166:VAL:HG11 2 0.37	(1,998)	1:A:68:ILE:HD12	1:A:156:ILE:HD13	2	0.01	0.02
(1,998) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD11 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD11 1:A:156:ILE:HD11 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD11 1:A:156:ILE:HD12 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD11 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:156:ILE:HD11 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:156:ILE:HD12 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD11 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:66:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:66:VAL:H 1:A:166:VAL:HG11 2 0.37 0.67 (1,953) 1:A:166:VAL:H 1:A:166:VAL:HG12 2 0.3	(1,998)	1:A:68:ILE:HD13	1:A:156:ILE:HD11	2	0.01	0.02
(1,981) 1:A:68:ILE:HD11 1:A:156:ILE:HD11 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD11 1:A:156:ILE:HD12 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD11 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:156:ILE:HD11 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:156:ILE:HD12 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD12 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:66:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD12 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:66:VAL:H 1:A:166:VAL:HG11 2 0.01 0.02 (1,953) 1:A:166:VAL:H 1:A:166:VAL:HG13 2 0.3	(1,998)	1:A:68:ILE:HD13	1:A:156:ILE:HD12	2	0.01	0.02
(1,981) 1:A:68:ILE:HD11 1:A:156:ILE:HD12 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD11 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:156:ILE:HD11 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:156:ILE:HD12 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD11 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD12 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:166:VAL:H 1:A:166:VAL:HG11 2 0.37 0.67 (1,953) 1:A:166:VAL:H 1:A:166:VAL:HG13 2 0.	(1,998)	1:A:68:ILE:HD13	1:A:156:ILE:HD13	2	0.01	0.02
(1,981) 1:A:68:ILE:HD11 1:A:156:ILE:HD11 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:156:ILE:HD11 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:156:ILE:HD12 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD11 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD12 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:166:VAL:H 1:A:166:VAL:HG11 2 0.37 0.67 (1,953) 1:A:166:VAL:H 1:A:166:VAL:HG13 2 0.37 0.67 (1,953) 1:A:166:VAL:H 1:A:166:VAL:HG13 2 0.37	(1,981)	1:A:68:ILE:HD11	1:A:156:ILE:HD11	2	0.01	0.02
(1,981) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:156:ILE:HD11 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:156:ILE:HD12 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD11 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:166:VAL:HG11 2 0.01 0.02 (1,953) 1:A:166:VAL:H 1:A:166:VAL:HG12 2 0.37 0.67 (1,953) 1:A:166:VAL:H 1:A:166:VAL:HG13 2 0.37 0.67 (1,953) 1:A:166:VAL:H 1:A:169:LEU:HD12 2 0.43 0.62 (1,914) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:169:LEU:HD21 2 0.43	(1,981)	1:A:68:ILE:HD11	1:A:156:ILE:HD12	2	0.01	0.02
(1,981) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:156:ILE:HD12 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD11 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD12 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:66:VAL:H 1:A:166:VAL:HG11 2 0.37 0.67 (1,953) 1:A:166:VAL:H 1:A:166:VAL:HG12 2 0.37 0.67 (1,953) 1:A:166:VAL:H 1:A:166:VAL:HG13 2 0.37 0.67 (1,953) 1:A:166:VAL:H 1:A:166:VAL:HG13 2 0.37 0.67 (1,953) 1:A:166:VAL:H 1:A:166:VAL:HG13 2 0.43 0.62 (1,914) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:169:LEU:HD21 2 0.43	(1,981)	1:A:68:ILE:HD11	1:A:156:ILE:HD13	2	0.01	0.02
(1,981) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD11 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD12 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,983) 1:A:166:VAL:H 1:A:166:VAL:HG11 2 0.37 0.67 (1,953) 1:A:166:VAL:H 1:A:166:VAL:HG13 2 0.37 0.67 (1,914) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:169:LEU:HD21 2 0.43 0.62 (1,914) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:169:LEU:HD22 2 0.43	(1,981)	1:A:68:ILE:HD12	1:A:156:ILE:HD11	2	0.01	0.02
(1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD11 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD12 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:166:VAL:H 1:A:166:VAL:HG11 2 0.37 0.67 (1,953) 1:A:166:VAL:H 1:A:166:VAL:HG13 2 0.43 0.62 (1,914) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:169:LEU:HD21 2 0.43 0.62 (1,914) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:169:LEU:HD23 2 0.43 0.62 (1,914) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:169:LEU:HD23 2 0.43	· · /	1:A:68:ILE:HD12	1:A:156:ILE:HD12	2	0.01	0.02
(1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,953) 1:A:166:VAL:H 1:A:166:VAL:HG11 2 0.37 0.67 (1,953) 1:A:166:VAL:H 1:A:166:VAL:HG13 2 0.37 0.67 (1,953) 1:A:166:VAL:H 1:A:166:VAL:HG13 2 0.37 0.67 (1,914) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:169:LEU:HD21 2 0.43 0.62 (1,914) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:169:LEU:HD22 2 0.43 0.62 (1,914) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:169:LEU:HD21 2 0.43 0.62 (1,914) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:169:LEU:HD22 2 0.43 0.62 (1,914) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:169:LEU:HD23 2 0.43 0.62 (1,914) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:169:LEU:HD23 2 0.43 0.62 (1,914) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:169:LEU:HD23 2 0.43	(1,981)	1:A:68:ILE:HD12	1:A:156:ILE:HD13	2	0.01	0.02
(1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD13 2 0.01 0.02 (1,953) 1:A:166:VAL:H 1:A:166:VAL:HG11 2 0.37 0.67 (1,953) 1:A:166:VAL:H 1:A:166:VAL:HG12 2 0.37 0.67 (1,953) 1:A:166:VAL:H 1:A:166:VAL:HG13 2 0.37 0.67 (1,914) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:169:LEU:HD21 2 0.43 0.62 (1,914) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:169:LEU:HD22 2 0.43 0.62 (1,914) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:169:LEU:HD23 2 0.43 0.62 (1,914) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:169:LEU:HD21 2 0.43 0.62 (1,914) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:169:LEU:HD22 2 0.43 0.62 (1,914) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:169:LEU:HD23 2 0.43 0.62 (1,914) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:169:LEU:HD23 2 0.43 0.62 (1,914) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:169:LEU:HD23 2 0.43	(1,981)	1:A:68:ILE:HD13	1:A:156:ILE:HD11	2	0.01	0.02
(1,953) 1:A:166:VAL:H 1:A:166:VAL:HG11 2 0.37 0.67 (1,953) 1:A:166:VAL:H 1:A:166:VAL:HG12 2 0.37 0.67 (1,953) 1:A:166:VAL:H 1:A:166:VAL:HG13 2 0.37 0.67 (1,914) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:169:LEU:HD21 2 0.43 0.62 (1,914) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:169:LEU:HD22 2 0.43 0.62 (1,914) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:169:LEU:HD23 2 0.43 0.62 (1,914) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:169:LEU:HD21 2 0.43 0.62 (1,914) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:169:LEU:HD22 2 0.43 0.62 (1,914) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:169:LEU:HD23 2 0.43 0.62 (1,914) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:169:LEU:HD21 2 0.43 0.62 (1,914) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:169:LEU:HD22 2 0.43 0.62 (1,914) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:169:LEU:HD22 2 0.43	(1,981)	1:A:68:ILE:HD13	1:A:156:ILE:HD12	2	0.01	0.02
(1,953) 1:A:166:VAL:H 1:A:166:VAL:HG12 2 0.37 0.67 (1,953) 1:A:166:VAL:H 1:A:166:VAL:HG13 2 0.37 0.67 (1,914) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:169:LEU:HD21 2 0.43 0.62 (1,914) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:169:LEU:HD22 2 0.43 0.62 (1,914) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:169:LEU:HD23 2 0.43 0.62 (1,914) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:169:LEU:HD21 2 0.43 0.62 (1,914) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:169:LEU:HD23 2 0.43 0.62 (1,914) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:169:LEU:HD23 2 0.43 0.62 (1,914) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:169:LEU:HD22 2 0.43 0.62 (1,914) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:169:LEU:HD22 2 0.43 0.62 (1,914) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:169:LEU:HD22 2 0.43 0.62 (1,914) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:169:LEU:HD23 2 0.	(1,981)	1:A:68:ILE:HD13	1:A:156:ILE:HD13	2	0.01	0.02
(1,953) 1:A:166:VAL:H 1:A:166:VAL:HG12 2 0.37 0.67 (1,953) 1:A:166:VAL:H 1:A:166:VAL:HG13 2 0.37 0.67 (1,914) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:169:LEU:HD21 2 0.43 0.62 (1,914) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:169:LEU:HD22 2 0.43 0.62 (1,914) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:169:LEU:HD23 2 0.43 0.62 (1,914) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:169:LEU:HD21 2 0.43 0.62 (1,914) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:169:LEU:HD23 2 0.43 0.62 (1,914) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:169:LEU:HD23 2 0.43 0.62 (1,914) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:169:LEU:HD22 2 0.43 0.62 (1,914) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:169:LEU:HD23 2 0.43 0.62 (1,914) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:169:LEU:HD22 2 0.43 0.62 (1,914) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:169:LEU:HD23 2 0.	(1,953)	1:A:166:VAL:H	1:A:166:VAL:HG11	2	0.37	0.67
(1,914) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:169:LEU:HD21 2 0.43 0.62 (1,914) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:169:LEU:HD22 2 0.43 0.62 (1,914) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:169:LEU:HD23 2 0.43 0.62 (1,914) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:169:LEU:HD21 2 0.43 0.62 (1,914) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:169:LEU:HD22 2 0.43 0.62 (1,914) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:169:LEU:HD23 2 0.43 0.62 (1,914) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:169:LEU:HD21 2 0.43 0.62 (1,914) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:169:LEU:HD22 2 0.43 0.62 (1,914) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:169:LEU:HD23 2 0.43 0.62 (1,913) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:14:SER:H 2 0.12 0.14 (1,913) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:14:SER:H 2 0.12 0.14 (1,981) 1:A:77:VAL:HG11 1:A:145:ALA:H 2 0.05		1:A:166:VAL:H	1:A:166:VAL:HG12	2	0.37	0.67
(1,914) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:169:LEU:HD22 2 0.43 0.62 (1,914) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:169:LEU:HD23 2 0.43 0.62 (1,914) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:169:LEU:HD21 2 0.43 0.62 (1,914) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:169:LEU:HD22 2 0.43 0.62 (1,914) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:169:LEU:HD23 2 0.43 0.62 (1,914) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:169:LEU:HD21 2 0.43 0.62 (1,914) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:169:LEU:HD22 2 0.43 0.62 (1,914) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:169:LEU:HD23 2 0.43 0.62 (1,914) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:14:SER:H 2 0.12 0.14 (1,913) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:14:SER:H 2 0.12 0.14 (1,913) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:14:SER:H 2 0.12 0.14 (1,881) 1:A:77:VAL:HG11 1:A:145:ALA:H 2 0.05 0.06 (1,881) 1:A:77:VAL:HG12 1:A:145:ALA:H 2 </td <td>(1,953)</td> <td>1:A:166:VAL:H</td> <td>1:A:166:VAL:HG13</td> <td>2</td> <td>0.37</td> <td>0.67</td>	(1,953)	1:A:166:VAL:H	1:A:166:VAL:HG13	2	0.37	0.67
(1,914) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:169:LEU:HD23 2 0.43 0.62 (1,914) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:169:LEU:HD21 2 0.43 0.62 (1,914) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:169:LEU:HD22 2 0.43 0.62 (1,914) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:169:LEU:HD23 2 0.43 0.62 (1,914) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:169:LEU:HD21 2 0.43 0.62 (1,914) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:169:LEU:HD22 2 0.43 0.62 (1,914) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:14:SER:H 2 0.43 0.62 (1,913) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:14:SER:H 2 0.12 0.14 (1,913) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:14:SER:H 2 0.12 0.14 (1,913) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:14:SER:H 2 0.05 0.06 (1,881) 1:A:77:VAL:HG11 1:A:145:ALA:H 2 0.05 0.06 (1,881) 1:A:77:VAL:HG12 1:A:145:ALA:H 2 0.05 0.06	(1,914)	1:A:13:LEU:HD11	1:A:169:LEU:HD21	2	0.43	0.62
(1,914) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:169:LEU:HD23 2 0.43 0.62 (1,914) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:169:LEU:HD21 2 0.43 0.62 (1,914) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:169:LEU:HD22 2 0.43 0.62 (1,914) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:169:LEU:HD23 2 0.43 0.62 (1,914) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:169:LEU:HD21 2 0.43 0.62 (1,914) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:169:LEU:HD22 2 0.43 0.62 (1,914) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:169:LEU:HD23 2 0.43 0.62 (1,913) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:14:SER:H 2 0.12 0.14 (1,913) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:14:SER:H 2 0.12 0.14 (1,913) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:14:SER:H 2 0.05 0.06 (1,881) 1:A:77:VAL:HG11 1:A:145:ALA:H 2 0.05 0.06 (1,881) 1:A:77:VAL:HG12 1:A:145:ALA:H 2 0.05 0.06	(1,914)	1:A:13:LEU:HD11	1:A:169:LEU:HD22	2	0.43	0.62
(1,914) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:169:LEU:HD22 2 0.43 0.62 (1,914) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:169:LEU:HD23 2 0.43 0.62 (1,914) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:169:LEU:HD21 2 0.43 0.62 (1,914) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:169:LEU:HD22 2 0.43 0.62 (1,914) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:14:SER:H 2 0.43 0.62 (1,913) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:14:SER:H 2 0.12 0.14 (1,913) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:14:SER:H 2 0.12 0.14 (1,913) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:14:SER:H 2 0.12 0.14 (1,881) 1:A:77:VAL:HG11 1:A:145:ALA:H 2 0.05 0.06 (1,881) 1:A:77:VAL:HG12 1:A:145:ALA:H 2 0.05 0.06		1:A:13:LEU:HD11	1:A:169:LEU:HD23	2	0.43	0.62
(1,914) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:169:LEU:HD23 2 0.43 0.62 (1,914) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:169:LEU:HD21 2 0.43 0.62 (1,914) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:169:LEU:HD22 2 0.43 0.62 (1,914) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:169:LEU:HD23 2 0.43 0.62 (1,914) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:14:SER:H 2 0.12 0.14 (1,913) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:14:SER:H 2 0.12 0.14 (1,913) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:14:SER:H 2 0.12 0.14 (1,913) 1:A:77:VAL:HG11 1:A:145:ALA:H 2 0.05 0.06 (1,881) 1:A:77:VAL:HG12 1:A:145:ALA:H 2 0.05 0.06	(1,914)	1:A:13:LEU:HD12	1:A:169:LEU:HD21	2	0.43	0.62
(1,914) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:169:LEU:HD21 2 0.43 0.62 (1,914) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:169:LEU:HD22 2 0.43 0.62 (1,914) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:169:LEU:HD23 2 0.43 0.62 (1,913) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:14:SER:H 2 0.12 0.14 (1,913) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:14:SER:H 2 0.12 0.14 (1,913) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:14:SER:H 2 0.12 0.14 (1,881) 1:A:77:VAL:HG11 1:A:145:ALA:H 2 0.05 0.06 (1,881) 1:A:77:VAL:HG12 1:A:145:ALA:H 2 0.05 0.06	(1,914)	1:A:13:LEU:HD12	1:A:169:LEU:HD22	2	0.43	0.62
(1,914) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:169:LEU:HD22 2 0.43 0.62 (1,914) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:169:LEU:HD23 2 0.43 0.62 (1,913) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:14:SER:H 2 0.12 0.14 (1,913) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:14:SER:H 2 0.12 0.14 (1,913) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:14:SER:H 2 0.12 0.14 (1,881) 1:A:77:VAL:HG11 1:A:145:ALA:H 2 0.05 0.06 (1,881) 1:A:77:VAL:HG12 1:A:145:ALA:H 2 0.05 0.06	(1,914)	1:A:13:LEU:HD12	1:A:169:LEU:HD23	2	0.43	0.62
(1,914) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:169:LEU:HD23 2 0.43 0.62 (1,913) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:14:SER:H 2 0.12 0.14 (1,913) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:14:SER:H 2 0.12 0.14 (1,913) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:14:SER:H 2 0.12 0.14 (1,881) 1:A:77:VAL:HG11 1:A:145:ALA:H 2 0.05 0.06 (1,881) 1:A:77:VAL:HG12 1:A:145:ALA:H 2 0.05 0.06	(1,914)	1:A:13:LEU:HD13	1:A:169:LEU:HD21	2	0.43	0.62
(1,914) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:169:LEU:HD23 2 0.43 0.62 (1,913) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:14:SER:H 2 0.12 0.14 (1,913) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:14:SER:H 2 0.12 0.14 (1,913) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:14:SER:H 2 0.12 0.14 (1,881) 1:A:77:VAL:HG11 1:A:145:ALA:H 2 0.05 0.06 (1,881) 1:A:77:VAL:HG12 1:A:145:ALA:H 2 0.05 0.06	· · /	1:A:13:LEU:HD13	1:A:169:LEU:HD22	2	0.43	0.62
(1,913) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:14:SER:H 2 0.12 0.14 (1,913) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:14:SER:H 2 0.12 0.14 (1,913) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:14:SER:H 2 0.12 0.14 (1,881) 1:A:77:VAL:HG11 1:A:145:ALA:H 2 0.05 0.06 (1,881) 1:A:77:VAL:HG12 1:A:145:ALA:H 2 0.05 0.06	· · /	1:A:13:LEU:HD13	1:A:169:LEU:HD23	2	0.43	0.62
(1,913) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:14:SER:H 2 0.12 0.14 (1,913) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:14:SER:H 2 0.12 0.14 (1,881) 1:A:77:VAL:HG11 1:A:145:ALA:H 2 0.05 0.06 (1,881) 1:A:77:VAL:HG12 1:A:145:ALA:H 2 0.05 0.06	· /	1:A:13:LEU:HD11	1:A:14:SER:H	2	0.12	0.14
(1,913) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:14:SER:H 2 0.12 0.14 (1,881) 1:A:77:VAL:HG11 1:A:145:ALA:H 2 0.05 0.06 (1,881) 1:A:77:VAL:HG12 1:A:145:ALA:H 2 0.05 0.06		1:A:13:LEU:HD12	1:A:14:SER:H		0.12	0.14
(1,881) 1:A:77:VAL:HG11 1:A:145:ALA:H 2 0.05 0.06 (1,881) 1:A:77:VAL:HG12 1:A:145:ALA:H 2 0.05 0.06	\ ' ' /	1:A:13:LEU:HD13	1:A:14:SER:H	2	0.12	0.14
(1,881) 1:A:77:VAL:HG12 1:A:145:ALA:H 2 0.05 0.06		1:A:77:VAL:HG11	1:A:145:ALA:H	2	0.05	0.06
		1:A:77:VAL:HG12	1:A:145:ALA:H	2	0.05	0.06
	(1,881)	1:A:77:VAL:HG13	1:A:145:ALA:H	2	0.05	0.06
(1,88) 1:A:76:LEU:HD21 1:A:141:GLY:H 2 0.05 0.07	(1,88)	1:A:76:LEU:HD21	1:A:141:GLY:H	2	0.05	0.07
(1,88) 1:A:76:LEU:HD22 1:A:141:GLY:H 2 0.05 0.07		1:A:76:LEU:HD22	1:A:141:GLY:H	2	0.05	0.07



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,88)	1:A:76:LEU:HD23	1:A:141:GLY:H	2	0.05	0.07
(1,824)	1:A:42:ILE:HD11	1:A:43:VAL:H	2	0.03	0.04
(1,824)	1:A:42:ILE:HD12	1:A:43:VAL:H	2	0.03	0.04
(1,824)	1:A:42:ILE:HD13	1:A:43:VAL:H	2	0.03	0.04
(1,820)	1:A:76:LEU:HD21	1:A:140:ILE:H	2	0.1	0.14
(1,820)	1:A:76:LEU:HD22	1:A:140:ILE:H	2	0.1	0.14
(1,820)	1:A:76:LEU:HD23	1:A:140:ILE:H	2	0.1	0.14
(1,786)	1:A:121:GLN:HE21	1:A:125:VAL:HG21	2	0.07	0.09
(1,786)	1:A:121:GLN:HE21	1:A:125:VAL:HG22	2	0.07	0.09
(1,786)	1:A:121:GLN:HE21	1:A:125:VAL:HG23	2	0.07	0.09
(1,782)	1:A:22:LEU:HD21	1:A:26:LEU:H	2	0.03	0.04
(1,782)	1:A:22:LEU:HD22	1:A:26:LEU:H	2	0.03	0.04
(1,782)	1:A:22:LEU:HD23	1:A:26:LEU:H	2	0.03	0.04
(1,742)	1:A:36:VAL:HG11	1:A:44:LEU:HD11	2	0.03	0.06
(1,742)	1:A:36:VAL:HG11	1:A:44:LEU:HD12	2	0.03	0.06
(1,742)	1:A:36:VAL:HG11	1:A:44:LEU:HD13	2	0.03	0.06
(1,742)	1:A:36:VAL:HG12	1:A:44:LEU:HD11	2	0.03	0.06
(1,742)	1:A:36:VAL:HG12	1:A:44:LEU:HD12	2	0.03	0.06
(1,742)	1:A:36:VAL:HG12	1:A:44:LEU:HD13	2	0.03	0.06
(1,742)	1:A:36:VAL:HG13	1:A:44:LEU:HD11	2	0.03	0.06
(1,742)	1:A:36:VAL:HG13	1:A:44:LEU:HD12	2	0.03	0.06
(1,742)	1:A:36:VAL:HG13	1:A:44:LEU:HD13	2	0.03	0.06
(1,728)	1:A:120:ILE:HD11	1:A:172:VAL:HG21	2	0.01	0.02
(1,728)	1:A:120:ILE:HD11	1:A:172:VAL:HG22	2	0.01	0.02
(1,728)	1:A:120:ILE:HD11	1:A:172:VAL:HG23	2	0.01	0.02
(1,728)	1:A:120:ILE:HD12	1:A:172:VAL:HG21	2	0.01	0.02
(1,728)	1:A:120:ILE:HD12	1:A:172:VAL:HG22	2	0.01	0.02
(1,728)	1:A:120:ILE:HD12	1:A:172:VAL:HG23	2	0.01	0.02
(1,728)	1:A:120:ILE:HD13	1:A:172:VAL:HG21	2	0.01	0.02
(1,728)	1:A:120:ILE:HD13	1:A:172:VAL:HG22	2	0.01	0.02
(1,728)	1:A:120:ILE:HD13	1:A:172:VAL:HG23	2	0.01	0.02
(1,650)	1:A:38:LYS:H	1:A:41:GLU:H	2	0.12	0.14
(1,647)	1:A:103:MET:H	1:A:105:LYS:H	2	0.14	0.18
(1,639)	1:A:73:ASN:H	1:A:75:LYS:H	2	0.04	0.06
(1,591)	1:A:136:LEU:HD21	1:A:155:ILE:HD11	2	0.04	0.06
(1,591)	1:A:136:LEU:HD21	1:A:155:ILE:HD12	2	0.04	0.06
(1,591)	1:A:136:LEU:HD21	1:A:155:ILE:HD13	2	0.04	0.06
(1,591)	1:A:136:LEU:HD22	1:A:155:ILE:HD11	2	0.04	0.06
(1,591)	1:A:136:LEU:HD22	1:A:155:ILE:HD12	2	0.04	0.06
(1,591)	1:A:136:LEU:HD22	1:A:155:ILE:HD13	2	0.04	0.06
(1,591)	1:A:136:LEU:HD23	1:A:155:ILE:HD11	2	0.04	0.06
(1,591)	1:A:136:LEU:HD23	1:A:155:ILE:HD12	2	0.04	0.06



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,591)	1:A:136:LEU:HD23	1:A:155:ILE:HD13	2	0.04	0.06
(1,518)	1:A:22:LEU:HD11	1:A:28:TYR:HD1	2	0.99	1.91
(1,518)	1:A:22:LEU:HD12	1:A:28:TYR:HD1	2	0.99	1.91
(1,518)	1:A:22:LEU:HD13	1:A:28:TYR:HD1	2	0.99	1.91
(1,501)	1:A:91:TYR:HD1	1:A:153:VAL:HG21	2	0.09	0.14
(1,501)	1:A:91:TYR:HD1	1:A:153:VAL:HG22	2	0.09	0.14
(1,501)	1:A:91:TYR:HD1	1:A:153:VAL:HG23	2	0.09	0.14
(1,50)	1:A:80:ASN:H	1:A:80:ASN:HD22	2	0.27	0.27
(1,488)	1:A:68:ILE:HD11	1:A:156:ILE:HD11	2	0.01	0.02
(1,488)	1:A:68:ILE:HD11	1:A:156:ILE:HD12	2	0.01	0.02
(1,488)	1:A:68:ILE:HD11	1:A:156:ILE:HD13	2	0.01	0.02
(1,488)	1:A:68:ILE:HD12	1:A:156:ILE:HD11	2	0.01	0.02
(1,488)	1:A:68:ILE:HD12	1:A:156:ILE:HD12	2	0.01	0.02
(1,488)	1:A:68:ILE:HD12	1:A:156:ILE:HD13	2	0.01	0.02
(1,488)	1:A:68:ILE:HD13	1:A:156:ILE:HD11	2	0.01	0.02
(1,488)	1:A:68:ILE:HD13	1:A:156:ILE:HD12	2	0.01	0.02
(1,488)	1:A:68:ILE:HD13	1:A:156:ILE:HD13	2	0.01	0.02
(1,481)	1:A:152:GLN:HE21	1:A:171:LEU:HD21	2	0.01	0.01
(1,481)	1:A:152:GLN:HE21	1:A:171:LEU:HD22	2	0.01	0.01
(1,481)	1:A:152:GLN:HE21	1:A:171:LEU:HD23	2	0.01	0.01
(1,480)	1:A:152:GLN:HE22	1:A:171:LEU:HD21	2	0.04	0.05
(1,480)	1:A:152:GLN:HE22	1:A:171:LEU:HD22	2	0.04	0.05
(1,480)	1:A:152:GLN:HE22	1:A:171:LEU:HD23	2	0.04	0.05
(1,479)	1:A:152:GLN:HE22	1:A:172:VAL:H	2	0.05	0.08
(1,475)	1:A:23:VAL:H	1:A:28:TYR:HD1	2	0.39	0.67
(1,461)	1:A:22:LEU:HD11	1:A:171:LEU:H	2	0.04	0.05
(1,461)	1:A:22:LEU:HD12	1:A:171:LEU:H	2	0.04	0.05
(1,461)	1:A:22:LEU:HD13	1:A:171:LEU:H	2	0.04	0.05
(1,458)	1:A:164:THR:H	1:A:166:VAL:H	2	0.03	0.05
(1,453)	1:A:71:VAL:H	1:A:74:HIS:H	2	0.06	0.09
(1,384)	1:A:104:GLU:H	1:A:108:ARG:H	2	0.08	0.15
(1,373)	1:A:175:ALA:H	1:A:176:ILE:HD11	2	0.06	0.1
(1,373)	1:A:175:ALA:H	1:A:176:ILE:HD12	2	0.06	0.1
(1,373)	1:A:175:ALA:H	1:A:176:ILE:HD13	2	0.06	0.1
(1,361)	1:A:161:VAL:HG11	1:A:164:THR:H	2	0.03	0.06
(1,361)	1:A:161:VAL:HG12	1:A:164:THR:H	2	0.03	0.06
(1,361)	1:A:161:VAL:HG13	1:A:164:THR:H	2	0.03	0.06
(1,276)	1:A:62:GLU:H	1:A:64:VAL:H	2	0.03	0.04
(1,220)	1:A:109:ASP:H	1:A:113:VAL:H	2	0.04	0.05
(1,215)	1:A:21:LYS:H	1:A:28:TYR:HD1	2	0.45	0.86
(4.00=)	1 1 100 7770 77	1 A 100 A D C II	0	0.01	0.00
(1,207)	1:A:130:LYS:H	1:A:132:ARG:H	2	0.01	0.02



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,201)	1:A:127:LEU:HD22	1:A:129:ALA:H	2	0.01	0.01
(1,201)	1:A:127:LEU:HD23	1:A:129:ALA:H	2	0.01	0.01
(1,192)	1:A:37:ARG:H	1:A:72:LEU:HD21	2	0.1	0.15
(1,192)	1:A:37:ARG:H	1:A:72:LEU:HD22	2	0.1	0.15
(1,192)	1:A:37:ARG:H	1:A:72:LEU:HD23	2	0.1	0.15
(1,181)	1:A:152:GLN:HE21	1:A:172:VAL:H	2	0.07	0.07
(1,179)	1:A:92:ILE:HD11	1:A:153:VAL:H	2	0.04	0.05
(1,179)	1:A:92:ILE:HD12	1:A:153:VAL:H	2	0.04	0.05
(1,179)	1:A:92:ILE:HD13	1:A:153:VAL:H	2	0.04	0.05
(1,168)	1:A:110:LYS:H	1:A:113:VAL:HG21	2	0.04	0.05
(1,168)	1:A:110:LYS:H	1:A:113:VAL:HG22	2	0.04	0.05
(1,168)	1:A:110:LYS:H	1:A:113:VAL:HG23	2	0.04	0.05
(1,122)	1:A:17:SER:H	1:A:18:PHE:H	2	0.03	0.06
(1,1135)	1:A:23:VAL:O	1:A:27:VAL:H	2	0.05	0.08
(1,1121)	1:A:118:LYS:O	1:A:122:GLY:H	2	0.01	0.02
(1,1094)	1:A:93:LYS:O	1:A:97:LYS:N	2	0.01	0.01
(1,1088)	1:A:90:ALA:O	1:A:94:LYS:N	2	0.05	0.06
(1,1071)	1:A:35:VAL:H	1:A:67:GLY:O	2	0.01	0.02
(1,1060)	1:A:28:TYR:O	1:A:171:LEU:N	2	0.01	0.02
(1,1055)	1:A:161:VAL:O	1:A:164:THR:H	2	0.03	0.04
(1,1034)	1:A:79:MET:N	1:A:138:PHE:O	2	0.01	0.02
(1,1029)	1:A:77:VAL:H	1:A:140:ILE:O	2	0.03	0.05
(1,1028)	1:A:77:VAL:O	1:A:140:ILE:N	2	0.01	0.02
(1,984)	1:A:100:ILE:HD11	1:A:113:VAL:HG21	1	0.07	0.07
(1,984)	1:A:100:ILE:HD11	1:A:113:VAL:HG22	1	0.07	0.07
(1,984)	1:A:100:ILE:HD11	1:A:113:VAL:HG23	1	0.07	0.07
(1,984)	1:A:100:ILE:HD12	1:A:113:VAL:HG21	1	0.07	0.07
(1,984)	1:A:100:ILE:HD12	1:A:113:VAL:HG22	1	0.07	0.07
(1,984)	1:A:100:ILE:HD12	1:A:113:VAL:HG23	1	0.07	0.07
(1,984)	1:A:100:ILE:HD13	1:A:113:VAL:HG21	1	0.07	0.07
(1,984)	1:A:100:ILE:HD13	1:A:113:VAL:HG22	1	0.07	0.07
(1,984)	1:A:100:ILE:HD13	1:A:113:VAL:HG23	1	0.07	0.07
(1,952)	1:A:161:VAL:HG11	1:A:166:VAL:HG11	1	0.61	0.61
(1,952)	1:A:161:VAL:HG11	1:A:166:VAL:HG12	1	0.61	0.61
(1,952)	1:A:161:VAL:HG11	1:A:166:VAL:HG13	1	0.61	0.61
(1,952)	1:A:161:VAL:HG12	1:A:166:VAL:HG11	1	0.61	0.61
(1,952)	1:A:161:VAL:HG12	1:A:166:VAL:HG12	1	0.61	0.61
(1,952)	1:A:161:VAL:HG12	1:A:166:VAL:HG13	1	0.61	0.61
(1,952)	1:A:161:VAL:HG13	1:A:166:VAL:HG11	1	0.61	0.61
(1,952)	1:A:161:VAL:HG13	1:A:166:VAL:HG12	1	0.61	0.61
(1,952)	1:A:161:VAL:HG13	1:A:166:VAL:HG13	1	0.61	0.61
(1,943)	1:A:150:ASN:H	1:A:150:ASN:HD21	1	0.08	0.08



Continued from previous page...

1,928	Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,92) 1:A:161:VAL:HG11 1:A:163:GLY:H 1 0.05 0.05 (1,92) 1:A:161:VAL:HG12 1:A:163:GLY:H 1 0.05 0.05 (1,92) 1:A:161:VAL:HG13 1:A:163:GLY:H 1 0.05 0.05 (1,915) 1:A:131:EU:HD11 1:A:171:LEU:HD11 1 0.34 0.34 (1,915) 1:A:131:EU:HD11 1:A:171:LEU:HD11 1 0.34 0.34 (1,915) 1:A:131:EU:HD11 1:A:171:LEU:HD12 1 0.34 0.34 (1,915) 1:A:131:EU:HD12 1:A:171:LEU:HD13 1 0.34 0.34 (1,915) 1:A:131:EU:HD12 1:A:171:LEU:HD13 1 0.34 0.34 (1,915) 1:A:131:EU:HD12 1:A:171:LEU:HD12 1 0.34 0.34 (1,915) 1:A:131:EU:HD12 1:A:171:LEU:HD12 1 0.34 0.34 (1,915) 1:A:131:EU:HD12 1:A:171:LEU:HD11 1 0.34 0.34 (1,915) 1:A:131:EU:HD13 1:A:171:LEU:HD13 1 0.34 0.34 (1,915) 1:A:131:LEU:HD13 1:A:171:LEU:HD11 1 0.34 0.34 (1,915) 1:A:131:LEU:HD13 1:A:171:LEU:HD11 1 0.34 0.34 (1,915) 1:A:131:LEU:HD13 1:A:171:LEU:HD12 1 0.34 0.34 (1,915) 1:A:131:LEU:HD13 1:A:171:LEU:HD13 1 0.34 0.34 (1,915) 1:A:131:LEU:HD13 1:A:171:LEU:HD13 1 0.34 0.34 (1,915) 1:A:136:LEU:HD13 1:A:171:LEU:HD13 1 0.34 0.34 (1,915) 1:A:136:LEU:HD13 1:A:171:LEU:HD13 1 0.34 0.34 (1,916) 1:A:136:LEU:HD14 1:A:166:THR:H 1 0.03 0.03 (1,902) 1:A:136:LEU:HD21 1:A:156:ILE:H 1 0.07 0.07 (1,902) 1:A:136:LEU:HD22 1:A:156:ILE:H 1 0.07 0.07 (1,902) 1:A:136:LEU:HD23 1:A:156:ILE:H 1 0.07 0.07 (1,902) 1:A:2:LEU:HD23 1:A:156:ILE:H 1 0.06 0.06 (1,900) 1:A:2:LEU:HD21 1:A:179:GLU:H 1 0.06 0.06 (1,900) 1:A:2:LEU:HD22 1:A:179:GLU:H 1 0.06 0.06 (1,900) 1:A:2:LEU:HD23 1:A:179:GLU:H 1 0.06 0.06 (1,800) 1:A:4:LEU:HD21 1:A:45:ALA:H 1 0.01 0.01 (1,800) 1:A:44:LEU:HD21 1:A:45:ALA:H 1 0.01 0.01 (1,800) 1:A:44:LEU:HD13 1:A:45:ALA:H 1 0.00 0.00 (1,800) 1:A:44:LEU:HD11 1:A:45:ALA:H 1 0.00 0.00 (1,800) 1:A:44:LEU:HD12 1:A:45:ALA:H 1 0.00 0.00 (1,800) 1:A:44:LEU:HD11 1:A:45:ALA:H 1 0.00 0.00 (1,800) 1:A:44:LEU:HD12 1:A:45:ALA:H 1 0.00 0.00 (1,800) 1:A:44:LEU:HD13 1:A:45:ALA:H 1 0.00 0.00 (1,80	(1,928)	1:A:106:ASN:H	1:A:106:ASN:HD21	1	0.01	0.01
(1,92) 1:A:161:VAL:HG12 1:A:163:GIY:H 1 0.05 0.05 (1,92) 1:A:161:VAL:HG13 1:A:163:GIY:H 1 0.05 0.05 (1,915) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:171:LEU:HD11 1 0.34 0.34 (1,915) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:171:LEU:HD12 1 0.34 0.34 (1,915) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:171:LEU:HD13 1 0.34 0.34 (1,915) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:171:LEU:HD13 1 0.34 0.34 (1,915) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:171:LEU:HD11 1 0.34 0.34 (1,915) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:171:LEU:HD11 1 0.34 0.34 (1,915) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:171:LEU:HD12 1 0.34 0.34 (1,915) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:171:LEU:HD12 1 0.34 0.34 (1,915) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:171:LEU:HD13 1 0.34 0.34 (1,915) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:171:LEU:HD11 1 0.34 0.34 (1,915) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:171:LEU:HD12 1 0.34 0.34 (1,915) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:171:LEU:HD12 1 0.34 0.34 (1,915) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:171:LEU:HD12 1 0.34 0.34 (1,915) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:171:LEU:HD13 1 0.34 0.34 (1,916) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:171:LEU:HD13 1 0.34 0.34 (1,916) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:171:LEU:HD13 1 0.34 0.34 (1,916) 1:A:13:LEU:HD23 1:A:171:LEU:HD13 1 0.07 0.07 (1,902) 1:A:13:CLEU:HD22 1:A:15:CLE:H 1 0.07 0.07 (1,902) 1:A:13:CLEU:HD23 1:A:15:CLE:H 1 0.07 0.07 (1,902) 1:A:13:CLEU:HD23 1:A:179:GLU:H 1 0.06 0.06 (1,900) 1:A:2:LEU:HD23 1:A:179:GLU:H 1 0.06 0.06 (1,800) 1:A:4:LEU:HD23 1:A:179:GLU:H 1 0.06 0.06 (1,800) 1:A:4:LEU:HD23 1:A:45:ALA:H 1 0.01 0.01 (1,889) 1:A:44:LEU:HD23 1:A:45:ALA:H 1 0.01 0.01 (1,889) 1:A:44:LEU:HD23 1:A:45:ALA:H 1 0.04 0.04 (1,885) 1:A:3:LYS:H 1:A:70:LE:HD11 1 0.04 0.04 (1,889) 1:A:44:LEU:HD23 1:A:45:ALA:H 1 0.00 0.00 (1,800) 1:A:4:LEU:HD23 1:A:45:ALA:H 1 0.00 0.00 (1,889) 1:A:44:LEU:HD13 1:A:45:ALA:H 1 0.00 0.00 (1,889) 1:A:44:LEU:HD13 1:A:45:ALA:H 1 0.00 0.00 (1,889) 1:A:44:LEU:HD13 1:A:45:ALA:H 1 0.00 0.00 (1,889) 1:A:45:LEU:HD13 1:A:45:ALA:H 1 0.00 0.00 (1,889) 1:A:45:LEU:HD13 1:A:45:ALA:H 1 0.00 0.00 (1,885) 1:A:35:LE:H 11:A:169:LE:HD13 1 0.05 0.05 (0.06 (1,888) 1:A:13:A:46:LE:HD11 1:A:15:LE:HD11 1 0.	(1,924)	1:A:80:ASN:H	1:A:80:ASN:HD21	1	0.01	0.01
(1,92) 1:A:161:VAL:HG13 1:A:163:GLY:H 1 0.05 0.05 (1,915) 1:A:131:LEU:HD11 1:A:171:LEU:HD11 1 0.34 0.34 (1,915) 1:A:131:LEU:HD11 1:A:171:LEU:HD12 1 0.34 0.34 (1,915) 1:A:131:LEU:HD11 1:A:171:LEU:HD13 1 0.34 0.34 (1,915) 1:A:131:LEU:HD12 1:A:171:LEU:HD11 1 0.34 0.34 (1,915) 1:A:131:LEU:HD12 1:A:171:LEU:HD11 1 0.34 0.34 (1,915) 1:A:131:LEU:HD12 1:A:171:LEU:HD12 1 0.34 0.34 (1,915) 1:A:131:LEU:HD12 1:A:171:LEU:HD13 1 0.34 0.34 (1,915) 1:A:131:LEU:HD12 1:A:171:LEU:HD13 1 0.34 0.34 (1,915) 1:A:131:LEU:HD13 1:A:171:LEU:HD11 1 0.34 0.34 (1,915) 1:A:131:LEU:HD13 1:A:171:LEU:HD11 1 0.34 0.34 (1,915) 1:A:131:LEU:HD13 1:A:171:LEU:HD13 1 0.34 0.34 (1,915) 1:A:131:LEU:HD13 1:A:171:LEU:HD13 1 0.34 0.34 (1,915) 1:A:163:GLY:H 1 1:A:164:THR:H 1 0.03 0.03 (1,902) 1:A:163:CLU:HD12 1:A:156:ILE:H 1 0.07 0.07 (1,902) 1:A:136:LEU:HD21 1:A:156:ILE:H 1 0.07 0.07 (1,902) 1:A:136:LEU:HD22 1:A:156:ILE:H 1 0.07 0.07 (1,902) 1:A:136:LEU:HD23 1:A:156:ILE:H 1 0.07 0.07 (1,900) 1:A:2:LEU:HD23 1:A:156:ILE:H 1 0.06 0.06 (1,900) 1:A:2:LEU:HD22 1:A:179:GLU:H 1 0.06 0.06 (1,900) 1:A:2:LEU:HD22 1:A:179:GLU:H 1 0.06 0.06 (1,900) 1:A:2:LEU:HD22 1:A:159:LU:H 1 0.00 0.00 (1,900) 1:A:4:LEU:HD23 1:A:179:GLU:H 1 0.00 0.00 (1,890) 1:A:44:LEU:HD23 1:A:45:ALA:H 1 0.01 0.01 (1,890) 1:A:44:LEU:HD23 1:A:45:ALA:H 1 0.01 0.01 (1,890) 1:A:44:LEU:HD23 1:A:45:ALA:H 1 0.01 0.01 (1,890) 1:A:44:LEU:HD23 1:A:45:ALA:H 1 0.00 0.00 (1,889) 1:A:44:LEU:HD13 1:A:45:ALA:H 1 0.00 0.00 (1,885) 1:A:31:LYS:H 1:A:70:ILE:HD11 1 0.04 0.04 0.04 (1,885) 1:A:31:LYS:H 1:A:70:ILE:HD11 1 0.05 0.05 (1,876) 1:A:155:ILE:H 1:A:169:LEU:HD13 1 0.08 0.08 (1,876) 1:A:155:ILE:H 1:A:169:LEU:HD13 1 0.05 0.05 (1,872) 1:A:66:ARG:H 1:A:72:LEU:HD13 1 0.05 0.05 (1,872)	(1,92)	1:A:161:VAL:HG11	1:A:163:GLY:H	1	0.05	0.05
(1,915) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:17:LEU:HD11 1 0.34 0.34 (1,915) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:17:LEU:HD12 1 0.34 0.34 (1,915) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:17:LEU:HD13 1 0.34 0.34 (1,915) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:17:LEU:HD11 1 0.34 0.34 (1,915) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:17:LEU:HD13 1 0.34 0.34 (1,915) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:17:LEU:HD13 1 0.34 0.34 (1,915) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:17:LEU:HD12 1 0.34 0.34 (1,915) 1:A:13:LEU:HD23 1:A:16:LEU:HD12 1 0.07	(1,92)	1:A:161:VAL:HG12	1:A:163:GLY:H	1	0.05	0.05
(1,915) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:17:LEU:HD12 1 0.34 0.34 (1,915) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:17:LEU:HD13 1 0.34 0.34 (1,915) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:17:LEU:HD11 1 0.34 0.34 (1,915) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:17:LEU:HD13 1 0.34 0.34 (1,915) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:17:LEU:HD11 1 0.34 0.34 (1,915) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:17:LEU:HD12 1 0.34 0.34 (1,915) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:17:LEU:HD12 1 0.34 0.34 (1,915) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:17:LEU:HD12 1 0.34 0.34 (1,915) 1:A:13:G:LEU:HD13 1:A:16:G:LE:HD13 1 0.34 0.34 (1,915) 1:A:13:G:LEU:HD21 1:A:15:G:LE:HD13 1 0.34 0.34 (1,917) 1:A:13:G:LEU:HD22 1:A:15:G:LE:H 1 0.07 0.07 (1,902) 1:A:13:G:LEU:HD23 1:A:17:9:GLU:H 1 0.0	(1,92)	1:A:161:VAL:HG13	1:A:163:GLY:H	1	0.05	0.05
(1,915) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:171:LEU:HD13 1 0.34 0.34 (1,915) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:171:LEU:HD11 1 0.34 0.34 (1,915) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:171:LEU:HD12 1 0.34 0.34 (1,915) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:171:LEU:HD13 1 0.34 0.34 (1,915) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:171:LEU:HD12 1 0.34 0.34 (1,915) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:171:LEU:HD12 1 0.34 0.34 (1,915) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:16:G:LEU:HD13 1 0.34 0.34 (1,915) 1:A:13:G:LEU:HD13 1:A:16:G:LE:H 1 0.03 0.34 (1,915) 1:A:13:G:LEU:HD21 1:A:15:G:LE:H 1 0.07 0.07 (1,902) 1:A:13:G:LEU:HD22 1:A:15:G:LE:H 1 0.07 0.07 (1,902) 1:A:2:LEU:HD22 1:A:17:G:LE:H 1 0.06 0.06 (1,900) 1:A:2:LEU:HD21 1:A:17:G:LE:H 1 0.06 <td>(1,915)</td> <td>1:A:13:LEU:HD11</td> <td>1:A:171:LEU:HD11</td> <td>1</td> <td>0.34</td> <td>0.34</td>	(1,915)	1:A:13:LEU:HD11	1:A:171:LEU:HD11	1	0.34	0.34
(1,915) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:171:LEU:HD11 1 0.34 0.34 (1,915) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:171:LEU:HD12 1 0.34 0.34 (1,915) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:171:LEU:HD13 1 0.34 0.34 (1,915) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:171:LEU:HD13 1 0.34 0.34 (1,915) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:171:LEU:HD11 1 0.34 0.34 (1,915) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:171:LEU:HD11 1 0.34 0.34 (1,915) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:171:LEU:HD12 1 0.34 0.34 (1,915) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:171:LEU:HD13 1 0.34 0.34 (1,915) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:171:LEU:HD13 1 0.34 0.34 (1,915) 1:A:13:G:LEU:HD13 1:A:171:LEU:HD13 1 0.34 0.34 (1,915) 1:A:13:G:LEU:HD12 1:A:16:G:LE:H 1 0.07 0.07 (1,902) 1:A:13:G:LEU:HD21 1:A:15:G:LE:H 1 0.07 0.07 (1,902) 1:A:13:G:LEU:HD22 1:A:15:G:LE:H 1 0.07 0.07 (1,902) 1:A:13:G:LEU:HD23 1:A:15:G:LE:H 1 0.06 0.66 (1,900) 1:A:2:LEU:HD23 1:A:179:GLU:H 1 0.06 0.66 (1,900) 1:A:2:LEU:HD23 1:A:179:GLU:H 1 0.06 0.66 (1,900) 1:A:2:LEU:HD22 1:A:179:GLU:H 1 0.06 0.66 (1,800) 1:A:4:LEU:HD23 1:A:179:GLU:H 1 0.06 0.66 (1,800) 1:A:4:LEU:HD21 1:A:45:ALA:H 1 0.01 0.01 (1,890) 1:A:44:LEU:HD21 1:A:45:ALA:H 1 0.01 0.01 (1,890) 1:A:44:LEU:HD23 1:A:45:ALA:H 1 0.01 0.01 (1,890) 1:A:44:LEU:HD21 1:A:45:ALA:H 1 0.01 0.01 (1,889) 1:A:44:LEU:HD13 1:A:45:ALA:H 1 0.04 0.04 (1,889) 1:A:44:LEU:HD13 1:A:45:ALA:H 1 0.04 0.04 (1,889) 1:A:44:LEU:HD11 1:A:45:ALA:H 1 0.04 0.04 (1,889) 1:A:44:LEU:HD12 1:A:45:ALA:H 1 0.04 0.04 (1,889) 1:A:44:LEU:HD13 1:A:45:ALA:H 1 0.04 0.04 (1,889) 1:A:44:LEU:HD13 1:A:45:ALA:H 1 0.04 0.04 (1,889) 1:A:44:LEU:HD13 1:A:45:ALA:H 1 0.04 0.04 (1,889) 1:A:15:LYS:H 1:A:70:ILE:HD11 1 0.04 0.04 (1,885) 1:A:31:LYS:H 1:A:70:ILE:HD11 1 0.04 0.04 (1,885) 1:A:31:LYS:H 1:A:70:ILE:HD11 1 0.04 0.04 (1,885) 1:A:31:LYS:H 1:A:70:ILE:HD13 1 0.04 0.04 (1,885) 1:A:31:LYS:H 1:A:70:ILE:HD13 1 0.04 0.04 (1,885) 1:A:31:LYS:H 1:A:70:ILE:HD11 1 0.06 0.06 (1,883) 1:A:140:ILE:HD11 1:A:145:ALA:H 1 0.06 0.06 (1,883) 1:A:140:ILE:HD13 1:A:145:LE:HD11 1 0.05 0.05 (1,876) 1:A:155:ILE:H 1:A:169:LEU:HD22 1 0.08 0.08 (1,876) 1:A:155:ILE:H 1:A:169:LEU:HD23 1 0.08 0.08 (1,876) 1:A:165:ILE:H 1:A:169:LEU:HD12 1 0.05 0.05 (1,872) 1:A:66:ARG:H	(1,915)	1:A:13:LEU:HD11	1:A:171:LEU:HD12	1	0.34	0.34
(1,915) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:171:LEU:HD12 1 0.34 0.34 (1,915) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:171:LEU:HD13 1 0.34 0.34 (1,915) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:171:LEU:HD11 1 0.34 0.34 (1,915) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:171:LEU:HD12 1 0.34 0.34 (1,915) 1:A:163:GLY:H 1:A:164:THR:H 1 0.03 0.34 (1,915) 1:A:163:GLEU:HD13 1:A:171:LEU:HD13 1 0.34 0.34 (1,915) 1:A:163:GLY:H 1:A:164:THR:H 1 0.03 0.03 (1,902) 1:A:136:LEU:HD21 1:A:156:ILE:H 1 0.07 0.07 (1,902) 1:A:136:LEU:HD22 1:A:179:GLU:H 1 0.06 0.06 (1,900) 1:A:2:LEU:HD21 1:A:179:GLU:H 1 0.06 0.06 (1,900) 1:A:2:LEU:HD22 1:A:179:GLU:H 1 0.06 0.06 (1,890) 1:A:44:LEU:HD21 1:A:45:ALA:H 1 0.01	(1,915)	1:A:13:LEU:HD11	1:A:171:LEU:HD13	1	0.34	0.34
(1,915) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:171:LEU:HD13 1 0.34 0.34 (1,915) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:171:LEU:HD11 1 0.34 0.34 (1,915) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:171:LEU:HD12 1 0.34 0.34 (1,915) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:171:LEU:HD13 1 0.34 0.34 (1,91) 1:A:163:GLY:H 1:A:164:THR:H 1 0.03 0.03 (1,902) 1:A:163:CLU:HD21 1:A:156:ILE:H 1 0.07 0.07 (1,902) 1:A:136:LEU:HD22 1:A:156:ILE:H 1 0.07 0.07 (1,902) 1:A:136:LEU:HD22 1:A:179:GLU:H 1 0.06 0.06 (1,900) 1:A:2:LEU:HD22 1:A:179:GLU:H 1 0.06 0.06 (1,900) 1:A:2:LEU:HD23 1:A:179:GLU:H 1 0.06 0.06 (1,900) 1:A:4:LEU:HD23 1:A:179:GLU:H 1 0.06 0.06 (1,890) 1:A:44:LEU:HD21 1:A:45:ALA:H 1 0.01 0.01	(1,915)	1:A:13:LEU:HD12	1:A:171:LEU:HD11	1	0.34	0.34
(1,915) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:171:LEU:HD12 1 0.34 0.34 (1,915) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:171:LEU:HD12 1 0.34 0.34 (1,915) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:171:LEU:HD13 1 0.34 0.34 (1,915) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:164:THR:H 1 0.03 0.03 (1,902) 1:A:136:LEU:HD21 1:A:156:ILE:H 1 0.07 0.07 (1,902) 1:A:136:LEU:HD22 1:A:156:ILE:H 1 0.07 0.07 (1,902) 1:A:136:LEU:HD23 1:A:156:ILE:H 1 0.07 0.07 (1,900) 1:A:2:LEU:HD21 1:A:179:GLU:H 1 0.06 0.06 (1,900) 1:A:2:LEU:HD23 1:A:179:GLU:H 1 0.06 0.06 (1,890) 1:A:44:LEU:HD21 1:A:45:ALA:H 1 0.01 0.01 (1,889) 1:A:44:LEU:HD23 1:A:45:ALA:H 1 0.01 0.01 (1,889) 1:A:44:LEU:HD13 1:A:45:ALA:H 1 0.04 0.04<	(1,915)	1:A:13:LEU:HD12	1:A:171:LEU:HD12	1	0.34	0.34
(1,915) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:17:LEU:HD12 1 0.34 0.34 (1,915) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:17:LEU:HD13 1 0.34 0.34 (1,91) 1:A:163:GLY:H 1:A:164:THR:H 1 0.03 0.03 (1,902) 1:A:136:LEU:HD21 1:A:156:ILE:H 1 0.07 0.07 (1,902) 1:A:136:LEU:HD22 1:A:156:ILE:H 1 0.07 0.07 (1,902) 1:A:136:LEU:HD23 1:A:156:ILE:H 1 0.07 0.07 (1,900) 1:A:2:LEU:HD23 1:A:179:GLU:H 1 0.06 0.06 (1,900) 1:A:2:LEU:HD23 1:A:45:ALA:H 1 0.06 0.06 (1,900) 1:A:44:LEU:HD23 1:A:45:ALA:H 1 0.01 0.01 (1,890) 1:A:44:LEU:HD21 1:A:45:ALA:H 1 0.01 0.01 (1,889) 1:A:44:LEU:HD13 1:A:45:ALA:H 1 0.01 0.01 (1,889) 1:A:44:LEU:HD13 1:A:45:ALA:H 1 0.04 0.04 <	(1,915)	1:A:13:LEU:HD12	1:A:171:LEU:HD13	1	0.34	0.34
(1,915) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:171:LEU:HD13 1 0.34 0.34 (1,91) 1:A:163:GLY:H 1:A:164:THR:H 1 0.03 0.03 (1,902) 1:A:136:LEU:HD21 1:A:156:ILE:H 1 0.07 0.07 (1,902) 1:A:136:LEU:HD22 1:A:156:ILE:H 1 0.07 0.07 (1,902) 1:A:136:LEU:HD23 1:A:156:ILE:H 1 0.07 0.07 (1,900) 1:A:2:LEU:HD21 1:A:179:GLU:H 1 0.06 0.06 (1,900) 1:A:2:LEU:HD22 1:A:179:GLU:H 1 0.06 0.06 (1,900) 1:A:2:LEU:HD23 1:A:179:GLU:H 1 0.06 0.06 (1,900) 1:A:44:LEU:HD23 1:A:45:ALA:H 1 0.01 0.01 (1,890) 1:A:44:LEU:HD23 1:A:45:ALA:H 1 0.01 0.01 (1,889) 1:A:44:LEU:HD11 1:A:45:ALA:H 1 0.04 0.04 (1,889) 1:A:44:LEU:HD13 1:A:45:ALA:H 1 0.04 0.04 </td <td>(1,915)</td> <td>1:A:13:LEU:HD13</td> <td>1:A:171:LEU:HD11</td> <td>1</td> <td>0.34</td> <td>0.34</td>	(1,915)	1:A:13:LEU:HD13	1:A:171:LEU:HD11	1	0.34	0.34
(1,91) 1:A:163:GLY:H 1:A:164:THR:H 1 0.03 0.03 (1,902) 1:A:136:LEU:HD21 1:A:156:ILE:H 1 0.07 0.07 (1,902) 1:A:136:LEU:HD22 1:A:156:ILE:H 1 0.07 0.07 (1,902) 1:A:136:LEU:HD23 1:A:156:ILE:H 1 0.07 0.07 (1,900) 1:A:2:LEU:HD21 1:A:179:GLU:H 1 0.06 0.06 (1,900) 1:A:2:LEU:HD22 1:A:179:GLU:H 1 0.06 0.06 (1,890) 1:A:44:LEU:HD23 1:A:45:ALA:H 1 0.01 0.01 (1,890) 1:A:44:LEU:HD22 1:A:45:ALA:H 1 0.01 0.01 (1,889) 1:A:44:LEU:HD23 1:A:45:ALA:H 1 0.01 0.01 (1,889) 1:A:44:LEU:HD13 1:A:45:ALA:H 1 0.04 0.04 (1,889) 1:A:44:LEU:HD13 1:A:45:ALA:H 1 0.04 0.04 (1,885) 1:A:31:LYS:H 1:A:70:ILE:HD11 1 0.04 0.04	(1,915)	1:A:13:LEU:HD13	1:A:171:LEU:HD12	1	0.34	0.34
(1,902) 1:A:136:LEU:HD21 1:A:156:ILE:H 1 0.07 0.07 (1,902) 1:A:136:LEU:HD22 1:A:156:ILE:H 1 0.07 0.07 (1,902) 1:A:136:LEU:HD23 1:A:156:ILE:H 1 0.07 0.07 (1,900) 1:A:2:LEU:HD21 1:A:179:GLU:H 1 0.06 0.06 (1,900) 1:A:2:LEU:HD22 1:A:179:GLU:H 1 0.06 0.06 (1,900) 1:A:4:LEU:HD23 1:A:179:GLU:H 1 0.06 0.06 (1,890) 1:A:44:LEU:HD23 1:A:45:ALA:H 1 0.01 0.01 (1,890) 1:A:44:LEU:HD21 1:A:45:ALA:H 1 0.01 0.01 (1,889) 1:A:44:LEU:HD22 1:A:45:ALA:H 1 0.01 0.01 (1,889) 1:A:44:LEU:HD11 1:A:45:ALA:H 1 0.04 0.04 (1,889) 1:A:31:LYS:H 1:A:70:ILE:HD11 1 0.04 0.04 (1,885) 1:A:31:LYS:H 1:A:70:ILE:HD11 1 0.04 0.04 <td>(1,915)</td> <td>1:A:13:LEU:HD13</td> <td>1:A:171:LEU:HD13</td> <td>1</td> <td>0.34</td> <td>0.34</td>	(1,915)	1:A:13:LEU:HD13	1:A:171:LEU:HD13	1	0.34	0.34
(1,902) 1:A:136:LEU:HD22 1:A:156:ILE:H 1 0.07 0.07 (1,902) 1:A:136:LEU:HD23 1:A:156:ILE:H 1 0.07 0.07 (1,900) 1:A:2:LEU:HD21 1:A:179:GLU:H 1 0.06 0.06 (1,900) 1:A:2:LEU:HD22 1:A:179:GLU:H 1 0.06 0.06 (1,900) 1:A:2:LEU:HD23 1:A:179:GLU:H 1 0.06 0.06 (1,890) 1:A:44:LEU:HD21 1:A:45:ALA:H 1 0.01 0.01 (1,890) 1:A:44:LEU:HD22 1:A:45:ALA:H 1 0.01 0.01 (1,889) 1:A:44:LEU:HD13 1:A:45:ALA:H 1 0.01 0.01 (1,889) 1:A:44:LEU:HD12 1:A:45:ALA:H 1 0.04 0.04 (1,889) 1:A:34:LYS:H 1:A:70:ILE:HD11 1 0.04 0.04 (1,885) 1:A:31:LYS:H 1:A:70:ILE:HD11 1 0.04 0.04 (1,885) 1:A:31:LYS:H 1:A:70:ILE:HD13 1 0.04 0.04	(1,91)	1:A:163:GLY:H	1:A:164:THR:H	1	0.03	0.03
(1,902) 1:A:136:LEU:HD23 1:A:156:ILE:H 1 0.07 0.07 (1,900) 1:A:2:LEU:HD21 1:A:179:GLU:H 1 0.06 0.06 (1,900) 1:A:2:LEU:HD22 1:A:179:GLU:H 1 0.06 0.06 (1,900) 1:A:2:LEU:HD23 1:A:179:GLU:H 1 0.06 0.06 (1,890) 1:A:44:LEU:HD21 1:A:45:ALA:H 1 0.01 0.01 (1,890) 1:A:44:LEU:HD22 1:A:45:ALA:H 1 0.01 0.01 (1,890) 1:A:44:LEU:HD23 1:A:45:ALA:H 1 0.01 0.01 (1,889) 1:A:44:LEU:HD13 1:A:45:ALA:H 1 0.01 0.01 (1,889) 1:A:44:LEU:HD12 1:A:45:ALA:H 1 0.04 0.04 (1,889) 1:A:31:LYS:H 1:A:70:ILE:HD11 1 0.04 0.04 (1,885) 1:A:31:LYS:H 1:A:70:ILE:HD11 1 0.04 0.04 (1,885) 1:A:31:LYS:H 1:A:70:ILE:HD13 1 0.04 0.04	(1,902)	1:A:136:LEU:HD21	1:A:156:ILE:H	1	0.07	0.07
(1,900) 1:A:2:LEU:HD21 1:A:179:GLU:H 1 0.06 0.06 (1,900) 1:A:2:LEU:HD22 1:A:179:GLU:H 1 0.06 0.06 (1,900) 1:A:2:LEU:HD23 1:A:179:GLU:H 1 0.06 0.06 (1,890) 1:A:44:LEU:HD21 1:A:45:ALA:H 1 0.01 0.01 (1,890) 1:A:44:LEU:HD22 1:A:45:ALA:H 1 0.01 0.01 (1,890) 1:A:44:LEU:HD23 1:A:45:ALA:H 1 0.01 0.01 (1,889) 1:A:44:LEU:HD13 1:A:45:ALA:H 1 0.04 0.04 (1,889) 1:A:44:LEU:HD13 1:A:45:ALA:H 1 0.04 0.04 (1,889) 1:A:31:LYS:H 1:A:70:ILE:HD11 1 0.04 0.04 (1,885) 1:A:31:LYS:H 1:A:70:ILE:HD12 1 0.04 0.04 (1,885) 1:A:31:LYS:H 1:A:70:ILE:HD13 1 0.04 0.04 (1,885) 1:A:31:LYS:H 1:A:145:ALA:H 1 0.06 0.06 <t< td=""><td>(1,902)</td><td>1:A:136:LEU:HD22</td><td>1:A:156:ILE:H</td><td>1</td><td>0.07</td><td>0.07</td></t<>	(1,902)	1:A:136:LEU:HD22	1:A:156:ILE:H	1	0.07	0.07
(1,900) 1:A:2:LEU:HD21 1:A:179:GLU:H 1 0.06 0.06 (1,900) 1:A:2:LEU:HD22 1:A:179:GLU:H 1 0.06 0.06 (1,900) 1:A:2:LEU:HD23 1:A:179:GLU:H 1 0.06 0.06 (1,890) 1:A:44:LEU:HD21 1:A:45:ALA:H 1 0.01 0.01 (1,890) 1:A:44:LEU:HD22 1:A:45:ALA:H 1 0.01 0.01 (1,890) 1:A:44:LEU:HD23 1:A:45:ALA:H 1 0.01 0.01 (1,889) 1:A:44:LEU:HD13 1:A:45:ALA:H 1 0.04 0.04 (1,889) 1:A:44:LEU:HD13 1:A:45:ALA:H 1 0.04 0.04 (1,889) 1:A:31:LYS:H 1:A:70:ILE:HD11 1 0.04 0.04 (1,885) 1:A:31:LYS:H 1:A:70:ILE:HD12 1 0.04 0.04 (1,885) 1:A:31:LYS:H 1:A:70:ILE:HD13 1 0.04 0.04 (1,885) 1:A:31:LYS:H 1:A:145:ALA:H 1 0.06 0.06 <t< td=""><td></td><td>1:A:136:LEU:HD23</td><td>1:A:156:ILE:H</td><td>1</td><td>0.07</td><td>0.07</td></t<>		1:A:136:LEU:HD23	1:A:156:ILE:H	1	0.07	0.07
(1,900) 1:A:2:LEU:HD23 1:A:179:GLU:H 1 0.06 0.06 (1,890) 1:A:44:LEU:HD21 1:A:45:ALA:H 1 0.01 0.01 (1,890) 1:A:44:LEU:HD22 1:A:45:ALA:H 1 0.01 0.01 (1,890) 1:A:44:LEU:HD23 1:A:45:ALA:H 1 0.01 0.01 (1,889) 1:A:44:LEU:HD11 1:A:45:ALA:H 1 0.04 0.04 (1,889) 1:A:44:LEU:HD12 1:A:45:ALA:H 1 0.04 0.04 (1,889) 1:A:44:LEU:HD13 1:A:45:ALA:H 1 0.04 0.04 (1,889) 1:A:44:LEU:HD13 1:A:70:ILE:HD11 1 0.04 0.04 (1,885) 1:A:31:LYS:H 1:A:70:ILE:HD12 1 0.04 0.04 (1,885) 1:A:31:LYS:H 1:A:70:ILE:HD13 1 0.04 0.04 (1,885) 1:A:31:LYS:H 1:A:70:ILE:HD13 1 0.04 0.04 (1,883) 1:A:140:ILE:HD11 1:A:145:ALA:H 1 0.06 0.06		1:A:2:LEU:HD21	1:A:179:GLU:H	1	0.06	0.06
(1,890) 1:A:44:LEU:HD21 1:A:45:ALA:H 1 0.01 0.01 (1,890) 1:A:44:LEU:HD22 1:A:45:ALA:H 1 0.01 0.01 (1,890) 1:A:44:LEU:HD23 1:A:45:ALA:H 1 0.01 0.01 (1,889) 1:A:44:LEU:HD11 1:A:45:ALA:H 1 0.04 0.04 (1,889) 1:A:44:LEU:HD12 1:A:45:ALA:H 1 0.04 0.04 (1,889) 1:A:44:LEU:HD13 1:A:45:ALA:H 1 0.04 0.04 (1,889) 1:A:44:LEU:HD13 1:A:70:ILE:HD11 1 0.04 0.04 (1,885) 1:A:31:LYS:H 1:A:70:ILE:HD12 1 0.04 0.04 (1,885) 1:A:31:LYS:H 1:A:70:ILE:HD13 1 0.04 0.04 (1,885) 1:A:31:LYS:H 1:A:70:ILE:HD13 1 0.04 0.04 (1,883) 1:A:140:ILE:HD11 1:A:145:ALA:H 1 0.06 0.06 (1,883) 1:A:140:ILE:HD13 1:A:145:ALA:H 1 0.06 0.06 <td>(1,900)</td> <td>1:A:2:LEU:HD22</td> <td>1:A:179:GLU:H</td> <td>1</td> <td>0.06</td> <td>0.06</td>	(1,900)	1:A:2:LEU:HD22	1:A:179:GLU:H	1	0.06	0.06
(1,890) 1:A:44:LEU:HD22 1:A:45:ALA:H 1 0.01 0.01 (1,890) 1:A:44:LEU:HD23 1:A:45:ALA:H 1 0.01 0.01 (1,889) 1:A:44:LEU:HD11 1:A:45:ALA:H 1 0.04 0.04 (1,889) 1:A:44:LEU:HD12 1:A:45:ALA:H 1 0.04 0.04 (1,889) 1:A:44:LEU:HD13 1:A:45:ALA:H 1 0.04 0.04 (1,885) 1:A:31:LYS:H 1:A:70:ILE:HD11 1 0.04 0.04 (1,885) 1:A:31:LYS:H 1:A:70:ILE:HD12 1 0.04 0.04 (1,885) 1:A:31:LYS:H 1:A:70:ILE:HD13 1 0.04 0.04 (1,885) 1:A:31:LYS:H 1:A:70:ILE:HD13 1 0.04 0.04 (1,885) 1:A:140:ILE:HD11 1:A:145:ALA:H 1 0.06 0.06 (1,883) 1:A:140:ILE:HD11 1:A:145:ALA:H 1 0.06 0.06 (1,883) 1:A:140:ILE:HD13 1:A:145:ALA:H 1 0.06 0.06 <td>(1,900)</td> <td>1:A:2:LEU:HD23</td> <td>1:A:179:GLU:H</td> <td>1</td> <td>0.06</td> <td>0.06</td>	(1,900)	1:A:2:LEU:HD23	1:A:179:GLU:H	1	0.06	0.06
(1,890) 1:A:44:LEU:HD23 1:A:45:ALA:H 1 0.01 0.01 (1,889) 1:A:44:LEU:HD11 1:A:45:ALA:H 1 0.04 0.04 (1,889) 1:A:44:LEU:HD12 1:A:45:ALA:H 1 0.04 0.04 (1,889) 1:A:44:LEU:HD13 1:A:45:ALA:H 1 0.04 0.04 (1,885) 1:A:31:LYS:H 1:A:70:ILE:HD11 1 0.04 0.04 (1,885) 1:A:31:LYS:H 1:A:70:ILE:HD12 1 0.04 0.04 (1,885) 1:A:31:LYS:H 1:A:70:ILE:HD13 1 0.04 0.04 (1,883) 1:A:140:ILE:HD11 1:A:145:ALA:H 1 0.06 0.06 (1,883) 1:A:140:ILE:HD12 1:A:145:ALA:H 1 0.06 0.06 (1,883) 1:A:140:ILE:HD13 1:A:145:ALA:H 1 0.06 0.06 (1,883) 1:A:155:ILE:H 1:A:169:LEU:HD21 1 0.08 0.08 (1,876) 1:A:155:ILE:H 1:A:169:LEU:HD22 1 0.08 0.08	(1,890)	1:A:44:LEU:HD21	1:A:45:ALA:H	1	0.01	0.01
(1,889) 1:A:44:LEU:HD11 1:A:45:ALA:H 1 0.04 0.04 (1,889) 1:A:44:LEU:HD12 1:A:45:ALA:H 1 0.04 0.04 (1,889) 1:A:44:LEU:HD13 1:A:45:ALA:H 1 0.04 0.04 (1,885) 1:A:31:LYS:H 1:A:70:ILE:HD11 1 0.04 0.04 (1,885) 1:A:31:LYS:H 1:A:70:ILE:HD12 1 0.04 0.04 (1,885) 1:A:31:LYS:H 1:A:70:ILE:HD12 1 0.04 0.04 (1,885) 1:A:31:LYS:H 1:A:70:ILE:HD12 1 0.04 0.04 (1,885) 1:A:31:LYS:H 1:A:70:ILE:HD13 1 0.04 0.04 (1,885) 1:A:31:LYS:H 1:A:145:ALA:H 1 0.06 0.06 (1,883) 1:A:140:ILE:HD11 1:A:145:ALA:H 1 0.06 0.06 (1,883) 1:A:140:ILE:HD13 1:A:145:ALA:H 1 0.06 0.06 (1,883) 1:A:155:ILE:H 1:A:169:LEU:HD21 1 0.08 0.08	(1,890)	1:A:44:LEU:HD22	1:A:45:ALA:H	1	0.01	0.01
(1,889) 1:A:44:LEU:HD12 1:A:45:ALA:H 1 0.04 0.04 (1,889) 1:A:44:LEU:HD13 1:A:45:ALA:H 1 0.04 0.04 (1,885) 1:A:31:LYS:H 1:A:70:ILE:HD11 1 0.04 0.04 (1,885) 1:A:31:LYS:H 1:A:70:ILE:HD12 1 0.04 0.04 (1,885) 1:A:31:LYS:H 1:A:70:ILE:HD13 1 0.04 0.04 (1,883) 1:A:140:ILE:HD11 1:A:145:ALA:H 1 0.06 0.06 (1,883) 1:A:140:ILE:HD12 1:A:145:ALA:H 1 0.06 0.06 (1,883) 1:A:140:ILE:HD13 1:A:145:ALA:H 1 0.06 0.06 (1,883) 1:A:140:ILE:HD13 1:A:145:ALA:H 1 0.06 0.06 (1,883) 1:A:140:ILE:HD13 1:A:145:ALA:H 1 0.06 0.06 (1,883) 1:A:155:ILE:H 1:A:169:LEU:HD21 1 0.08 0.08 (1,876) 1:A:155:ILE:H 1:A:169:LEU:HD23 1 0.08 0.08	(1,890)	1:A:44:LEU:HD23	1:A:45:ALA:H	1	0.01	0.01
(1,889) 1:A:44:LEU:HD13 1:A:45:ALA:H 1 0.04 0.04 (1,885) 1:A:31:LYS:H 1:A:70:ILE:HD11 1 0.04 0.04 (1,885) 1:A:31:LYS:H 1:A:70:ILE:HD12 1 0.04 0.04 (1,885) 1:A:31:LYS:H 1:A:70:ILE:HD13 1 0.04 0.04 (1,883) 1:A:140:ILE:HD11 1:A:145:ALA:H 1 0.06 0.06 (1,883) 1:A:140:ILE:HD12 1:A:145:ALA:H 1 0.06 0.06 (1,883) 1:A:140:ILE:HD13 1:A:145:ALA:H 1 0.06 0.06 (1,883) 1:A:140:ILE:HD13 1:A:145:ALA:H 1 0.06 0.06 (1,886) 1:A:155:ILE:H 1:A:169:LEU:HD21 1 0.08 0.08 (1,876) 1:A:155:ILE:H 1:A:169:LEU:HD23 1 0.08 0.08 (1,872) 1:A:66:ARG:H 1:A:72:LEU:HD11 1 0.05 0.05 (1,872) 1:A:66:ARG:H 1:A:72:LEU:HD13 1 0.05 0.05	(1,889)	1:A:44:LEU:HD11	1:A:45:ALA:H	1	0.04	0.04
(1,885) 1:A:31:LYS:H 1:A:70:ILE:HD11 1 0.04 0.04 (1,885) 1:A:31:LYS:H 1:A:70:ILE:HD12 1 0.04 0.04 (1,885) 1:A:31:LYS:H 1:A:70:ILE:HD13 1 0.04 0.04 (1,885) 1:A:140:ILE:HD11 1:A:70:ILE:HD13 1 0.04 0.04 (1,883) 1:A:140:ILE:HD11 1:A:145:ALA:H 1 0.06 0.06 (1,883) 1:A:140:ILE:HD13 1:A:145:ALA:H 1 0.06 0.06 (1,883) 1:A:140:ILE:HD13 1:A:145:ALA:H 1 0.06 0.06 (1,883) 1:A:140:ILE:HD13 1:A:145:ALA:H 1 0.06 0.06 (1,876) 1:A:155:ILE:H 1:A:169:LEU:HD21 1 0.08 0.08 (1,876) 1:A:155:ILE:H 1:A:169:LEU:HD23 1 0.08 0.08 (1,872) 1:A:66:ARG:H 1:A:72:LEU:HD11 1 0.05 0.05 (1,872) 1:A:66:ARG:H 1:A:72:LEU:HD13 1 0.05 0.05 <td>(1,889)</td> <td>1:A:44:LEU:HD12</td> <td>1:A:45:ALA:H</td> <td>1</td> <td>0.04</td> <td>0.04</td>	(1,889)	1:A:44:LEU:HD12	1:A:45:ALA:H	1	0.04	0.04
(1,885) 1:A:31:LYS:H 1:A:70:ILE:HD12 1 0.04 0.04 (1,885) 1:A:31:LYS:H 1:A:70:ILE:HD13 1 0.04 0.04 (1,883) 1:A:140:ILE:HD11 1:A:145:ALA:H 1 0.06 0.06 (1,883) 1:A:140:ILE:HD12 1:A:145:ALA:H 1 0.06 0.06 (1,883) 1:A:140:ILE:HD13 1:A:145:ALA:H 1 0.06 0.06 (1,876) 1:A:155:ILE:H 1:A:169:LEU:HD21 1 0.08 0.08 (1,876) 1:A:155:ILE:H 1:A:169:LEU:HD22 1 0.08 0.08 (1,872) 1:A:66:ARG:H 1:A:72:LEU:HD11 1 0.05 0.05 (1,872) 1:A:66:ARG:H 1:A:72:LEU:HD12 1 0.05 0.05 (1,872) 1:A:66:ARG:H 1:A:72:LEU:HD13 1 0.05 0.05 (1,868) 1:A:113:VAL:HG21 1:A:115:ALA:H 1 0.06 0.06 (1,868) 1:A:113:VAL:HG22 1:A:115:ALA:H 1 0.06 0.06	(1,889)	1:A:44:LEU:HD13	1:A:45:ALA:H	1	0.04	0.04
(1,885) 1:A:31:LYS:H 1:A:70:ILE:HD13 1 0.04 0.04 (1,883) 1:A:140:ILE:HD11 1:A:145:ALA:H 1 0.06 0.06 (1,883) 1:A:140:ILE:HD12 1:A:145:ALA:H 1 0.06 0.06 (1,883) 1:A:140:ILE:HD13 1:A:145:ALA:H 1 0.06 0.06 (1,876) 1:A:155:ILE:H 1:A:169:LEU:HD21 1 0.08 0.08 (1,876) 1:A:155:ILE:H 1:A:169:LEU:HD22 1 0.08 0.08 (1,876) 1:A:66:ARG:H 1:A:72:LEU:HD13 1 0.05 0.05 (1,872) 1:A:66:ARG:H 1:A:72:LEU:HD12 1 0.05 0.05 (1,872) 1:A:66:ARG:H 1:A:72:LEU:HD13 1 0.05 0.05 (1,868) 1:A:113:VAL:HG21 1:A:115:ALA:H 1 0.06 0.06 (1,868) 1:A:113:VAL:HG22 1:A:115:ALA:H 1 0.06 0.06	(1,885)	1:A:31:LYS:H	1:A:70:ILE:HD11	1	0.04	0.04
(1,883) 1:A:140:ILE:HD11 1:A:145:ALA:H 1 0.06 0.06 (1,883) 1:A:140:ILE:HD12 1:A:145:ALA:H 1 0.06 0.06 (1,883) 1:A:140:ILE:HD13 1:A:145:ALA:H 1 0.06 0.06 (1,876) 1:A:155:ILE:H 1:A:169:LEU:HD21 1 0.08 0.08 (1,876) 1:A:155:ILE:H 1:A:169:LEU:HD22 1 0.08 0.08 (1,876) 1:A:155:ILE:H 1:A:169:LEU:HD23 1 0.08 0.08 (1,872) 1:A:66:ARG:H 1:A:72:LEU:HD11 1 0.05 0.05 (1,872) 1:A:66:ARG:H 1:A:72:LEU:HD12 1 0.05 0.05 (1,872) 1:A:66:ARG:H 1:A:72:LEU:HD13 1 0.05 0.05 (1,868) 1:A:113:VAL:HG21 1:A:115:ALA:H 1 0.06 0.06 (1,868) 1:A:113:VAL:HG22 1:A:115:ALA:H 1 0.06 0.06	(1,885)	1:A:31:LYS:H	1:A:70:ILE:HD12	1	0.04	0.04
(1,883) 1:A:140:ILE:HD12 1:A:145:ALA:H 1 0.06 0.06 (1,883) 1:A:140:ILE:HD13 1:A:145:ALA:H 1 0.06 0.06 (1,876) 1:A:155:ILE:H 1:A:169:LEU:HD21 1 0.08 0.08 (1,876) 1:A:155:ILE:H 1:A:169:LEU:HD22 1 0.08 0.08 (1,876) 1:A:155:ILE:H 1:A:169:LEU:HD23 1 0.08 0.08 (1,872) 1:A:66:ARG:H 1:A:72:LEU:HD11 1 0.05 0.05 (1,872) 1:A:66:ARG:H 1:A:72:LEU:HD12 1 0.05 0.05 (1,872) 1:A:66:ARG:H 1:A:72:LEU:HD13 1 0.05 0.05 (1,868) 1:A:113:VAL:HG21 1:A:115:ALA:H 1 0.06 0.06 (1,868) 1:A:113:VAL:HG22 1:A:115:ALA:H 1 0.06 0.06	(1,885)	1:A:31:LYS:H	1:A:70:ILE:HD13	1	0.04	0.04
(1,883) 1:A:140:ILE:HD13 1:A:145:ALA:H 1 0.06 0.06 (1,876) 1:A:155:ILE:H 1:A:169:LEU:HD21 1 0.08 0.08 (1,876) 1:A:155:ILE:H 1:A:169:LEU:HD22 1 0.08 0.08 (1,876) 1:A:155:ILE:H 1:A:169:LEU:HD23 1 0.08 0.08 (1,872) 1:A:66:ARG:H 1:A:72:LEU:HD11 1 0.05 0.05 (1,872) 1:A:66:ARG:H 1:A:72:LEU:HD12 1 0.05 0.05 (1,872) 1:A:66:ARG:H 1:A:72:LEU:HD13 1 0.05 0.05 (1,868) 1:A:113:VAL:HG21 1:A:115:ALA:H 1 0.06 0.06 (1,868) 1:A:113:VAL:HG22 1:A:115:ALA:H 1 0.06 0.06	(1,883)	1:A:140:ILE:HD11	1:A:145:ALA:H	1	0.06	0.06
(1,876) 1:A:155:ILE:H 1:A:169:LEU:HD21 1 0.08 0.08 (1,876) 1:A:155:ILE:H 1:A:169:LEU:HD22 1 0.08 0.08 (1,876) 1:A:155:ILE:H 1:A:169:LEU:HD23 1 0.08 0.08 (1,872) 1:A:66:ARG:H 1:A:72:LEU:HD11 1 0.05 0.05 (1,872) 1:A:66:ARG:H 1:A:72:LEU:HD12 1 0.05 0.05 (1,872) 1:A:66:ARG:H 1:A:72:LEU:HD13 1 0.05 0.05 (1,868) 1:A:113:VAL:HG21 1:A:115:ALA:H 1 0.06 0.06 (1,868) 1:A:113:VAL:HG22 1:A:115:ALA:H 1 0.06 0.06	(1,883)	1:A:140:ILE:HD12	1:A:145:ALA:H	1	0.06	0.06
(1,876) 1:A:155:ILE:H 1:A:169:LEU:HD21 1 0.08 0.08 (1,876) 1:A:155:ILE:H 1:A:169:LEU:HD22 1 0.08 0.08 (1,876) 1:A:155:ILE:H 1:A:169:LEU:HD23 1 0.08 0.08 (1,872) 1:A:66:ARG:H 1:A:72:LEU:HD11 1 0.05 0.05 (1,872) 1:A:66:ARG:H 1:A:72:LEU:HD12 1 0.05 0.05 (1,872) 1:A:66:ARG:H 1:A:72:LEU:HD13 1 0.05 0.05 (1,868) 1:A:113:VAL:HG21 1:A:115:ALA:H 1 0.06 0.06 (1,868) 1:A:113:VAL:HG22 1:A:115:ALA:H 1 0.06 0.06	· · · /	1:A:140:ILE:HD13	1:A:145:ALA:H	1	0.06	0.06
(1,876) 1:A:155:ILE:H 1:A:169:LEU:HD22 1 0.08 0.08 (1,876) 1:A:155:ILE:H 1:A:169:LEU:HD23 1 0.08 0.08 (1,872) 1:A:66:ARG:H 1:A:72:LEU:HD11 1 0.05 0.05 (1,872) 1:A:66:ARG:H 1:A:72:LEU:HD12 1 0.05 0.05 (1,872) 1:A:66:ARG:H 1:A:72:LEU:HD13 1 0.05 0.05 (1,868) 1:A:113:VAL:HG21 1:A:115:ALA:H 1 0.06 0.06 (1,868) 1:A:113:VAL:HG22 1:A:115:ALA:H 1 0.06 0.06		1:A:155:ILE:H	1:A:169:LEU:HD21	1	0.08	0.08
(1,876) 1:A:155:ILE:H 1:A:169:LEU:HD23 1 0.08 0.08 (1,872) 1:A:66:ARG:H 1:A:72:LEU:HD11 1 0.05 0.05 (1,872) 1:A:66:ARG:H 1:A:72:LEU:HD12 1 0.05 0.05 (1,872) 1:A:66:ARG:H 1:A:72:LEU:HD13 1 0.05 0.05 (1,868) 1:A:113:VAL:HG21 1:A:115:ALA:H 1 0.06 0.06 (1,868) 1:A:113:VAL:HG22 1:A:115:ALA:H 1 0.06 0.06		1:A:155:ILE:H	1:A:169:LEU:HD22	1	0.08	
(1,872) 1:A:66:ARG:H 1:A:72:LEU:HD11 1 0.05 0.05 (1,872) 1:A:66:ARG:H 1:A:72:LEU:HD12 1 0.05 0.05 (1,872) 1:A:66:ARG:H 1:A:72:LEU:HD13 1 0.05 0.05 (1,868) 1:A:113:VAL:HG21 1:A:115:ALA:H 1 0.06 0.06 (1,868) 1:A:113:VAL:HG22 1:A:115:ALA:H 1 0.06 0.06		1:A:155:ILE:H	1:A:169:LEU:HD23	1	0.08	0.08
(1,872) 1:A:66:ARG:H 1:A:72:LEU:HD12 1 0.05 0.05 (1,872) 1:A:66:ARG:H 1:A:72:LEU:HD13 1 0.05 0.05 (1,868) 1:A:113:VAL:HG21 1:A:115:ALA:H 1 0.06 0.06 (1,868) 1:A:113:VAL:HG22 1:A:115:ALA:H 1 0.06 0.06		1:A:66:ARG:H	1:A:72:LEU:HD11	1	0.05	0.05
(1,872) 1:A:66:ARG:H 1:A:72:LEU:HD13 1 0.05 0.05 (1,868) 1:A:113:VAL:HG21 1:A:115:ALA:H 1 0.06 0.06 (1,868) 1:A:113:VAL:HG22 1:A:115:ALA:H 1 0.06 0.06		1:A:66:ARG:H	1:A:72:LEU:HD12	1	0.05	0.05
(1,868) 1:A:113:VAL:HG21 1:A:115:ALA:H 1 0.06 0.06 (1,868) 1:A:113:VAL:HG22 1:A:115:ALA:H 1 0.06 0.06		1:A:66:ARG:H	1:A:72:LEU:HD13		0.05	0.05
(1,868) 1:A:113:VAL:HG22 1:A:115:ALA:H 1 0.06 0.06	· · /	1:A:113:VAL:HG21	1:A:115:ALA:H	1	0.06	0.06
	(, ,	1:A:113:VAL:HG22	1:A:115:ALA:H			
, , ,	(1,868)	1:A:113:VAL:HG23	1:A:115:ALA:H	1	0.06	0.06



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,865)	1:A:7:ILE:HD11	1:A:8:PHE:H	1	0.15	0.15
(1,865)	1:A:7:ILE:HD12	1:A:8:PHE:H	1	0.15	0.15
(1,865)	1:A:7:ILE:HD13	1:A:8:PHE:H	1	0.15	0.15
(1,864)	1:A:35:VAL:HG21	1:A:70:ILE:H	1	0.08	0.08
(1,864)	1:A:35:VAL:HG22	1:A:70:ILE:H	1	0.08	0.08
(1,864)	1:A:35:VAL:HG23	1:A:70:ILE:H	1	0.08	0.08
(1,856)	1:A:22:LEU:HD11	1:A:29:GLU:H	1	0.07	0.07
(1,856)	1:A:22:LEU:HD12	1:A:29:GLU:H	1	0.07	0.07
(1,856)	1:A:22:LEU:HD13	1:A:29:GLU:H	1	0.07	0.07
(1,841)	1:A:26:LEU:HD11	1:A:117:LYS:H	1	0.04	0.04
(1,841)	1:A:26:LEU:HD12	1:A:117:LYS:H	1	0.04	0.04
(1,841)	1:A:26:LEU:HD13	1:A:117:LYS:H	1	0.04	0.04
(1,821)	1:A:32:GLY:H	1:A:70:ILE:HD11	1	0.01	0.01
(1,821)	1:A:32:GLY:H	1:A:70:ILE:HD12	1	0.01	0.01
(1,821)	1:A:32:GLY:H	1:A:70:ILE:HD13	1	0.01	0.01
(1,82)	1:A:12:GLU:H	1:A:13:LEU:H	1	0.02	0.02
(1,802)	1:A:44:LEU:H	1:A:44:LEU:HD21	1	0.03	0.03
(1,802)	1:A:44:LEU:H	1:A:44:LEU:HD22	1	0.03	0.03
(1,802)	1:A:44:LEU:H	1:A:44:LEU:HD23	1	0.03	0.03
(1,800)	1:A:72:LEU:H	1:A:76:LEU:HD11	1	0.02	0.02
(1,800)	1:A:72:LEU:H	1:A:76:LEU:HD12	1	0.02	0.02
(1,800)	1:A:72:LEU:H	1:A:76:LEU:HD13	1	0.02	0.02
(1,794)	1:A:42:ILE:H	1:A:42:ILE:HD11	1	0.03	0.03
(1,794)	1:A:42:ILE:H	1:A:42:ILE:HD12	1	0.03	0.03
(1,794)	1:A:42:ILE:H	1:A:42:ILE:HD13	1	0.03	0.03
(1,773)	1:A:35:VAL:HG11	1:A:69:ASP:H	1	0.03	0.03
(1,773)	1:A:35:VAL:HG12	1:A:69:ASP:H	1	0.03	0.03
(1,773)	1:A:35:VAL:HG13	1:A:69:ASP:H	1	0.03	0.03
(1,757)	1:A:13:LEU:HD21	1:A:176:ILE:HD11	1	0.01	0.01
(1,757)	1:A:13:LEU:HD21	1:A:176:ILE:HD12	1	0.01	0.01
(1,757)	1:A:13:LEU:HD21	1:A:176:ILE:HD13	1	0.01	0.01
(1,757)	1:A:13:LEU:HD22	1:A:176:ILE:HD11	1	0.01	0.01
(1,757)	1:A:13:LEU:HD22	1:A:176:ILE:HD12	1	0.01	0.01
(1,757)	1:A:13:LEU:HD22	1:A:176:ILE:HD13	1	0.01	0.01
(1,757)	1:A:13:LEU:HD23	1:A:176:ILE:HD11	1	0.01	0.01
(1,757)	1:A:13:LEU:HD23	1:A:176:ILE:HD12	1	0.01	0.01
(1,757)	1:A:13:LEU:HD23	1:A:176:ILE:HD13	1	0.01	0.01
(1,750)	1:A:35:VAL:HG11	1:A:44:LEU:HD21	1	0.03	0.03
(1,750)	1:A:35:VAL:HG11	1:A:44:LEU:HD22	1	0.03	0.03
(1,750)	1:A:35:VAL:HG11	1:A:44:LEU:HD23	1	0.03	0.03
(1,750)	1:A:35:VAL:HG12 1:A:35:VAL:HG12	1:A:44:LEU:HD21	1	0.03	0.03



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,750)	1:A:35:VAL:HG12	1:A:44:LEU:HD23	1	0.03	0.03
(1,750)	1:A:35:VAL:HG13	1:A:44:LEU:HD21	1	0.03	0.03
(1,750)	1:A:35:VAL:HG13	1:A:44:LEU:HD22	1	0.03	0.03
(1,750)	1:A:35:VAL:HG13	1:A:44:LEU:HD23	1	0.03	0.03
(1,734)	1:A:36:VAL:HG11	1:A:42:ILE:HD11	1	0.04	0.04
(1,734)	1:A:36:VAL:HG11	1:A:42:ILE:HD12	1	0.04	0.04
(1,734)	1:A:36:VAL:HG11	1:A:42:ILE:HD13	1	0.04	0.04
(1,734)	1:A:36:VAL:HG12	1:A:42:ILE:HD11	1	0.04	0.04
(1,734)	1:A:36:VAL:HG12	1:A:42:ILE:HD12	1	0.04	0.04
(1,734)	1:A:36:VAL:HG12	1:A:42:ILE:HD13	1	0.04	0.04
(1,734)	1:A:36:VAL:HG13	1:A:42:ILE:HD11	1	0.04	0.04
(1,734)	1:A:36:VAL:HG13	1:A:42:ILE:HD12	1	0.04	0.04
(1,734)	1:A:36:VAL:HG13	1:A:42:ILE:HD13	1	0.04	0.04
(1,732)	1:A:42:ILE:HD11	1:A:44:LEU:HD21	1	0.05	0.05
(1,732)	1:A:42:ILE:HD11	1:A:44:LEU:HD22	1	0.05	0.05
(1,732)	1:A:42:ILE:HD11	1:A:44:LEU:HD23	1	0.05	0.05
(1,732)	1:A:42:ILE:HD12	1:A:44:LEU:HD21	1	0.05	0.05
(1,732)	1:A:42:ILE:HD12	1:A:44:LEU:HD22	1	0.05	0.05
(1,732)	1:A:42:ILE:HD12	1:A:44:LEU:HD23	1	0.05	0.05
(1,732)	1:A:42:ILE:HD13	1:A:44:LEU:HD21	1	0.05	0.05
(1,732)	1:A:42:ILE:HD13	1:A:44:LEU:HD22	1	0.05	0.05
(1,732)	1:A:42:ILE:HD13	1:A:44:LEU:HD23	1	0.05	0.05
(1,731)	1:A:140:ILE:HD11	1:A:153:VAL:HG21	1	0.03	0.03
(1,731)	1:A:140:ILE:HD11	1:A:153:VAL:HG22	1	0.03	0.03
(1,731)	1:A:140:ILE:HD11	1:A:153:VAL:HG23	1	0.03	0.03
(1,731)	1:A:140:ILE:HD12	1:A:153:VAL:HG21	1	0.03	0.03
(1,731)	1:A:140:ILE:HD12	1:A:153:VAL:HG22	1	0.03	0.03
(1,731)	1:A:140:ILE:HD12	1:A:153:VAL:HG23	1	0.03	0.03
(1,731)	1:A:140:ILE:HD13	1:A:153:VAL:HG21	1	0.03	0.03
(1,731)	1:A:140:ILE:HD13	1:A:153:VAL:HG22	1	0.03	0.03
(1,731)	1:A:140:ILE:HD13	1:A:153:VAL:HG23	1	0.03	0.03
(1,709)	1:A:99:VAL:HG11	1:A:172:VAL:HG21	1	0.04	0.04
(1,709)	1:A:99:VAL:HG11	1:A:172:VAL:HG22	1	0.04	0.04
(1,709)	1:A:99:VAL:HG11	1:A:172:VAL:HG23	1	0.04	0.04
(1,709)	1:A:99:VAL:HG12	1:A:172:VAL:HG21	1	0.04	0.04
(1,709)	1:A:99:VAL:HG12	1:A:172:VAL:HG22	1	0.04	0.04
(1,709)	1:A:99:VAL:HG12	1:A:172:VAL:HG23	1	0.04	0.04
(1,709)	1:A:99:VAL:HG13	1:A:172:VAL:HG21	1	0.04	0.04
(1,709)	1:A:99:VAL:HG13	1:A:172:VAL:HG22	1	0.04	0.04
(1,709)	1:A:99:VAL:HG13	1:A:172:VAL:HG23	1	0.04	0.04
(1,670)	1:A:37:ARG:H	1:A:67:GLY:H	1	0.03	0.03
(1,665)	1:A:108:ARG:H	1:A:109:ASP:H	1	0.05	0.05



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,622)	1:A:67:GLY:H	1:A:69:ASP:H	1	0.03	0.03
(1,611)	1:A:126:SER:H	1:A:129:ALA:H	1	0.05	0.05
(1,610)	1:A:127:LEU:H	1:A:129:ALA:H	1	0.01	0.01
(1,61)	1:A:123:TRP:HE1	1:A:127:LEU:HD11	1	0.01	0.01
(1,61)	1:A:123:TRP:HE1	1:A:127:LEU:HD12	1	0.01	0.01
(1,61)	1:A:123:TRP:HE1	1:A:127:LEU:HD13	1	0.01	0.01
(1,602)	1:A:80:ASN:H	1:A:80:ASN:HD21	1	0.01	0.01
(1,587)	1:A:156:ILE:HD11	1:A:171:LEU:HD21	1	0.06	0.06
(1,587)	1:A:156:ILE:HD11	1:A:171:LEU:HD22	1	0.06	0.06
(1,587)	1:A:156:ILE:HD11	1:A:171:LEU:HD23	1	0.06	0.06
(1,587)	1:A:156:ILE:HD12	1:A:171:LEU:HD21	1	0.06	0.06
(1,587)	1:A:156:ILE:HD12	1:A:171:LEU:HD22	1	0.06	0.06
(1,587)	1:A:156:ILE:HD12	1:A:171:LEU:HD23	1	0.06	0.06
(1,587)	1:A:156:ILE:HD13	1:A:171:LEU:HD21	1	0.06	0.06
(1,587)	1:A:156:ILE:HD13	1:A:171:LEU:HD22	1	0.06	0.06
(1,587)	1:A:156:ILE:HD13	1:A:171:LEU:HD23	1	0.06	0.06
(1,585)	1:A:133:PHE:HD1	1:A:136:LEU:HD11	1	0.03	0.03
(1,585)	1:A:133:PHE:HD1	1:A:136:LEU:HD12	1	0.03	0.03
(1,585)	1:A:133:PHE:HD1	1:A:136:LEU:HD13	1	0.03	0.03
(1,585)	1:A:133:PHE:HD2	1:A:136:LEU:HD11	1	0.03	0.03
(1,585)	1:A:133:PHE:HD2	1:A:136:LEU:HD12	1	0.03	0.03
(1,585)	1:A:133:PHE:HD2	1:A:136:LEU:HD13	1	0.03	0.03
(1,582)	1:A:161:VAL:HG21	1:A:163:GLY:H	1	0.04	0.04
(1,582)	1:A:161:VAL:HG22	1:A:163:GLY:H	1	0.04	0.04
(1,582)	1:A:161:VAL:HG23	1:A:163:GLY:H	1	0.04	0.04
(1,552)	1:A:13:LEU:HD21	1:A:169:LEU:HD21	1	0.11	0.11
(1,552)	1:A:13:LEU:HD21	1:A:169:LEU:HD22	1	0.11	0.11
(1,552)	1:A:13:LEU:HD21	1:A:169:LEU:HD23	1	0.11	0.11
(1,552)	1:A:13:LEU:HD22	1:A:169:LEU:HD21	1	0.11	0.11
(1,552)	1:A:13:LEU:HD22	1:A:169:LEU:HD22	1	0.11	0.11
(1,552)	1:A:13:LEU:HD22	1:A:169:LEU:HD23	1	0.11	0.11
(1,552)	1:A:13:LEU:HD23	1:A:169:LEU:HD21	1	0.11	0.11
(1,552)	1:A:13:LEU:HD23	1:A:169:LEU:HD22	1	0.11	0.11
(1,552)	1:A:13:LEU:HD23	1:A:169:LEU:HD23	1	0.11	0.11
(1,54)	1:A:30:PHE:H	1:A:169:LEU:HD21	1	0.01	0.01
(1,54)	1:A:30:PHE:H	1:A:169:LEU:HD22	1	0.01	0.01
(1,54)	1:A:30:PHE:H	1:A:169:LEU:HD23	1	0.01	0.01
(1,535)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:99:VAL:HG11	1	0.31	0.31
(1,535)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:99:VAL:HG12	1	0.31	0.31
(1,535)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:99:VAL:HG13	1	0.31	0.31
(1,52)	1:A:138:PHE:H	1:A:153:VAL:HG11	1	0.04	0.04
(1,52)	1:A:138:PHE:H	1:A:153:VAL:HG12	1	0.04	0.04



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,52)	1:A:138:PHE:H	1:A:153:VAL:HG13	1	0.04	0.04
(1,472)	1:A:7:ILE:HD11	1:A:176:ILE:H	1	0.05	0.05
(1,472)	1:A:7:ILE:HD12	1:A:176:ILE:H	1	0.05	0.05
(1,472)	1:A:7:ILE:HD13	1:A:176:ILE:H	1	0.05	0.05
(1,462)	1:A:182:LEU:H	1:A:183:GLU:H	1	0.16	0.16
(1,452)	1:A:96:MET:H	1:A:100:ILE:HD11	1	0.04	0.04
(1,452)	1:A:96:MET:H	1:A:100:ILE:HD12	1	0.04	0.04
(1,452)	1:A:96:MET:H	1:A:100:ILE:HD13	1	0.04	0.04
(1,440)	1:A:147:GLY:H	1:A:148:ALA:H	1	0.04	0.04
(1,406)	1:A:25:ASP:H	1:A:26:LEU:H	1	0.04	0.04
(1,405)	1:A:24:ASP:H	1:A:25:ASP:H	1	0.17	0.17
(1,401)	1:A:59:GLY:H	1:A:60:SER:H	1	0.02	0.02
(1,387)	1:A:116:PHE:HE1	1:A:174:GLU:H	1	0.85	0.85
(1,385)	1:A:108:ARG:H	1:A:113:VAL:HG21	1	0.01	0.01
(1,385)	1:A:108:ARG:H	1:A:113:VAL:HG22	1	0.01	0.01
(1,385)	1:A:108:ARG:H	1:A:113:VAL:HG23	1	0.01	0.01
(1,377)	1:A:33:LYS:H	1:A:70:ILE:H	1	0.02	0.02
(1,345)	1:A:98:ASN:H	1:A:99:VAL:HG21	1	0.01	0.01
(1,345)	1:A:98:ASN:H	1:A:99:VAL:HG22	1	0.01	0.01
(1,345)	1:A:98:ASN:H	1:A:99:VAL:HG23	1	0.01	0.01
(1,34)	1:A:116:PHE:HE1	1:A:173:LYS:H	1	1.32	1.32
(1,293)	1:A:21:LYS:H	1:A:29:GLU:H	1	0.01	0.01
(1,286)	1:A:64:VAL:H	1:A:65:GLU:H	1	0.04	0.04
(1,281)	1:A:93:LYS:H	1:A:95:PHE:H	1	0.03	0.03
(1,275)	1:A:61:ASP:H	1:A:62:GLU:H	1	0.01	0.01
(1,270)	1:A:26:LEU:HD21	1:A:121:GLN:H	1	0.06	0.06
(1,270)	1:A:26:LEU:HD22	1:A:121:GLN:H	1	0.06	0.06
(1,270)	1:A:26:LEU:HD23	1:A:121:GLN:H	1	0.06	0.06
(1,251)	1:A:68:ILE:H	1:A:71:VAL:H	1	0.01	0.01
(1,242)	1:A:64:VAL:HG11	1:A:66:ARG:H	1	0.02	0.02
(1,242)	1:A:64:VAL:HG12	1:A:66:ARG:H	1	0.02	0.02
(1,242)	1:A:64:VAL:HG13	1:A:66:ARG:H	1	0.02	0.02
(1,233)	1:A:145:ALA:H	1:A:147:GLY:H	1	0.03	0.03
(1,232)	1:A:145:ALA:H	1:A:148:ALA:H	1	0.02	0.02
(1,213)	1:A:172:VAL:HG21	1:A:176:ILE:H	1	0.02	0.02
(1,213)	1:A:172:VAL:HG22	1:A:176:ILE:H	1	0.02	0.02
(1,213)	1:A:172:VAL:HG23	1:A:176:ILE:H	1	0.02	0.02
(1,209)	1:A:181:CYS:H	1:A:182:LEU:HD21	1	0.01	0.01
(1,209)	1:A:181:CYS:H	1:A:182:LEU:HD22	1	0.01	0.01
(1,209)	1:A:181:CYS:H	1:A:182:LEU:HD23	1	0.01	0.01
(1,206)	1:A:159:ARG:H	1:A:168:THR:H	1	0.05	0.05
(1,20)	1:A:35:VAL:H	1:A:69:ASP:H	1	0.08	0.08



Continued from previous page...

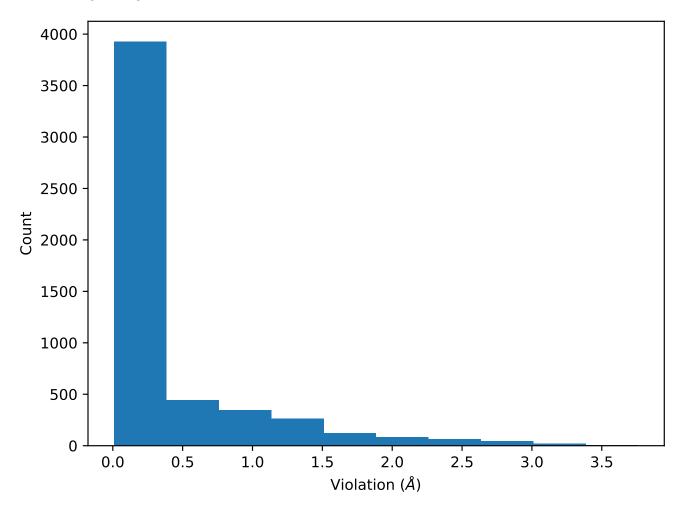
Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,194)	1:A:176:ILE:HD11	1:A:177:ILE:H	1	0.15	0.15
(1,194)	1:A:176:ILE:HD12	1:A:177:ILE:H	1	0.15	0.15
(1,194)	1:A:176:ILE:HD13	1:A:177:ILE:H	1	0.15	0.15
(1,187)	1:A:159:ARG:H	1:A:166:VAL:H	1	0.01	0.01
(1,184)	1:A:27:VAL:HG21	1:A:172:VAL:H	1	0.01	0.01
(1,184)	1:A:27:VAL:HG22	1:A:172:VAL:H	1	0.01	0.01
(1,184)	1:A:27:VAL:HG23	1:A:172:VAL:H	1	0.01	0.01
(1,164)	1:A:8:PHE:HD1	1:A:152:GLN:H	1	0.04	0.04
(1,164)	1:A:8:PHE:HD2	1:A:152:GLN:H	1	0.04	0.04
(1,15)	1:A:138:PHE:HD1	1:A:154:ALA:H	1	0.08	0.08
(1,15)	1:A:138:PHE:HD2	1:A:154:ALA:H	1	0.08	0.08
(1,149)	1:A:71:VAL:HG21	1:A:78:GLU:H	1	0.02	0.02
(1,149)	1:A:71:VAL:HG22	1:A:78:GLU:H	1	0.02	0.02
(1,149)	1:A:71:VAL:HG23	1:A:78:GLU:H	1	0.02	0.02
(1,130)	1:A:132:ARG:H	1:A:133:PHE:HD1	1	0.07	0.07
(1,130)	1:A:132:ARG:H	1:A:133:PHE:HD2	1	0.07	0.07
(1,115)	1:A:72:LEU:H	1:A:74:HIS:H	1	0.02	0.02
(1,1136)	1:A:23:VAL:O	1:A:27:VAL:N	1	0.06	0.06
(1,1127)	1:A:121:GLN:O	1:A:125:VAL:H	1	0.02	0.02
(1,1119)	1:A:117:LYS:O	1:A:121:GLN:H	1	0.04	0.04
(1,1113)	1:A:114:ASP:O	1:A:118:LYS:H	1	0.06	0.06
(1,1107)	1:A:100:ILE:O	1:A:104:GLU:H	1	0.01	0.01
(1,1106)	1:A:99:VAL:O	1:A:103:MET:N	1	0.04	0.04
(1,1101)	1:A:97:LYS:O	1:A:101:ASP:H	1	0.01	0.01
(1,1091)	1:A:92:ILE:O	1:A:96:MET:H	1	0.02	0.02
(1,1074)	1:A:37:ARG:O	1:A:65:GLU:N	1	0.01	0.01
(1,1070)	1:A:35:VAL:O	1:A:67:GLY:N	1	0.08	0.08
(1,107)	1:A:54:GLY:H	1:A:55:ALA:H	1	0.13	0.13
(1,1062)	1:A:28:TYR:N	1:A:171:LEU:O	1	0.01	0.01
(1,1051)	1:A:159:ARG:O	1:A:166:VAL:H	1	0.03	0.03
(1,1049)	1:A:157:GLU:H	1:A:168:THR:O	1	0.03	0.03
(1,1041)	1:A:139:PHE:H	1:A:154:ALA:O	1	0.02	0.02
(1,1038)	1:A:137:ALA:N	1:A:156:ILE:O	1	0.01	0.01
(1,1025)	1:A:5:LYS:H	1:A:177:ILE:O	1	0.05	0.05
(1,1021)	1:A:3:ILE:H	1:A:179:GLU:O	1	0.02	0.02



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)
(1,109)	1:A:15:SER:H	1:A:18:PHE:HE1	8	3.76
(1,561)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD11	15	3.5
(1,561)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD12	15	3.5
(1,561)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD13	15	3.5
(1,523)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG21	17	3.46
(1,523)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG22	17	3.46
(1,523)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG23	17	3.46



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

	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,572)	1:A:100:ILE:HD11	1:A:116:PHE:HE1	15	3.38
(1,572)	1:A:100:ILE:HD12	1:A:116:PHE:HE1	15	3.38
(1,572)	1:A:100:ILE:HD13	1:A:116:PHE:HE1	15	3.38
(1,561)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD11	9	3.3
(1,561)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD12	9	3.3
(1,561)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD13	9	3.3
(1,523)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG21	11	3.3
(1,523)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG22	11	3.3
(1,523)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG23	11	3.3
(1,523)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG21	8	3.22
(1,523)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG22	8	3.22
(1,523)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG23	8	3.22
(1,523)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG21	14	3.15
(1,523)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG22	14	3.15
(1,523)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG23	14	3.15
(1,523)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG21	16	3.14
(1,523)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG22	16	3.14
(1,523)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG23	16	3.14
(1,523)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG21	4	3.08
(1,523)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG22	4	3.08
(1,523)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG23	4	3.08
(1,601)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:171:LEU:HD11	10	2.99
(1,601)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:171:LEU:HD12	10	2.99
(1,601)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:171:LEU:HD13	10	2.99
(1,561)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD11	1	2.99
(1,561)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD12	1	2.99
(1,561)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD13	1	2.99
(1,561)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD11	11	2.98
(1,561)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD12	11	2.98
(1,561)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD13	11	2.98
(1,109)	1:A:15:SER:H	1:A:18:PHE:HE1	13	2.98
(1,601)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:171:LEU:HD11	16	2.94
(1,601)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:171:LEU:HD12	16	2.94
(1,601)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:171:LEU:HD13	16	2.94
(1,165)	1:A:8:PHE:HE1	1:A:152:GLN:H	11	2.94
(1,174)	1:A:22:LEU:H	1:A:28:TYR:HD1	12	2.92
(1,601)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:171:LEU:HD11	19	2.87
(1,601)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:171:LEU:HD12	19	2.87
(1,601)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:171:LEU:HD13	19	2.87
(1,523)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG21	3	2.86
(1,523)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG22	3	2.86
(1,523)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG23	3	2.86



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,109)	1:A:15:SER:H	1:A:18:PHE:HE1	17	2.84
(1,520)	1:A:22:LEU:HD21	1:A:28:TYR:HD1	12	2.83
(1,520)	1:A:22:LEU:HD22	1:A:28:TYR:HD1	12	2.83
(1,520)	1:A:22:LEU:HD23	1:A:28:TYR:HD1	12	2.83
(1,109)	1:A:15:SER:H	1:A:18:PHE:HE1	6	2.8
(1,601)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:171:LEU:HD11	9	2.76
(1,601)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:171:LEU:HD12	9	2.76
(1,601)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:171:LEU:HD13	9	2.76
(1,561)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD11	17	2.74
(1,561)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD12	17	2.74
(1,561)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD13	17	2.74
(1,449)	1:A:4:TYR:HD1	1:A:15:SER:H	15	2.72
(1,144)	1:A:78:GLU:H	1:A:139:PHE:HE1	11	2.71
(1,144)	1:A:78:GLU:H	1:A:139:PHE:HE1	17	2.7
(1,76)	1:A:4:TYR:HD1	1:A:14:SER:H	15	2.68
(1,523)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG21	2	2.68
(1,523)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG22	2	2.68
(1,523)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG23	2	2.68
(1,561)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD11	7	2.67
(1,561)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD12	7	2.67
(1,561)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD13	7	2.67
(1,76)	1:A:4:TYR:HD1	1:A:14:SER:H	5	2.66
(1,144)	1:A:78:GLU:H	1:A:139:PHE:HE1	6	2.66
(1,144)	1:A:78:GLU:H	1:A:139:PHE:HE1	19	2.66
(1,449)	1:A:4:TYR:HD1	1:A:15:SER:H	5	2.64
(1,76)	1:A:4:TYR:HD1	1:A:14:SER:H	3	2.63
(1,144)	1:A:78:GLU:H	1:A:139:PHE:HE1	2	2.63
(1,144)	1:A:78:GLU:H	1:A:139:PHE:HE1	7	2.63
(1,144)	1:A:78:GLU:H	1:A:139:PHE:HE1	8	2.63
(1,523)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG21	10	2.62
(1,523)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG22	10	2.62
(1,523)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG23	10	2.62
(1,76)	1:A:4:TYR:HD1	1:A:14:SER:H	2	2.61
(1,572)	1:A:100:ILE:HD11	1:A:116:PHE:HE1	4	2.6
(1,572)	1:A:100:ILE:HD12	1:A:116:PHE:HE1	4	2.6
(1,572)	1:A:100:ILE:HD13	1:A:116:PHE:HE1	4	2.6
(1,449)	1:A:4:TYR:HD1	1:A:15:SER:H	6	2.6
(1,144)	1:A:78:GLU:H	1:A:139:PHE:HE1	3	2.6
(1,572)	1:A:100:ILE:HD11	1:A:116:PHE:HE1	1	2.56
(1,572)	1:A:100:ILE:HD12	1:A:116:PHE:HE1	1	2.56
(1,572)	1:A:100:ILE:HD13	1:A:116:PHE:HE1	1	2.56
(1,523)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG21	18	2.53



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,523)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG22	18	2.53
(1,523)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG23	18	2.53
(1,144)	1:A:78:GLU:H	1:A:139:PHE:HE1	9	2.53
(1,523)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG21	15	2.52
(1,523)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG22	15	2.52
(1,523)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG23	15	2.52
(1,449)	1:A:4:TYR:HD1	1:A:15:SER:H	13	2.51
(1,601)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:171:LEU:HD11	17	2.49
(1,601)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:171:LEU:HD12	17	2.49
(1,601)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:171:LEU:HD13	17	2.49
(1,918)	1:A:18:PHE:HE1	1:A:73:ASN:HD21	14	2.48
(1,523)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG21	7	2.48
(1,523)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG22	7	2.48
(1,523)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG23	7	2.48
(1,144)	1:A:78:GLU:H	1:A:139:PHE:HE1	15	2.47
(1,523)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG21	13	2.43
(1,523)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG22	13	2.43
(1,523)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG23	13	2.43
(1,165)	1:A:8:PHE:HE1	1:A:152:GLN:H	19	2.41
(1,561)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD11	20	2.36
(1,561)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD12	20	2.36
(1,561)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD13	20	2.36
(1,601)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:171:LEU:HD11	8	2.34
(1,601)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:171:LEU:HD12	8	2.34
(1,601)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:171:LEU:HD13	8	2.34
(1,109)	1:A:15:SER:H	1:A:18:PHE:HE1	15	2.34
(1,601)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:171:LEU:HD11	20	2.33
(1,601)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:171:LEU:HD12	20	2.33
(1,601)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:171:LEU:HD13	20	2.33
(1,559)	1:A:92:ILE:HD11	1:A:95:PHE:HE1	8	2.33
(1,559)	1:A:92:ILE:HD12	1:A:95:PHE:HE1	8	2.33
(1,559)	1:A:92:ILE:HD13	1:A:95:PHE:HE1	8	2.33
(1,601)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:171:LEU:HD11	2	2.31
(1,601)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:171:LEU:HD12	2	2.31
(1,601)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:171:LEU:HD13	2	2.31
(1,144)	1:A:78:GLU:H	1:A:139:PHE:HE1	1	2.31
(1,144)	1:A:78:GLU:H	1:A:139:PHE:HE1	18	2.3
(1,951)	1:A:161:VAL:H	1:A:166:VAL:HG11	16	2.27
(1,951)	1:A:161:VAL:H	1:A:166:VAL:HG12	16	2.27
(1,951)	1:A:161:VAL:H	1:A:166:VAL:HG13	16	2.27
(1,523)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG21	6	2.27
(1,523)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG22	6	2.27



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,523)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG23	6	2.27
(1,322)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:171:LEU:H	19	2.27
(1,566)	1:A:68:ILE:HD11	1:A:139:PHE:HE1	16	2.26
(1,566)	1:A:68:ILE:HD12	1:A:139:PHE:HE1	16	2.26
(1,566)	1:A:68:ILE:HD13	1:A:139:PHE:HE1	16	2.26
(1,523)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG21	19	2.25
(1,523)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG22	19	2.25
(1,523)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG23	19	2.25
(1,601)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:171:LEU:HD11	5	2.24
(1,601)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:171:LEU:HD12	5	2.24
(1,601)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:171:LEU:HD13	5	2.24
(1,601)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:171:LEU:HD11	18	2.21
(1,601)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:171:LEU:HD12	18	2.21
(1,601)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:171:LEU:HD13	18	2.21
(1,572)	1:A:100:ILE:HD11	1:A:116:PHE:HE1	3	2.21
(1,572)	1:A:100:ILE:HD12	1:A:116:PHE:HE1	3	2.21
(1,572)	1:A:100:ILE:HD13	1:A:116:PHE:HE1	3	2.21
(1,561)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD11	16	2.21
(1,561)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD12	16	2.21
(1,561)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD13	16	2.21
(1,950)	1:A:160:ASP:H	1:A:166:VAL:HG11	7	2.18
(1,950)	1:A:160:ASP:H	1:A:166:VAL:HG12	7	2.18
(1,950)	1:A:160:ASP:H	1:A:166:VAL:HG13	7	2.18
(1,918)	1:A:18:PHE:HE1	1:A:73:ASN:HD21	12	2.18
(1,950)	1:A:160:ASP:H	1:A:166:VAL:HG11	15	2.17
(1,950)	1:A:160:ASP:H	1:A:166:VAL:HG12	15	2.17
(1,950)	1:A:160:ASP:H	1:A:166:VAL:HG13	15	2.17
(1,561)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD11	19	2.17
(1,561)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD12	19	2.17
(1,561)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD13	19	2.17
(1,76)	1:A:4:TYR:HD1	1:A:14:SER:H	19	2.16
(1,144)	1:A:78:GLU:H	1:A:139:PHE:HE1	5	2.15
(1,76)	1:A:4:TYR:HD1	1:A:14:SER:H	9	2.13
(1,601)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:171:LEU:HD11	1	2.13
(1,601)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:171:LEU:HD12	1	2.13
(1,601)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:171:LEU:HD13	1	2.13
(1,572)	1:A:100:ILE:HD11	1:A:116:PHE:HE1	12	2.13
(1,572)	1:A:100:ILE:HD12	1:A:116:PHE:HE1	12	2.13
(1,572)	1:A:100:ILE:HD13	1:A:116:PHE:HE1	12	2.13
(1,109)	1:A:15:SER:H	1:A:18:PHE:HE1	7	2.11
(1,950)	1:A:160:ASP:H	1:A:166:VAL:HG11	2	2.09
(1,950)	1:A:160:ASP:H	1:A:166:VAL:HG12	2	2.09



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

(1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG13 2 2.09 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG11 6 2.08 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG12 6 2.08 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG13 6 2.08 (1,449) 1:A:4:TYR:HD1 1:A:15:SER:H 19 2.07 (1,76) 1:A:4:TYR:HD1 1:A:15:SER:H 19 2.06 (1,322) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:17:LEU:H 8 2.05 (1,601) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:17:LEU:H 8 2.05 (1,601) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:17:LEU:HD12 3 2.04 (1,601) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:17:LEU:HD11 3 2.04 (1,601) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:17:LEU:HD12 3 2.04 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:17:LEU:HD13 3 2.04 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:17:LEU:HD11 2 2.04 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:17:LEU:HD11 2 2.04 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:17:LEU:HD11 2 2.04 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:17:LEU:HD12 2 2.04 (1,523) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG21 9 2.04 (1,523) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG21 9 2.04 (1,523) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG21 9 2.04 (1,523) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG23 9 2.04 (1,523) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG23 9 2.04 (1,523) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG23 9 2.04 (1,523) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:14:SER:H 11 2.03 (1,76) 1:A:4:TYR:HD1 1:A:14:SER:H 11 2.03 (1,76) 1:A:4:TYR:HD1 1:A:14:SER:H 11 2.03 (1,76) 1:A:4:TYR:HD1 1:A:14:SER:H 12 2.02 (1,523) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG21 9 1.04 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:14:SER:H 12 1.09 (1,76) 1:A:4:TYR:HD1 1:A:14:SER:H 11 1.09 (1,76) 1:A:14:SET:TYR:HD1 1:A:14:SER:H 11 1.09 (1,76) 1:A:16:ASP:H 1:A:14:ASP:HB11 1.A:14:ASP:HB11 1.A:14:ASP:HB11 1.A:14:ASP:HB11 1.A:	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG12 6 2.08 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG13 6 2.08 (1,449) 1:A:4:TYR:HD1 1:A:15:SER:H 19 2.07 (1,76) 1:A:4:TYR:HD1 1:A:14:SER:H 13 2.06 (1,322) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:171:LEU:H 8 2.05 (1,601) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:171:LEU:HD11 3 2.04 (1,601) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:171:LEU:HD11 3 2.04 (1,601) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:171:LEU:HD12 3 2.04 (1,601) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:171:LEU:HD13 3 2.04 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD13 3 2.04 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD13 2 2.04 (1,523) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG21 9 2.04 (1,523) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG21 9 2.04 (1,523) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG23 9 2.04 (1,523) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:14:SER:H 11 2.03 (1,76) 1:A:4:TYR:HD1 1:A:14:SER:H 6 1.99 (1,76) 1:A:4:TYR:HD1 1:A:14:SER:H 6 1.99 (1,76) 1:A:4:TYR:HD1 1:A:14:SER:H 6 1.99 (1,76) 1:A:4:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD11 6 1.99 (1,76) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD11 6 1.98 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:16:ILE:HD12 6 1.98 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:16:ILE:HD11 6 1.99 (1,561) 1:A:29:TYR:HD1 1:A:16:ILE:HD12 6 1.98 (1,561) 1:A:29:TYR:HD1 1:A:16:ILE:HD13 6 1.99 (1,561) 1:A:29:TYR:HD1 1:A:16:ILE:HD13 6 1.99 (1,561) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG11 17 1.97 (1,525) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG13 8 1.95 (1,525) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:166:VAL:HG14 4 1.94 (1,572) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:116:PHE:HE1 9 1.93 (1,572) 1:A:100:	(1,950)	1:A:160:ASP:H	1:A:166:VAL:HG13	2	2.09
(1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG13 6 2.08 (1,449) 1:A:4:TYR:HD1 1:A:15:SER:H 19 2.07 (1,76) 1:A:4:TYR:HD1 1:A:15:SER:H 13 2.06 (1,322) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:171:LEU:H 8 2.05 (1,601) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:171:LEU:HD13 3 2.04 (1,601) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:171:LEU:HD12 3 2.04 (1,601) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:171:LEU:HD12 3 2.04 (1,601) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:171:LEU:HD13 3 2.04 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:LLE:HD11 2 2.04 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:LLE:HD11 2 2.04 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:LLE:HD11 2 2.04 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:LLE:HD12 2 2.04 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:LLE:HD13 2 2.04 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:LLE:HD13 2 2.04 (1,523) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG21 9 2.04 (1,523) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG22 9 2.04 (1,523) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG23 9 2.04 (1,561) 1:A:4:TYR:HD1 1:A:14:SER:H 11 2.03 (1,76) 1:A:4:TYR:HD1 1:A:14:SER:H 12 2.02 (1,322) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:171:LEU:H 16 1.99 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:171:LEU:H 16 1.98 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:LLE:HD11 6 1.98 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:LLE:HD11 6 1.98 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:LLE:HD12 6 1.98 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:LLE:HD13 1 6 1.98 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:LLE:HD13 1 6 1.99 (1,550) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG13 17 1.97 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG11 17 1.97 (1,525) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG11 17 1.97 (1,525) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG11 17 1.97 (1,525) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG11 17 1.97 (1,525) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG13 4 1.94 (1,570) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG13 4 1.94 (1,570) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG13 4 1.94 (1,570) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG13 4 1	(1,950)	1:A:160:ASP:H	1:A:166:VAL:HG11	6	2.08
(1,449) 1:A:4:TYR:HD1 1:A:15:SER:H 19 2.07 (1,76) 1:A:4:TYR:HD1 1:A:14:SER:H 13 2.06 (1,322) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:17:LEU:H 8 2.05 (1,601) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:17:LEU:HD11 3 2.04 (1,601) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:17:LEU:HD11 3 2.04 (1,601) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:17:LEU:HD11 3 2.04 (1,601) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:17:LEU:HD12 3 2.04 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:17:LEU:HD13 3 2.04 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD11 2 2.04 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD11 2 2.04 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD12 2 2.04 (1,562) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD12 2 2.04 (1,523) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG21 9 2.04 (1,523) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG21 9 2.04 (1,523) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG22 9 2.04 (1,523) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG23 9 2.04 (1,523) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG23 9 2.04 (1,566) 1:A:4:TYR:HD1 1:A:14:SER:H 11 2.03 (1,76) 1:A:4:TYR:HD1 1:A:14:SER:H 11 2.03 (1,76) 1:A:4:TYR:HD1 1:A:171:LEU:H 16 1.99 (1,66) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:171:LEU:H 16 1.99 (1,66) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:171:LEU:H 16 1.99 (1,76) 1:A:4:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD11 6 1.98 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD12 6 1.98 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD13 6 1.98 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD12 6 1.99 (1,525) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG11 17 1.97 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG13 17 1.97 (1,525) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG13 17 1.99 (1,525) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG13 17 1.99 (1,	(1,950)	1:A:160:ASP:H	1:A:166:VAL:HG12	6	2.08
(1,76) 1:A:4:TYR:HD1 1:A:17:LEU:H 8 2.05 (1,322) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:171:LEU:HD11 3 2.04 (1,601) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:171:LEU:HD11 3 2.04 (1,601) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:171:LEU:HD12 3 2.04 (1,601) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:171:LEU:HD13 3 2.04 (1,501) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD13 2 2.04 (1,501) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD11 2 2.04 (1,501) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD12 2 2.04 (1,501) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD13 2 2.04 (1,501) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD13 2 2.04 (1,501) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD13 2 2.04 (1,502) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG21 9 2.04 (1,502) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG21 9 2.04 (1,502) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG23 9 2.04 (1,76) 1:A:4:TYR:HD1 1:A:14:SER:H 11 2.03 (1,76) 1:A:4:TYR:HD1 1:A:14:SER:H 12 2.02 (1,302) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD13 6 1.98 (1,501) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD11 6 1.99 (1,501) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD11 6 1.98 (1,501) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD12 6 1.98 (1,501) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD12 6 1.98 (1,501) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD13 6 1.98 (1,501) 1:A:160:ASP:H 1:A:160:VAL:HG11 17 1.97 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:160:VAL:HG11 17 1.97 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:160:VAL:HG11 17 1.97 (1,502) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG13 17 1.97 (1,503) 1:A:160:ASP:H 1:A:160:VAL:HG13 17 1.97 (1,504) 1:A:25:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG13 17 1.97 (1,505) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:166:VAL:HG13 17 1.97 (1,505) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:166:VAL:HG13 17 1.97 (1,505) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG13 17 1.97 (1,505) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG13 17 1.97 (1,505) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG13 17 1.97 (1,505) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG13 17 1.99 (1,505) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG13 17 1.99 (1,507) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VA	(1,950)	1:A:160:ASP:H	1:A:166:VAL:HG13	6	2.08
(1,322) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:171:LEU:H 8 2.05 (1,601) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:171:LEU:HD11 3 2.04 (1,601) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:171:LEU:HD12 3 2.04 (1,601) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:171:LEU:HD13 3 2.04 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD11 2 2.04 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD12 2 2.04 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD12 2 2.04 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD13 2 2.04 (1,562) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG21 9 2.04 (1,523) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG22 9 2.04 (1,523) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG22 9 2.04 (1,523) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG23 9 2.04 (1,76) 1:A:4:TYR:HD1 1:A:14:SER:H 11 2.03 (1,76) 1:A:4:TYR:HD1 1:A:171:LEU:H 16 1.99 (1,76) 1:A:4:TYR:HD1 1:A:171:LEU:H 16 1.99 (1,76) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD11 6 1.98 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD11 6 1.98 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD12 6 1.98 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD13 6 1.98 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:166:VAL:HG13 17 1.97 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG11 17 1.97 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG11 17 1.97 (1,525) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG11 19 1.91 (1,572) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:116:PHE:HE1 9 1.93 (1,572) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:116:PHE:HE1 9 1.93 (1,578) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:28:TYR:HD1 12 1.91 (1,518) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:28:TYR:HD1 12 1.91	(1,449)	1:A:4:TYR:HD1	1:A:15:SER:H	19	2.07
(1,601) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:171:LEU:HD12 3 2.04 (1,601) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:171:LEU:HD12 3 2.04 (1,601) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:171:LEU:HD13 3 2.04 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD11 2 2.04 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD12 2 2.04 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD13 2 2.04 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD13 2 2.04 (1,523) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG21 9 2.04 (1,523) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG23 9 2.04 (1,523) 1:A:4:FYR:HD1 1:A:14:SER:H 11 2.03 (1,76) 1:A:4:TYR:HD1 1:A:14:SER:H 12 2.02 (1,322) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:17:LEU:H 16 1.99 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:17:LEU:HD11 6 1.98 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:17:LEU:HD11<	(1,76)	1:A:4:TYR:HD1	1:A:14:SER:H	13	2.06
(1,601) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:171:LEU:HD12 3 2.04 (1,601) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:171:LEU:HD13 3 2.04 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD11 2 2.04 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD12 2 2.04 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD13 2 2.04 (1,523) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG21 9 2.04 (1,523) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG22 9 2.04 (1,523) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG23 9 2.04 (1,523) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG23 9 2.04 (1,76) 1:A:4:TYR:HD1 1:A:14:SER:H 11 2.03 (1,76) 1:A:4:TYR:HD1 1:A:14:SER:H 12 2.02 (1,322) 1:A:2:2:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD11 6 1.98 (1,561) 1:A:2:8:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD11 6 1.98 (1,561) 1:A:2:8:TYR:HD1 1:A:176:IL	(1,322)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:171:LEU:H	8	2.05
(1,601) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:171:LEU:HD13 3 2.04 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD11 2 2.04 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD12 2 2.04 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD13 2 2.04 (1,523) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG21 9 2.04 (1,523) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG22 9 2.04 (1,523) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG23 9 2.04 (1,523) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:14:SER:H 11 2.03 (1,76) 1:A:4:TYR:HD1 1:A:14:SER:H 12 2.02 (1,322) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD14 6 1.98 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD12 6 1.98 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD12 6 1.98 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD12 6 1.98 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:166:VAL	(1,601)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:171:LEU:HD11	3	2.04
(1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD11 2 2.04 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD12 2 2.04 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD13 2 2.04 (1,523) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG21 9 2.04 (1,523) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG23 9 2.04 (1,523) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG23 9 2.04 (1,76) 1:A:4:TYR:HD1 1:A:14:SER:H 11 2.03 (1,76) 1:A:4:TYR:HD1 1:A:14:SER:H 16 1.99 (1,76) 1:A:4:TYR:HD1 1:A:14:SER:H 16 1.99 (1,76) 1:A:4:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD11 6 1.98 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD11 6 1.98 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD12 6 1.98 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD13 6 1.98 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD13 <td>(1,601)</td> <td>1:A:28:TYR:HD1</td> <td>1:A:171:LEU:HD12</td> <td>3</td> <td>2.04</td>	(1,601)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:171:LEU:HD12	3	2.04
(1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD12 2 2.04 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD13 2 2.04 (1,523) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG21 9 2.04 (1,523) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG22 9 2.04 (1,76) 1:A:4:TYR:HD1 1:A:14:SER:H 11 2.03 (1,76) 1:A:4:TYR:HD1 1:A:14:SER:H 12 2.02 (1,322) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:14:SER:H 12 2.02 (1,322) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:14:SER:H 6 1.98 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD11 6 1.98 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD12 6 1.98 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD13 6 1.98 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD13 6 1.98 (1,561) 1:A:4:G0:ASP:H 1:A:166:VAL:HG11 17 1.97 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG13 <td>(1,601)</td> <td>1:A:28:TYR:HD1</td> <td>1:A:171:LEU:HD13</td> <td>3</td> <td>2.04</td>	(1,601)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:171:LEU:HD13	3	2.04
(1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD13 2 2.04 (1,523) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG21 9 2.04 (1,523) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG22 9 2.04 (1,523) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG23 9 2.04 (1,76) 1:A:4:TYR:HD1 1:A:14:SER:H 11 2.03 (1,76) 1:A:4:TYR:HD1 1:A:17:ILEU:H 16 1.99 (1,76) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:17:ILEU:H 16 1.99 (1,76) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:17:ILE:HD11 6 1.98 (1,76) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD11 6 1.98 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD12 6 1.98 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD13 6 1.98 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD13 6 1.98 (1,561) 1:A:4:TYR:HD1 1:A:160:LE:HD13 6 1.98 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG11	(1,561)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD11	2	2.04
(1,523) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG21 9 2.04 (1,523) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG22 9 2.04 (1,523) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG23 9 2.04 (1,76) 1:A:4:TYR:HD1 1:A:14:SER:H 11 2.03 (1,76) 1:A:4:TYR:HD1 1:A:14:SER:H 12 2.02 (1,322) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:17:LEU:H 16 1.99 (1,76) 1:A:4:TYR:HD1 1:A:14:SER:H 6 1.98 (1,76) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:17:LEU:H 16 1.98 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD11 6 1.98 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD12 6 1.98 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD13 6 1.98 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD13 6 1.98 (1,561) 1:A:4:174:HD1 1:A:166:VAL:HG11 17 1.97 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG12	(1,561)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD12	2	2.04
(1,523) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG22 9 2.04 (1,523) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG23 9 2.04 (1,76) 1:A:4:TYR:HD1 1:A:14:SER:H 11 2.03 (1,76) 1:A:4:TYR:HD1 1:A:14:SER:H 12 2.02 (1,322) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:17:LEU:H 16 1.99 (1,76) 1:A:4:TYR:HD1 1:A:14:SER:H 6 1.98 (1,76) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD11 6 1.98 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD12 6 1.98 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD13 6 1.98 (1,561) 1:A:24:TYR:HD1 1:A:166:VAL:HG11 17 1.97 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:126:VAL:HG13	(1,561)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD13	2	2.04
(1,523) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG23 9 2.04 (1,76) 1:A:4:TYR:HD1 1:A:14:SER:H 11 2.03 (1,76) 1:A:4:TYR:HD1 1:A:14:SER:H 12 2.02 (1,322) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:17:LEU:H 16 1.99 (1,76) 1:A:4:TYR:HD1 1:A:14:SER:H 6 1.98 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD11 6 1.98 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD12 6 1.98 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD13 6 1.98 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD13 6 1.98 (1,561) 1:A:4:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD13 6 1.98 (1,449) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG11 17 1.97 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG11 17 1.97 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:124:VAL:HG11 17 1.97 (1,525) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG13	(1,523)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG21	9	2.04
(1,76) 1:A:4:TYR:HD1 1:A:14:SER:H 11 2.03 (1,76) 1:A:4:TYR:HD1 1:A:14:SER:H 12 2.02 (1,322) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:171:LEU:H 16 1.99 (1,76) 1:A:4:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD11 6 1.98 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD12 6 1.98 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD13 6 1.98 (1,561) 1:A:4:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD13 6 1.98 (1,561) 1:A:4:4:74:HD1 1:A:16:ILE:HD13 6 1.98 (1,449) 1:A:4:4:74:HD1 1:A:16:A:4:A:14:ILE:HD13 17 1.97 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG13 17 1.97 (1,525) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124	(1,523)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG22	9	2.04
(1,76) 1:A:4:TYR:HD1 1:A:14:SER:H 12 2.02 (1,322) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:171:LEU:H 16 1.99 (1,76) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:14:SER:H 6 1.98 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD11 6 1.98 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD13 6 1.98 (1,561) 1:A:4:4:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD13 6 1.98 (1,499) 1:A:4:4:TYR:HD1 1:A:16:VAL:HG11 17 1.97 (1,950) 1:A:16:A:28:PHE:HE1 1:A:16:VAL:HG13 17 1.97 (1,525) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG13 17 1.97 (1,525) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124	(1,523)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG23	9	2.04
(1,322) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:171:LEU:H 16 1.99 (1,76) 1:A:4:TYR:HD1 1:A:14:SER:H 6 1.98 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD11 6 1.98 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD12 6 1.98 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD13 6 1.98 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD12 6 1.98 (1,561) 1:A:44:TYR:HD1 1:A:15:SER:H 9 1.98 (1,490) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG11 17 1.97 (1,590) 1:A:160:ASP:HEI 1:A:124:VAL:HG13 17 1.97 (1,525) 1:A:95:PHE:HEI 1:A:124:VAL:HG13 17 1.97 (1,525) 1:A:95:PHE:HEI 1:A:124:VAL:	(1,76)	1:A:4:TYR:HD1	1:A:14:SER:H	11	2.03
(1,76) 1:A:4:TYR:HD1 1:A:14:SER:H 6 1.98 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD11 6 1.98 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD12 6 1.98 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD13 6 1.98 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD13 6 1.98 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD13 6 1.98 (1,449) 1:A:4:TYR:HD1 1:A:15:SER:H 9 1.98 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG11 17 1.97 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG13 17 1.97 (1,525) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG12 17 1.97 (1,525) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG13 17 1.97 (1,525) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG13 8 1.95 (1,525) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:166:VAL:HG13 8 1.95 (1,525) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:H	(' /	1:A:4:TYR:HD1	1:A:14:SER:H	12	2.02
(1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD11 6 1.98 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD12 6 1.98 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD13 6 1.98 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD13 6 1.98 (1,449) 1:A:4:TYR:HD1 1:A:15:SER:H 9 1.98 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG11 17 1.97 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG13 17 1.97 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:124:VAL:HG11 17 1.97 (1,525) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG12 17 1.97 (1,525) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG13 17 1.97 (1,525) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG11 8 1.95 (1,525) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG13 8 1.95 (1,525) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:166:VAL:HG13 4 1.94 (1,525) 1:A:160:ASP:H 1:A:166	(1,322)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:171:LEU:H	16	1.99
(1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD11 6 1.98 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD12 6 1.98 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD13 6 1.98 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD13 6 1.98 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD13 6 1.98 (1,561) 1:A:4:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD13 6 1.98 (1,449) 1:A:4:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD13 6 1.98 (1,550) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG11 17 1.97 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:124:VAL:HG13 17 1.97 (1,525) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG13 17 1.97 (1,525) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG11 8 1.95 (1,525) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG13 8 1.95 (1,525) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:166:VAL:HG13 4 1.94 (1,525) 1:A:160:ASP:H 1:A:1	(1,76)	1:A:4:TYR:HD1	1:A:14:SER:H	6	1.98
(1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD13 6 1.98 (1,449) 1:A:4:TYR:HD1 1:A:15:SER:H 9 1.98 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG11 17 1.97 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG12 17 1.97 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG13 17 1.97 (1,525) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG11 17 1.97 (1,525) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG13 17 1.97 (1,525) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG13 17 1.97 (1,525) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG13 8 1.95 (1,525) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG12 8 1.95 (1,525) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG13 8 1.95 (1,525) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:166:VAL:HG13 4 1.94 (1,520) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG13 4 1.94 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166	(1,561)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD11	6	1.98
(1,449) 1:A:4:TYR:HD1 1:A:15:SER:H 9 1.98 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG11 17 1.97 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG12 17 1.97 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG13 17 1.97 (1,525) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG11 17 1.97 (1,525) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG12 17 1.97 (1,525) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG13 17 1.97 (1,525) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG11 8 1.95 (1,525) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG12 8 1.95 (1,525) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG13 8 1.95 (1,525) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:166:VAL:HG13 4 1.94 (1,525) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG13 4 1.94 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG13 4 1.94 (1,572) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:1	(1,561)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD12	6	1.98
(1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG11 17 1.97 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG12 17 1.97 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG13 17 1.97 (1,550) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG11 17 1.97 (1,525) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG12 17 1.97 (1,525) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG13 17 1.97 (1,525) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG11 8 1.95 (1,525) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG12 8 1.95 (1,525) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG13 8 1.95 (1,525) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:166:VAL:HG13 4 1.94 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG12 4 1.94 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG13 4 1.94 (1,572) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:16:PHE:HE1 9 1.93 (1,572) 1:A:100:ILE:HD12	(1,561)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD13	6	1.98
(1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG12 17 1.97 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG13 17 1.97 (1,525) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG11 17 1.97 (1,525) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG12 17 1.97 (1,525) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG13 17 1.97 (1,525) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG11 8 1.95 (1,525) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG12 8 1.95 (1,525) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG13 8 1.95 (1,525) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:166:VAL:HG13 8 1.95 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG12 4 1.94 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG13 4 1.94 (1,572) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:16:PHE:HE1 9 1.93 (1,572) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:16:PHE:HE1 9 1.93 (1,572) 1:A:100:ILE:HD13	(1,449)	1:A:4:TYR:HD1	1:A:15:SER:H	9	1.98
(1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG13 17 1.97 (1,525) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG11 17 1.97 (1,525) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG12 17 1.97 (1,525) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG13 17 1.97 (1,525) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG11 8 1.95 (1,525) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG12 8 1.95 (1,525) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:166:VAL:HG13 8 1.95 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG11 4 1.94 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG13 4 1.94 (1,950) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:16:PHE:HE1 9 1.93 (1,572) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:116:PHE:HE1 9 1.93 (1,572) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:116:PHE:HE1 9 1.93 (1,518) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:28:TYR:HD1 12 1.91	(1,950)	1:A:160:ASP:H	1:A:166:VAL:HG11	17	1.97
(1,525) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG11 17 1.97 (1,525) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG12 17 1.97 (1,525) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG13 17 1.97 (1,525) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG11 8 1.95 (1,525) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG12 8 1.95 (1,525) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG13 8 1.95 (1,525) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:166:VAL:HG13 4 1.94 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG12 4 1.94 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG13 4 1.94 (1,950) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:116:PHE:HE1 9 1.93 (1,572) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:116:PHE:HE1 9 1.93 (1,572) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:116:PHE:HE1 9 1.93 (1,518) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:28:TYR:HD1 12 1.91 (1,518) 1:A:22:LEU:HD12 <t< td=""><td>(1,950)</td><td>1:A:160:ASP:H</td><td>1:A:166:VAL:HG12</td><td>17</td><td>1.97</td></t<>	(1,950)	1:A:160:ASP:H	1:A:166:VAL:HG12	17	1.97
(1,525) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG12 17 1.97 (1,525) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG13 17 1.97 (1,525) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG11 8 1.95 (1,525) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG12 8 1.95 (1,525) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG13 8 1.95 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG11 4 1.94 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG12 4 1.94 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG13 4 1.94 (1,572) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:116:PHE:HE1 9 1.93 (1,572) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:116:PHE:HE1 9 1.93 (1,572) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:16:PHE:HE1 9 1.93 (1,518) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:28:TYR:HD1 12 1.91 (1,518) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:28:TYR:HD1 12 1.91	(1,950)	1:A:160:ASP:H	1:A:166:VAL:HG13	17	1.97
(1,525) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG13 17 1.97 (1,525) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG11 8 1.95 (1,525) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG12 8 1.95 (1,525) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG13 8 1.95 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG11 4 1.94 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG12 4 1.94 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG13 4 1.94 (1,950) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:116:PHE:HE1 9 1.93 (1,572) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:116:PHE:HE1 9 1.93 (1,572) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:116:PHE:HE1 9 1.93 (1,572) 1:A:2100:ILE:HD13 1:A:116:PHE:HE1 9 1.93 (1,518) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:28:TYR:HD1 12 1.91 (1,518) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:28:TYR:HD1 12 1.91	(1,525)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG11	17	1.97
(1,525) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG11 8 1.95 (1,525) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG12 8 1.95 (1,525) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG13 8 1.95 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG11 4 1.94 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG12 4 1.94 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG13 4 1.94 (1,950) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:16:PHE:HE1 9 1.93 (1,572) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:116:PHE:HE1 9 1.93 (1,572) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:116:PHE:HE1 9 1.93 (1,572) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:116:PHE:HE1 9 1.93 (1,518) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:28:TYR:HD1 12 1.91 (1,518) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:28:TYR:HD1 12 1.91	(1,525)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG12	17	1.97
(1,525) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG12 8 1.95 (1,525) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG13 8 1.95 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG11 4 1.94 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG12 4 1.94 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG13 4 1.94 (1,572) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:116:PHE:HE1 9 1.93 (1,572) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:116:PHE:HE1 9 1.93 (1,572) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:116:PHE:HE1 9 1.93 (1,572) 1:A:20:ILE:HD13 1:A:116:PHE:HE1 9 1.93 (1,518) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:28:TYR:HD1 12 1.91 (1,518) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:28:TYR:HD1 12 1.91	(1,525)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG13	17	1.97
(1,525) 1:A:95:PHE:HE1 1:A:124:VAL:HG13 8 1.95 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG11 4 1.94 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG12 4 1.94 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG13 4 1.94 (1,572) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:116:PHE:HE1 9 1.93 (1,572) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:116:PHE:HE1 9 1.93 (1,572) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:116:PHE:HE1 9 1.93 (1,572) 1:A:20:ILE:HD13 1:A:116:PHE:HE1 9 1.93 (1,518) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:28:TYR:HD1 12 1.91 (1,518) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:28:TYR:HD1 12 1.91	(1,525)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG11	8	1.95
(1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG11 4 1.94 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG12 4 1.94 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG13 4 1.94 (1,572) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:116:PHE:HE1 9 1.93 (1,572) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:116:PHE:HE1 9 1.93 (1,572) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:116:PHE:HE1 9 1.93 (1,572) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:28:TYR:HD1 12 1.91 (1,518) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:28:TYR:HD1 12 1.91	(1,525)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG12	8	1.95
(1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG11 4 1.94 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG12 4 1.94 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG13 4 1.94 (1,572) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:116:PHE:HE1 9 1.93 (1,572) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:116:PHE:HE1 9 1.93 (1,572) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:116:PHE:HE1 9 1.93 (1,572) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:28:TYR:HD1 12 1.91 (1,518) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:28:TYR:HD1 12 1.91	, ,	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG13	8	1.95
(1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG12 4 1.94 (1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG13 4 1.94 (1,572) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:116:PHE:HE1 9 1.93 (1,572) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:116:PHE:HE1 9 1.93 (1,572) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:116:PHE:HE1 9 1.93 (1,572) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:28:TYR:HD1 12 1.91 (1,518) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:28:TYR:HD1 12 1.91		1:A:160:ASP:H	1:A:166:VAL:HG11	4	1.94
(1,950) 1:A:160:ASP:H 1:A:166:VAL:HG13 4 1.94 (1,572) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:116:PHE:HE1 9 1.93 (1,572) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:116:PHE:HE1 9 1.93 (1,572) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:116:PHE:HE1 9 1.93 (1,572) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:28:TYR:HD1 12 1.91 (1,518) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:28:TYR:HD1 12 1.91		1:A:160:ASP:H	1:A:166:VAL:HG12	4	1.94
(1,572) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:116:PHE:HE1 9 1.93 (1,572) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:116:PHE:HE1 9 1.93 (1,572) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:116:PHE:HE1 9 1.93 (1,572) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:28:TYR:HD1 12 1.91 (1,518) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:28:TYR:HD1 12 1.91	/	1:A:160:ASP:H	1:A:166:VAL:HG13	4	
(1,572) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:116:PHE:HE1 9 1.93 (1,572) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:116:PHE:HE1 9 1.93 (1,518) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:28:TYR:HD1 12 1.91 (1,518) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:28:TYR:HD1 12 1.91		1:A:100:ILE:HD11	1:A:116:PHE:HE1		
(1,572) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:116:PHE:HE1 9 1.93 (1,518) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:28:TYR:HD1 12 1.91 (1,518) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:28:TYR:HD1 12 1.91	, ,			9	
(1,518) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:28:TYR:HD1 12 1.91 (1,518) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:28:TYR:HD1 12 1.91	_ ` ′		1:A:116:PHE:HE1		
(1,518) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:28:TYR:HD1 12 1.91	` '	1:A:22:LEU:HD11	1:A:28:TYR:HD1	12	1.91
	· · /	1:A:22:LEU:HD12	1:A:28:TYR:HD1	12	1.91
· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·	(1,518)	1:A:22:LEU:HD13	1:A:28:TYR:HD1	12	1.91



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,322)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:171:LEU:H	2	1.91
(1,950)	1:A:160:ASP:H	1:A:166:VAL:HG11	11	1.9
(1,950)	1:A:160:ASP:H	1:A:166:VAL:HG12	11	1.9
(1,950)	1:A:160:ASP:H	1:A:166:VAL:HG13	11	1.9
(1,322)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:171:LEU:H	6	1.89
(1,950)	1:A:160:ASP:H	1:A:166:VAL:HG11	1	1.88
(1,950)	1:A:160:ASP:H	1:A:166:VAL:HG12	1	1.88
(1,950)	1:A:160:ASP:H	1:A:166:VAL:HG13	1	1.88
(1,950)	1:A:160:ASP:H	1:A:166:VAL:HG11	16	1.88
(1,950)	1:A:160:ASP:H	1:A:166:VAL:HG12	16	1.88
(1,950)	1:A:160:ASP:H	1:A:166:VAL:HG13	16	1.88
(1,572)	1:A:100:ILE:HD11	1:A:116:PHE:HE1	10	1.88
(1,572)	1:A:100:ILE:HD12	1:A:116:PHE:HE1	10	1.88
(1,572)	1:A:100:ILE:HD13	1:A:116:PHE:HE1	10	1.88
(1,76)	1:A:4:TYR:HD1	1:A:14:SER:H	20	1.87
(1,559)	1:A:92:ILE:HD11	1:A:95:PHE:HE1	10	1.87
(1,559)	1:A:92:ILE:HD12	1:A:95:PHE:HE1	10	1.87
(1,559)	1:A:92:ILE:HD13	1:A:95:PHE:HE1	10	1.87
(1,525)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG11	4	1.87
(1,525)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG12	4	1.87
(1,525)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG13	4	1.87
(1,525)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG11	11	1.87
(1,525)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG12	11	1.87
(1,525)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG13	11	1.87
(1,322)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:171:LEU:H	10	1.86
(1,949)	1:A:159:ARG:H	1:A:166:VAL:HG11	2	1.85
(1,949)	1:A:159:ARG:H	1:A:166:VAL:HG12	2	1.85
(1,949)	1:A:159:ARG:H	1:A:166:VAL:HG13	2	1.85
(1,917)	1:A:13:LEU:HD11	1:A:177:ILE:H	5	1.85
(1,917)	1:A:13:LEU:HD12	1:A:177:ILE:H	5	1.85
(1,917)	1:A:13:LEU:HD13	1:A:177:ILE:H	5	1.85
(1,322)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:171:LEU:H	17	1.85
(1,918)	1:A:18:PHE:HE1	1:A:73:ASN:HD21	20	1.83
(1,322)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:171:LEU:H	11	1.83
(1,561)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD11	3	1.82
(1,561)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD12	3	1.82
(1,561)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD13	3	1.82
(1,572)	1:A:100:ILE:HD11	1:A:116:PHE:HE1	14	1.81
(1,572)	1:A:100:ILE:HD12	1:A:116:PHE:HE1	14	1.81
(1,572)	1:A:100:ILE:HD13	1:A:116:PHE:HE1	14	1.81
(1,950)	1:A:160:ASP:H	1:A:166:VAL:HG11	14	1.8
(1,950)	1:A:160:ASP:H	1:A:166:VAL:HG12	14	1.8



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,950)	1:A:160:ASP:H	1:A:166:VAL:HG13	14	1.8
(1,572)	1:A:100:ILE:HD11	1:A:116:PHE:HE1	19	1.79
(1,572)	1:A:100:ILE:HD12	1:A:116:PHE:HE1	19	1.79
(1,572)	1:A:100:ILE:HD13	1:A:116:PHE:HE1	19	1.79
(1,322)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:171:LEU:H	13	1.78
(1,322)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:171:LEU:H	5	1.77
(1,572)	1:A:100:ILE:HD11	1:A:116:PHE:HE1	16	1.75
(1,572)	1:A:100:ILE:HD12	1:A:116:PHE:HE1	16	1.75
(1,572)	1:A:100:ILE:HD13	1:A:116:PHE:HE1	16	1.75
(1,523)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG21	1	1.75
(1,523)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG22	1	1.75
(1,523)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG23	1	1.75
(1,350)	1:A:116:PHE:HE1	1:A:117:LYS:H	10	1.75
(1,949)	1:A:159:ARG:H	1:A:166:VAL:HG11	11	1.73
(1,949)	1:A:159:ARG:H	1:A:166:VAL:HG12	11	1.73
(1,949)	1:A:159:ARG:H	1:A:166:VAL:HG13	11	1.73
(1,572)	1:A:100:ILE:HD11	1:A:116:PHE:HE1	20	1.73
(1,572)	1:A:100:ILE:HD12	1:A:116:PHE:HE1	20	1.73
(1,572)	1:A:100:ILE:HD13	1:A:116:PHE:HE1	20	1.73
(1,949)	1:A:159:ARG:H	1:A:166:VAL:HG11	17	1.72
(1,949)	1:A:159:ARG:H	1:A:166:VAL:HG12	17	1.72
(1,949)	1:A:159:ARG:H	1:A:166:VAL:HG13	17	1.72
(1,322)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:171:LEU:H	9	1.72
(1,572)	1:A:100:ILE:HD11	1:A:116:PHE:HE1	7	1.71
(1,572)	1:A:100:ILE:HD12	1:A:116:PHE:HE1	7	1.71
(1,572)	1:A:100:ILE:HD13	1:A:116:PHE:HE1	7	1.71
(1,525)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG11	16	1.71
(1,525)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG12	16	1.71
(1,525)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG13	16	1.71
(1,350)	1:A:116:PHE:HE1	1:A:117:LYS:H	20	1.71
(1,917)	1:A:13:LEU:HD11	1:A:177:ILE:H	15	1.69
(1,917)	1:A:13:LEU:HD12	1:A:177:ILE:H	15	1.69
(1,917)	1:A:13:LEU:HD13	1:A:177:ILE:H	15	1.69
(1,525)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG11	14	1.69
(1,525)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG12	14	1.69
(1,525)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG13	14	1.69
(1,322)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:171:LEU:H	20	1.69
(1,350)	1:A:116:PHE:HE1	1:A:117:LYS:H	1	1.68
(1,350)	1:A:116:PHE:HE1	1:A:117:LYS:H	16	1.68
(1,562)	1:A:4:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD11	18	1.64
(1,562)	1:A:4:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD12	18	1.64
(1,562)	1:A:4:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD13	18	1.64



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,350)	1:A:116:PHE:HE1	1:A:117:LYS:H	15	1.64
(1,931)	1:A:121:GLN:H	1:A:125:VAL:HG11	1	1.63
(1,931)	1:A:121:GLN:H	1:A:125:VAL:HG12	1	1.63
(1,931)	1:A:121:GLN:H	1:A:125:VAL:HG13	1	1.63
(1,350)	1:A:116:PHE:HE1	1:A:117:LYS:H	7	1.63
(1,572)	1:A:100:ILE:HD11	1:A:116:PHE:HE1	6	1.62
(1,572)	1:A:100:ILE:HD12	1:A:116:PHE:HE1	6	1.62
(1,572)	1:A:100:ILE:HD13	1:A:116:PHE:HE1	6	1.62
(1,322)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:171:LEU:H	18	1.61
(1,950)	1:A:160:ASP:H	1:A:166:VAL:HG11	20	1.6
(1,950)	1:A:160:ASP:H	1:A:166:VAL:HG12	20	1.6
(1,950)	1:A:160:ASP:H	1:A:166:VAL:HG13	20	1.6
(1,350)	1:A:116:PHE:HE1	1:A:117:LYS:H	9	1.6
(1,1009)	1:A:4:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD11	18	1.6
(1,1009)	1:A:4:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD12	18	1.6
(1,1009)	1:A:4:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD13	18	1.6
(1,449)	1:A:4:TYR:HD1	1:A:15:SER:H	20	1.59
(1,931)	1:A:121:GLN:H	1:A:125:VAL:HG11	15	1.58
(1,931)	1:A:121:GLN:H	1:A:125:VAL:HG12	15	1.58
(1,931)	1:A:121:GLN:H	1:A:125:VAL:HG13	15	1.58
(1,537)	1:A:99:VAL:HG21	1:A:116:PHE:HE1	4	1.58
(1,537)	1:A:99:VAL:HG22	1:A:116:PHE:HE1	4	1.58
(1,537)	1:A:99:VAL:HG23	1:A:116:PHE:HE1	4	1.58
(1,350)	1:A:116:PHE:HE1	1:A:117:LYS:H	14	1.58
(1,350)	1:A:116:PHE:HE1	1:A:117:LYS:H	4	1.56
(1,322)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:171:LEU:H	1	1.55
(1,559)	1:A:92:ILE:HD11	1:A:95:PHE:HE1	16	1.54
(1,559)	1:A:92:ILE:HD12	1:A:95:PHE:HE1	16	1.54
(1,559)	1:A:92:ILE:HD13	1:A:95:PHE:HE1	16	1.54
(1,561)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD11	8	1.53
(1,561)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD12	8	1.53
(1,561)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD13	8	1.53
(1,559)	1:A:92:ILE:HD11	1:A:95:PHE:HE1	3	1.53
(1,559)	1:A:92:ILE:HD12	1:A:95:PHE:HE1	3	1.53
(1,559)	1:A:92:ILE:HD13	1:A:95:PHE:HE1	3	1.53
(1,489)	1:A:139:PHE:HE1	1:A:156:ILE:HD11	10	1.53
(1,489)	1:A:139:PHE:HE1	1:A:156:ILE:HD12	10	1.53
(1,489)	1:A:139:PHE:HE1	1:A:156:ILE:HD13	10	1.53
(1,350)	1:A:116:PHE:HE1	1:A:117:LYS:H	12	1.53
(1,911)	1:A:5:LYS:H	1:A:13:LEU:HD11	15	1.52
(1,911)	1:A:5:LYS:H	1:A:13:LEU:HD12	15	1.52
(1,911)	1:A:5:LYS:H	1:A:13:LEU:HD13	15	1.52



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,601)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:171:LEU:HD11	13	1.52
(1,601)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:171:LEU:HD12	13	1.52
(1,601)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:171:LEU:HD13	13	1.52
(1,917)	1:A:13:LEU:HD11	1:A:177:ILE:H	6	1.5
(1,917)	1:A:13:LEU:HD12	1:A:177:ILE:H	6	1.5
(1,917)	1:A:13:LEU:HD13	1:A:177:ILE:H	6	1.5
(1,562)	1:A:4:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD11	8	1.5
(1,562)	1:A:4:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD12	8	1.5
(1,562)	1:A:4:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD13	8	1.5
(1,350)	1:A:116:PHE:HE1	1:A:117:LYS:H	2	1.5
(1,949)	1:A:159:ARG:H	1:A:166:VAL:HG11	4	1.49
(1,949)	1:A:159:ARG:H	1:A:166:VAL:HG12	4	1.49
(1,949)	1:A:159:ARG:H	1:A:166:VAL:HG13	4	1.49
(1,949)	1:A:159:ARG:H	1:A:166:VAL:HG11	15	1.49
(1,949)	1:A:159:ARG:H	1:A:166:VAL:HG12	15	1.49
(1,949)	1:A:159:ARG:H	1:A:166:VAL:HG13	15	1.49
(1,449)	1:A:4:TYR:HD1	1:A:15:SER:H	3	1.49
(1,949)	1:A:159:ARG:H	1:A:166:VAL:HG11	6	1.47
(1,949)	1:A:159:ARG:H	1:A:166:VAL:HG12	6	1.47
(1,949)	1:A:159:ARG:H	1:A:166:VAL:HG13	6	1.47
(1,935)	1:A:124:VAL:H	1:A:125:VAL:HG11	15	1.47
(1,935)	1:A:124:VAL:H	1:A:125:VAL:HG12	15	1.47
(1,935)	1:A:124:VAL:H	1:A:125:VAL:HG13	15	1.47
(1,76)	1:A:4:TYR:HD1	1:A:14:SER:H	14	1.47
(1,572)	1:A:100:ILE:HD11	1:A:116:PHE:HE1	2	1.47
(1,572)	1:A:100:ILE:HD12	1:A:116:PHE:HE1	2	1.47
(1,572)	1:A:100:ILE:HD13	1:A:116:PHE:HE1	2	1.47
(1,562)	1:A:4:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD11	1	1.47
(1,562)	1:A:4:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD12	1	1.47
(1,562)	1:A:4:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD13	1	1.47
(1,489)	1:A:139:PHE:HE1	1:A:156:ILE:HD11	12	1.47
(1,489)	1:A:139:PHE:HE1	1:A:156:ILE:HD12	12	1.47
(1,489)	1:A:139:PHE:HE1	1:A:156:ILE:HD13	12	1.47
(1,109)	1:A:15:SER:H	1:A:18:PHE:HE1	5	1.47
(1,917)	1:A:13:LEU:HD11	1:A:177:ILE:H	13	1.46
(1,917)	1:A:13:LEU:HD12	1:A:177:ILE:H	13	1.46
(1,917)	1:A:13:LEU:HD13	1:A:177:ILE:H	13	1.46
(1,566)	1:A:68:ILE:HD11	1:A:139:PHE:HE1	13	1.46
(1,566)	1:A:68:ILE:HD12	1:A:139:PHE:HE1	13	1.46
(1,566)	1:A:68:ILE:HD13	1:A:139:PHE:HE1	13	1.46
(1,1009)	1:A:4:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD11	8	1.46
(1,1009)	1:A:4:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD12	8	1.46



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1009)	1:A:4:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD13	8	1.46
(1,911)	1:A:5:LYS:H	1:A:13:LEU:HD11	19	1.45
(1,911)	1:A:5:LYS:H	1:A:13:LEU:HD12	19	1.45
(1,911)	1:A:5:LYS:H	1:A:13:LEU:HD13	19	1.45
(1,561)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD11	5	1.45
(1,561)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD12	5	1.45
(1,561)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD13	5	1.45
(1,489)	1:A:139:PHE:HE1	1:A:156:ILE:HD11	13	1.45
(1,489)	1:A:139:PHE:HE1	1:A:156:ILE:HD12	13	1.45
(1,489)	1:A:139:PHE:HE1	1:A:156:ILE:HD13	13	1.45
(1,109)	1:A:15:SER:H	1:A:18:PHE:HE1	9	1.45
(1,935)	1:A:124:VAL:H	1:A:125:VAL:HG11	3	1.44
(1,935)	1:A:124:VAL:H	1:A:125:VAL:HG12	3	1.44
(1,935)	1:A:124:VAL:H	1:A:125:VAL:HG13	3	1.44
(1,165)	1:A:8:PHE:HE1	1:A:152:GLN:H	1	1.44
(1,935)	1:A:124:VAL:H	1:A:125:VAL:HG11	1	1.43
(1,935)	1:A:124:VAL:H	1:A:125:VAL:HG12	1	1.43
(1,935)	1:A:124:VAL:H	1:A:125:VAL:HG13	1	1.43
(1,931)	1:A:121:GLN:H	1:A:125:VAL:HG11	11	1.43
(1,931)	1:A:121:GLN:H	1:A:125:VAL:HG12	11	1.43
(1,931)	1:A:121:GLN:H	1:A:125:VAL:HG13	11	1.43
(1,572)	1:A:100:ILE:HD11	1:A:116:PHE:HE1	11	1.43
(1,572)	1:A:100:ILE:HD12	1:A:116:PHE:HE1	11	1.43
(1,572)	1:A:100:ILE:HD13	1:A:116:PHE:HE1	11	1.43
(1,350)	1:A:116:PHE:HE1	1:A:117:LYS:H	11	1.43
(1,350)	1:A:116:PHE:HE1	1:A:117:LYS:H	19	1.43
(1,1009)	1:A:4:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD11	1	1.43
(1,1009)	1:A:4:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD12	1	1.43
(1,1009)	1:A:4:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD13	1	1.43
(1,165)	1:A:8:PHE:HE1	1:A:152:GLN:H	14	1.42
(1,489)	1:A:139:PHE:HE1	1:A:156:ILE:HD11	4	1.41
(1,489)	1:A:139:PHE:HE1	1:A:156:ILE:HD12	4	1.41
(1,489)	1:A:139:PHE:HE1	1:A:156:ILE:HD13	4	1.41
(1,489)	1:A:139:PHE:HE1	1:A:156:ILE:HD11	20	1.41
(1,489)	1:A:139:PHE:HE1	1:A:156:ILE:HD12	20	1.41
(1,489)	1:A:139:PHE:HE1	1:A:156:ILE:HD13	20	1.41
(1,322)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:171:LEU:H	3	1.41
(1,601)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:171:LEU:HD11	11	1.4
(1,601)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:171:LEU:HD12	11	1.4
(1,601)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:171:LEU:HD13	11	1.4
(1,449)	1:A:4:TYR:HD1	1:A:15:SER:H	2	1.4
(1,935)	1:A:124:VAL:H	1:A:125:VAL:HG11	10	1.39
()/				od on mort mage



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,935)	1:A:124:VAL:H	1:A:125:VAL:HG12	10	1.39
(1,935)	1:A:124:VAL:H	1:A:125:VAL:HG13	10	1.39
(1,935)	1:A:124:VAL:H	1:A:125:VAL:HG11	11	1.39
(1,935)	1:A:124:VAL:H	1:A:125:VAL:HG12	11	1.39
(1,935)	1:A:124:VAL:H	1:A:125:VAL:HG13	11	1.39
(1,561)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD11	14	1.38
(1,561)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD12	14	1.38
(1,561)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD13	14	1.38
(1,917)	1:A:13:LEU:HD11	1:A:177:ILE:H	19	1.37
(1,917)	1:A:13:LEU:HD12	1:A:177:ILE:H	19	1.37
(1,917)	1:A:13:LEU:HD13	1:A:177:ILE:H	19	1.37
(1,350)	1:A:116:PHE:HE1	1:A:117:LYS:H	18	1.37
(1,918)	1:A:18:PHE:HE1	1:A:73:ASN:HD21	7	1.36
(1,492)	1:A:7:ILE:HD11	1:A:8:PHE:HE1	3	1.36
(1,492)	1:A:7:ILE:HD12	1:A:8:PHE:HE1	3	1.36
(1,492)	1:A:7:ILE:HD13	1:A:8:PHE:HE1	3	1.36
(1,350)	1:A:116:PHE:HE1	1:A:117:LYS:H	3	1.36
(1,525)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG11	2	1.35
(1,525)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG12	2	1.35
(1,525)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG13	2	1.35
(1,489)	1:A:139:PHE:HE1	1:A:156:ILE:HD11	16	1.35
(1,489)	1:A:139:PHE:HE1	1:A:156:ILE:HD12	16	1.35
(1,489)	1:A:139:PHE:HE1	1:A:156:ILE:HD13	16	1.35
(1,559)	1:A:92:ILE:HD11	1:A:95:PHE:HE1	19	1.34
(1,559)	1:A:92:ILE:HD12	1:A:95:PHE:HE1	19	1.34
(1,559)	1:A:92:ILE:HD13	1:A:95:PHE:HE1	19	1.34
(1,350)	1:A:116:PHE:HE1	1:A:117:LYS:H	8	1.34
(1,949)	1:A:159:ARG:H	1:A:166:VAL:HG11	7	1.33
(1,949)	1:A:159:ARG:H	1:A:166:VAL:HG12	7	1.33
(1,949)	1:A:159:ARG:H	1:A:166:VAL:HG13	7	1.33
(1,917)	1:A:13:LEU:HD11	1:A:177:ILE:H	4	1.33
(1,917)	1:A:13:LEU:HD12	1:A:177:ILE:H	4	1.33
(1,917)	1:A:13:LEU:HD13	1:A:177:ILE:H	4	1.33
(1,44)	1:A:82:TYR:H	1:A:82:TYR:HE1	3	1.33
(1,572)	1:A:100:ILE:HD11	1:A:116:PHE:HE1	18	1.32
(1,572)	1:A:100:ILE:HD12	1:A:116:PHE:HE1	18	1.32
(1,572)	1:A:100:ILE:HD13	1:A:116:PHE:HE1	18	1.32
(1,34)	1:A:116:PHE:HE1	1:A:173:LYS:H	17	1.32
(1,935)	1:A:124:VAL:H	1:A:125:VAL:HG11	17	1.31
(1,935)	1:A:124:VAL:H	1:A:125:VAL:HG12	17	1.31
(1,935)	1:A:124:VAL:H	1:A:125:VAL:HG13	17	1.31
(1,933)	1:A:122:GLY:H	1:A:125:VAL:HG11	1	1.31



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,933)	1:A:122:GLY:H	1:A:125:VAL:HG12	1	1.31
(1,933)	1:A:122:GLY:H	1:A:125:VAL:HG13	1	1.31
(1,911)	1:A:5:LYS:H	1:A:13:LEU:HD11	6	1.31
(1,911)	1:A:5:LYS:H	1:A:13:LEU:HD12	6	1.31
(1,911)	1:A:5:LYS:H	1:A:13:LEU:HD13	6	1.31
(1,525)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG11	3	1.31
(1,525)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG12	3	1.31
(1,525)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG13	3	1.31
(1,940)	1:A:125:VAL:HG11	1:A:128:LEU:HD11	9	1.3
(1,940)	1:A:125:VAL:HG11	1:A:128:LEU:HD12	9	1.3
(1,940)	1:A:125:VAL:HG11	1:A:128:LEU:HD13	9	1.3
(1,940)	1:A:125:VAL:HG12	1:A:128:LEU:HD11	9	1.3
(1,940)	1:A:125:VAL:HG12	1:A:128:LEU:HD12	9	1.3
(1,940)	1:A:125:VAL:HG12	1:A:128:LEU:HD13	9	1.3
(1,940)	1:A:125:VAL:HG13	1:A:128:LEU:HD11	9	1.3
(1,940)	1:A:125:VAL:HG13	1:A:128:LEU:HD12	9	1.3
(1,940)	1:A:125:VAL:HG13	1:A:128:LEU:HD13	9	1.3
(1,933)	1:A:122:GLY:H	1:A:125:VAL:HG11	15	1.3
(1,933)	1:A:122:GLY:H	1:A:125:VAL:HG12	15	1.3
(1,933)	1:A:122:GLY:H	1:A:125:VAL:HG13	15	1.3
(1,931)	1:A:121:GLN:H	1:A:125:VAL:HG11	17	1.3
(1,931)	1:A:121:GLN:H	1:A:125:VAL:HG12	17	1.3
(1,931)	1:A:121:GLN:H	1:A:125:VAL:HG13	17	1.3
(1,525)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG11	10	1.3
(1,525)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG12	10	1.3
(1,525)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG13	10	1.3
(1,492)	1:A:7:ILE:HD11	1:A:8:PHE:HE1	11	1.3
(1,492)	1:A:7:ILE:HD12	1:A:8:PHE:HE1	11	1.3
(1,492)	1:A:7:ILE:HD13	1:A:8:PHE:HE1	11	1.3
(1,911)	1:A:5:LYS:H	1:A:13:LEU:HD11	5	1.29
(1,911)	1:A:5:LYS:H	1:A:13:LEU:HD12	5	1.29
(1,911)	1:A:5:LYS:H	1:A:13:LEU:HD13	5	1.29
(1,559)	1:A:92:ILE:HD11	1:A:95:PHE:HE1	18	1.29
(1,559)	1:A:92:ILE:HD12	1:A:95:PHE:HE1	18	1.29
(1,559)	1:A:92:ILE:HD13	1:A:95:PHE:HE1	18	1.29
(1,436)	1:A:82:TYR:HD1	1:A:83:GLU:H	12	1.29
(1,933)	1:A:122:GLY:H	1:A:125:VAL:HG11	3	1.28
(1,933)	1:A:122:GLY:H	1:A:125:VAL:HG12	3	1.28
(1,933)	1:A:122:GLY:H	1:A:125:VAL:HG13	3	1.28
(1,923)	1:A:30:PHE:HB2	1:A:169:LEU:H	16	1.28
(1,350)	1:A:116:PHE:HE1	1:A:117:LYS:H	5	1.28
(1,322)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:171:LEU:H	4	1.28



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,525)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG11	19	1.26
(1,525)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG12	19	1.26
(1,525)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG13	19	1.26
(1,1010)	1:A:18:PHE:HE1	1:A:73:ASN:HD22	14	1.26
(1,936)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:125:VAL:HG11	11	1.25
(1,936)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:125:VAL:HG12	11	1.25
(1,936)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:125:VAL:HG13	11	1.25
(1,936)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:125:VAL:HG11	11	1.25
(1,936)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:125:VAL:HG12	11	1.25
(1,936)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:125:VAL:HG13	11	1.25
(1,936)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:125:VAL:HG11	11	1.25
(1,936)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:125:VAL:HG12	11	1.25
(1,936)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:125:VAL:HG13	11	1.25
(1,570)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:120:ILE:HD11	16	1.25
(1,570)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:120:ILE:HD12	16	1.25
(1,570)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:120:ILE:HD13	16	1.25
(1,936)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:125:VAL:HG11	17	1.24
(1,936)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:125:VAL:HG12	17	1.24
(1,936)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:125:VAL:HG13	17	1.24
(1,936)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:125:VAL:HG11	17	1.24
(1,936)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:125:VAL:HG12	17	1.24
(1,936)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:125:VAL:HG13	17	1.24
(1,936)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:125:VAL:HG11	17	1.24
(1,936)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:125:VAL:HG12	17	1.24
(1,936)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:125:VAL:HG13	17	1.24
(1,436)	1:A:82:TYR:HD1	1:A:83:GLU:H	16	1.24
(1,570)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:120:ILE:HD11	4	1.23
(1,570)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:120:ILE:HD12	4	1.23
(1,570)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:120:ILE:HD13	4	1.23
(1,566)	1:A:68:ILE:HD11	1:A:139:PHE:HE1	20	1.23
(1,566)	1:A:68:ILE:HD12	1:A:139:PHE:HE1	20	1.23
(1,566)	1:A:68:ILE:HD13	1:A:139:PHE:HE1	20	1.23
(1,489)	1:A:139:PHE:HE1	1:A:156:ILE:HD11	14	1.23
(1,489)	1:A:139:PHE:HE1	1:A:156:ILE:HD12	14	1.23
(1,489)	1:A:139:PHE:HE1	1:A:156:ILE:HD13	14	1.23
(1,350)	1:A:116:PHE:HE1	1:A:117:LYS:H	13	1.23
(1,918)	1:A:18:PHE:HE1	1:A:73:ASN:HD21	18	1.22
(1,322)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:171:LEU:H	14	1.22
(1,502)	1:A:91:TYR:HE1	1:A:153:VAL:HG21	2	1.21
(1,502)	1:A:91:TYR:HE1	1:A:153:VAL:HG22	2	1.21
(1,502)	1:A:91:TYR:HE1	1:A:153:VAL:HG23	2	1.21
(1,436)	1:A:82:TYR:HD1	1:A:83:GLU:H	18	1.21



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,538)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:99:VAL:HG21	17	1.2
(1,538)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:99:VAL:HG22	17	1.2
(1,538)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:99:VAL:HG23	17	1.2
(1,44)	1:A:82:TYR:H	1:A:82:TYR:HE1	16	1.2
(1,599)	1:A:91:TYR:HD1	1:A:153:VAL:HG11	2	1.19
(1,599)	1:A:91:TYR:HD1	1:A:153:VAL:HG12	2	1.19
(1,599)	1:A:91:TYR:HD1	1:A:153:VAL:HG13	2	1.19
(1,559)	1:A:92:ILE:HD11	1:A:95:PHE:HE1	11	1.19
(1,559)	1:A:92:ILE:HD12	1:A:95:PHE:HE1	11	1.19
(1,559)	1:A:92:ILE:HD13	1:A:95:PHE:HE1	11	1.19
(1,41)	1:A:158:TYR:H	1:A:158:TYR:HE1	7	1.19
(1,109)	1:A:15:SER:H	1:A:18:PHE:HE1	1	1.19
(1,936)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:125:VAL:HG11	1	1.18
(1,936)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:125:VAL:HG12	1	1.18
(1,936)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:125:VAL:HG13	1	1.18
(1,936)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:125:VAL:HG11	1	1.18
(1,936)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:125:VAL:HG12	1	1.18
(1,936)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:125:VAL:HG13	1	1.18
(1,936)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:125:VAL:HG11	1	1.18
(1,936)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:125:VAL:HG12	1	1.18
(1,936)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:125:VAL:HG13	1	1.18
(1,931)	1:A:121:GLN:H	1:A:125:VAL:HG11	3	1.18
(1,931)	1:A:121:GLN:H	1:A:125:VAL:HG12	3	1.18
(1,931)	1:A:121:GLN:H	1:A:125:VAL:HG13	3	1.18
(1,949)	1:A:159:ARG:H	1:A:166:VAL:HG11	1	1.17
(1,949)	1:A:159:ARG:H	1:A:166:VAL:HG12	1	1.17
(1,949)	1:A:159:ARG:H	1:A:166:VAL:HG13	1	1.17
(1,936)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:125:VAL:HG11	3	1.17
(1,936)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:125:VAL:HG12	3	1.17
(1,936)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:125:VAL:HG13	3	1.17
(1,936)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:125:VAL:HG11	3	1.17
(1,936)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:125:VAL:HG12	3	1.17
(1,936)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:125:VAL:HG13	3	1.17
(1,936)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:125:VAL:HG11	3	1.17
(1,936)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:125:VAL:HG12	3	1.17
(1,936)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:125:VAL:HG13	3	1.17
(1,936)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:125:VAL:HG11	15	1.17
(1,936)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:125:VAL:HG12	15	1.17
(1,936)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:125:VAL:HG13	15	1.17
(1,936)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:125:VAL:HG11	15	1.17
(1,936)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:125:VAL:HG12	15	1.17
(1,936)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:125:VAL:HG13	15	1.17



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,936)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:125:VAL:HG11	15	1.17
(1,936)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:125:VAL:HG12	15	1.17
(1,936)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:125:VAL:HG13	15	1.17
(1,559)	1:A:92:ILE:HD11	1:A:95:PHE:HE1	4	1.17
(1,559)	1:A:92:ILE:HD12	1:A:95:PHE:HE1	4	1.17
(1,559)	1:A:92:ILE:HD13	1:A:95:PHE:HE1	4	1.17
(1,350)	1:A:116:PHE:HE1	1:A:117:LYS:H	6	1.17
(1,322)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:171:LEU:H	7	1.16
(1,911)	1:A:5:LYS:H	1:A:13:LEU:HD11	4	1.15
(1,911)	1:A:5:LYS:H	1:A:13:LEU:HD12	4	1.15
(1,911)	1:A:5:LYS:H	1:A:13:LEU:HD13	4	1.15
(1,44)	1:A:82:TYR:H	1:A:82:TYR:HE1	10	1.15
(1,436)	1:A:82:TYR:HD1	1:A:83:GLU:H	14	1.15
(1,436)	1:A:82:TYR:HD1	1:A:83:GLU:H	3	1.14
(1,936)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:125:VAL:HG11	10	1.13
(1,936)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:125:VAL:HG12	10	1.13
(1,936)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:125:VAL:HG13	10	1.13
(1,936)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:125:VAL:HG11	10	1.13
(1,936)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:125:VAL:HG12	10	1.13
(1,936)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:125:VAL:HG13	10	1.13
(1,936)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:125:VAL:HG11	10	1.13
(1,936)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:125:VAL:HG12	10	1.13
(1,936)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:125:VAL:HG13	10	1.13
(1,559)	1:A:92:ILE:HD11	1:A:95:PHE:HE1	14	1.13
(1,559)	1:A:92:ILE:HD12	1:A:95:PHE:HE1	14	1.13
(1,559)	1:A:92:ILE:HD13	1:A:95:PHE:HE1	14	1.13
(1,165)	1:A:8:PHE:HE1	1:A:152:GLN:H	7	1.13
(1,934)	1:A:123:TRP:H	1:A:125:VAL:HG11	3	1.12
(1,934)	1:A:123:TRP:H	1:A:125:VAL:HG12	3	1.12
(1,934)	1:A:123:TRP:H	1:A:125:VAL:HG13	3	1.12
(1,599)	1:A:91:TYR:HD1	1:A:153:VAL:HG11	20	1.12
(1,599)	1:A:91:TYR:HD1	1:A:153:VAL:HG12	20	1.12
(1,599)	1:A:91:TYR:HD1	1:A:153:VAL:HG13	20	1.12
(1,931)	1:A:121:GLN:H	1:A:125:VAL:HG11	10	1.11
(1,931)	1:A:121:GLN:H	1:A:125:VAL:HG12	10	1.11
(1,931)	1:A:121:GLN:H	1:A:125:VAL:HG13	10	1.11
(1,538)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:99:VAL:HG21	3	1.11
(1,538)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:99:VAL:HG22	3	1.11
(1,538)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:99:VAL:HG23	3	1.11
(1,1010)	1:A:18:PHE:HE1	1:A:73:ASN:HD22	12	1.11
(1,562)	1:A:4:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD11	10	1.1
(1,562)	1:A:4:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD12	10	1.1
	<u> </u>	<u> </u>	Continue	



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,562)	1:A:4:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD13	10	1.1
(1,436)	1:A:82:TYR:HD1	1:A:83:GLU:H	17	1.1
(1,949)	1:A:159:ARG:H	1:A:166:VAL:HG11	14	1.09
(1,949)	1:A:159:ARG:H	1:A:166:VAL:HG12	14	1.09
(1,949)	1:A:159:ARG:H	1:A:166:VAL:HG13	14	1.09
(1,918)	1:A:18:PHE:HE1	1:A:73:ASN:HD21	4	1.09
(1,917)	1:A:13:LEU:HD11	1:A:177:ILE:H	1	1.08
(1,917)	1:A:13:LEU:HD12	1:A:177:ILE:H	1	1.08
(1,917)	1:A:13:LEU:HD13	1:A:177:ILE:H	1	1.08
(1,322)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:171:LEU:H	15	1.08
(1,940)	1:A:125:VAL:HG11	1:A:128:LEU:HD11	18	1.07
(1,940)	1:A:125:VAL:HG11	1:A:128:LEU:HD12	18	1.07
(1,940)	1:A:125:VAL:HG11	1:A:128:LEU:HD13	18	1.07
(1,940)	1:A:125:VAL:HG12	1:A:128:LEU:HD11	18	1.07
(1,940)	1:A:125:VAL:HG12	1:A:128:LEU:HD12	18	1.07
(1,940)	1:A:125:VAL:HG12	1:A:128:LEU:HD13	18	1.07
(1,940)	1:A:125:VAL:HG13	1:A:128:LEU:HD11	18	1.07
(1,940)	1:A:125:VAL:HG13	1:A:128:LEU:HD12	18	1.07
(1,940)	1:A:125:VAL:HG13	1:A:128:LEU:HD13	18	1.07
(1,525)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG11	18	1.07
(1,525)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG12	18	1.07
(1,525)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG13	18	1.07
(1,436)	1:A:82:TYR:HD1	1:A:83:GLU:H	11	1.07
(1,923)	1:A:30:PHE:HB2	1:A:169:LEU:H	3	1.06
(1,562)	1:A:4:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD11	7	1.06
(1,562)	1:A:4:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD12	7	1.06
(1,562)	1:A:4:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD13	7	1.06
(1,44)	1:A:82:TYR:H	1:A:82:TYR:HE1	7	1.06
(1,1009)	1:A:4:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD11	10	1.06
(1,1009)	1:A:4:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD12	10	1.06
(1,1009)	1:A:4:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD13	10	1.06
(1,436)	1:A:82:TYR:HD1	1:A:83:GLU:H	1	1.05
(1,436)	1:A:82:TYR:HD1	1:A:83:GLU:H	5	1.05
(1,109)	1:A:15:SER:H	1:A:18:PHE:HE1	19	1.05
(1,572)	1:A:100:ILE:HD11	1:A:116:PHE:HE1	5	1.04
(1,572)	1:A:100:ILE:HD12	1:A:116:PHE:HE1	5	1.04
(1,572)	1:A:100:ILE:HD13	1:A:116:PHE:HE1	5	1.04
(1,572)	1:A:100:ILE:HD11	1:A:116:PHE:HE1	13	1.04
(1,572)	1:A:100:ILE:HD12	1:A:116:PHE:HE1	13	1.04
(1,572)	1:A:100:ILE:HD13	1:A:116:PHE:HE1	13	1.04
(1,538)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:99:VAL:HG21	15	1.04
(1,538)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:99:VAL:HG22	15	1.04
	I	İ		nd on nort nago



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,538)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:99:VAL:HG23	15	1.04
(1,509)	1:A:71:VAL:HG11	1:A:139:PHE:HE1	7	1.04
(1,509)	1:A:71:VAL:HG12	1:A:139:PHE:HE1	7	1.04
(1,509)	1:A:71:VAL:HG13	1:A:139:PHE:HE1	7	1.04
(1,918)	1:A:18:PHE:HE1	1:A:73:ASN:HD21	6	1.03
(1,916)	1:A:13:LEU:HD11	1:A:176:ILE:HD11	5	1.03
(1,916)	1:A:13:LEU:HD11	1:A:176:ILE:HD12	5	1.03
(1,916)	1:A:13:LEU:HD11	1:A:176:ILE:HD13	5	1.03
(1,916)	1:A:13:LEU:HD12	1:A:176:ILE:HD11	5	1.03
(1,916)	1:A:13:LEU:HD12	1:A:176:ILE:HD12	5	1.03
(1,916)	1:A:13:LEU:HD12	1:A:176:ILE:HD13	5	1.03
(1,916)	1:A:13:LEU:HD13	1:A:176:ILE:HD11	5	1.03
(1,916)	1:A:13:LEU:HD13	1:A:176:ILE:HD12	5	1.03
(1,916)	1:A:13:LEU:HD13	1:A:176:ILE:HD13	5	1.03
(1,559)	1:A:92:ILE:HD11	1:A:95:PHE:HE1	1	1.03
(1,559)	1:A:92:ILE:HD12	1:A:95:PHE:HE1	1	1.03
(1,559)	1:A:92:ILE:HD13	1:A:95:PHE:HE1	1	1.03
(1,44)	1:A:82:TYR:H	1:A:82:TYR:HE1	6	1.03
(1,436)	1:A:82:TYR:HD1	1:A:83:GLU:H	20	1.03
(1,40)	1:A:158:TYR:H	1:A:158:TYR:HD1	7	1.03
(1,1010)	1:A:18:PHE:HE1	1:A:73:ASN:HD22	7	1.03
(1,570)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:120:ILE:HD11	11	1.02
(1,570)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:120:ILE:HD12	11	1.02
(1,570)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:120:ILE:HD13	11	1.02
(1,436)	1:A:82:TYR:HD1	1:A:83:GLU:H	13	1.02
(1,1009)	1:A:4:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD11	7	1.02
(1,1009)	1:A:4:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD12	7	1.02
(1,1009)	1:A:4:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD13	7	1.02
(1,933)	1:A:122:GLY:H	1:A:125:VAL:HG11	10	1.01
(1,933)	1:A:122:GLY:H	1:A:125:VAL:HG12	10	1.01
(1,933)	1:A:122:GLY:H	1:A:125:VAL:HG13	10	1.01
(1,538)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:99:VAL:HG21	7	1.01
(1,538)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:99:VAL:HG22	7	1.01
(1,538)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:99:VAL:HG23	7	1.01
(1,498)	1:A:27:VAL:HG11	1:A:28:TYR:HD1	6	1.01
(1,498)	1:A:27:VAL:HG12	1:A:28:TYR:HD1	6	1.01
(1,498)	1:A:27:VAL:HG13	1:A:28:TYR:HD1	6	1.01
(1,933)	1:A:122:GLY:H	1:A:125:VAL:HG11	11	1.0
(1,933)	1:A:122:GLY:H	1:A:125:VAL:HG12	11	1.0
(1,933)	1:A:122:GLY:H	1:A:125:VAL:HG13	11	1.0
(1,923)	1:A:30:PHE:HB2	1:A:169:LEU:H	13	1.0
(1,525)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG11	13	1.0



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,525)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG12	13	1.0
(1,525)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG13	13	1.0
(1,44)	1:A:82:TYR:H	1:A:82:TYR:HE1	9	1.0
(1,44)	1:A:82:TYR:H	1:A:82:TYR:HE1	14	1.0
(1,436)	1:A:82:TYR:HD1	1:A:83:GLU:H	4	1.0
(1,525)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG11	15	0.99
(1,525)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG12	15	0.99
(1,525)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG13	15	0.99
(1,436)	1:A:82:TYR:HD1	1:A:83:GLU:H	9	0.99
(1,599)	1:A:91:TYR:HD1	1:A:153:VAL:HG11	16	0.98
(1,599)	1:A:91:TYR:HD1	1:A:153:VAL:HG12	16	0.98
(1,599)	1:A:91:TYR:HD1	1:A:153:VAL:HG13	16	0.98
(1,561)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD11	13	0.98
(1,561)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD12	13	0.98
(1,561)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD13	13	0.98
(1,44)	1:A:82:TYR:H	1:A:82:TYR:HE1	1	0.98
(1,940)	1:A:125:VAL:HG11	1:A:128:LEU:HD11	20	0.97
(1,940)	1:A:125:VAL:HG11	1:A:128:LEU:HD12	20	0.97
(1,940)	1:A:125:VAL:HG11	1:A:128:LEU:HD13	20	0.97
(1,940)	1:A:125:VAL:HG12	1:A:128:LEU:HD11	20	0.97
(1,940)	1:A:125:VAL:HG12	1:A:128:LEU:HD12	20	0.97
(1,940)	1:A:125:VAL:HG12	1:A:128:LEU:HD13	20	0.97
(1,940)	1:A:125:VAL:HG13	1:A:128:LEU:HD11	20	0.97
(1,940)	1:A:125:VAL:HG13	1:A:128:LEU:HD12	20	0.97
(1,940)	1:A:125:VAL:HG13	1:A:128:LEU:HD13	20	0.97
(1,927)	1:A:105:LYS:H	1:A:106:ASN:HD21	15	0.97
(1,911)	1:A:5:LYS:H	1:A:13:LEU:HD11	1	0.97
(1,911)	1:A:5:LYS:H	1:A:13:LEU:HD12	1	0.97
(1,911)	1:A:5:LYS:H	1:A:13:LEU:HD13	1	0.97
(1,559)	1:A:92:ILE:HD11	1:A:95:PHE:HE1	15	0.96
(1,559)	1:A:92:ILE:HD12	1:A:95:PHE:HE1	15	0.96
(1,559)	1:A:92:ILE:HD13	1:A:95:PHE:HE1	15	0.96
(1,525)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG11	7	0.96
(1,525)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG12	7	0.96
(1,525)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG13	7	0.96
(1,436)	1:A:82:TYR:HD1	1:A:83:GLU:H	15	0.96
(1,934)	1:A:123:TRP:H	1:A:125:VAL:HG11	15	0.95
(1,934)	1:A:123:TRP:H	1:A:125:VAL:HG12	15	0.95
(1,934)	1:A:123:TRP:H	1:A:125:VAL:HG13	15	0.95
(1,601)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:171:LEU:HD11	4	0.95
(1,601)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:171:LEU:HD12	4	0.95
(1,601)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:171:LEU:HD13	4	0.95



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,566)	1:A:68:ILE:HD11	1:A:139:PHE:HE1	4	0.95
(1,566)	1:A:68:ILE:HD12	1:A:139:PHE:HE1	4	0.95
(1,566)	1:A:68:ILE:HD13	1:A:139:PHE:HE1	4	0.95
(1,559)	1:A:92:ILE:HD11	1:A:95:PHE:HE1	2	0.95
(1,559)	1:A:92:ILE:HD12	1:A:95:PHE:HE1	2	0.95
(1,559)	1:A:92:ILE:HD13	1:A:95:PHE:HE1	2	0.95
(1,559)	1:A:92:ILE:HD11	1:A:95:PHE:HE1	7	0.95
(1,559)	1:A:92:ILE:HD12	1:A:95:PHE:HE1	7	0.95
(1,559)	1:A:92:ILE:HD13	1:A:95:PHE:HE1	7	0.95
(1,498)	1:A:27:VAL:HG11	1:A:28:TYR:HD1	2	0.95
(1,498)	1:A:27:VAL:HG12	1:A:28:TYR:HD1	2	0.95
(1,498)	1:A:27:VAL:HG13	1:A:28:TYR:HD1	2	0.95
(1,44)	1:A:82:TYR:H	1:A:82:TYR:HE1	12	0.95
(1,436)	1:A:82:TYR:HD1	1:A:83:GLU:H	19	0.95
(1,178)	1:A:91:TYR:HD1	1:A:153:VAL:H	17	0.95
(1,911)	1:A:5:LYS:H	1:A:13:LEU:HD11	13	0.94
(1,911)	1:A:5:LYS:H	1:A:13:LEU:HD12	13	0.94
(1,911)	1:A:5:LYS:H	1:A:13:LEU:HD13	13	0.94
(1,537)	1:A:99:VAL:HG21	1:A:116:PHE:HE1	15	0.93
(1,537)	1:A:99:VAL:HG22	1:A:116:PHE:HE1	15	0.93
(1,537)	1:A:99:VAL:HG23	1:A:116:PHE:HE1	15	0.93
(1,919)	1:A:18:PHE:HZ	1:A:73:ASN:HD21	19	0.92
(1,44)	1:A:82:TYR:H	1:A:82:TYR:HE1	15	0.92
(1,41)	1:A:158:TYR:H	1:A:158:TYR:HE1	2	0.92
(1,178)	1:A:91:TYR:HD1	1:A:153:VAL:H	2	0.92
(1,109)	1:A:15:SER:H	1:A:18:PHE:HE1	2	0.92
(1,436)	1:A:82:TYR:HD1	1:A:83:GLU:H	7	0.91
(1,509)	1:A:71:VAL:HG11	1:A:139:PHE:HE1	3	0.9
(1,509)	1:A:71:VAL:HG12	1:A:139:PHE:HE1	3	0.9
(1,509)	1:A:71:VAL:HG13	1:A:139:PHE:HE1	3	0.9
(1,561)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD11	18	0.89
(1,561)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD12	18	0.89
(1,561)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD13	18	0.89
(1,525)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG11	9	0.89
(1,525)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG12	9	0.89
(1,525)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG13	9	0.89
(1,436)	1:A:82:TYR:HD1	1:A:83:GLU:H	6	0.89
(1,436)	1:A:82:TYR:HD1	1:A:83:GLU:H	8	0.89
(1,940)	1:A:125:VAL:HG11	1:A:128:LEU:HD11	14	0.88
(1,940)	1:A:125:VAL:HG11	1:A:128:LEU:HD12	14	0.88
(1,940)	1:A:125:VAL:HG11	1:A:128:LEU:HD13	14	0.88
(1,940)	1:A:125:VAL:HG12	1:A:128:LEU:HD11	14	0.88



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,940)	1:A:125:VAL:HG12	1:A:128:LEU:HD12	14	0.88
(1,940)	1:A:125:VAL:HG12	1:A:128:LEU:HD13	14	0.88
(1,940)	1:A:125:VAL:HG13	1:A:128:LEU:HD11	14	0.88
(1,940)	1:A:125:VAL:HG13	1:A:128:LEU:HD12	14	0.88
(1,940)	1:A:125:VAL:HG13	1:A:128:LEU:HD13	14	0.88
(1,934)	1:A:123:TRP:H	1:A:125:VAL:HG11	1	0.88
(1,934)	1:A:123:TRP:H	1:A:125:VAL:HG12	1	0.88
(1,934)	1:A:123:TRP:H	1:A:125:VAL:HG13	1	0.88
(1,932)	1:A:121:GLN:HE21	1:A:125:VAL:HG11	10	0.88
(1,932)	1:A:121:GLN:HE21	1:A:125:VAL:HG12	10	0.88
(1,932)	1:A:121:GLN:HE21	1:A:125:VAL:HG13	10	0.88
(1,932)	1:A:121:GLN:HE22	1:A:125:VAL:HG11	10	0.88
(1,932)	1:A:121:GLN:HE22	1:A:125:VAL:HG12	10	0.88
(1,932)	1:A:121:GLN:HE22	1:A:125:VAL:HG13	10	0.88
(1,919)	1:A:18:PHE:HZ	1:A:73:ASN:HD21	14	0.88
(1,498)	1:A:27:VAL:HG11	1:A:28:TYR:HD1	4	0.88
(1,498)	1:A:27:VAL:HG12	1:A:28:TYR:HD1	4	0.88
(1,498)	1:A:27:VAL:HG13	1:A:28:TYR:HD1	4	0.88
(1,492)	1:A:7:ILE:HD11	1:A:8:PHE:HE1	1	0.88
(1,492)	1:A:7:ILE:HD12	1:A:8:PHE:HE1	1	0.88
(1,492)	1:A:7:ILE:HD13	1:A:8:PHE:HE1	1	0.88
(1,44)	1:A:82:TYR:H	1:A:82:TYR:HE1	13	0.88
(1,44)	1:A:82:TYR:H	1:A:82:TYR:HE1	18	0.88
(1,436)	1:A:82:TYR:HD1	1:A:83:GLU:H	10	0.88
(1,165)	1:A:8:PHE:HE1	1:A:152:GLN:H	8	0.88
(1,599)	1:A:91:TYR:HD1	1:A:153:VAL:HG11	17	0.87
(1,599)	1:A:91:TYR:HD1	1:A:153:VAL:HG12	17	0.87
(1,599)	1:A:91:TYR:HD1	1:A:153:VAL:HG13	17	0.87
(1,561)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD11	10	0.87
(1,561)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD12	10	0.87
(1,561)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD13	10	0.87
(1,44)	1:A:82:TYR:H	1:A:82:TYR:HE1	5	0.87
(1,41)	1:A:158:TYR:H	1:A:158:TYR:HE1	3	0.87
(1,215)	1:A:21:LYS:H	1:A:28:TYR:HD1	12	0.86
(1,934)	1:A:123:TRP:H	1:A:125:VAL:HG11	10	0.85
(1,934)	1:A:123:TRP:H	1:A:125:VAL:HG12	10	0.85
(1,934)	1:A:123:TRP:H	1:A:125:VAL:HG13	10	0.85
(1,538)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:99:VAL:HG21	14	0.85
(1,538)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:99:VAL:HG22	14	0.85
(1,538)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:99:VAL:HG23	14	0.85
(1,498)	1:A:27:VAL:HG11	1:A:28:TYR:HD1	10	0.85
(1,498)	1:A:27:VAL:HG12	1:A:28:TYR:HD1	10	0.85



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,498)	1:A:27:VAL:HG13	1:A:28:TYR:HD1	10	0.85
(1,387)	1:A:116:PHE:HE1	1:A:174:GLU:H	17	0.85
(1,165)	1:A:8:PHE:HE1	1:A:152:GLN:H	17	0.85
(1,923)	1:A:30:PHE:HB2	1:A:169:LEU:H	6	0.84
(1,599)	1:A:91:TYR:HD1	1:A:153:VAL:HG11	13	0.84
(1,599)	1:A:91:TYR:HD1	1:A:153:VAL:HG12	13	0.84
(1,599)	1:A:91:TYR:HD1	1:A:153:VAL:HG13	13	0.84
(1,538)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:99:VAL:HG21	9	0.84
(1,538)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:99:VAL:HG22	9	0.84
(1,538)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:99:VAL:HG23	9	0.84
(1,436)	1:A:82:TYR:HD1	1:A:83:GLU:H	2	0.83
(1,40)	1:A:158:TYR:H	1:A:158:TYR:HD1	3	0.83
(1,186)	1:A:158:TYR:HD1	1:A:159:ARG:H	5	0.83
(1,949)	1:A:159:ARG:H	1:A:166:VAL:HG11	20	0.82
(1,949)	1:A:159:ARG:H	1:A:166:VAL:HG12	20	0.82
(1,949)	1:A:159:ARG:H	1:A:166:VAL:HG13	20	0.82
(1,940)	1:A:125:VAL:HG11	1:A:128:LEU:HD11	16	0.82
(1,940)	1:A:125:VAL:HG11	1:A:128:LEU:HD12	16	0.82
(1,940)	1:A:125:VAL:HG11	1:A:128:LEU:HD13	16	0.82
(1,940)	1:A:125:VAL:HG12	1:A:128:LEU:HD11	16	0.82
(1,940)	1:A:125:VAL:HG12	1:A:128:LEU:HD12	16	0.82
(1,940)	1:A:125:VAL:HG12	1:A:128:LEU:HD13	16	0.82
(1,940)	1:A:125:VAL:HG13	1:A:128:LEU:HD11	16	0.82
(1,940)	1:A:125:VAL:HG13	1:A:128:LEU:HD12	16	0.82
(1,940)	1:A:125:VAL:HG13	1:A:128:LEU:HD13	16	0.82
(1,938)	1:A:125:VAL:H	1:A:125:VAL:HG11	3	0.82
(1,938)	1:A:125:VAL:H	1:A:125:VAL:HG12	3	0.82
(1,938)	1:A:125:VAL:H	1:A:125:VAL:HG13	3	0.82
(1,938)	1:A:125:VAL:H	1:A:125:VAL:HG11	17	0.82
(1,938)	1:A:125:VAL:H	1:A:125:VAL:HG12	17	0.82
(1,938)	1:A:125:VAL:H	1:A:125:VAL:HG13	17	0.82
(1,76)	1:A:4:TYR:HD1	1:A:14:SER:H	17	0.82
(1,218)	1:A:4:TYR:HD1	1:A:5:LYS:H	4	0.82
(1,938)	1:A:125:VAL:H	1:A:125:VAL:HG11	1	0.81
(1,938)	1:A:125:VAL:H	1:A:125:VAL:HG12	1	0.81
(1,938)	1:A:125:VAL:H	1:A:125:VAL:HG13	1	0.81
(1,938)	1:A:125:VAL:H	1:A:125:VAL:HG11	11	0.81
(1,938)	1:A:125:VAL:H	1:A:125:VAL:HG12	11	0.81
(1,938)	1:A:125:VAL:H	1:A:125:VAL:HG13	11	0.81
(1,938)	1:A:125:VAL:H	1:A:125:VAL:HG11	15	0.81
(1,938)	1:A:125:VAL:H	1:A:125:VAL:HG12	15	0.81
(1,938)	1:A:125:VAL:H	1:A:125:VAL:HG13	15	0.81



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,570)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:120:ILE:HD11	14	0.81
(1,570)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:120:ILE:HD12	14	0.81
(1,570)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:120:ILE:HD13	14	0.81
(1,498)	1:A:27:VAL:HG11	1:A:28:TYR:HD1	13	0.81
(1,498)	1:A:27:VAL:HG12	1:A:28:TYR:HD1	13	0.81
(1,498)	1:A:27:VAL:HG13	1:A:28:TYR:HD1	13	0.81
(1,186)	1:A:158:TYR:HD1	1:A:159:ARG:H	18	0.81
(1,933)	1:A:122:GLY:H	1:A:125:VAL:HG11	17	0.8
(1,933)	1:A:122:GLY:H	1:A:125:VAL:HG12	17	0.8
(1,933)	1:A:122:GLY:H	1:A:125:VAL:HG13	17	0.8
(1,920)	1:A:28:TYR:HB2	1:A:171:LEU:H	8	0.8
(1,918)	1:A:18:PHE:HE1	1:A:73:ASN:HD21	2	0.8
(1,599)	1:A:91:TYR:HD1	1:A:153:VAL:HG11	9	0.8
(1,599)	1:A:91:TYR:HD1	1:A:153:VAL:HG12	9	0.8
(1,599)	1:A:91:TYR:HD1	1:A:153:VAL:HG13	9	0.8
(1,570)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:120:ILE:HD11	17	0.8
(1,570)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:120:ILE:HD12	17	0.8
(1,570)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:120:ILE:HD13	17	0.8
(1,502)	1:A:91:TYR:HE1	1:A:153:VAL:HG21	16	0.8
(1,502)	1:A:91:TYR:HE1	1:A:153:VAL:HG22	16	0.8
(1,502)	1:A:91:TYR:HE1	1:A:153:VAL:HG23	16	0.8
(1,916)	1:A:13:LEU:HD11	1:A:176:ILE:HD11	6	0.79
(1,916)	1:A:13:LEU:HD11	1:A:176:ILE:HD12	6	0.79
(1,916)	1:A:13:LEU:HD11	1:A:176:ILE:HD13	6	0.79
(1,916)	1:A:13:LEU:HD12	1:A:176:ILE:HD11	6	0.79
(1,916)	1:A:13:LEU:HD12	1:A:176:ILE:HD12	6	0.79
(1,916)	1:A:13:LEU:HD12	1:A:176:ILE:HD13	6	0.79
(1,916)	1:A:13:LEU:HD13	1:A:176:ILE:HD11	6	0.79
(1,916)	1:A:13:LEU:HD13	1:A:176:ILE:HD12	6	0.79
(1,916)	1:A:13:LEU:HD13	1:A:176:ILE:HD13	6	0.79
(1,920)	1:A:28:TYR:HB2	1:A:171:LEU:H	19	0.78
(1,572)	1:A:100:ILE:HD11	1:A:116:PHE:HE1	8	0.78
(1,572)	1:A:100:ILE:HD12	1:A:116:PHE:HE1	8	0.78
(1,572)	1:A:100:ILE:HD13	1:A:116:PHE:HE1	8	0.78
(1,525)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG11	6	0.78
(1,525)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG12	6	0.78
(1,525)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG13	6	0.78
(1,186)	1:A:158:TYR:HD1	1:A:159:ARG:H	11	0.78
(1,938)	1:A:125:VAL:H	1:A:125:VAL:HG11	10	0.77
(1,938)	1:A:125:VAL:H	1:A:125:VAL:HG12	10	0.77
(1,938)	1:A:125:VAL:H	1:A:125:VAL:HG13	10	0.77
(1,919)	1:A:18:PHE:HZ	1:A:73:ASN:HD21	7	0.77
	<u> </u>	<u> </u>		d on mort mage



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,910)	1:A:4:TYR:HB2	1:A:14:SER:H	6	0.77
(1,58)	1:A:8:PHE:H	1:A:8:PHE:HE1	2	0.77
(1,509)	1:A:71:VAL:HG11	1:A:139:PHE:HE1	1	0.77
(1,509)	1:A:71:VAL:HG12	1:A:139:PHE:HE1	1	0.77
(1,509)	1:A:71:VAL:HG13	1:A:139:PHE:HE1	1	0.77
(1,509)	1:A:71:VAL:HG11	1:A:139:PHE:HE1	11	0.77
(1,509)	1:A:71:VAL:HG12	1:A:139:PHE:HE1	11	0.77
(1,509)	1:A:71:VAL:HG13	1:A:139:PHE:HE1	11	0.77
(1,498)	1:A:27:VAL:HG11	1:A:28:TYR:HD1	8	0.77
(1,498)	1:A:27:VAL:HG12	1:A:28:TYR:HD1	8	0.77
(1,498)	1:A:27:VAL:HG13	1:A:28:TYR:HD1	8	0.77
(1,40)	1:A:158:TYR:H	1:A:158:TYR:HD1	2	0.77
(1,498)	1:A:27:VAL:HG11	1:A:28:TYR:HD1	5	0.76
(1,498)	1:A:27:VAL:HG12	1:A:28:TYR:HD1	5	0.76
(1,498)	1:A:27:VAL:HG13	1:A:28:TYR:HD1	5	0.76
(1,498)	1:A:27:VAL:HG11	1:A:28:TYR:HD1	16	0.76
(1,498)	1:A:27:VAL:HG12	1:A:28:TYR:HD1	16	0.76
(1,498)	1:A:27:VAL:HG13	1:A:28:TYR:HD1	16	0.76
(1,498)	1:A:27:VAL:HG11	1:A:28:TYR:HD1	19	0.76
(1,498)	1:A:27:VAL:HG12	1:A:28:TYR:HD1	19	0.76
(1,498)	1:A:27:VAL:HG13	1:A:28:TYR:HD1	19	0.76
(1,218)	1:A:4:TYR:HD1	1:A:5:LYS:H	7	0.76
(1,178)	1:A:91:TYR:HD1	1:A:153:VAL:H	20	0.76
(1,165)	1:A:8:PHE:HE1	1:A:152:GLN:H	13	0.76
(1,937)	1:A:124:VAL:HG21	1:A:125:VAL:HG11	11	0.75
(1,937)	1:A:124:VAL:HG21	1:A:125:VAL:HG12	11	0.75
(1,937)	1:A:124:VAL:HG21	1:A:125:VAL:HG13	11	0.75
(1,937)	1:A:124:VAL:HG22	1:A:125:VAL:HG11	11	0.75
(1,937)	1:A:124:VAL:HG22	1:A:125:VAL:HG12	11	0.75
(1,937)	1:A:124:VAL:HG22	1:A:125:VAL:HG13	11	0.75
(1,937)	1:A:124:VAL:HG23	1:A:125:VAL:HG11	11	0.75
(1,937)	1:A:124:VAL:HG23	1:A:125:VAL:HG12	11	0.75
(1,937)	1:A:124:VAL:HG23	1:A:125:VAL:HG13	11	0.75
(1,937)	1:A:124:VAL:HG21	1:A:125:VAL:HG11	17	0.75
(1,937)	1:A:124:VAL:HG21	1:A:125:VAL:HG12	17	0.75
(1,937)	1:A:124:VAL:HG21	1:A:125:VAL:HG13	17	0.75
(1,937)	1:A:124:VAL:HG22	1:A:125:VAL:HG11	17	0.75
(1,937)	1:A:124:VAL:HG22	1:A:125:VAL:HG12	17	0.75
(1,937)	1:A:124:VAL:HG22	1:A:125:VAL:HG13	17	0.75
(1,937)	1:A:124:VAL:HG23	1:A:125:VAL:HG11	17	0.75
(1,937)	1:A:124:VAL:HG23	1:A:125:VAL:HG12	17	0.75
(1,937)	1:A:124:VAL:HG23	1:A:125:VAL:HG13	17	0.75



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,559)	1:A:92:ILE:HD11	1:A:95:PHE:HE1	17	0.75
(1,559)	1:A:92:ILE:HD12	1:A:95:PHE:HE1	17	0.75
(1,559)	1:A:92:ILE:HD13	1:A:95:PHE:HE1	17	0.75
(1,186)	1:A:158:TYR:HD1	1:A:159:ARG:H	10	0.75
(1,920)	1:A:28:TYR:HB2	1:A:171:LEU:H	16	0.74
(1,601)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:171:LEU:HD11	14	0.74
(1,601)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:171:LEU:HD12	14	0.74
(1,601)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:171:LEU:HD13	14	0.74
(1,599)	1:A:91:TYR:HD1	1:A:153:VAL:HG11	1	0.74
(1,599)	1:A:91:TYR:HD1	1:A:153:VAL:HG12	1	0.74
(1,599)	1:A:91:TYR:HD1	1:A:153:VAL:HG13	1	0.74
(1,509)	1:A:71:VAL:HG11	1:A:139:PHE:HE1	15	0.73
(1,509)	1:A:71:VAL:HG12	1:A:139:PHE:HE1	15	0.73
(1,509)	1:A:71:VAL:HG13	1:A:139:PHE:HE1	15	0.73
(1,44)	1:A:82:TYR:H	1:A:82:TYR:HE1	11	0.73
(1,922)	1:A:30:PHE:HB2	1:A:70:ILE:HD11	19	0.72
(1,922)	1:A:30:PHE:HB2	1:A:70:ILE:HD12	19	0.72
(1,922)	1:A:30:PHE:HB2	1:A:70:ILE:HD13	19	0.72
(1,44)	1:A:82:TYR:H	1:A:82:TYR:HE1	8	0.72
(1,601)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:171:LEU:HD11	6	0.71
(1,601)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:171:LEU:HD12	6	0.71
(1,601)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:171:LEU:HD13	6	0.71
(1,570)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:120:ILE:HD11	15	0.71
(1,570)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:120:ILE:HD12	15	0.71
(1,570)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:120:ILE:HD13	15	0.71
(1,559)	1:A:92:ILE:HD11	1:A:95:PHE:HE1	9	0.71
(1,559)	1:A:92:ILE:HD12	1:A:95:PHE:HE1	9	0.71
(1,559)	1:A:92:ILE:HD13	1:A:95:PHE:HE1	9	0.71
(1,538)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:99:VAL:HG21	1	0.71
(1,538)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:99:VAL:HG22	1	0.71
(1,538)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:99:VAL:HG23	1	0.71
(1,509)	1:A:71:VAL:HG11	1:A:139:PHE:HE1	8	0.71
(1,509)	1:A:71:VAL:HG12	1:A:139:PHE:HE1	8	0.71
(1,509)	1:A:71:VAL:HG13	1:A:139:PHE:HE1	8	0.71
(1,492)	1:A:7:ILE:HD11	1:A:8:PHE:HE1	2	0.71
(1,492)	1:A:7:ILE:HD12	1:A:8:PHE:HE1	2	0.71
(1,492)	1:A:7:ILE:HD13	1:A:8:PHE:HE1	2	0.71
(1,1010)	1:A:18:PHE:HE1	1:A:73:ASN:HD22	18	0.71
(1,912)	1:A:13:LEU:H	1:A:13:LEU:HD11	16	0.7
(1,912)	1:A:13:LEU:H	1:A:13:LEU:HD12	16	0.7
(1,912)	1:A:13:LEU:H	1:A:13:LEU:HD13	16	0.7
(1,570)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:120:ILE:HD11	18	0.7



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,570)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:120:ILE:HD12	18	0.7
(1,570)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:120:ILE:HD13	18	0.7
(1,509)	1:A:71:VAL:HG11	1:A:139:PHE:HE1	2	0.7
(1,509)	1:A:71:VAL:HG12	1:A:139:PHE:HE1	2	0.7
(1,509)	1:A:71:VAL:HG13	1:A:139:PHE:HE1	2	0.7
(1,509)	1:A:71:VAL:HG11	1:A:139:PHE:HE1	18	0.7
(1,509)	1:A:71:VAL:HG12	1:A:139:PHE:HE1	18	0.7
(1,509)	1:A:71:VAL:HG13	1:A:139:PHE:HE1	18	0.7
(1,502)	1:A:91:TYR:HE1	1:A:153:VAL:HG21	20	0.7
(1,502)	1:A:91:TYR:HE1	1:A:153:VAL:HG22	20	0.7
(1,502)	1:A:91:TYR:HE1	1:A:153:VAL:HG23	20	0.7
(1,934)	1:A:123:TRP:H	1:A:125:VAL:HG11	11	0.69
(1,934)	1:A:123:TRP:H	1:A:125:VAL:HG12	11	0.69
(1,934)	1:A:123:TRP:H	1:A:125:VAL:HG13	11	0.69
(1,509)	1:A:71:VAL:HG11	1:A:139:PHE:HE1	19	0.69
(1,509)	1:A:71:VAL:HG12	1:A:139:PHE:HE1	19	0.69
(1,509)	1:A:71:VAL:HG13	1:A:139:PHE:HE1	19	0.69
(1,484)	1:A:116:PHE:HE1	1:A:175:ALA:H	17	0.69
(1,58)	1:A:8:PHE:H	1:A:8:PHE:HE1	3	0.68
(1,498)	1:A:27:VAL:HG11	1:A:28:TYR:HD1	18	0.68
(1,498)	1:A:27:VAL:HG12	1:A:28:TYR:HD1	18	0.68
(1,498)	1:A:27:VAL:HG13	1:A:28:TYR:HD1	18	0.68
(1,44)	1:A:82:TYR:H	1:A:82:TYR:HE1	19	0.68
(1,953)	1:A:166:VAL:H	1:A:166:VAL:HG11	16	0.67
(1,953)	1:A:166:VAL:H	1:A:166:VAL:HG12	16	0.67
(1,953)	1:A:166:VAL:H	1:A:166:VAL:HG13	16	0.67
(1,923)	1:A:30:PHE:HB2	1:A:169:LEU:H	17	0.67
(1,475)	1:A:23:VAL:H	1:A:28:TYR:HD1	12	0.67
(1,109)	1:A:15:SER:H	1:A:18:PHE:HE1	12	0.67
(1,940)	1:A:125:VAL:HG11	1:A:128:LEU:HD11	5	0.66
(1,940)	1:A:125:VAL:HG11	1:A:128:LEU:HD12	5	0.66
(1,940)	1:A:125:VAL:HG11	1:A:128:LEU:HD13	5	0.66
(1,940)	1:A:125:VAL:HG12	1:A:128:LEU:HD11	5	0.66
(1,940)	1:A:125:VAL:HG12	1:A:128:LEU:HD12	5	0.66
(1,940)	1:A:125:VAL:HG12	1:A:128:LEU:HD13	5	0.66
(1,940)	1:A:125:VAL:HG13	1:A:128:LEU:HD11	5	0.66
(1,940)	1:A:125:VAL:HG13	1:A:128:LEU:HD12	5	0.66
(1,940)	1:A:125:VAL:HG13	1:A:128:LEU:HD13	5	0.66
(1,927)	1:A:105:LYS:H	1:A:106:ASN:HD21	20	0.66
(1,4)	1:A:28:TYR:H	1:A:28:TYR:HD1	14	0.66
(1,109)	1:A:15:SER:H	1:A:18:PHE:HE1	3	0.66
(1,923)	1:A:30:PHE:HB2	1:A:169:LEU:H	4	0.65



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,923)	1:A:30:PHE:HB2	1:A:169:LEU:H	8	0.65
(1,916)	1:A:13:LEU:HD11	1:A:176:ILE:HD11	4	0.65
(1,916)	1:A:13:LEU:HD11	1:A:176:ILE:HD12	4	0.65
(1,916)	1:A:13:LEU:HD11	1:A:176:ILE:HD13	4	0.65
(1,916)	1:A:13:LEU:HD12	1:A:176:ILE:HD11	4	0.65
(1,916)	1:A:13:LEU:HD12	1:A:176:ILE:HD12	4	0.65
(1,916)	1:A:13:LEU:HD12	1:A:176:ILE:HD13	4	0.65
(1,916)	1:A:13:LEU:HD13	1:A:176:ILE:HD11	4	0.65
(1,916)	1:A:13:LEU:HD13	1:A:176:ILE:HD12	4	0.65
(1,916)	1:A:13:LEU:HD13	1:A:176:ILE:HD13	4	0.65
(1,599)	1:A:91:TYR:HD1	1:A:153:VAL:HG11	18	0.65
(1,599)	1:A:91:TYR:HD1	1:A:153:VAL:HG12	18	0.65
(1,599)	1:A:91:TYR:HD1	1:A:153:VAL:HG13	18	0.65
(1,559)	1:A:92:ILE:HD11	1:A:95:PHE:HE1	6	0.65
(1,559)	1:A:92:ILE:HD12	1:A:95:PHE:HE1	6	0.65
(1,559)	1:A:92:ILE:HD13	1:A:95:PHE:HE1	6	0.65
(1,538)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:99:VAL:HG21	6	0.65
(1,538)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:99:VAL:HG22	6	0.65
(1,538)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:99:VAL:HG23	6	0.65
(1,498)	1:A:27:VAL:HG11	1:A:28:TYR:HD1	3	0.65
(1,498)	1:A:27:VAL:HG12	1:A:28:TYR:HD1	3	0.65
(1,498)	1:A:27:VAL:HG13	1:A:28:TYR:HD1	3	0.65
(1,218)	1:A:4:TYR:HD1	1:A:5:LYS:H	10	0.65
(1,538)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:99:VAL:HG21	2	0.64
(1,538)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:99:VAL:HG22	2	0.64
(1,538)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:99:VAL:HG23	2	0.64
(1,498)	1:A:27:VAL:HG11	1:A:28:TYR:HD1	14	0.64
(1,498)	1:A:27:VAL:HG12	1:A:28:TYR:HD1	14	0.64
(1,498)	1:A:27:VAL:HG13	1:A:28:TYR:HD1	14	0.64
(1,923)	1:A:30:PHE:HB2	1:A:169:LEU:H	14	0.63
(1,218)	1:A:4:TYR:HD1	1:A:5:LYS:H	1	0.63
(1,937)	1:A:124:VAL:HG21	1:A:125:VAL:HG11	1	0.62
(1,937)	1:A:124:VAL:HG21	1:A:125:VAL:HG12	1	0.62
(1,937)	1:A:124:VAL:HG21	1:A:125:VAL:HG13	1	0.62
(1,937)	1:A:124:VAL:HG22	1:A:125:VAL:HG11	1	0.62
(1,937)	1:A:124:VAL:HG22	1:A:125:VAL:HG12	1	0.62
(1,937)	1:A:124:VAL:HG22	1:A:125:VAL:HG13	1	0.62
(1,937)	1:A:124:VAL:HG23	1:A:125:VAL:HG11	1	0.62
(1,937)	1:A:124:VAL:HG23	1:A:125:VAL:HG12	1	0.62
(1,937)	1:A:124:VAL:HG23	1:A:125:VAL:HG13	1	0.62
(1,923)	1:A:30:PHE:HB2	1:A:169:LEU:H	9	0.62
(1,922)	1:A:30:PHE:HB2	1:A:70:ILE:HD11	11	0.62



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,922)	1:A:30:PHE:HB2	1:A:70:ILE:HD12	11	0.62
(1,922)	1:A:30:PHE:HB2	1:A:70:ILE:HD13	11	0.62
(1,914)	1:A:13:LEU:HD11	1:A:169:LEU:HD21	6	0.62
(1,914)	1:A:13:LEU:HD11	1:A:169:LEU:HD22	6	0.62
(1,914)	1:A:13:LEU:HD11	1:A:169:LEU:HD23	6	0.62
(1,914)	1:A:13:LEU:HD12	1:A:169:LEU:HD21	6	0.62
(1,914)	1:A:13:LEU:HD12	1:A:169:LEU:HD22	6	0.62
(1,914)	1:A:13:LEU:HD12	1:A:169:LEU:HD23	6	0.62
(1,914)	1:A:13:LEU:HD13	1:A:169:LEU:HD21	6	0.62
(1,914)	1:A:13:LEU:HD13	1:A:169:LEU:HD22	6	0.62
(1,914)	1:A:13:LEU:HD13	1:A:169:LEU:HD23	6	0.62
(1,599)	1:A:91:TYR:HD1	1:A:153:VAL:HG11	11	0.62
(1,599)	1:A:91:TYR:HD1	1:A:153:VAL:HG12	11	0.62
(1,599)	1:A:91:TYR:HD1	1:A:153:VAL:HG13	11	0.62
(1,502)	1:A:91:TYR:HE1	1:A:153:VAL:HG21	6	0.62
(1,502)	1:A:91:TYR:HE1	1:A:153:VAL:HG22	6	0.62
(1,502)	1:A:91:TYR:HE1	1:A:153:VAL:HG23	6	0.62
(1,44)	1:A:82:TYR:H	1:A:82:TYR:HE1	4	0.62
(1,218)	1:A:4:TYR:HD1	1:A:5:LYS:H	16	0.62
(1,165)	1:A:8:PHE:HE1	1:A:152:GLN:H	10	0.62
(1,952)	1:A:161:VAL:HG11	1:A:166:VAL:HG11	16	0.61
(1,952)	1:A:161:VAL:HG11	1:A:166:VAL:HG12	16	0.61
(1,952)	1:A:161:VAL:HG11	1:A:166:VAL:HG13	16	0.61
(1,952)	1:A:161:VAL:HG12	1:A:166:VAL:HG11	16	0.61
(1,952)	1:A:161:VAL:HG12	1:A:166:VAL:HG12	16	0.61
(1,952)	1:A:161:VAL:HG12	1:A:166:VAL:HG13	16	0.61
(1,952)	1:A:161:VAL:HG13	1:A:166:VAL:HG11	16	0.61
(1,952)	1:A:161:VAL:HG13	1:A:166:VAL:HG12	16	0.61
(1,952)	1:A:161:VAL:HG13	1:A:166:VAL:HG13	16	0.61
(1,940)	1:A:125:VAL:HG11	1:A:128:LEU:HD11	17	0.61
(1,940)	1:A:125:VAL:HG11	1:A:128:LEU:HD12	17	0.61
(1,940)	1:A:125:VAL:HG11	1:A:128:LEU:HD13	17	0.61
(1,940)	1:A:125:VAL:HG12	1:A:128:LEU:HD11	17	0.61
(1,940)	1:A:125:VAL:HG12	1:A:128:LEU:HD12	17	0.61
(1,940)	1:A:125:VAL:HG12	1:A:128:LEU:HD13	17	0.61
(1,940)	1:A:125:VAL:HG13	1:A:128:LEU:HD11	17	0.61
(1,940)	1:A:125:VAL:HG13	1:A:128:LEU:HD12	17	0.61
(1,940)	1:A:125:VAL:HG13	1:A:128:LEU:HD13	17	0.61
(1,923)	1:A:30:PHE:HB2	1:A:169:LEU:H	7	0.61
(1,41)	1:A:158:TYR:H	1:A:158:TYR:HE1	17	0.61
(1,601)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:171:LEU:HD11	7	0.6
(1,601)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:171:LEU:HD12	7	0.6



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,601)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:171:LEU:HD13	7	0.6
(1,537)	1:A:99:VAL:HG21	1:A:116:PHE:HE1	1	0.6
(1,537)	1:A:99:VAL:HG22	1:A:116:PHE:HE1	1	0.6
(1,537)	1:A:99:VAL:HG23	1:A:116:PHE:HE1	1	0.6
(1,40)	1:A:158:TYR:H	1:A:158:TYR:HD1	17	0.6
(1,186)	1:A:158:TYR:HD1	1:A:159:ARG:H	8	0.6
(1,927)	1:A:105:LYS:H	1:A:106:ASN:HD21	9	0.59
(1,559)	1:A:92:ILE:HD11	1:A:95:PHE:HE1	13	0.59
(1,559)	1:A:92:ILE:HD12	1:A:95:PHE:HE1	13	0.59
(1,559)	1:A:92:ILE:HD13	1:A:95:PHE:HE1	13	0.59
(1,538)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:99:VAL:HG21	18	0.59
(1,538)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:99:VAL:HG22	18	0.59
(1,538)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:99:VAL:HG23	18	0.59
(1,502)	1:A:91:TYR:HE1	1:A:153:VAL:HG21	1	0.59
(1,502)	1:A:91:TYR:HE1	1:A:153:VAL:HG22	1	0.59
(1,502)	1:A:91:TYR:HE1	1:A:153:VAL:HG23	1	0.59
(1,218)	1:A:4:TYR:HD1	1:A:5:LYS:H	18	0.59
(1,165)	1:A:8:PHE:HE1	1:A:152:GLN:H	16	0.59
(1,942)	1:A:135:ASN:HD21	1:A:136:LEU:H	8	0.58
(1,570)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:120:ILE:HD11	6	0.58
(1,570)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:120:ILE:HD12	6	0.58
(1,570)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:120:ILE:HD13	6	0.58
(1,934)	1:A:123:TRP:H	1:A:125:VAL:HG11	17	0.57
(1,934)	1:A:123:TRP:H	1:A:125:VAL:HG12	17	0.57
(1,934)	1:A:123:TRP:H	1:A:125:VAL:HG13	17	0.57
(1,923)	1:A:30:PHE:HB2	1:A:169:LEU:H	1	0.57
(1,570)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:120:ILE:HD11	3	0.57
(1,570)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:120:ILE:HD12	3	0.57
(1,570)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:120:ILE:HD13	3	0.57
(1,509)	1:A:71:VAL:HG11	1:A:139:PHE:HE1	17	0.57
(1,509)	1:A:71:VAL:HG12	1:A:139:PHE:HE1	17	0.57
(1,509)	1:A:71:VAL:HG13	1:A:139:PHE:HE1	17	0.57
(1,4)	1:A:28:TYR:H	1:A:28:TYR:HD1	19	0.57
(1,186)	1:A:158:TYR:HD1	1:A:159:ARG:H	16	0.57
(1,951)	1:A:161:VAL:H	1:A:166:VAL:HG11	6	0.56
(1,951)	1:A:161:VAL:H	1:A:166:VAL:HG12	6	0.56
(1,951)	1:A:161:VAL:H	1:A:166:VAL:HG13	6	0.56
(1,937)	1:A:124:VAL:HG21	1:A:125:VAL:HG11	3	0.56
(1,937)	1:A:124:VAL:HG21	1:A:125:VAL:HG12	3	0.56
(1,937)	1:A:124:VAL:HG21	1:A:125:VAL:HG13	3	0.56
(1,937)	1:A:124:VAL:HG22	1:A:125:VAL:HG11	3	0.56



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,937)	1:A:124:VAL:HG22	1:A:125:VAL:HG13	3	0.56
(1,937)	1:A:124:VAL:HG23	1:A:125:VAL:HG11	3	0.56
(1,937)	1:A:124:VAL:HG23	1:A:125:VAL:HG12	3	0.56
(1,937)	1:A:124:VAL:HG23	1:A:125:VAL:HG13	3	0.56
(1,937)	1:A:124:VAL:HG21	1:A:125:VAL:HG11	15	0.56
(1,937)	1:A:124:VAL:HG21	1:A:125:VAL:HG12	15	0.56
(1,937)	1:A:124:VAL:HG21	1:A:125:VAL:HG13	15	0.56
(1,937)	1:A:124:VAL:HG22	1:A:125:VAL:HG11	15	0.56
(1,937)	1:A:124:VAL:HG22	1:A:125:VAL:HG12	15	0.56
(1,937)	1:A:124:VAL:HG22	1:A:125:VAL:HG13	15	0.56
(1,937)	1:A:124:VAL:HG23	1:A:125:VAL:HG11	15	0.56
(1,937)	1:A:124:VAL:HG23	1:A:125:VAL:HG12	15	0.56
(1,937)	1:A:124:VAL:HG23	1:A:125:VAL:HG13	15	0.56
(1,916)	1:A:13:LEU:HD11	1:A:176:ILE:HD11	19	0.56
(1,916)	1:A:13:LEU:HD11	1:A:176:ILE:HD12	19	0.56
(1,916)	1:A:13:LEU:HD11	1:A:176:ILE:HD13	19	0.56
(1,916)	1:A:13:LEU:HD12	1:A:176:ILE:HD11	19	0.56
(1,916)	1:A:13:LEU:HD12	1:A:176:ILE:HD12	19	0.56
(1,916)	1:A:13:LEU:HD12	1:A:176:ILE:HD13	19	0.56
(1,916)	1:A:13:LEU:HD13	1:A:176:ILE:HD11	19	0.56
(1,916)	1:A:13:LEU:HD13	1:A:176:ILE:HD12	19	0.56
(1,916)	1:A:13:LEU:HD13	1:A:176:ILE:HD13	19	0.56
(1,566)	1:A:68:ILE:HD11	1:A:139:PHE:HE1	12	0.56
(1,566)	1:A:68:ILE:HD12	1:A:139:PHE:HE1	12	0.56
(1,566)	1:A:68:ILE:HD13	1:A:139:PHE:HE1	12	0.56
(1,178)	1:A:91:TYR:HD1	1:A:153:VAL:H	6	0.56
(1,942)	1:A:135:ASN:HD21	1:A:136:LEU:H	12	0.55
(1,942)	1:A:135:ASN:HD21	1:A:136:LEU:H	14	0.55
(1,927)	1:A:105:LYS:H	1:A:106:ASN:HD21	4	0.55
(1,927)	1:A:105:LYS:H	1:A:106:ASN:HD21	13	0.55
(1,927)	1:A:105:LYS:H	1:A:106:ASN:HD21	19	0.55
(1,910)	1:A:4:TYR:HB2	1:A:14:SER:H	8	0.55
(1,570)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:120:ILE:HD11	8	0.55
(1,570)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:120:ILE:HD12	8	0.55
(1,570)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:120:ILE:HD13	8	0.55
(1,562)	1:A:4:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD11	16	0.55
(1,562)	1:A:4:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD12	16	0.55
(1,562)	1:A:4:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD13	16	0.55
(1,449)	1:A:4:TYR:HD1	1:A:15:SER:H	12	0.55
(1,4)	1:A:28:TYR:H	1:A:28:TYR:HD1	16	0.55
(1,920)	1:A:28:TYR:HB2	1:A:171:LEU:H	18	0.54
(1,443)	1:A:91:TYR:H	1:A:91:TYR:HE1	7	0.54



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,4)	1:A:28:TYR:H	1:A:28:TYR:HD1	7	0.54
(1,927)	1:A:105:LYS:H	1:A:106:ASN:HD21	1	0.53
(1,502)	1:A:91:TYR:HE1	1:A:153:VAL:HG21	17	0.53
(1,502)	1:A:91:TYR:HE1	1:A:153:VAL:HG22	17	0.53
(1,502)	1:A:91:TYR:HE1	1:A:153:VAL:HG23	17	0.53
(1,498)	1:A:27:VAL:HG11	1:A:28:TYR:HD1	17	0.53
(1,498)	1:A:27:VAL:HG12	1:A:28:TYR:HD1	17	0.53
(1,498)	1:A:27:VAL:HG13	1:A:28:TYR:HD1	17	0.53
(1,4)	1:A:28:TYR:H	1:A:28:TYR:HD1	4	0.53
(1,218)	1:A:4:TYR:HD1	1:A:5:LYS:H	8	0.53
(1,218)	1:A:4:TYR:HD1	1:A:5:LYS:H	17	0.53
(1,186)	1:A:158:TYR:HD1	1:A:159:ARG:H	13	0.53
(1,932)	1:A:121:GLN:HE21	1:A:125:VAL:HG11	1	0.52
(1,932)	1:A:121:GLN:HE21	1:A:125:VAL:HG12	1	0.52
(1,932)	1:A:121:GLN:HE21	1:A:125:VAL:HG13	1	0.52
(1,932)	1:A:121:GLN:HE22	1:A:125:VAL:HG11	1	0.52
(1,932)	1:A:121:GLN:HE22	1:A:125:VAL:HG12	1	0.52
(1,932)	1:A:121:GLN:HE22	1:A:125:VAL:HG13	1	0.52
(1,920)	1:A:28:TYR:HB2	1:A:171:LEU:H	13	0.52
(1,920)	1:A:28:TYR:HB2	1:A:171:LEU:H	15	0.52
(1,538)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:99:VAL:HG21	13	0.52
(1,538)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:99:VAL:HG22	13	0.52
(1,538)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:99:VAL:HG23	13	0.52
(1,4)	1:A:28:TYR:H	1:A:28:TYR:HD1	18	0.52
(1,920)	1:A:28:TYR:HB2	1:A:171:LEU:H	3	0.51
(1,58)	1:A:8:PHE:H	1:A:8:PHE:HE1	1	0.51
(1,443)	1:A:91:TYR:H	1:A:91:TYR:HE1	15	0.51
(1,44)	1:A:82:TYR:H	1:A:82:TYR:HE1	17	0.51
(1,4)	1:A:28:TYR:H	1:A:28:TYR:HD1	8	0.51
(1,4)	1:A:28:TYR:H	1:A:28:TYR:HD1	13	0.51
(1,1009)	1:A:4:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD11	16	0.51
(1,1009)	1:A:4:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD12	16	0.51
(1,1009)	1:A:4:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD13	16	0.51
(1,922)	1:A:30:PHE:HB2	1:A:70:ILE:HD11	14	0.5
(1,922)	1:A:30:PHE:HB2	1:A:70:ILE:HD12	14	0.5
(1,922)	1:A:30:PHE:HB2	1:A:70:ILE:HD13	14	0.5
(1,920)	1:A:28:TYR:HB2	1:A:171:LEU:H	7	0.5
(1,932)	1:A:121:GLN:HE21	1:A:125:VAL:HG11	3	0.49
(1,932)	1:A:121:GLN:HE21	1:A:125:VAL:HG12	3	0.49
(1,932)	1:A:121:GLN:HE21	1:A:125:VAL:HG13	3	0.49
(1,932)	1:A:121:GLN:HE22	1:A:125:VAL:HG11	3	0.49
(1,932)	1:A:121:GLN:HE22	1:A:125:VAL:HG12	3	0.49



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,932)	1:A:121:GLN:HE22	1:A:125:VAL:HG13	3	0.49
(1,923)	1:A:30:PHE:HB2	1:A:169:LEU:H	19	0.49
(1,509)	1:A:71:VAL:HG11	1:A:139:PHE:HE1	9	0.49
(1,509)	1:A:71:VAL:HG12	1:A:139:PHE:HE1	9	0.49
(1,509)	1:A:71:VAL:HG13	1:A:139:PHE:HE1	9	0.49
(1,165)	1:A:8:PHE:HE1	1:A:152:GLN:H	18	0.49
(1,937)	1:A:124:VAL:HG21	1:A:125:VAL:HG11	10	0.48
(1,937)	1:A:124:VAL:HG21	1:A:125:VAL:HG12	10	0.48
(1,937)	1:A:124:VAL:HG21	1:A:125:VAL:HG13	10	0.48
(1,937)	1:A:124:VAL:HG22	1:A:125:VAL:HG11	10	0.48
(1,937)	1:A:124:VAL:HG22	1:A:125:VAL:HG12	10	0.48
(1,937)	1:A:124:VAL:HG22	1:A:125:VAL:HG13	10	0.48
(1,937)	1:A:124:VAL:HG23	1:A:125:VAL:HG11	10	0.48
(1,937)	1:A:124:VAL:HG23	1:A:125:VAL:HG12	10	0.48
(1,937)	1:A:124:VAL:HG23	1:A:125:VAL:HG13	10	0.48
(1,910)	1:A:4:TYR:HB2	1:A:14:SER:H	19	0.48
(1,502)	1:A:91:TYR:HE1	1:A:153:VAL:HG21	13	0.48
(1,502)	1:A:91:TYR:HE1	1:A:153:VAL:HG22	13	0.48
(1,502)	1:A:91:TYR:HE1	1:A:153:VAL:HG23	13	0.48
(1,498)	1:A:27:VAL:HG11	1:A:28:TYR:HD1	7	0.48
(1,498)	1:A:27:VAL:HG12	1:A:28:TYR:HD1	7	0.48
(1,498)	1:A:27:VAL:HG13	1:A:28:TYR:HD1	7	0.48
(1,4)	1:A:28:TYR:H	1:A:28:TYR:HD1	2	0.48
(1,4)	1:A:28:TYR:H	1:A:28:TYR:HD1	10	0.48
(1,942)	1:A:135:ASN:HD21	1:A:136:LEU:H	11	0.47
(1,940)	1:A:125:VAL:HG11	1:A:128:LEU:HD11	1	0.47
(1,940)	1:A:125:VAL:HG11	1:A:128:LEU:HD12	1	0.47
(1,940)	1:A:125:VAL:HG11	1:A:128:LEU:HD13	1	0.47
(1,940)	1:A:125:VAL:HG12	1:A:128:LEU:HD11	1	0.47
(1,940)	1:A:125:VAL:HG12	1:A:128:LEU:HD12	1	0.47
(1,940)	1:A:125:VAL:HG12	1:A:128:LEU:HD13	1	0.47
(1,940)	1:A:125:VAL:HG13	1:A:128:LEU:HD11	1	0.47
(1,940)	1:A:125:VAL:HG13	1:A:128:LEU:HD12	1	0.47
(1,940)	1:A:125:VAL:HG13	1:A:128:LEU:HD13	1	0.47
(1,940)	1:A:125:VAL:HG11	1:A:128:LEU:HD11	11	0.47
(1,940)	1:A:125:VAL:HG11	1:A:128:LEU:HD12	11	0.47
(1,940)	1:A:125:VAL:HG11	1:A:128:LEU:HD13	11	0.47
(1,940)	1:A:125:VAL:HG12	1:A:128:LEU:HD11	11	0.47
(1,940)	1:A:125:VAL:HG12	1:A:128:LEU:HD12	11	0.47
(1,940)	1:A:125:VAL:HG12	1:A:128:LEU:HD13	11	0.47
(1,940)	1:A:125:VAL:HG13	1:A:128:LEU:HD11	11	0.47
(1,940)	1:A:125:VAL:HG13	1:A:128:LEU:HD12	11	0.47



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,940)	1:A:125:VAL:HG13	1:A:128:LEU:HD13	11	0.47
(1,932)	1:A:121:GLN:HE21	1:A:125:VAL:HG11	17	0.47
(1,932)	1:A:121:GLN:HE21	1:A:125:VAL:HG12	17	0.47
(1,932)	1:A:121:GLN:HE21	1:A:125:VAL:HG13	17	0.47
(1,932)	1:A:121:GLN:HE22	1:A:125:VAL:HG11	17	0.47
(1,932)	1:A:121:GLN:HE22	1:A:125:VAL:HG12	17	0.47
(1,932)	1:A:121:GLN:HE22	1:A:125:VAL:HG13	17	0.47
(1,923)	1:A:30:PHE:HB2	1:A:169:LEU:H	18	0.47
(1,58)	1:A:8:PHE:H	1:A:8:PHE:HE1	11	0.47
(1,509)	1:A:71:VAL:HG11	1:A:139:PHE:HE1	5	0.47
(1,509)	1:A:71:VAL:HG12	1:A:139:PHE:HE1	5	0.47
(1,509)	1:A:71:VAL:HG13	1:A:139:PHE:HE1	5	0.47
(1,4)	1:A:28:TYR:H	1:A:28:TYR:HD1	3	0.47
(1,4)	1:A:28:TYR:H	1:A:28:TYR:HD1	5	0.47
(1,922)	1:A:30:PHE:HB2	1:A:70:ILE:HD11	7	0.46
(1,922)	1:A:30:PHE:HB2	1:A:70:ILE:HD12	7	0.46
(1,922)	1:A:30:PHE:HB2	1:A:70:ILE:HD13	7	0.46
(1,919)	1:A:18:PHE:HZ	1:A:73:ASN:HD21	12	0.46
(1,4)	1:A:28:TYR:H	1:A:28:TYR:HD1	6	0.46
(1,165)	1:A:8:PHE:HE1	1:A:152:GLN:H	6	0.46
(1,923)	1:A:30:PHE:HB2	1:A:169:LEU:H	20	0.45
(1,498)	1:A:27:VAL:HG11	1:A:28:TYR:HD1	11	0.45
(1,498)	1:A:27:VAL:HG12	1:A:28:TYR:HD1	11	0.45
(1,498)	1:A:27:VAL:HG13	1:A:28:TYR:HD1	11	0.45
(1,942)	1:A:135:ASN:HD21	1:A:136:LEU:H	16	0.44
(1,920)	1:A:28:TYR:HB2	1:A:171:LEU:H	14	0.44
(1,918)	1:A:18:PHE:HE1	1:A:73:ASN:HD21	3	0.44
(1,599)	1:A:91:TYR:HD1	1:A:153:VAL:HG11	6	0.44
(1,599)	1:A:91:TYR:HD1	1:A:153:VAL:HG12	6	0.44
(1,599)	1:A:91:TYR:HD1	1:A:153:VAL:HG13	6	0.44
(1,509)	1:A:71:VAL:HG11	1:A:139:PHE:HE1	6	0.44
(1,509)	1:A:71:VAL:HG12	1:A:139:PHE:HE1	6	0.44
(1,509)	1:A:71:VAL:HG13	1:A:139:PHE:HE1	6	0.44
(1,951)	1:A:161:VAL:H	1:A:166:VAL:HG11	2	0.43
(1,951)	1:A:161:VAL:H	1:A:166:VAL:HG12	2	0.43
(1,951)	1:A:161:VAL:H	1:A:166:VAL:HG13	2	0.43
(1,570)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:120:ILE:HD11	7	0.43
(1,570)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:120:ILE:HD12	7	0.43
(1,570)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:120:ILE:HD13	7	0.43
(1,525)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG11	1	0.43
(1,525)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG12	1	0.43
(1,525)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:124:VAL:HG13	1	0.43



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,449)	1:A:4:TYR:HD1	1:A:15:SER:H	17	0.43
(1,40)	1:A:158:TYR:H	1:A:158:TYR:HD1	19	0.43
(1,922)	1:A:30:PHE:HB2	1:A:70:ILE:HD11	4	0.42
(1,922)	1:A:30:PHE:HB2	1:A:70:ILE:HD12	4	0.42
(1,922)	1:A:30:PHE:HB2	1:A:70:ILE:HD13	4	0.42
(1,920)	1:A:28:TYR:HB2	1:A:171:LEU:H	10	0.42
(1,58)	1:A:8:PHE:H	1:A:8:PHE:HE1	9	0.42
(1,58)	1:A:8:PHE:H	1:A:8:PHE:HE1	17	0.42
(1,929)	1:A:106:ASN:HD21	1:A:107:ASN:H	2	0.41
(1,922)	1:A:30:PHE:HB2	1:A:70:ILE:HD11	1	0.41
(1,922)	1:A:30:PHE:HB2	1:A:70:ILE:HD12	1	0.41
(1,922)	1:A:30:PHE:HB2	1:A:70:ILE:HD13	1	0.41
(1,83)	1:A:4:TYR:H	1:A:4:TYR:HD1	6	0.41
(1,562)	1:A:4:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD11	15	0.41
(1,562)	1:A:4:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD12	15	0.41
(1,562)	1:A:4:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD13	15	0.41
(1,41)	1:A:158:TYR:H	1:A:158:TYR:HE1	19	0.41
(1,186)	1:A:158:TYR:HD1	1:A:159:ARG:H	14	0.41
(1,949)	1:A:159:ARG:H	1:A:166:VAL:HG11	16	0.4
(1,949)	1:A:159:ARG:H	1:A:166:VAL:HG12	16	0.4
(1,949)	1:A:159:ARG:H	1:A:166:VAL:HG13	16	0.4
(1,942)	1:A:135:ASN:HD21	1:A:136:LEU:H	10	0.4
(1,940)	1:A:125:VAL:HG11	1:A:128:LEU:HD11	4	0.4
(1,940)	1:A:125:VAL:HG11	1:A:128:LEU:HD12	4	0.4
(1,940)	1:A:125:VAL:HG11	1:A:128:LEU:HD13	4	0.4
(1,940)	1:A:125:VAL:HG12	1:A:128:LEU:HD11	4	0.4
(1,940)	1:A:125:VAL:HG12	1:A:128:LEU:HD12	4	0.4
(1,940)	1:A:125:VAL:HG12	1:A:128:LEU:HD13	4	0.4
(1,940)	1:A:125:VAL:HG13	1:A:128:LEU:HD11	4	0.4
(1,940)	1:A:125:VAL:HG13	1:A:128:LEU:HD12	4	0.4
(1,940)	1:A:125:VAL:HG13	1:A:128:LEU:HD13	4	0.4
(1,912)	1:A:13:LEU:H	1:A:13:LEU:HD11	12	0.4
(1,912)	1:A:13:LEU:H	1:A:13:LEU:HD12	12	0.4
(1,912)	1:A:13:LEU:H	1:A:13:LEU:HD13	12	0.4
(1,83)	1:A:4:TYR:H	1:A:4:TYR:HD1	9	0.4
(1,950)	1:A:160:ASP:H	1:A:166:VAL:HG11	10	0.39
(1,950)	1:A:160:ASP:H	1:A:166:VAL:HG12	10	0.39
(1,950)	1:A:160:ASP:H	1:A:166:VAL:HG13	10	0.39
(1,912)	1:A:13:LEU:H	1:A:13:LEU:HD11	20	0.39
(1,912)	1:A:13:LEU:H	1:A:13:LEU:HD12	20	0.39
(1,912)	1:A:13:LEU:H	1:A:13:LEU:HD13	20	0.39
(1,910)	1:A:4:TYR:HB2	1:A:14:SER:H	17	0.39



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,502)	1:A:91:TYR:HE1	1:A:153:VAL:HG21	9	0.39
(1,502)	1:A:91:TYR:HE1	1:A:153:VAL:HG22	9	0.39
(1,502)	1:A:91:TYR:HE1	1:A:153:VAL:HG23	9	0.39
(1,44)	1:A:82:TYR:H	1:A:82:TYR:HE1	2	0.39
(1,165)	1:A:8:PHE:HE1	1:A:152:GLN:H	9	0.39
(1,930)	1:A:107:ASN:H	1:A:107:ASN:HD21	20	0.38
(1,912)	1:A:13:LEU:H	1:A:13:LEU:HD11	2	0.38
(1,912)	1:A:13:LEU:H	1:A:13:LEU:HD12	2	0.38
(1,912)	1:A:13:LEU:H	1:A:13:LEU:HD13	2	0.38
(1,912)	1:A:13:LEU:H	1:A:13:LEU:HD11	3	0.38
(1,912)	1:A:13:LEU:H	1:A:13:LEU:HD12	3	0.38
(1,912)	1:A:13:LEU:H	1:A:13:LEU:HD13	3	0.38
(1,58)	1:A:8:PHE:H	1:A:8:PHE:HE1	13	0.38
(1,4)	1:A:28:TYR:H	1:A:28:TYR:HD1	15	0.38
(1,186)	1:A:158:TYR:HD1	1:A:159:ARG:H	4	0.38
(1,932)	1:A:121:GLN:HE21	1:A:125:VAL:HG11	20	0.37
(1,932)	1:A:121:GLN:HE21	1:A:125:VAL:HG12	20	0.37
(1,932)	1:A:121:GLN:HE21	1:A:125:VAL:HG13	20	0.37
(1,932)	1:A:121:GLN:HE22	1:A:125:VAL:HG11	20	0.37
(1,932)	1:A:121:GLN:HE22	1:A:125:VAL:HG12	20	0.37
(1,932)	1:A:121:GLN:HE22	1:A:125:VAL:HG13	20	0.37
(1,570)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:120:ILE:HD11	2	0.37
(1,570)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:120:ILE:HD12	2	0.37
(1,570)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:120:ILE:HD13	2	0.37
(1,1009)	1:A:4:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD11	15	0.37
(1,1009)	1:A:4:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD12	15	0.37
(1,1009)	1:A:4:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD13	15	0.37
(1,537)	1:A:99:VAL:HG21	1:A:116:PHE:HE1	9	0.36
(1,537)	1:A:99:VAL:HG22	1:A:116:PHE:HE1	9	0.36
(1,537)	1:A:99:VAL:HG23	1:A:116:PHE:HE1	9	0.36
(1,951)	1:A:161:VAL:H	1:A:166:VAL:HG11	4	0.35
(1,951)	1:A:161:VAL:H	1:A:166:VAL:HG12	4	0.35
(1,951)	1:A:161:VAL:H	1:A:166:VAL:HG13	4	0.35
(1,942)	1:A:135:ASN:HD21	1:A:136:LEU:H	19	0.35
(1,941)	1:A:135:ASN:H	1:A:135:ASN:HD21	20	0.35
(1,932)	1:A:121:GLN:HE21	1:A:125:VAL:HG11	16	0.35
(1,932)	1:A:121:GLN:HE21	1:A:125:VAL:HG12	16	0.35
(1,932)	1:A:121:GLN:HE21	1:A:125:VAL:HG13	16	0.35
(1,932)	1:A:121:GLN:HE22	1:A:125:VAL:HG11	16	0.35
(1,932)	1:A:121:GLN:HE22	1:A:125:VAL:HG12	16	0.35
(1,932)	1:A:121:GLN:HE22	1:A:125:VAL:HG13	16	0.35
(1,76)	1:A:4:TYR:HD1	1:A:14:SER:H	18	0.35



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,58)	1:A:8:PHE:H	1:A:8:PHE:HE1	19	0.35
(1,443)	1:A:91:TYR:H	1:A:91:TYR:HE1	5	0.35
(1,942)	1:A:135:ASN:HD21	1:A:136:LEU:H	7	0.34
(1,939)	1:A:125:VAL:HG11	1:A:126:SER:H	12	0.34
(1,939)	1:A:125:VAL:HG12	1:A:126:SER:H	12	0.34
(1,939)	1:A:125:VAL:HG13	1:A:126:SER:H	12	0.34
(1,936)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:125:VAL:HG11	9	0.34
(1,936)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:125:VAL:HG12	9	0.34
(1,936)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:125:VAL:HG13	9	0.34
(1,936)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:125:VAL:HG11	9	0.34
(1,936)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:125:VAL:HG12	9	0.34
(1,936)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:125:VAL:HG13	9	0.34
(1,936)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:125:VAL:HG11	9	0.34
(1,936)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:125:VAL:HG12	9	0.34
(1,936)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:125:VAL:HG13	9	0.34
(1,915)	1:A:13:LEU:HD11	1:A:171:LEU:HD11	6	0.34
(1,915)	1:A:13:LEU:HD11	1:A:171:LEU:HD12	6	0.34
(1,915)	1:A:13:LEU:HD11	1:A:171:LEU:HD13	6	0.34
(1,915)	1:A:13:LEU:HD12	1:A:171:LEU:HD11	6	0.34
(1,915)	1:A:13:LEU:HD12	1:A:171:LEU:HD12	6	0.34
(1,915)	1:A:13:LEU:HD12	1:A:171:LEU:HD13	6	0.34
(1,915)	1:A:13:LEU:HD13	1:A:171:LEU:HD11	6	0.34
(1,915)	1:A:13:LEU:HD13	1:A:171:LEU:HD12	6	0.34
(1,915)	1:A:13:LEU:HD13	1:A:171:LEU:HD13	6	0.34
(1,43)	1:A:82:TYR:H	1:A:82:TYR:HD1	3	0.34
(1,929)	1:A:106:ASN:HD21	1:A:107:ASN:H	20	0.33
(1,922)	1:A:30:PHE:HB2	1:A:70:ILE:HD11	13	0.33
(1,922)	1:A:30:PHE:HB2	1:A:70:ILE:HD12	13	0.33
(1,922)	1:A:30:PHE:HB2	1:A:70:ILE:HD13	13	0.33
(1,920)	1:A:28:TYR:HB2	1:A:171:LEU:H	5	0.33
(1,918)	1:A:18:PHE:HE1	1:A:73:ASN:HD21	19	0.33
(1,83)	1:A:4:TYR:H	1:A:4:TYR:HD1	2	0.33
(1,498)	1:A:27:VAL:HG11	1:A:28:TYR:HD1	1	0.33
(1,498)	1:A:27:VAL:HG12	1:A:28:TYR:HD1	1	0.33
(1,498)	1:A:27:VAL:HG13	1:A:28:TYR:HD1	1	0.33
(1,484)	1:A:116:PHE:HE1	1:A:175:ALA:H	12	0.33
(1,922)	1:A:30:PHE:HB2	1:A:70:ILE:HD11	9	0.32
(1,922)	1:A:30:PHE:HB2	1:A:70:ILE:HD12	9	0.32
(1,922)	1:A:30:PHE:HB2	1:A:70:ILE:HD13	9	0.32
(1,912)	1:A:13:LEU:H	1:A:13:LEU:HD11	11	0.32
(1,912)	1:A:13:LEU:H	1:A:13:LEU:HD12	11	0.32
(1,912)	1:A:13:LEU:H	1:A:13:LEU:HD13	11	0.32



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,912)	1:A:13:LEU:H	1:A:13:LEU:HD11	14	0.32
(1,912)	1:A:13:LEU:H	1:A:13:LEU:HD12	14	0.32
(1,912)	1:A:13:LEU:H	1:A:13:LEU:HD13	14	0.32
(1,58)	1:A:8:PHE:H	1:A:8:PHE:HE1	14	0.32
(1,455)	1:A:8:PHE:H	1:A:11:ASP:H	14	0.32
(1,942)	1:A:135:ASN:HD21	1:A:136:LEU:H	3	0.31
(1,939)	1:A:125:VAL:HG11	1:A:126:SER:H	8	0.31
(1,939)	1:A:125:VAL:HG12	1:A:126:SER:H	8	0.31
(1,939)	1:A:125:VAL:HG13	1:A:126:SER:H	8	0.31
(1,923)	1:A:30:PHE:HB2	1:A:169:LEU:H	10	0.31
(1,923)	1:A:30:PHE:HB2	1:A:169:LEU:H	11	0.31
(1,874)	1:A:64:VAL:HG21	1:A:66:ARG:H	20	0.31
(1,874)	1:A:64:VAL:HG22	1:A:66:ARG:H	20	0.31
(1,874)	1:A:64:VAL:HG23	1:A:66:ARG:H	20	0.31
(1,58)	1:A:8:PHE:H	1:A:8:PHE:HE1	16	0.31
(1,535)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:99:VAL:HG11	20	0.31
(1,535)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:99:VAL:HG12	20	0.31
(1,535)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:99:VAL:HG13	20	0.31
(1,492)	1:A:7:ILE:HD11	1:A:8:PHE:HE1	16	0.31
(1,492)	1:A:7:ILE:HD12	1:A:8:PHE:HE1	16	0.31
(1,492)	1:A:7:ILE:HD13	1:A:8:PHE:HE1	16	0.31
(1,929)	1:A:106:ASN:HD21	1:A:107:ASN:H	1	0.3
(1,58)	1:A:8:PHE:H	1:A:8:PHE:HE1	12	0.3
(1,484)	1:A:116:PHE:HE1	1:A:175:ALA:H	5	0.3
(1,120)	1:A:91:TYR:H	1:A:91:TYR:HD1	7	0.3
(1,941)	1:A:135:ASN:H	1:A:135:ASN:HD21	11	0.29
(1,930)	1:A:107:ASN:H	1:A:107:ASN:HD21	16	0.29
(1,927)	1:A:105:LYS:H	1:A:106:ASN:HD21	2	0.29
(1,912)	1:A:13:LEU:H	1:A:13:LEU:HD11	10	0.29
(1,912)	1:A:13:LEU:H	1:A:13:LEU:HD12	10	0.29
(1,912)	1:A:13:LEU:H	1:A:13:LEU:HD13	10	0.29
(1,537)	1:A:99:VAL:HG21	1:A:116:PHE:HE1	7	0.29
(1,537)	1:A:99:VAL:HG22	1:A:116:PHE:HE1	7	0.29
(1,537)	1:A:99:VAL:HG23	1:A:116:PHE:HE1	7	0.29
(1,502)	1:A:91:TYR:HE1	1:A:153:VAL:HG21	18	0.29
(1,502)	1:A:91:TYR:HE1	1:A:153:VAL:HG22	18	0.29
(1,502)	1:A:91:TYR:HE1	1:A:153:VAL:HG23	18	0.29
(1,498)	1:A:27:VAL:HG11	1:A:28:TYR:HD1	15	0.29
(1,498)	1:A:27:VAL:HG12	1:A:28:TYR:HD1	15	0.29
(1,498)	1:A:27:VAL:HG13	1:A:28:TYR:HD1	15	0.29
(1,492)	1:A:7:ILE:HD11	1:A:8:PHE:HE1	6	0.29
(1,492)	1:A:7:ILE:HD12	1:A:8:PHE:HE1	6	0.29



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,492)	1:A:7:ILE:HD13	1:A:8:PHE:HE1	6	0.29
(1,186)	1:A:158:TYR:HD1	1:A:159:ARG:H	9	0.29
(1,942)	1:A:135:ASN:HD21	1:A:136:LEU:H	9	0.28
(1,920)	1:A:28:TYR:HB2	1:A:171:LEU:H	6	0.28
(1,570)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:120:ILE:HD11	10	0.28
(1,570)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:120:ILE:HD12	10	0.28
(1,570)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:120:ILE:HD13	10	0.28
(1,942)	1:A:135:ASN:HD21	1:A:136:LEU:H	2	0.27
(1,941)	1:A:135:ASN:H	1:A:135:ASN:HD21	9	0.27
(1,939)	1:A:125:VAL:HG11	1:A:126:SER:H	6	0.27
(1,939)	1:A:125:VAL:HG12	1:A:126:SER:H	6	0.27
(1,939)	1:A:125:VAL:HG13	1:A:126:SER:H	6	0.27
(1,920)	1:A:28:TYR:HB2	1:A:171:LEU:H	2	0.27
(1,58)	1:A:8:PHE:H	1:A:8:PHE:HE1	5	0.27
(1,569)	1:A:116:PHE:HE1	1:A:120:ILE:HD11	10	0.27
(1,569)	1:A:116:PHE:HE1	1:A:120:ILE:HD12	10	0.27
(1,569)	1:A:116:PHE:HE1	1:A:120:ILE:HD13	10	0.27
(1,50)	1:A:80:ASN:H	1:A:80:ASN:HD22	4	0.27
(1,455)	1:A:8:PHE:H	1:A:11:ASP:H	11	0.27
(1,44)	1:A:82:TYR:H	1:A:82:TYR:HE1	20	0.27
(1,951)	1:A:161:VAL:H	1:A:166:VAL:HG11	7	0.26
(1,951)	1:A:161:VAL:H	1:A:166:VAL:HG12	7	0.26
(1,951)	1:A:161:VAL:H	1:A:166:VAL:HG13	7	0.26
(1,942)	1:A:135:ASN:HD21	1:A:136:LEU:H	4	0.26
(1,942)	1:A:135:ASN:HD21	1:A:136:LEU:H	20	0.26
(1,941)	1:A:135:ASN:H	1:A:135:ASN:HD21	19	0.26
(1,916)	1:A:13:LEU:HD11	1:A:176:ILE:HD11	15	0.26
(1,916)	1:A:13:LEU:HD11	1:A:176:ILE:HD12	15	0.26
(1,916)	1:A:13:LEU:HD11	1:A:176:ILE:HD13	15	0.26
(1,916)	1:A:13:LEU:HD12	1:A:176:ILE:HD11	15	0.26
(1,916)	1:A:13:LEU:HD12	1:A:176:ILE:HD12	15	0.26
(1,916)	1:A:13:LEU:HD12	1:A:176:ILE:HD13	15	0.26
(1,916)	1:A:13:LEU:HD13	1:A:176:ILE:HD11	15	0.26
(1,916)	1:A:13:LEU:HD13	1:A:176:ILE:HD12	15	0.26
(1,916)	1:A:13:LEU:HD13	1:A:176:ILE:HD13	15	0.26
(1,79)	1:A:13:LEU:H	1:A:14:SER:H	18	0.26
(1,538)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:99:VAL:HG21	11	0.26
(1,538)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:99:VAL:HG22	11	0.26
(1,538)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:99:VAL:HG23	11	0.26
(1,50)	1:A:80:ASN:H	1:A:80:ASN:HD22	12	0.26
(1,498)	1:A:27:VAL:HG11	1:A:28:TYR:HD1	20	0.26
(1,498)	1:A:27:VAL:HG12	1:A:28:TYR:HD1	20	0.26



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,498)	1:A:27:VAL:HG13	1:A:28:TYR:HD1	20	0.26
(1,941)	1:A:135:ASN:H	1:A:135:ASN:HD21	3	0.25
(1,939)	1:A:125:VAL:HG11	1:A:126:SER:H	7	0.25
(1,939)	1:A:125:VAL:HG12	1:A:126:SER:H	7	0.25
(1,939)	1:A:125:VAL:HG13	1:A:126:SER:H	7	0.25
(1,936)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:125:VAL:HG11	20	0.25
(1,936)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:125:VAL:HG12	20	0.25
(1,936)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:125:VAL:HG13	20	0.25
(1,936)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:125:VAL:HG11	20	0.25
(1,936)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:125:VAL:HG12	20	0.25
(1,936)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:125:VAL:HG13	20	0.25
(1,936)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:125:VAL:HG11	20	0.25
(1,936)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:125:VAL:HG12	20	0.25
(1,936)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:125:VAL:HG13	20	0.25
(1,929)	1:A:106:ASN:HD21	1:A:107:ASN:H	9	0.25
(1,929)	1:A:106:ASN:HD21	1:A:107:ASN:H	13	0.25
(1,751)	1:A:36:VAL:HG11	1:A:44:LEU:HD21	9	0.25
(1,751)	1:A:36:VAL:HG11	1:A:44:LEU:HD22	9	0.25
(1,751)	1:A:36:VAL:HG11	1:A:44:LEU:HD23	9	0.25
(1,751)	1:A:36:VAL:HG12	1:A:44:LEU:HD21	9	0.25
(1,751)	1:A:36:VAL:HG12	1:A:44:LEU:HD22	9	0.25
(1,751)	1:A:36:VAL:HG12	1:A:44:LEU:HD23	9	0.25
(1,751)	1:A:36:VAL:HG13	1:A:44:LEU:HD21	9	0.25
(1,751)	1:A:36:VAL:HG13	1:A:44:LEU:HD22	9	0.25
(1,751)	1:A:36:VAL:HG13	1:A:44:LEU:HD23	9	0.25
(1,58)	1:A:8:PHE:H	1:A:8:PHE:HE1	8	0.25
(1,569)	1:A:116:PHE:HE1	1:A:120:ILE:HD11	20	0.25
(1,569)	1:A:116:PHE:HE1	1:A:120:ILE:HD12	20	0.25
(1,569)	1:A:116:PHE:HE1	1:A:120:ILE:HD13	20	0.25
(1,538)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:99:VAL:HG21	10	0.25
(1,538)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:99:VAL:HG22	10	0.25
(1,538)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:99:VAL:HG23	10	0.25
(1,538)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:99:VAL:HG21	16	0.25
(1,538)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:99:VAL:HG22	16	0.25
(1,538)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:99:VAL:HG23	16	0.25
(1,455)	1:A:8:PHE:H	1:A:11:ASP:H	1	0.25
(1,455)	1:A:8:PHE:H	1:A:11:ASP:H	2	0.25
(1,455)	1:A:8:PHE:H	1:A:11:ASP:H	3	0.25
(1,4)	1:A:28:TYR:H	1:A:28:TYR:HD1	17	0.25
(1,350)	1:A:116:PHE:HE1	1:A:117:LYS:H	17	0.25
(1,165)	1:A:8:PHE:HE1	1:A:152:GLN:H	2	0.25
(1,101)	1:A:150:ASN:H	1:A:151:GLY:H	17	0.25



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,914)	1:A:13:LEU:HD11	1:A:169:LEU:HD21	9	0.24
(1,914)	1:A:13:LEU:HD11	1:A:169:LEU:HD22	9	0.24
(1,914)	1:A:13:LEU:HD11	1:A:169:LEU:HD23	9	0.24
(1,914)	1:A:13:LEU:HD12	1:A:169:LEU:HD21	9	0.24
(1,914)	1:A:13:LEU:HD12	1:A:169:LEU:HD22	9	0.24
(1,914)	1:A:13:LEU:HD12	1:A:169:LEU:HD23	9	0.24
(1,914)	1:A:13:LEU:HD13	1:A:169:LEU:HD21	9	0.24
(1,914)	1:A:13:LEU:HD13	1:A:169:LEU:HD22	9	0.24
(1,914)	1:A:13:LEU:HD13	1:A:169:LEU:HD23	9	0.24
(1,569)	1:A:116:PHE:HE1	1:A:120:ILE:HD11	9	0.24
(1,569)	1:A:116:PHE:HE1	1:A:120:ILE:HD12	9	0.24
(1,569)	1:A:116:PHE:HE1	1:A:120:ILE:HD13	9	0.24
(1,449)	1:A:4:TYR:HD1	1:A:15:SER:H	11	0.24
(1,443)	1:A:91:TYR:H	1:A:91:TYR:HE1	10	0.24
(1,43)	1:A:82:TYR:H	1:A:82:TYR:HD1	16	0.24
(1,939)	1:A:125:VAL:HG11	1:A:126:SER:H	13	0.23
(1,939)	1:A:125:VAL:HG12	1:A:126:SER:H	13	0.23
(1,939)	1:A:125:VAL:HG13	1:A:126:SER:H	13	0.23
(1,569)	1:A:116:PHE:HE1	1:A:120:ILE:HD11	17	0.23
(1,569)	1:A:116:PHE:HE1	1:A:120:ILE:HD12	17	0.23
(1,569)	1:A:116:PHE:HE1	1:A:120:ILE:HD13	17	0.23
(1,455)	1:A:8:PHE:H	1:A:11:ASP:H	10	0.23
(1,455)	1:A:8:PHE:H	1:A:11:ASP:H	20	0.23
(1,443)	1:A:91:TYR:H	1:A:91:TYR:HE1	4	0.23
(1,443)	1:A:91:TYR:H	1:A:91:TYR:HE1	8	0.23
(1,109)	1:A:15:SER:H	1:A:18:PHE:HE1	16	0.23
(1,950)	1:A:160:ASP:H	1:A:166:VAL:HG11	13	0.22
(1,950)	1:A:160:ASP:H	1:A:166:VAL:HG12	13	0.22
(1,950)	1:A:160:ASP:H	1:A:166:VAL:HG13	13	0.22
(1,79)	1:A:13:LEU:H	1:A:14:SER:H	10	0.22
(1,537)	1:A:99:VAL:HG21	1:A:116:PHE:HE1	12	0.22
(1,537)	1:A:99:VAL:HG22	1:A:116:PHE:HE1	12	0.22
(1,537)	1:A:99:VAL:HG23	1:A:116:PHE:HE1	12	0.22
(1,455)	1:A:8:PHE:H	1:A:11:ASP:H	18	0.22
(1,443)	1:A:91:TYR:H	1:A:91:TYR:HE1	19	0.22
(1,178)	1:A:91:TYR:HD1	1:A:153:VAL:H	16	0.22
(1,951)	1:A:161:VAL:H	1:A:166:VAL:HG11	11	0.21
(1,951)	1:A:161:VAL:H	1:A:166:VAL:HG12	11	0.21
(1,951)	1:A:161:VAL:H	1:A:166:VAL:HG13	11	0.21
(1,936)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:125:VAL:HG11	4	0.21
(1,936)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:125:VAL:HG12	4	0.21
(1,936)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:125:VAL:HG13	4	0.21



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,936)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:125:VAL:HG11	4	0.21
(1,936)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:125:VAL:HG12	4	0.21
(1,936)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:125:VAL:HG13	4	0.21
(1,936)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:125:VAL:HG11	4	0.21
(1,936)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:125:VAL:HG12	4	0.21
(1,936)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:125:VAL:HG13	4	0.21
(1,936)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:125:VAL:HG11	18	0.21
(1,936)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:125:VAL:HG12	18	0.21
(1,936)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:125:VAL:HG13	18	0.21
(1,936)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:125:VAL:HG11	18	0.21
(1,936)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:125:VAL:HG12	18	0.21
(1,936)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:125:VAL:HG13	18	0.21
(1,936)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:125:VAL:HG11	18	0.21
(1,936)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:125:VAL:HG12	18	0.21
(1,936)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:125:VAL:HG13	18	0.21
(1,930)	1:A:107:ASN:H	1:A:107:ASN:HD21	1	0.21
(1,930)	1:A:107:ASN:H	1:A:107:ASN:HD21	19	0.21
(1,910)	1:A:4:TYR:HB2	1:A:14:SER:H	18	0.21
(1,874)	1:A:64:VAL:HG21	1:A:66:ARG:H	13	0.21
(1,874)	1:A:64:VAL:HG22	1:A:66:ARG:H	13	0.21
(1,874)	1:A:64:VAL:HG23	1:A:66:ARG:H	13	0.21
(1,751)	1:A:36:VAL:HG11	1:A:44:LEU:HD21	19	0.21
(1,751)	1:A:36:VAL:HG11	1:A:44:LEU:HD22	19	0.21
(1,751)	1:A:36:VAL:HG11	1:A:44:LEU:HD23	19	0.21
(1,751)	1:A:36:VAL:HG12	1:A:44:LEU:HD21	19	0.21
(1,751)	1:A:36:VAL:HG12	1:A:44:LEU:HD22	19	0.21
(1,751)	1:A:36:VAL:HG12	1:A:44:LEU:HD23	19	0.21
(1,751)	1:A:36:VAL:HG13	1:A:44:LEU:HD21	19	0.21
(1,751)	1:A:36:VAL:HG13	1:A:44:LEU:HD22	19	0.21
(1,751)	1:A:36:VAL:HG13	1:A:44:LEU:HD23	19	0.21
(1,58)	1:A:8:PHE:H	1:A:8:PHE:HE1	20	0.21
(1,455)	1:A:8:PHE:H	1:A:11:ASP:H	16	0.21
(1,415)	1:A:131:ASP:H	1:A:134:LYS:H	3	0.21
(1,100)	1:A:58:ASP:H	1:A:59:GLY:H	6	0.21
(1,941)	1:A:135:ASN:H	1:A:135:ASN:HD21	12	0.2
(1,936)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:125:VAL:HG11	5	0.2
(1,936)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:125:VAL:HG12	5	0.2
(1,936)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:125:VAL:HG13	5	0.2
(1,936)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:125:VAL:HG11	5	0.2
(1,936)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:125:VAL:HG12	5	0.2
(1,936)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:125:VAL:HG13	5	0.2
(1,936)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:125:VAL:HG11	5	0.2
\			Continue	



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,936)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:125:VAL:HG12	5	0.2
(1,936)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:125:VAL:HG13	5	0.2
(1,936)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:125:VAL:HG11	14	0.2
(1,936)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:125:VAL:HG12	14	0.2
(1,936)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:125:VAL:HG13	14	0.2
(1,936)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:125:VAL:HG11	14	0.2
(1,936)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:125:VAL:HG12	14	0.2
(1,936)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:125:VAL:HG13	14	0.2
(1,936)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:125:VAL:HG11	14	0.2
(1,936)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:125:VAL:HG12	14	0.2
(1,936)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:125:VAL:HG13	14	0.2
(1,936)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:125:VAL:HG11	16	0.2
(1,936)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:125:VAL:HG12	16	0.2
(1,936)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:125:VAL:HG13	16	0.2
(1,936)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:125:VAL:HG11	16	0.2
(1,936)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:125:VAL:HG12	16	0.2
(1,936)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:125:VAL:HG13	16	0.2
(1,936)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:125:VAL:HG11	16	0.2
(1,936)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:125:VAL:HG12	16	0.2
(1,936)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:125:VAL:HG13	16	0.2
(1,83)	1:A:4:TYR:H	1:A:4:TYR:HD1	19	0.2
(1,537)	1:A:99:VAL:HG21	1:A:116:PHE:HE1	3	0.2
(1,537)	1:A:99:VAL:HG22	1:A:116:PHE:HE1	3	0.2
(1,537)	1:A:99:VAL:HG23	1:A:116:PHE:HE1	3	0.2
(1,537)	1:A:99:VAL:HG21	1:A:116:PHE:HE1	14	0.2
(1,537)	1:A:99:VAL:HG22	1:A:116:PHE:HE1	14	0.2
(1,537)	1:A:99:VAL:HG23	1:A:116:PHE:HE1	14	0.2
(1,455)	1:A:8:PHE:H	1:A:11:ASP:H	12	0.2
(1,241)	1:A:37:ARG:H	1:A:66:ARG:H	13	0.2
(1,923)	1:A:30:PHE:HB2	1:A:169:LEU:H	15	0.19
(1,874)	1:A:64:VAL:HG21	1:A:66:ARG:H	2	0.19
(1,874)	1:A:64:VAL:HG22	1:A:66:ARG:H	2	0.19
(1,874)	1:A:64:VAL:HG23	1:A:66:ARG:H	2	0.19
(1,599)	1:A:91:TYR:HD1	1:A:153:VAL:HG11	14	0.19
(1,599)	1:A:91:TYR:HD1	1:A:153:VAL:HG12	14	0.19
(1,599)	1:A:91:TYR:HD1	1:A:153:VAL:HG13	14	0.19
(1,520)	1:A:22:LEU:HD21	1:A:28:TYR:HD1	3	0.19
(1,520)	1:A:22:LEU:HD22	1:A:28:TYR:HD1	3	0.19
(1,520)	1:A:22:LEU:HD23	1:A:28:TYR:HD1	3	0.19
(1,502)	1:A:91:TYR:HE1	1:A:153:VAL:HG21	11	0.19
(1,502)	1:A:91:TYR:HE1	1:A:153:VAL:HG22	11	0.19
(1,502)	1:A:91:TYR:HE1	1:A:153:VAL:HG23	11	0.19



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,484)	1:A:116:PHE:HE1	1:A:175:ALA:H	1	0.19
(1,243)	1:A:66:ARG:H	1:A:72:LEU:HD21	11	0.19
(1,243)	1:A:66:ARG:H	1:A:72:LEU:HD22	11	0.19
(1,243)	1:A:66:ARG:H	1:A:72:LEU:HD23	11	0.19
(1,951)	1:A:161:VAL:H	1:A:166:VAL:HG11	15	0.18
(1,951)	1:A:161:VAL:H	1:A:166:VAL:HG12	15	0.18
(1,951)	1:A:161:VAL:H	1:A:166:VAL:HG13	15	0.18
(1,939)	1:A:125:VAL:HG11	1:A:126:SER:H	2	0.18
(1,939)	1:A:125:VAL:HG12	1:A:126:SER:H	2	0.18
(1,939)	1:A:125:VAL:HG13	1:A:126:SER:H	2	0.18
(1,939)	1:A:125:VAL:HG11	1:A:126:SER:H	19	0.18
(1,939)	1:A:125:VAL:HG12	1:A:126:SER:H	19	0.18
(1,939)	1:A:125:VAL:HG13	1:A:126:SER:H	19	0.18
(1,929)	1:A:106:ASN:HD21	1:A:107:ASN:H	8	0.18
(1,921)	1:A:30:PHE:HB2	1:A:31:LYS:H	2	0.18
(1,912)	1:A:13:LEU:H	1:A:13:LEU:HD11	18	0.18
(1,912)	1:A:13:LEU:H	1:A:13:LEU:HD12	18	0.18
(1,912)	1:A:13:LEU:H	1:A:13:LEU:HD13	18	0.18
(1,647)	1:A:103:MET:H	1:A:105:LYS:H	13	0.18
(1,601)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:171:LEU:HD11	15	0.18
(1,601)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:171:LEU:HD12	15	0.18
(1,601)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:171:LEU:HD13	15	0.18
(1,463)	1:A:16:ASP:H	1:A:18:PHE:H	14	0.18
(1,243)	1:A:66:ARG:H	1:A:72:LEU:HD21	17	0.18
(1,243)	1:A:66:ARG:H	1:A:72:LEU:HD22	17	0.18
(1,243)	1:A:66:ARG:H	1:A:72:LEU:HD23	17	0.18
(1,191)	1:A:64:VAL:HG11	1:A:65:GLU:H	18	0.18
(1,191)	1:A:64:VAL:HG12	1:A:65:GLU:H	18	0.18
(1,191)	1:A:64:VAL:HG13	1:A:65:GLU:H	18	0.18
(1,120)	1:A:91:TYR:H	1:A:91:TYR:HD1	15	0.18
(1,932)	1:A:121:GLN:HE21	1:A:125:VAL:HG11	15	0.17
(1,932)	1:A:121:GLN:HE21	1:A:125:VAL:HG12	15	0.17
(1,932)	1:A:121:GLN:HE21	1:A:125:VAL:HG13	15	0.17
(1,932)	1:A:121:GLN:HE22	1:A:125:VAL:HG11	15	0.17
(1,932)	1:A:121:GLN:HE22	1:A:125:VAL:HG12	15	0.17
(1,932)	1:A:121:GLN:HE22	1:A:125:VAL:HG13	15	0.17
(1,930)	1:A:107:ASN:H	1:A:107:ASN:HD21	15	0.17
(1,93)	1:A:39:GLU:H	1:A:40:GLY:H	6	0.17
(1,912)	1:A:13:LEU:H	1:A:13:LEU:HD11	17	0.17
(1,912)	1:A:13:LEU:H	1:A:13:LEU:HD12	17	0.17
(1,912)	1:A:13:LEU:H	1:A:13:LEU:HD13	17	0.17
(1,730)	1:A:27:VAL:HG11	1:A:120:ILE:HD11	11	0.17



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,730)	1:A:27:VAL:HG11	1:A:120:ILE:HD12	11	0.17
(1,730)	1:A:27:VAL:HG11	1:A:120:ILE:HD13	11	0.17
(1,730)	1:A:27:VAL:HG12	1:A:120:ILE:HD11	11	0.17
(1,730)	1:A:27:VAL:HG12	1:A:120:ILE:HD12	11	0.17
(1,730)	1:A:27:VAL:HG12	1:A:120:ILE:HD13	11	0.17
(1,730)	1:A:27:VAL:HG13	1:A:120:ILE:HD11	11	0.17
(1,730)	1:A:27:VAL:HG13	1:A:120:ILE:HD12	11	0.17
(1,730)	1:A:27:VAL:HG13	1:A:120:ILE:HD13	11	0.17
(1,537)	1:A:99:VAL:HG21	1:A:116:PHE:HE1	6	0.17
(1,537)	1:A:99:VAL:HG22	1:A:116:PHE:HE1	6	0.17
(1,537)	1:A:99:VAL:HG23	1:A:116:PHE:HE1	6	0.17
(1,537)	1:A:99:VAL:HG21	1:A:116:PHE:HE1	16	0.17
(1,537)	1:A:99:VAL:HG22	1:A:116:PHE:HE1	16	0.17
(1,537)	1:A:99:VAL:HG23	1:A:116:PHE:HE1	16	0.17
(1,498)	1:A:27:VAL:HG11	1:A:28:TYR:HD1	9	0.17
(1,498)	1:A:27:VAL:HG12	1:A:28:TYR:HD1	9	0.17
(1,498)	1:A:27:VAL:HG13	1:A:28:TYR:HD1	9	0.17
(1,455)	1:A:8:PHE:H	1:A:11:ASP:H	19	0.17
(1,415)	1:A:131:ASP:H	1:A:134:LYS:H	8	0.17
(1,405)	1:A:24:ASP:H	1:A:25:ASP:H	8	0.17
(1,241)	1:A:37:ARG:H	1:A:66:ARG:H	10	0.17
(1,174)	1:A:22:LEU:H	1:A:28:TYR:HD1	18	0.17
(1,108)	1:A:15:SER:H	1:A:18:PHE:HD1	10	0.17
(1,108)	1:A:15:SER:H	1:A:18:PHE:HD2	10	0.17
(1,950)	1:A:160:ASP:H	1:A:166:VAL:HG11	5	0.16
(1,950)	1:A:160:ASP:H	1:A:166:VAL:HG12	5	0.16
(1,950)	1:A:160:ASP:H	1:A:166:VAL:HG13	5	0.16
(1,93)	1:A:39:GLU:H	1:A:40:GLY:H	15	0.16
(1,921)	1:A:30:PHE:HB2	1:A:31:LYS:H	1	0.16
(1,89)	1:A:162:ASP:H	1:A:163:GLY:H	3	0.16
(1,874)	1:A:64:VAL:HG21	1:A:66:ARG:H	6	0.16
(1,874)	1:A:64:VAL:HG22	1:A:66:ARG:H	6	0.16
(1,874)	1:A:64:VAL:HG23	1:A:66:ARG:H	6	0.16
(1,874)	1:A:64:VAL:HG21	1:A:66:ARG:H	18	0.16
(1,874)	1:A:64:VAL:HG22	1:A:66:ARG:H	18	0.16
(1,874)	1:A:64:VAL:HG23	1:A:66:ARG:H	18	0.16
(1,76)	1:A:4:TYR:HD1	1:A:14:SER:H	8	0.16
(1,58)	1:A:8:PHE:H	1:A:8:PHE:HE1	18	0.16
(1,462)	1:A:182:LEU:H	1:A:183:GLU:H	14	0.16
(1,40)	1:A:158:TYR:H	1:A:158:TYR:HD1	20	0.16
(1,391)	1:A:23:VAL:HG11	1:A:26:LEU:H	2	0.16
(1,391)	1:A:23:VAL:HG12	1:A:26:LEU:H	2	0.16



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,391)	1:A:23:VAL:HG13	1:A:26:LEU:H	2	0.16
(1,391)	1:A:23:VAL:HG11	1:A:26:LEU:H	18	0.16
(1,391)	1:A:23:VAL:HG12	1:A:26:LEU:H	18	0.16
(1,391)	1:A:23:VAL:HG13	1:A:26:LEU:H	18	0.16
(1,160)	1:A:44:LEU:H	1:A:44:LEU:HD11	2	0.16
(1,160)	1:A:44:LEU:H	1:A:44:LEU:HD12	2	0.16
(1,160)	1:A:44:LEU:H	1:A:44:LEU:HD13	2	0.16
(1,120)	1:A:91:TYR:H	1:A:91:TYR:HD1	5	0.16
(1,951)	1:A:161:VAL:H	1:A:166:VAL:HG11	10	0.15
(1,951)	1:A:161:VAL:H	1:A:166:VAL:HG12	10	0.15
(1,951)	1:A:161:VAL:H	1:A:166:VAL:HG13	10	0.15
(1,947)	1:A:152:GLN:HE21	1:A:176:ILE:HD11	14	0.15
(1,947)	1:A:152:GLN:HE21	1:A:176:ILE:HD12	14	0.15
(1,947)	1:A:152:GLN:HE21	1:A:176:ILE:HD13	14	0.15
(1,947)	1:A:152:GLN:HE22	1:A:176:ILE:HD11	14	0.15
(1,947)	1:A:152:GLN:HE22	1:A:176:ILE:HD12	14	0.15
(1,947)	1:A:152:GLN:HE22	1:A:176:ILE:HD13	14	0.15
(1,930)	1:A:107:ASN:H	1:A:107:ASN:HD21	12	0.15
(1,865)	1:A:7:ILE:HD11	1:A:8:PHE:H	6	0.15
(1,865)	1:A:7:ILE:HD12	1:A:8:PHE:H	6	0.15
(1,865)	1:A:7:ILE:HD13	1:A:8:PHE:H	6	0.15
(1,862)	1:A:62:GLU:H	1:A:64:VAL:HG21	7	0.15
(1,862)	1:A:62:GLU:H	1:A:64:VAL:HG22	7	0.15
(1,862)	1:A:62:GLU:H	1:A:64:VAL:HG23	7	0.15
(1,79)	1:A:13:LEU:H	1:A:14:SER:H	17	0.15
(1,751)	1:A:36:VAL:HG11	1:A:44:LEU:HD21	3	0.15
(1,751)	1:A:36:VAL:HG11	1:A:44:LEU:HD22	3	0.15
(1,751)	1:A:36:VAL:HG11	1:A:44:LEU:HD23	3	0.15
(1,751)	1:A:36:VAL:HG12	1:A:44:LEU:HD21	3	0.15
(1,751)	1:A:36:VAL:HG12	1:A:44:LEU:HD22	3	0.15
(1,751)	1:A:36:VAL:HG12	1:A:44:LEU:HD23	3	0.15
(1,751)	1:A:36:VAL:HG13	1:A:44:LEU:HD21	3	0.15
(1,751)	1:A:36:VAL:HG13	1:A:44:LEU:HD22	3	0.15
(1,751)	1:A:36:VAL:HG13	1:A:44:LEU:HD23	3	0.15
(1,655)	1:A:52:GLU:H	1:A:53:GLU:H	7	0.15
(1,537)	1:A:99:VAL:HG21	1:A:116:PHE:HE1	10	0.15
(1,537)	1:A:99:VAL:HG22	1:A:116:PHE:HE1	10	0.15
(1,537)	1:A:99:VAL:HG23	1:A:116:PHE:HE1	10	0.15
(1,43)	1:A:82:TYR:H	1:A:82:TYR:HD1	7	0.15
(1,391)	1:A:23:VAL:HG11	1:A:26:LEU:H	3	0.15
(1,391)	1:A:23:VAL:HG12	1:A:26:LEU:H	3	0.15
(1,391)	1:A:23:VAL:HG13	1:A:26:LEU:H	3	0.15



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,384)	1:A:104:GLU:H	1:A:108:ARG:H	16	0.15
(1,194)	1:A:176:ILE:HD11	1:A:177:ILE:H	11	0.15
(1,194)	1:A:176:ILE:HD12	1:A:177:ILE:H	11	0.15
(1,194)	1:A:176:ILE:HD13	1:A:177:ILE:H	11	0.15
(1,192)	1:A:37:ARG:H	1:A:72:LEU:HD21	19	0.15
(1,192)	1:A:37:ARG:H	1:A:72:LEU:HD22	19	0.15
(1,192)	1:A:37:ARG:H	1:A:72:LEU:HD23	19	0.15
(1,98)	1:A:36:VAL:HG11	1:A:67:GLY:H	20	0.14
(1,98)	1:A:36:VAL:HG12	1:A:67:GLY:H	20	0.14
(1,98)	1:A:36:VAL:HG13	1:A:67:GLY:H	20	0.14
(1,951)	1:A:161:VAL:H	1:A:166:VAL:HG11	1	0.14
(1,951)	1:A:161:VAL:H	1:A:166:VAL:HG12	1	0.14
(1,951)	1:A:161:VAL:H	1:A:166:VAL:HG13	1	0.14
(1,932)	1:A:121:GLN:HE21	1:A:125:VAL:HG11	6	0.14
(1,932)	1:A:121:GLN:HE21	1:A:125:VAL:HG12	6	0.14
(1,932)	1:A:121:GLN:HE21	1:A:125:VAL:HG13	6	0.14
(1,932)	1:A:121:GLN:HE22	1:A:125:VAL:HG11	6	0.14
(1,932)	1:A:121:GLN:HE22	1:A:125:VAL:HG12	6	0.14
(1,932)	1:A:121:GLN:HE22	1:A:125:VAL:HG13	6	0.14
(1,93)	1:A:39:GLU:H	1:A:40:GLY:H	16	0.14
(1,922)	1:A:30:PHE:HB2	1:A:70:ILE:HD11	8	0.14
(1,922)	1:A:30:PHE:HB2	1:A:70:ILE:HD12	8	0.14
(1,922)	1:A:30:PHE:HB2	1:A:70:ILE:HD13	8	0.14
(1,921)	1:A:30:PHE:HB2	1:A:31:LYS:H	9	0.14
(1,913)	1:A:13:LEU:HD11	1:A:14:SER:H	1	0.14
(1,913)	1:A:13:LEU:HD12	1:A:14:SER:H	1	0.14
(1,913)	1:A:13:LEU:HD13	1:A:14:SER:H	1	0.14
(1,901)	1:A:156:ILE:H	1:A:169:LEU:HD11	8	0.14
(1,901)	1:A:156:ILE:H	1:A:169:LEU:HD12	8	0.14
(1,901)	1:A:156:ILE:H	1:A:169:LEU:HD13	8	0.14
(1,90)	1:A:161:VAL:H	1:A:163:GLY:H	9	0.14
(1,860)	1:A:139:PHE:H	1:A:153:VAL:HG21	7	0.14
(1,860)	1:A:139:PHE:H	1:A:153:VAL:HG22	7	0.14
(1,860)	1:A:139:PHE:H	1:A:153:VAL:HG23	7	0.14
(1,83)	1:A:4:TYR:H	1:A:4:TYR:HD1	13	0.14
(1,820)	1:A:76:LEU:HD21	1:A:140:ILE:H	9	0.14
(1,820)	1:A:76:LEU:HD22	1:A:140:ILE:H	9	0.14
(1,820)	1:A:76:LEU:HD23	1:A:140:ILE:H	9	0.14
(1,808)	1:A:121:GLN:HE22	1:A:125:VAL:HG11	10	0.14
(1,808)	1:A:121:GLN:HE22	1:A:125:VAL:HG12	10	0.14
(1,808)	1:A:121:GLN:HE22	1:A:125:VAL:HG13	10	0.14
(1,79)	1:A:13:LEU:H	1:A:14:SER:H	4	0.14



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,79)	1:A:13:LEU:H	1:A:14:SER:H	13	0.14
(1,766)	1:A:77:VAL:HG11	1:A:140:ILE:HD11	10	0.14
(1,766)	1:A:77:VAL:HG11	1:A:140:ILE:HD12	10	0.14
(1,766)	1:A:77:VAL:HG11	1:A:140:ILE:HD13	10	0.14
(1,766)	1:A:77:VAL:HG12	1:A:140:ILE:HD11	10	0.14
(1,766)	1:A:77:VAL:HG12	1:A:140:ILE:HD12	10	0.14
(1,766)	1:A:77:VAL:HG12	1:A:140:ILE:HD13	10	0.14
(1,766)	1:A:77:VAL:HG13	1:A:140:ILE:HD11	10	0.14
(1,766)	1:A:77:VAL:HG13	1:A:140:ILE:HD12	10	0.14
(1,766)	1:A:77:VAL:HG13	1:A:140:ILE:HD13	10	0.14
(1,650)	1:A:38:LYS:H	1:A:41:GLU:H	1	0.14
(1,599)	1:A:91:TYR:HD1	1:A:153:VAL:HG11	12	0.14
(1,599)	1:A:91:TYR:HD1	1:A:153:VAL:HG12	12	0.14
(1,599)	1:A:91:TYR:HD1	1:A:153:VAL:HG13	12	0.14
(1,566)	1:A:68:ILE:HD11	1:A:139:PHE:HE1	14	0.14
(1,566)	1:A:68:ILE:HD12	1:A:139:PHE:HE1	14	0.14
(1,566)	1:A:68:ILE:HD13	1:A:139:PHE:HE1	14	0.14
(1,501)	1:A:91:TYR:HD1	1:A:153:VAL:HG21	2	0.14
(1,501)	1:A:91:TYR:HD1	1:A:153:VAL:HG22	2	0.14
(1,501)	1:A:91:TYR:HD1	1:A:153:VAL:HG23	2	0.14
(1,391)	1:A:23:VAL:HG11	1:A:26:LEU:H	9	0.14
(1,391)	1:A:23:VAL:HG12	1:A:26:LEU:H	9	0.14
(1,391)	1:A:23:VAL:HG13	1:A:26:LEU:H	9	0.14
(1,288)	1:A:2:LEU:HD11	1:A:3:ILE:H	2	0.14
(1,288)	1:A:2:LEU:HD12	1:A:3:ILE:H	2	0.14
(1,288)	1:A:2:LEU:HD13	1:A:3:ILE:H	2	0.14
(1,1045)	1:A:155:ILE:H	1:A:170:MET:O	6	0.14
(1,1045)	1:A:155:ILE:H	1:A:170:MET:O	11	0.14
(1,948)	1:A:158:TYR:H	1:A:158:TYR:HB2	6	0.13
(1,93)	1:A:39:GLU:H	1:A:40:GLY:H	2	0.13
(1,921)	1:A:30:PHE:HB2	1:A:31:LYS:H	20	0.13
(1,874)	1:A:64:VAL:HG21	1:A:66:ARG:H	14	0.13
(1,874)	1:A:64:VAL:HG22	1:A:66:ARG:H	14	0.13
(1,874)	1:A:64:VAL:HG23	1:A:66:ARG:H	14	0.13
(1,862)	1:A:62:GLU:H	1:A:64:VAL:HG21	14	0.13
(1,862)	1:A:62:GLU:H	1:A:64:VAL:HG22	14	0.13
(1,862)	1:A:62:GLU:H	1:A:64:VAL:HG23	14	0.13
(1,860)	1:A:139:PHE:H	1:A:153:VAL:HG21	15	0.13
(1,860)	1:A:139:PHE:H	1:A:153:VAL:HG22	15	0.13
(1,860)	1:A:139:PHE:H	1:A:153:VAL:HG23	15	0.13
(1,860)	1:A:139:PHE:H	1:A:153:VAL:HG21	16	0.13
(1,860)	1:A:139:PHE:H	1:A:153:VAL:HG22	16	0.13



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

(1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG23 16 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG22 19 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG23 19 0.13 (1,860) 1:A:39:PHE:H 1:A:153:VAL:HG23 19 0.13 (1,797) 1:A:92:ILE:HD11 1:A:96:MET:H 15 0.13 (1,797) 1:A:92:ILE:HD13 1:A:96:MET:H 15 0.13 (1,757) 1:A:92:ILE:HD121 1:A:182:IEU:HD21 9 0.13 (1,756) 1:A:2:LEU:HD21 1:A:182:IEU:HD22 9 0.13 (1,756) 1:A:2:LEU:HD22 1:A:182:IEU:HD23 9 0.13 (1,756) 1:A:2:LEU:HD22 1:A:182:IEU:HD23 9 0.13 (1,756) 1:A:2:LEU:HD22 1:A:182:IEU:HD23 9 0.13 (1,756) 1:A:2:LEU:HD23 1:A:182:IEU:HD21 9 0.13 (1,756) 1:A:2:LEU:HD23 1:A:182:IEU:HD21 9 0.13 (1,756) 1:A:4:2:IEU:HD23 1:A:	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG22 19 0.13 (1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG23 19 0.13 (1,797) 1:A:92:ILE:HD11 1:A:96:MET:H 15 0.13 (1,797) 1:A:92:ILE:HD12 1:A:96:MET:H 15 0.13 (1,797) 1:A:92:ILE:HD13 1:A:96:MET:H 15 0.13 (1,797) 1:A:92:ILE:HD13 1:A:96:MET:H 15 0.13 (1,756) 1:A:2:LEU:HD21 1:A:182:LEU:HD21 9 0.13 (1,756) 1:A:2:LEU:HD21 1:A:182:LEU:HD22 9 0.13 (1,756) 1:A:2:LEU:HD21 1:A:182:LEU:HD22 9 0.13 (1,756) 1:A:2:LEU:HD22 1:A:182:LEU:HD23 9 0.13 (1,756) 1:A:2:LEU:HD23 1:A:182:LEU:HD22 9 0.13 (1,756) 1:A:2:LEU:HD23 1:A:182:LEU:HD21 9 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD11 1:A:44:LEU:HD11 20 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD11 1:A:44:LEU:HD11 20 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD11 1:A:44:LEU:HD12 20 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD11 1:A:44:LEU:HD11 20 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD12 1:A:44:LEU:HD13 20 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD13 1:A:44:IEU:HD13 20 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD13 1:A:43:IBE:HD14 3 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD14 1:A:133:PHE:HD1 3 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD14 1:A:133:PHE:HD1 3 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD14 1:A:133:PHE:HD1 3 0.13 (1,517) 1:A:1	(1,860)	1:A:139:PHE:H	1:A:153:VAL:HG23	16	0.13
(1,860) 1:A:139:PHE:H 1:A:153:VAL:HG23 19 0.13 (1,797) 1:A:92:ILE:HD11 1:A:96:MET:H 15 0.13 (1,797) 1:A:92:ILE:HD12 1:A:96:MET:H 15 0.13 (1,797) 1:A:92:ILE:HD13 1:A:96:MET:H 15 0.13 (1,756) 1:A:2:LEU:HD21 1:A:182:LEU:HD22 9 0.13 (1,756) 1:A:2:LEU:HD21 1:A:182:LEU:HD23 9 0.13 (1,756) 1:A:2:LEU:HD22 1:A:182:LEU:HD23 9 0.13 (1,756) 1:A:2:LEU:HD22 1:A:182:LEU:HD23 9 0.13 (1,756) 1:A:2:LEU:HD23 1:A:182:LEU:HD23 9 0.13 (1,756) 1:A:2:LEU:HD23 1:A:182:LEU:HD21 9 0.13 (1,756) 1:A:2:LEU:HD23 1:A:182:LEU:HD21 9 0.13 (1,756) 1:A:2:LEU:HD23 1:A:182:LEU:HD22 9 0.13 (1,756) 1:A:2:LEU:HD23 1:A:182:LEU:HD23 9 0.13 (1,756) 1:A:4:2:ILE:HD13 1:A:44:	(1,860)	1:A:139:PHE:H	1:A:153:VAL:HG21	19	0.13
(1,797) 1:A:92:ILE:HD11 1:A:96:MET:H 15 0.13 (1,797) 1:A:92:ILE:HD12 1:A:96:MET:H 15 0.13 (1,797) 1:A:92:ILE:HD13 1:A:96:MET:H 15 0.13 (1,756) 1:A:2:LEU:HD21 1:A:182:LEU:HD21 9 0.13 (1,756) 1:A:2:LEU:HD21 1:A:182:LEU:HD22 9 0.13 (1,756) 1:A:2:LEU:HD22 1:A:182:LEU:HD23 9 0.13 (1,756) 1:A:2:LEU:HD22 1:A:182:LEU:HD22 9 0.13 (1,756) 1:A:2:LEU:HD22 1:A:182:LEU:HD23 9 0.13 (1,756) 1:A:2:LEU:HD23 1:A:182:LEU:HD23 9 0.13 (1,756) 1:A:2:LEU:HD23 1:A:182:LEU:HD21 9 0.13 (1,756) 1:A:2:LEU:HD23 1:A:182:LEU:HD22 9 0.13 (1,756) 1:A:2:LEU:HD23 1:A:182:LEU:HD22 9 0.13 (1,756) 1:A:4:LEU:HD23 1:A:482:LEU:HD23 9 0.13 (1,756) 1:A:4:LEU:HD23 1:A:482:L	(1,860)	1:A:139:PHE:H	1:A:153:VAL:HG22	19	0.13
(1,797) 1:A:92:ILE:HD12 1:A:96:MET:H 15 0.13 (1,797) 1:A:92:ILE:HD13 1:A:96:MET:H 15 0.13 (1,756) 1:A:2:LEU:HD21 1:A:182:LEU:HD21 9 0.13 (1,756) 1:A:2:LEU:HD21 1:A:182:LEU:HD22 9 0.13 (1,756) 1:A:2:LEU:HD22 1:A:182:LEU:HD21 9 0.13 (1,756) 1:A:2:LEU:HD22 1:A:182:LEU:HD22 9 0.13 (1,756) 1:A:2:LEU:HD22 1:A:182:LEU:HD23 9 0.13 (1,756) 1:A:2:LEU:HD23 1:A:182:LEU:HD21 9 0.13 (1,756) 1:A:2:LEU:HD23 1:A:182:LEU:HD21 9 0.13 (1,756) 1:A:2:LEU:HD23 1:A:182:LEU:HD21 9 0.13 (1,756) 1:A:2:LEU:HD23 1:A:182:LEU:HD22 9 0.13 (1,756) 1:A:2:LEU:HD23 1:A:182:LEU:HD23 9 0.13 (1,756) 1:A:4:LEU:HD23 1:A:482:LEU:HD23 9 0.13 (1,756) 1:A:4:LEU:HD23 1:A:482	(1,860)	1:A:139:PHE:H	1:A:153:VAL:HG23	19	0.13
(1,797) 1:A:92:ILE:HD13 1:A:96:MET:H 15 0.13 (1,756) 1:A:2:LEU:HD21 1:A:182:LEU:HD21 9 0.13 (1,756) 1:A:2:LEU:HD21 1:A:182:LEU:HD22 9 0.13 (1,756) 1:A:2:LEU:HD21 1:A:182:LEU:HD23 9 0.13 (1,756) 1:A:2:LEU:HD22 1:A:182:LEU:HD22 9 0.13 (1,756) 1:A:2:LEU:HD23 1:A:182:LEU:HD23 9 0.13 (1,756) 1:A:2:LEU:HD23 1:A:182:LEU:HD21 9 0.13 (1,756) 1:A:2:LEU:HD23 1:A:182:LEU:HD22 9 0.13 (1,756) 1:A:2:LEU:HD23 1:A:182:LEU:HD22 9 0.13 (1,756) 1:A:2:LEU:HD23 1:A:182:LEU:HD21 9 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD11 1:A:44:LEU:HD12 20 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD11 1:A:44:LEU:HD12 20 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD12 1:A:44:LEU:HD12 20 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD12 1	(1,797)	1:A:92:ILE:HD11	1:A:96:MET:H	15	0.13
(1,756) 1:A:2:LEU:HD21 1:A:182:LEU:HD21 9 0.13 (1,756) 1:A:2:LEU:HD21 1:A:182:LEU:HD22 9 0.13 (1,756) 1:A:2:LEU:HD21 1:A:182:LEU:HD23 9 0.13 (1,756) 1:A:2:LEU:HD22 1:A:182:LEU:HD21 9 0.13 (1,756) 1:A:2:LEU:HD22 1:A:182:LEU:HD23 9 0.13 (1,756) 1:A:2:LEU:HD23 1:A:182:LEU:HD23 9 0.13 (1,756) 1:A:2:LEU:HD23 1:A:182:LEU:HD22 9 0.13 (1,756) 1:A:2:LEU:HD23 1:A:182:LEU:HD22 9 0.13 (1,756) 1:A:2:LEU:HD23 1:A:182:LEU:HD22 9 0.13 (1,756) 1:A:2:LEU:HD23 1:A:482:LEU:HD23 9 0.13 (1,756) 1:A:42:LE:HD11 1:A:442:LEU:HD12 20 0.13 (1,743) 1:A:42:LE:HD11 1:A:442:LEU:HD11 20 0.13 (1,743) 1:A:42:LE:HD11 1:A:442:LEU:HD12 20 0.13 (1,743) 1:A:42:LEU:HD12 <th< td=""><td>(1,797)</td><td>1:A:92:ILE:HD12</td><td>1:A:96:MET:H</td><td>15</td><td>0.13</td></th<>	(1,797)	1:A:92:ILE:HD12	1:A:96:MET:H	15	0.13
(1,756) 1:A:2:LEU:HD21 1:A:182:LEU:HD22 9 0.13 (1,756) 1:A:2:LEU:HD21 1:A:182:LEU:HD23 9 0.13 (1,756) 1:A:2:LEU:HD22 1:A:182:LEU:HD21 9 0.13 (1,756) 1:A:2:LEU:HD22 1:A:182:LEU:HD23 9 0.13 (1,756) 1:A:2:LEU:HD23 1:A:182:LEU:HD21 9 0.13 (1,756) 1:A:2:LEU:HD23 1:A:182:LEU:HD22 9 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD11 1:A:44:LEU:HD12 20 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD11 1:A:44:LEU:HD13 20 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD12 1:A:44:LEU:HD11 20 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD12 1:A:44:LEU:HD12 20 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD13 <t< td=""><td>(1,797)</td><td>1:A:92:ILE:HD13</td><td>1:A:96:MET:H</td><td>15</td><td>0.13</td></t<>	(1,797)	1:A:92:ILE:HD13	1:A:96:MET:H	15	0.13
(1,756) 1:A:2:LEU:HD21 1:A:182:LEU:HD22 9 0.13 (1,756) 1:A:2:LEU:HD22 1:A:182:LEU:HD21 9 0.13 (1,756) 1:A:2:LEU:HD22 1:A:182:LEU:HD22 9 0.13 (1,756) 1:A:2:LEU:HD22 1:A:182:LEU:HD23 9 0.13 (1,756) 1:A:2:LEU:HD23 1:A:182:LEU:HD21 9 0.13 (1,756) 1:A:2:LEU:HD23 1:A:182:LEU:HD22 9 0.13 (1,756) 1:A:2:LEU:HD23 1:A:182:LEU:HD23 9 0.13 (1,756) 1:A:42:LEU:HD23 1:A:48:LEU:HD11 20 0.13 (1,743) 1:A:42:LEU:HD11 1:A:44:LEU:HD13 20 0.13 (1,743) 1:A:42:LEU:HD12 1:A:44:LEU:HD13 20 0.13 (1,743) 1:A:42:LEU:HD13 <td< td=""><td>(1,756)</td><td>1:A:2:LEU:HD21</td><td>1:A:182:LEU:HD21</td><td>9</td><td>0.13</td></td<>	(1,756)	1:A:2:LEU:HD21	1:A:182:LEU:HD21	9	0.13
(1,756) 1:A:2:LEU:HD22 1:A:182:LEU:HD21 9 0.13 (1,756) 1:A:2:LEU:HD22 1:A:182:LEU:HD22 9 0.13 (1,756) 1:A:2:LEU:HD22 1:A:182:LEU:HD23 9 0.13 (1,756) 1:A:2:LEU:HD23 1:A:182:LEU:HD21 9 0.13 (1,756) 1:A:2:LEU:HD23 1:A:182:LEU:HD22 9 0.13 (1,756) 1:A:2:LEU:HD23 1:A:182:LEU:HD23 9 0.13 (1,756) 1:A:2:LEU:HD23 1:A:42:LEU:HD11 1:A:44:LEU:HD12 20 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD11 1:A:44:LEU:HD12 20 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD11 1:A:44:LEU:HD13 20 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD12 1:A:44:LEU:HD11 20 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD12 1:A:44:LEU:HD13 20 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD13 1:A:44:LEU:HD11 20 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD13 1:A:44:LEU:HD13 20 0.13 (1,743)	(1,756)	1:A:2:LEU:HD21	1:A:182:LEU:HD22	9	0.13
(1,756) 1:A:2:LEU:HD22 1:A:182:LEU:HD22 9 0.13 (1,756) 1:A:2:LEU:HD22 1:A:182:LEU:HD23 9 0.13 (1,756) 1:A:2:LEU:HD23 1:A:182:LEU:HD21 9 0.13 (1,756) 1:A:2:LEU:HD23 1:A:182:LEU:HD22 9 0.13 (1,756) 1:A:2:LEU:HD23 1:A:182:LEU:HD23 9 0.13 (1,756) 1:A:2:LEU:HD23 1:A:42:LEU:HD11 1:A:44:LEU:HD12 20 0.13 (1,743) 1:A:42:LE:HD11 1:A:44:LEU:HD12 20 0.13 (1,743) 1:A:42:LE:HD11 1:A:44:LEU:HD13 20 0.13 (1,743) 1:A:42:LE:HD12 1:A:44:LEU:HD11 20 0.13 (1,743) 1:A:42:LE:HD12 1:A:44:LEU:HD13 20 0.13 (1,743) 1:A:42:LE:HD13 1:A:44:LEU:HD11 20 0.13 (1,743) 1:A:42:LE:HD13 1:A:44:LEU:HD11 20 0.13 (1,743) 1:A:42:LE:HD13 1:A:44:LEU:HD12 20 0.13 (1,743) 1:	(1,756)	1:A:2:LEU:HD21	1:A:182:LEU:HD23	9	0.13
(1,756) 1:A:2:LEU:HD22 1:A:182:LEU:HD23 9 0.13 (1,756) 1:A:2:LEU:HD23 1:A:182:LEU:HD21 9 0.13 (1,756) 1:A:2:LEU:HD23 1:A:182:LEU:HD22 9 0.13 (1,756) 1:A:2:LEU:HD23 1:A:182:LEU:HD23 9 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD11 1:A:44:LEU:HD11 20 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD11 1:A:44:LEU:HD12 20 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD11 1:A:44:LEU:HD13 20 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD12 1:A:44:LEU:HD11 20 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD12 1:A:44:LEU:HD12 20 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD12 1:A:44:LEU:HD13 20 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD13 1:A:44:LEU:HD11 20 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD13 1:A:44:LEU:HD12 20 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD13 1:A:44:LEU:HD13 20 0.13 (1,743) 1:A:3:8:PLE:HD13	(1,756)	1:A:2:LEU:HD22	1:A:182:LEU:HD21	9	0.13
(1,756) 1:A:2:LEU:HD23 1:A:182:LEU:HD22 9 0.13 (1,756) 1:A:2:LEU:HD23 1:A:182:LEU:HD22 9 0.13 (1,756) 1:A:2:LEU:HD23 1:A:182:LEU:HD23 9 0.13 (1,743) 1:A:42:LE:HD11 1:A:44:LEU:HD11 20 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD11 1:A:44:LEU:HD12 20 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD11 1:A:44:LEU:HD13 20 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD12 1:A:44:LEU:HD11 20 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD12 1:A:44:LEU:HD12 20 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD12 1:A:44:LEU:HD13 20 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD13 1:A:44:LEU:HD11 20 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD13 1:A:44:LEU:HD12 20 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD13 1:A:44:LEU:HD13 20 0.13 (1,517) 1:A:12:ILE:HD11 1:A:43:PE:HD13 3 0.13 (1,517) 1:A:12:PLEU:HD11	(1,756)	1:A:2:LEU:HD22	1:A:182:LEU:HD22	9	0.13
(1,756) 1:A:2:LEU:HD23 1:A:182:LEU:HD23 9 0.13 (1,756) 1:A:2:LEU:HD23 1:A:182:LEU:HD23 9 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD11 1:A:44:LEU:HD11 20 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD11 1:A:44:LEU:HD12 20 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD11 1:A:44:LEU:HD13 20 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD12 1:A:44:LEU:HD11 20 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD12 1:A:44:LEU:HD12 20 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD12 1:A:44:LEU:HD13 20 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD13 1:A:44:LEU:HD11 20 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD13 1:A:44:LEU:HD12 20 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD13 1:A:44:LEU:HD12 20 0.13 (1,743) 1:A:80:ASN:H 1:A:82:TYR:H 2 0.13 (1,543) 1:A:127:LEU:HD13 1:A:133:PHE:HD1 3 0.13 (1,517) 1:A:1217:LEU:HD11	(1,756)	1:A:2:LEU:HD22	1:A:182:LEU:HD23	9	0.13
(1,756) 1:A:2:LEU:HD23 1:A:182:LEU:HD23 9 0.13 (1,756) 1:A:2:LEU:HD23 1:A:182:LEU:HD23 9 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD11 1:A:44:LEU:HD11 20 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD11 1:A:44:LEU:HD12 20 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD11 1:A:44:LEU:HD13 20 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD12 1:A:44:LEU:HD11 20 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD12 1:A:44:LEU:HD12 20 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD12 1:A:44:LEU:HD13 20 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD13 1:A:44:LEU:HD11 20 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD13 1:A:44:LEU:HD12 20 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD13 1:A:44:LEU:HD12 20 0.13 (1,743) 1:A:80:ASN:H 1:A:82:TYR:H 2 0.13 (1,543) 1:A:127:LEU:HD13 1:A:133:PHE:HD1 3 0.13 (1,517) 1:A:1217:LEU:HD11	,	1:A:2:LEU:HD23	1:A:182:LEU:HD21	9	0.13
(1,743) 1:A:42:ILE:HD11 1:A:44:LEU:HD11 20 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD11 1:A:44:LEU:HD12 20 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD11 1:A:44:LEU:HD13 20 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD12 1:A:44:LEU:HD11 20 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD12 1:A:44:LEU:HD13 20 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD13 1:A:44:LEU:HD11 20 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD13 1:A:44:LEU:HD11 20 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD13 1:A:44:LEU:HD12 20 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD13 1:A:44:LEU:HD13 20 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD13 1:A:44:LEU:HD13 20 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD13 1:A:44:LEU:HD13 20 0.13 (1,509) 1:A:80:ASN:H 1:A:82:TYR:H 2 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD11 1:A:133:PHE:HD1 3 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD12		1:A:2:LEU:HD23	1:A:182:LEU:HD22	9	0.13
(1,743) 1:A:42:ILE:HD11 1:A:44:LEU:HD12 20 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD11 1:A:44:LEU:HD13 20 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD12 1:A:44:LEU:HD11 20 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD12 1:A:44:LEU:HD13 20 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD13 1:A:44:LEU:HD11 20 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD13 1:A:44:LEU:HD12 20 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD13 1:A:44:LEU:HD12 20 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD13 1:A:44:LEU:HD12 20 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD13 1:A:44:LEU:HD13 20 0.13 (1,609) 1:A:80:ASN:H 1:A:43:PHE:HD1 3 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD11	(1,756)	1:A:2:LEU:HD23	1:A:182:LEU:HD23	9	0.13
(1,743) 1:A:42:ILE:HD11 1:A:44:LEU:HD13 20 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD12 1:A:44:LEU:HD11 20 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD12 1:A:44:LEU:HD12 20 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD13 1:A:44:LEU:HD11 20 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD13 1:A:44:LEU:HD12 20 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD13 1:A:44:LEU:HD12 20 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD13 1:A:44:LEU:HD12 20 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD13 1:A:44:LEU:HD13 20 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD13 1:A:44:LEU:HD13 20 0.13 (1,609) 1:A:80:ASN:H 1:A:82:TYR:H 2 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD11 1:A:133:PHE:HD1 3 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD12 1:A:133:PHE:HD1 3 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD13 1:A:133:PHE:HD1 3 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD11	(1,743)	1:A:42:ILE:HD11	1:A:44:LEU:HD11	20	0.13
(1,743) 1:A:42:ILE:HD11 1:A:44:LEU:HD13 20 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD12 1:A:44:LEU:HD11 20 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD12 1:A:44:LEU:HD12 20 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD13 1:A:44:LEU:HD11 20 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD13 1:A:44:LEU:HD12 20 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD13 1:A:44:LEU:HD12 20 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD13 1:A:44:LEU:HD12 20 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD13 1:A:44:LEU:HD13 20 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD13 1:A:44:LEU:HD13 20 0.13 (1,609) 1:A:80:ASN:H 1:A:82:TYR:H 2 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD11 1:A:133:PHE:HD1 3 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD12 1:A:133:PHE:HD1 3 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD13 1:A:133:PHE:HD1 3 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD11	(1,743)	1:A:42:ILE:HD11	1:A:44:LEU:HD12	20	0.13
(1,743) 1:A:42:ILE:HD12 1:A:44:LEU:HD12 20 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD12 1:A:44:LEU:HD13 20 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD13 1:A:44:LEU:HD11 20 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD13 1:A:44:LEU:HD12 20 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD13 1:A:44:LEU:HD13 20 0.13 (1,609) 1:A:80:ASN:H 1:A:82:TYR:H 2 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD11 1:A:133:PHE:HD1 3 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD11 1:A:133:PHE:HD2 3 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD12 1:A:133:PHE:HD1 3 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD13 1:A:133:PHE:HD1 3 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD13 1:A:133:PHE:HD1 4 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD11 1:A:133:PHE:HD1 4 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD13 1:A:133:PHE:HD1 4 0.13 (1,517) 1:A:12127:LEU:HD13	(1,743)	1:A:42:ILE:HD11	1:A:44:LEU:HD13	20	0.13
(1,743) 1:A:42:ILE:HD12 1:A:44:LEU:HD13 20 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD13 1:A:44:LEU:HD11 20 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD13 1:A:44:LEU:HD12 20 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD13 1:A:44:LEU:HD13 20 0.13 (1,609) 1:A:80:ASN:H 1:A:82:TYR:H 2 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD11 1:A:133:PHE:HD1 3 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD11 1:A:133:PHE:HD2 3 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD12 1:A:133:PHE:HD2 3 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD13 1:A:133:PHE:HD1 3 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD13 1:A:133:PHE:HD2 3 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD11 1:A:133:PHE:HD1 4 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD11 1:A:133:PHE:HD1 4 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD11 1:A:133:PHE:HD1 4 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD12	(1,743)	1:A:42:ILE:HD12	1:A:44:LEU:HD11	20	0.13
(1,743) 1:A:42:ILE:HD13 1:A:44:LEU:HD11 20 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD13 1:A:44:LEU:HD12 20 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD13 1:A:44:LEU:HD13 20 0.13 (1,609) 1:A:80:ASN:H 1:A:82:TYR:H 2 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD11 1:A:133:PHE:HD1 3 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD11 1:A:133:PHE:HD2 3 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD12 1:A:133:PHE:HD1 3 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD12 1:A:133:PHE:HD1 3 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD13 1:A:133:PHE:HD2 3 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD13 1:A:133:PHE:HD1 4 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD11 1:A:133:PHE:HD2 4 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD12 1:A:133:PHE:HD1 4 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD12 1:A:133:PHE:HD1 4 0.13 (1,517) 1:A:13:127:LEU:HD13	(1,743)	1:A:42:ILE:HD12	1:A:44:LEU:HD12	20	0.13
(1,743) 1:A:42:ILE:HD13 1:A:44:LEU:HD12 20 0.13 (1,743) 1:A:42:ILE:HD13 1:A:44:LEU:HD13 20 0.13 (1,609) 1:A:80:ASN:H 1:A:82:TYR:H 2 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD11 1:A:133:PHE:HD1 3 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD12 1:A:133:PHE:HD1 3 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD12 1:A:133:PHE:HD2 3 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD12 1:A:133:PHE:HD1 3 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD13 1:A:133:PHE:HD2 3 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD13 1:A:133:PHE:HD1 4 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD11 1:A:133:PHE:HD2 4 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD12 1:A:133:PHE:HD1 4 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD12 1:A:133:PHE:HD1 4 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD13 1:A:133:PHE:HD1 4 0.13 (1,517) 1:A:138:PHE:HD1	(1,743)	1:A:42:ILE:HD12	1:A:44:LEU:HD13	20	0.13
(1,743) 1:A:42:ILE:HD13 1:A:44:LEU:HD13 20 0.13 (1,609) 1:A:80:ASN:H 1:A:82:TYR:H 2 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD11 1:A:133:PHE:HD1 3 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD11 1:A:133:PHE:HD2 3 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD12 1:A:133:PHE:HD1 3 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD13 1:A:133:PHE:HD2 3 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD13 1:A:133:PHE:HD2 3 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD11 1:A:133:PHE:HD1 4 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD11 1:A:133:PHE:HD2 4 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD12 1:A:133:PHE:HD1 4 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD12 1:A:133:PHE:HD2 4 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD13 1:A:133:PHE:HD1 4 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD13 1:A:133:PHE:HD1 4 0.13 (1,500) 1:A:138:PHE:HD1	(1,743)	1:A:42:ILE:HD13	1:A:44:LEU:HD11	20	0.13
(1,609) 1:A:80:ASN:H 1:A:82:TYR:H 2 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD11 1:A:133:PHE:HD1 3 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD11 1:A:133:PHE:HD2 3 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD12 1:A:133:PHE:HD1 3 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD13 1:A:133:PHE:HD1 3 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD13 1:A:133:PHE:HD2 3 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD11 1:A:133:PHE:HD1 4 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD11 1:A:133:PHE:HD2 4 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD12 1:A:133:PHE:HD1 4 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD12 1:A:133:PHE:HD1 4 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD13 1:A:133:PHE:HD1 4 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD13 1:A:133:PHE:HD1 4 0.13 (1,500) 1:A:138:PHE:HD1 1:A:153:VAL:HG21 20 0.13 (1,500) 1:A:138:PHE:HD1 1:A:153:VAL:HG22 20 0.13 (1,500) 1:A:138:P	(1,743)	1:A:42:ILE:HD13	1:A:44:LEU:HD12	20	0.13
(1,517) 1:A:127:LEU:HD11 1:A:133:PHE:HD1 3 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD11 1:A:133:PHE:HD2 3 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD12 1:A:133:PHE:HD1 3 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD12 1:A:133:PHE:HD2 3 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD13 1:A:133:PHE:HD1 3 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD13 1:A:133:PHE:HD1 4 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD11 1:A:133:PHE:HD2 4 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD12 1:A:133:PHE:HD1 4 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD12 1:A:133:PHE:HD2 4 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD13 1:A:133:PHE:HD1 4 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD13 1:A:133:PHE:HD1 4 0.13 (1,500) 1:A:138:PHE:HD1 1:A:153:VAL:HG21 20 0.13 (1,500) 1:A:138:PHE:HD1 1:A:153:VAL:HG22 20 0.13 (1,500) 1:A:138:PHE:HD1 1:A:153:VAL:HG23 20 0.13	(1,743)	1:A:42:ILE:HD13	1:A:44:LEU:HD13	20	0.13
(1,517) 1:A:127:LEU:HD11 1:A:133:PHE:HD2 3 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD12 1:A:133:PHE:HD1 3 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD12 1:A:133:PHE:HD2 3 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD13 1:A:133:PHE:HD1 3 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD13 1:A:133:PHE:HD2 3 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD11 1:A:133:PHE:HD1 4 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD12 1:A:133:PHE:HD1 4 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD12 1:A:133:PHE:HD2 4 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD13 1:A:133:PHE:HD1 4 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD13 1:A:133:PHE:HD1 4 0.13 (1,500) 1:A:138:PHE:HD1 1:A:153:VAL:HG21 20 0.13 (1,500) 1:A:138:PHE:HD1 1:A:153:VAL:HG22 20 0.13 (1,500) 1:A:138:PHE:HD1 1:A:153:VAL:HG23 20 0.13	(1,609)	1:A:80:ASN:H	1:A:82:TYR:H	2	0.13
(1,517) 1:A:127:LEU:HD12 1:A:133:PHE:HD1 3 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD12 1:A:133:PHE:HD2 3 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD13 1:A:133:PHE:HD1 3 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD13 1:A:133:PHE:HD2 3 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD11 1:A:133:PHE:HD1 4 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD12 1:A:133:PHE:HD1 4 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD12 1:A:133:PHE:HD2 4 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD13 1:A:133:PHE:HD1 4 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD13 1:A:133:PHE:HD1 4 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD13 1:A:133:PHE:HD2 4 0.13 (1,500) 1:A:138:PHE:HD1 1:A:153:VAL:HG21 20 0.13 (1,500) 1:A:138:PHE:HD1 1:A:153:VAL:HG22 20 0.13 (1,500) 1:A:138:PHE:HD1 1:A:153:VAL:HG23 20 0.13	(1,517)	1:A:127:LEU:HD11	1:A:133:PHE:HD1	3	0.13
(1,517) 1:A:127:LEU:HD12 1:A:133:PHE:HD2 3 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD13 1:A:133:PHE:HD1 3 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD13 1:A:133:PHE:HD2 3 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD11 1:A:133:PHE:HD1 4 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD12 1:A:133:PHE:HD1 4 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD12 1:A:133:PHE:HD2 4 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD13 1:A:133:PHE:HD1 4 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD13 1:A:133:PHE:HD1 4 0.13 (1,517) 1:A:138:PHE:HD1 1:A:133:PHE:HD2 4 0.13 (1,500) 1:A:138:PHE:HD1 1:A:153:VAL:HG21 20 0.13 (1,500) 1:A:138:PHE:HD1 1:A:153:VAL:HG22 20 0.13 (1,500) 1:A:138:PHE:HD1 1:A:153:VAL:HG23 20 0.13	(1,517)	1:A:127:LEU:HD11	1:A:133:PHE:HD2	3	0.13
(1,517) 1:A:127:LEU:HD13 1:A:133:PHE:HD1 3 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD13 1:A:133:PHE:HD2 3 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD11 1:A:133:PHE:HD1 4 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD11 1:A:133:PHE:HD2 4 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD12 1:A:133:PHE:HD1 4 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD13 1:A:133:PHE:HD1 4 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD13 1:A:133:PHE:HD1 4 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD13 1:A:133:PHE:HD2 4 0.13 (1,500) 1:A:138:PHE:HD1 1:A:153:VAL:HG21 20 0.13 (1,500) 1:A:138:PHE:HD1 1:A:153:VAL:HG22 20 0.13 (1,500) 1:A:138:PHE:HD1 1:A:153:VAL:HG23 20 0.13	(1,517)	1:A:127:LEU:HD12	1:A:133:PHE:HD1	3	0.13
(1,517) 1:A:127:LEU:HD13 1:A:133:PHE:HD2 3 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD11 1:A:133:PHE:HD1 4 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD11 1:A:133:PHE:HD2 4 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD12 1:A:133:PHE:HD1 4 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD13 1:A:133:PHE:HD1 4 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD13 1:A:133:PHE:HD1 4 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD13 1:A:133:PHE:HD2 4 0.13 (1,500) 1:A:138:PHE:HD1 1:A:153:VAL:HG21 20 0.13 (1,500) 1:A:138:PHE:HD1 1:A:153:VAL:HG22 20 0.13 (1,500) 1:A:138:PHE:HD1 1:A:153:VAL:HG23 20 0.13	(1,517)	1:A:127:LEU:HD12	1:A:133:PHE:HD2	3	0.13
(1,517) 1:A:127:LEU:HD11 1:A:133:PHE:HD1 4 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD11 1:A:133:PHE:HD2 4 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD12 1:A:133:PHE:HD1 4 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD12 1:A:133:PHE:HD2 4 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD13 1:A:133:PHE:HD1 4 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD13 1:A:133:PHE:HD2 4 0.13 (1,500) 1:A:138:PHE:HD1 1:A:153:VAL:HG21 20 0.13 (1,500) 1:A:138:PHE:HD1 1:A:153:VAL:HG22 20 0.13 (1,500) 1:A:138:PHE:HD1 1:A:153:VAL:HG23 20 0.13	(1,517)	1:A:127:LEU:HD13	1:A:133:PHE:HD1	3	0.13
(1,517) 1:A:127:LEU:HD11 1:A:133:PHE:HD2 4 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD12 1:A:133:PHE:HD1 4 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD12 1:A:133:PHE:HD2 4 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD13 1:A:133:PHE:HD1 4 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD13 1:A:133:PHE:HD2 4 0.13 (1,500) 1:A:138:PHE:HD1 1:A:153:VAL:HG21 20 0.13 (1,500) 1:A:138:PHE:HD1 1:A:153:VAL:HG22 20 0.13 (1,500) 1:A:138:PHE:HD1 1:A:153:VAL:HG23 20 0.13	(1,517)	1:A:127:LEU:HD13	1:A:133:PHE:HD2	3	0.13
(1,517) 1:A:127:LEU:HD12 1:A:133:PHE:HD1 4 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD12 1:A:133:PHE:HD2 4 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD13 1:A:133:PHE:HD1 4 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD13 1:A:133:PHE:HD2 4 0.13 (1,500) 1:A:138:PHE:HD1 1:A:153:VAL:HG21 20 0.13 (1,500) 1:A:138:PHE:HD1 1:A:153:VAL:HG22 20 0.13 (1,500) 1:A:138:PHE:HD1 1:A:153:VAL:HG23 20 0.13	(1,517)	1:A:127:LEU:HD11	1:A:133:PHE:HD1	4	0.13
(1,517) 1:A:127:LEU:HD12 1:A:133:PHE:HD1 4 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD12 1:A:133:PHE:HD2 4 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD13 1:A:133:PHE:HD1 4 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD13 1:A:133:PHE:HD2 4 0.13 (1,500) 1:A:138:PHE:HD1 1:A:153:VAL:HG21 20 0.13 (1,500) 1:A:138:PHE:HD1 1:A:153:VAL:HG22 20 0.13 (1,500) 1:A:138:PHE:HD1 1:A:153:VAL:HG23 20 0.13		1:A:127:LEU:HD11	1:A:133:PHE:HD2	4	0.13
(1,517) 1:A:127:LEU:HD12 1:A:133:PHE:HD2 4 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD13 1:A:133:PHE:HD1 4 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD13 1:A:133:PHE:HD2 4 0.13 (1,500) 1:A:138:PHE:HD1 1:A:153:VAL:HG21 20 0.13 (1,500) 1:A:138:PHE:HD1 1:A:153:VAL:HG22 20 0.13 (1,500) 1:A:138:PHE:HD1 1:A:153:VAL:HG23 20 0.13		1:A:127:LEU:HD12	1:A:133:PHE:HD1	4	0.13
(1,517) 1:A:127:LEU:HD13 1:A:133:PHE:HD1 4 0.13 (1,517) 1:A:127:LEU:HD13 1:A:133:PHE:HD2 4 0.13 (1,500) 1:A:138:PHE:HD1 1:A:153:VAL:HG21 20 0.13 (1,500) 1:A:138:PHE:HD1 1:A:153:VAL:HG22 20 0.13 (1,500) 1:A:138:PHE:HD1 1:A:153:VAL:HG23 20 0.13		1:A:127:LEU:HD12	1:A:133:PHE:HD2	4	0.13
(1,517) 1:A:127:LEU:HD13 1:A:133:PHE:HD2 4 0.13 (1,500) 1:A:138:PHE:HD1 1:A:153:VAL:HG21 20 0.13 (1,500) 1:A:138:PHE:HD1 1:A:153:VAL:HG22 20 0.13 (1,500) 1:A:138:PHE:HD1 1:A:153:VAL:HG23 20 0.13		1:A:127:LEU:HD13	1:A:133:PHE:HD1	4	0.13
(1,500) 1:A:138:PHE:HD1 1:A:153:VAL:HG21 20 0.13 (1,500) 1:A:138:PHE:HD1 1:A:153:VAL:HG22 20 0.13 (1,500) 1:A:138:PHE:HD1 1:A:153:VAL:HG23 20 0.13	, ,	1:A:127:LEU:HD13	1:A:133:PHE:HD2	4	0.13
(1,500) 1:A:138:PHE:HD1 1:A:153:VAL:HG22 20 0.13 (1,500) 1:A:138:PHE:HD1 1:A:153:VAL:HG23 20 0.13		1:A:138:PHE:HD1	1:A:153:VAL:HG21	20	0.13
(1,500) 1:A:138:PHE:HD1 1:A:153:VAL:HG23 20 0.13		1:A:138:PHE:HD1	1:A:153:VAL:HG22	20	0.13
	/	1:A:138:PHE:HD1	1:A:153:VAL:HG23	20	0.13
	· · /	1:A:138:PHE:HD2	1:A:153:VAL:HG21	20	0.13



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,500)	1:A:138:PHE:HD2	1:A:153:VAL:HG22	20	0.13
(1,500)	1:A:138:PHE:HD2	1:A:153:VAL:HG23	20	0.13
(1,43)	1:A:82:TYR:H	1:A:82:TYR:HD1	10	0.13
(1,391)	1:A:23:VAL:HG11	1:A:26:LEU:H	12	0.13
(1,391)	1:A:23:VAL:HG12	1:A:26:LEU:H	12	0.13
(1,391)	1:A:23:VAL:HG13	1:A:26:LEU:H	12	0.13
(1,388)	1:A:116:PHE:HD1	1:A:174:GLU:H	12	0.13
(1,388)	1:A:116:PHE:HD2	1:A:174:GLU:H	12	0.13
(1,291)	1:A:182:LEU:HD21	1:A:183:GLU:H	4	0.13
(1,291)	1:A:182:LEU:HD22	1:A:183:GLU:H	4	0.13
(1,291)	1:A:182:LEU:HD23	1:A:183:GLU:H	4	0.13
(1,107)	1:A:54:GLY:H	1:A:55:ALA:H	9	0.13
(1,1045)	1:A:155:ILE:H	1:A:170:MET:O	17	0.13
(1,1013)	1:A:2:LEU:H	1:A:16:ASP:O	3	0.13
(1,983)	1:A:100:ILE:HD11	1:A:113:VAL:HG11	7	0.12
(1,983)	1:A:100:ILE:HD11	1:A:113:VAL:HG12	7	0.12
(1,983)	1:A:100:ILE:HD11	1:A:113:VAL:HG13	7	0.12
(1,983)	1:A:100:ILE:HD12	1:A:113:VAL:HG11	7	0.12
(1,983)	1:A:100:ILE:HD12	1:A:113:VAL:HG12	7	0.12
(1,983)	1:A:100:ILE:HD12	1:A:113:VAL:HG13	7	0.12
(1,983)	1:A:100:ILE:HD13	1:A:113:VAL:HG11	7	0.12
(1,983)	1:A:100:ILE:HD13	1:A:113:VAL:HG12	7	0.12
(1,983)	1:A:100:ILE:HD13	1:A:113:VAL:HG13	7	0.12
(1,977)	1:A:113:VAL:HG11	1:A:100:ILE:HD11	7	0.12
(1,977)	1:A:113:VAL:HG11	1:A:100:ILE:HD12	7	0.12
(1,977)	1:A:113:VAL:HG11	1:A:100:ILE:HD13	7	0.12
(1,977)	1:A:113:VAL:HG12	1:A:100:ILE:HD11	7	0.12
(1,977)	1:A:113:VAL:HG12	1:A:100:ILE:HD12	7	0.12
(1,977)	1:A:113:VAL:HG12	1:A:100:ILE:HD13	7	0.12
(1,977)	1:A:113:VAL:HG13	1:A:100:ILE:HD11	7	0.12
(1,977)	1:A:113:VAL:HG13	1:A:100:ILE:HD12	7	0.12
(1,977)	1:A:113:VAL:HG13	1:A:100:ILE:HD13	7	0.12
(1,93)	1:A:39:GLU:H	1:A:40:GLY:H	8	0.12
(1,93)	1:A:39:GLU:H	1:A:40:GLY:H	18	0.12
(1,929)	1:A:106:ASN:HD21	1:A:107:ASN:H	19	0.12
(1,923)	1:A:30:PHE:HB2	1:A:169:LEU:H	2	0.12
(1,874)	1:A:64:VAL:HG21	1:A:66:ARG:H	15	0.12
(1,874)	1:A:64:VAL:HG22	1:A:66:ARG:H	15	0.12
(1,874)	1:A:64:VAL:HG23	1:A:66:ARG:H	15	0.12
(1,862)	1:A:62:GLU:H	1:A:64:VAL:HG21	4	0.12
(1,862)	1:A:62:GLU:H	1:A:64:VAL:HG22	4	0.12
(1,862)	1:A:62:GLU:H	1:A:64:VAL:HG23	4	0.12
\	1	== 5:= 5		orte



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,860)	1:A:139:PHE:H	1:A:153:VAL:HG21	8	0.12
(1,860)	1:A:139:PHE:H	1:A:153:VAL:HG22	8	0.12
(1,860)	1:A:139:PHE:H	1:A:153:VAL:HG23	8	0.12
(1,832)	1:A:120:ILE:HD11	1:A:174:GLU:H	20	0.12
(1,832)	1:A:120:ILE:HD12	1:A:174:GLU:H	20	0.12
(1,832)	1:A:120:ILE:HD13	1:A:174:GLU:H	20	0.12
(1,829)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:128:LEU:H	12	0.12
(1,829)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:128:LEU:H	12	0.12
(1,829)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:128:LEU:H	12	0.12
(1,829)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:128:LEU:H	13	0.12
(1,829)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:128:LEU:H	13	0.12
(1,829)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:128:LEU:H	13	0.12
(1,814)	1:A:27:VAL:HG11	1:A:173:LYS:H	9	0.12
(1,814)	1:A:27:VAL:HG12	1:A:173:LYS:H	9	0.12
(1,814)	1:A:27:VAL:HG13	1:A:173:LYS:H	9	0.12
(1,79)	1:A:13:LEU:H	1:A:14:SER:H	20	0.12
(1,648)	1:A:56:GLU:H	1:A:57:ASP:H	3	0.12
(1,566)	1:A:68:ILE:HD11	1:A:139:PHE:HE1	17	0.12
(1,566)	1:A:68:ILE:HD12	1:A:139:PHE:HE1	17	0.12
(1,566)	1:A:68:ILE:HD13	1:A:139:PHE:HE1	17	0.12
(1,553)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:128:LEU:HD21	19	0.12
(1,553)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:128:LEU:HD22	19	0.12
(1,553)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:128:LEU:HD23	19	0.12
(1,553)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:128:LEU:HD21	19	0.12
(1,553)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:128:LEU:HD22	19	0.12
(1,553)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:128:LEU:HD23	19	0.12
(1,553)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:128:LEU:HD21	19	0.12
(1,553)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:128:LEU:HD22	19	0.12
(1,553)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:128:LEU:HD23	19	0.12
(1,540)	1:A:133:PHE:HD1	1:A:136:LEU:HD21	8	0.12
(1,540)	1:A:133:PHE:HD1	1:A:136:LEU:HD22	8	0.12
(1,540)	1:A:133:PHE:HD1	1:A:136:LEU:HD23	8	0.12
(1,540)	1:A:133:PHE:HD2	1:A:136:LEU:HD21	8	0.12
(1,540)	1:A:133:PHE:HD2	1:A:136:LEU:HD22	8	0.12
(1,540)	1:A:133:PHE:HD2	1:A:136:LEU:HD23	8	0.12
(1,540)	1:A:133:PHE:HD1	1:A:136:LEU:HD21	17	0.12
(1,540)	1:A:133:PHE:HD1	1:A:136:LEU:HD22	17	0.12
(1,540)	1:A:133:PHE:HD1	1:A:136:LEU:HD23	17	0.12
(1,540)	1:A:133:PHE:HD2	1:A:136:LEU:HD21	17	0.12
(1,540)	1:A:133:PHE:HD2	1:A:136:LEU:HD22	17	0.12
(1,540)	1:A:133:PHE:HD2	1:A:136:LEU:HD23	17	0.12
(1,500)	1:A:138:PHE:HD1	1:A:153:VAL:HG21	10	0.12
()/				ortz



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,500)	1:A:138:PHE:HD1	1:A:153:VAL:HG22	10	0.12
(1,500)	1:A:138:PHE:HD1	1:A:153:VAL:HG23	10	0.12
(1,500)	1:A:138:PHE:HD2	1:A:153:VAL:HG21	10	0.12
(1,500)	1:A:138:PHE:HD2	1:A:153:VAL:HG22	10	0.12
(1,500)	1:A:138:PHE:HD2	1:A:153:VAL:HG23	10	0.12
(1,500)	1:A:138:PHE:HD1	1:A:153:VAL:HG21	16	0.12
(1,500)	1:A:138:PHE:HD1	1:A:153:VAL:HG22	16	0.12
(1,500)	1:A:138:PHE:HD1	1:A:153:VAL:HG23	16	0.12
(1,500)	1:A:138:PHE:HD2	1:A:153:VAL:HG21	16	0.12
(1,500)	1:A:138:PHE:HD2	1:A:153:VAL:HG22	16	0.12
(1,500)	1:A:138:PHE:HD2	1:A:153:VAL:HG23	16	0.12
(1,443)	1:A:91:TYR:H	1:A:91:TYR:HE1	14	0.12
(1,40)	1:A:158:TYR:H	1:A:158:TYR:HD1	1	0.12
(1,40)	1:A:158:TYR:H	1:A:158:TYR:HD1	9	0.12
(1,391)	1:A:23:VAL:HG11	1:A:26:LEU:H	10	0.12
(1,391)	1:A:23:VAL:HG12	1:A:26:LEU:H	10	0.12
(1,391)	1:A:23:VAL:HG13	1:A:26:LEU:H	10	0.12
(1,341)	1:A:95:PHE:HD1	1:A:98:ASN:H	13	0.12
(1,341)	1:A:95:PHE:HD2	1:A:98:ASN:H	13	0.12
(1,341)	1:A:95:PHE:HD1	1:A:98:ASN:H	18	0.12
(1,341)	1:A:95:PHE:HD2	1:A:98:ASN:H	18	0.12
(1,265)	1:A:70:ILE:H	1:A:72:LEU:HD11	11	0.12
(1,265)	1:A:70:ILE:H	1:A:72:LEU:HD12	11	0.12
(1,265)	1:A:70:ILE:H	1:A:72:LEU:HD13	11	0.12
(1,223)	1:A:6:ASP:H	1:A:13:LEU:HD11	14	0.12
(1,223)	1:A:6:ASP:H	1:A:13:LEU:HD12	14	0.12
(1,223)	1:A:6:ASP:H	1:A:13:LEU:HD13	14	0.12
(1,222)	1:A:109:ASP:H	1:A:113:VAL:HG21	7	0.12
(1,222)	1:A:109:ASP:H	1:A:113:VAL:HG22	7	0.12
(1,222)	1:A:109:ASP:H	1:A:113:VAL:HG23	7	0.12
(1,186)	1:A:158:TYR:HD1	1:A:159:ARG:H	6	0.12
(1,159)	1:A:2:LEU:HD11	1:A:179:GLU:H	18	0.12
(1,159)	1:A:2:LEU:HD12	1:A:179:GLU:H	18	0.12
(1,159)	1:A:2:LEU:HD13	1:A:179:GLU:H	18	0.12
(1,148)	1:A:71:VAL:HG11	1:A:78:GLU:H	5	0.12
(1,148)	1:A:71:VAL:HG12	1:A:78:GLU:H	5	0.12
(1,148)	1:A:71:VAL:HG13	1:A:78:GLU:H	5	0.12
(1,116)	1:A:74:HIS:H	1:A:76:LEU:HD11	2	0.12
(1,116)	1:A:74:HIS:H	1:A:76:LEU:HD12	2	0.12
(1,116)	1:A:74:HIS:H	1:A:76:LEU:HD13	2	0.12
(1,105)	1:A:127:LEU:HD21	1:A:128:LEU:H	4	0.12
(1,105)	1:A:127:LEU:HD22	1:A:128:LEU:H	4	0.12
_ () == /	. 3:=== 3-			orte



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,105)	1:A:127:LEU:HD23	1:A:128:LEU:H	4	0.12
(1,1031)	1:A:79:MET:O	1:A:138:PHE:H	7	0.12
(1,100)	1:A:58:ASP:H	1:A:59:GLY:H	4	0.12
(1,941)	1:A:135:ASN:H	1:A:135:ASN:HD21	10	0.11
(1,93)	1:A:39:GLU:H	1:A:40:GLY:H	13	0.11
(1,912)	1:A:13:LEU:H	1:A:13:LEU:HD11	1	0.11
(1,912)	1:A:13:LEU:H	1:A:13:LEU:HD12	1	0.11
(1,912)	1:A:13:LEU:H	1:A:13:LEU:HD13	1	0.11
(1,874)	1:A:64:VAL:HG21	1:A:66:ARG:H	16	0.11
(1,874)	1:A:64:VAL:HG22	1:A:66:ARG:H	16	0.11
(1,874)	1:A:64:VAL:HG23	1:A:66:ARG:H	16	0.11
(1,798)	1:A:169:LEU:HD21	1:A:170:MET:H	5	0.11
(1,798)	1:A:169:LEU:HD22	1:A:170:MET:H	5	0.11
(1,798)	1:A:169:LEU:HD23	1:A:170:MET:H	5	0.11
(1,663)	1:A:149:GLU:H	1:A:151:GLY:H	5	0.11
(1,663)	1:A:149:GLU:H	1:A:151:GLY:H	13	0.11
(1,663)	1:A:149:GLU:H	1:A:151:GLY:H	14	0.11
(1,648)	1:A:56:GLU:H	1:A:57:ASP:H	1	0.11
(1,609)	1:A:80:ASN:H	1:A:82:TYR:H	12	0.11
(1,561)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD11	4	0.11
(1,561)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD12	4	0.11
(1,561)	1:A:28:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD13	4	0.11
(1,559)	1:A:92:ILE:HD11	1:A:95:PHE:HE1	12	0.11
(1,559)	1:A:92:ILE:HD12	1:A:95:PHE:HE1	12	0.11
(1,559)	1:A:92:ILE:HD13	1:A:95:PHE:HE1	12	0.11
(1,553)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:128:LEU:HD21	20	0.11
(1,553)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:128:LEU:HD22	20	0.11
(1,553)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:128:LEU:HD23	20	0.11
(1,553)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:128:LEU:HD21	20	0.11
(1,553)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:128:LEU:HD22	20	0.11
(1,553)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:128:LEU:HD23	20	0.11
(1,553)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:128:LEU:HD21	20	0.11
(1,553)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:128:LEU:HD22	20	0.11
(1,553)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:128:LEU:HD23	20	0.11
(1,552)	1:A:13:LEU:HD21	1:A:169:LEU:HD21	9	0.11
(1,552)	1:A:13:LEU:HD21	1:A:169:LEU:HD22	9	0.11
(1,552)	1:A:13:LEU:HD21	1:A:169:LEU:HD23	9	0.11
(1,552)	1:A:13:LEU:HD22	1:A:169:LEU:HD21	9	0.11
(1,552)	1:A:13:LEU:HD22	1:A:169:LEU:HD22	9	0.11
(1,552)	1:A:13:LEU:HD22	1:A:169:LEU:HD23	9	0.11
(1,552)	1:A:13:LEU:HD23	1:A:169:LEU:HD21	9	0.11
(1,552)	1:A:13:LEU:HD23	1:A:169:LEU:HD22	9	0.11



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,552)	1:A:13:LEU:HD23	1:A:169:LEU:HD23	9	0.11
(1,540)	1:A:133:PHE:HD1	1:A:136:LEU:HD21	3	0.11
(1,540)	1:A:133:PHE:HD1	1:A:136:LEU:HD22	3	0.11
(1,540)	1:A:133:PHE:HD1	1:A:136:LEU:HD23	3	0.11
(1,540)	1:A:133:PHE:HD2	1:A:136:LEU:HD21	3	0.11
(1,540)	1:A:133:PHE:HD2	1:A:136:LEU:HD22	3	0.11
(1,540)	1:A:133:PHE:HD2	1:A:136:LEU:HD23	3	0.11
(1,391)	1:A:23:VAL:HG11	1:A:26:LEU:H	20	0.11
(1,391)	1:A:23:VAL:HG12	1:A:26:LEU:H	20	0.11
(1,391)	1:A:23:VAL:HG13	1:A:26:LEU:H	20	0.11
(1,291)	1:A:182:LEU:HD21	1:A:183:GLU:H	19	0.11
(1,291)	1:A:182:LEU:HD22	1:A:183:GLU:H	19	0.11
(1,291)	1:A:182:LEU:HD23	1:A:183:GLU:H	19	0.11
(1,265)	1:A:70:ILE:H	1:A:72:LEU:HD11	18	0.11
(1,265)	1:A:70:ILE:H	1:A:72:LEU:HD12	18	0.11
(1,265)	1:A:70:ILE:H	1:A:72:LEU:HD13	18	0.11
(1,241)	1:A:37:ARG:H	1:A:66:ARG:H	7	0.11
(1,183)	1:A:171:LEU:HD21	1:A:172:VAL:H	7	0.11
(1,183)	1:A:171:LEU:HD22	1:A:172:VAL:H	7	0.11
(1,183)	1:A:171:LEU:HD23	1:A:172:VAL:H	7	0.11
(1,160)	1:A:44:LEU:H	1:A:44:LEU:HD11	3	0.11
(1,160)	1:A:44:LEU:H	1:A:44:LEU:HD12	3	0.11
(1,160)	1:A:44:LEU:H	1:A:44:LEU:HD13	3	0.11
(1,1069)	1:A:35:VAL:O	1:A:67:GLY:H	13	0.11
(1,1045)	1:A:155:ILE:H	1:A:170:MET:O	5	0.11
(1,983)	1:A:100:ILE:HD11	1:A:113:VAL:HG11	4	0.1
(1,983)	1:A:100:ILE:HD11	1:A:113:VAL:HG12	4	0.1
(1,983)	1:A:100:ILE:HD11	1:A:113:VAL:HG13	4	0.1
(1,983)	1:A:100:ILE:HD12	1:A:113:VAL:HG11	4	0.1
(1,983)	1:A:100:ILE:HD12	1:A:113:VAL:HG12	4	0.1
(1,983)	1:A:100:ILE:HD12	1:A:113:VAL:HG13	4	0.1
(1,983)	1:A:100:ILE:HD13	1:A:113:VAL:HG11	4	0.1
(1,983)	1:A:100:ILE:HD13	1:A:113:VAL:HG12	4	0.1
(1,983)	1:A:100:ILE:HD13	1:A:113:VAL:HG13	4	0.1
(1,983)	1:A:100:ILE:HD11	1:A:113:VAL:HG11	12	0.1
(1,983)	1:A:100:ILE:HD11	1:A:113:VAL:HG12	12	0.1
(1,983)	1:A:100:ILE:HD11	1:A:113:VAL:HG13	12	0.1
(1,983)	1:A:100:ILE:HD12	1:A:113:VAL:HG11	12	0.1
(1,983)	1:A:100:ILE:HD12	1:A:113:VAL:HG12	12	0.1
(1,983)	1:A:100:ILE:HD12	1:A:113:VAL:HG13	12	0.1
(1,983)	1:A:100:ILE:HD13	1:A:113:VAL:HG11	12	0.1
(1,983)	1:A:100:ILE:HD13	1:A:113:VAL:HG12	12	0.1



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

(1,983) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG13 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD11 4 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD12 4 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD13 4 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD13 4 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD11 4 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD11 4 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD11 4 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 4 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 4 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD12 4 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD12 4 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD12 4 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD13 4 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD13 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD11 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD12 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD11 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD11 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD11 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 12 0.1 (1,979) 1:A:107:ASN:H 1:A:107:ASN:H 12 0.1 (1,930) 1:A:107:ASN:H 1:A:107:ASN:H 12 0.1 (1,930) 1:A:106:ASN:HD21 1:A:107:ASN:HD21 2 0.1 (1,930) 1:A:13:EU:HD11 1:A:14:SER:H 15 0.1 (1,913) 1:A:13:IEU:HD13 1:A:14:SER:H 15 0.1 (1,913) 1:A:13:IEU:HD13 1:A:14:SER:H 15 0.1 (1,914) 1:A:13:IEU:HD13 1:A:14:SER:H 15 0.1 (1,915) 1:A:13:IEU:H 1:A:13:IEU:HD11 5 0.1 (1,916) 1:A:13:IEU:H 1:A:13:IEU:HD11 7 0.1 (1,917) 1:A:13:IEU:H 1:A:13:IEU:HD13 7 0.1 (1,918) 1:A:13:IEU:H 1:A:13:IEU:HD13 7 0.1 (1,919) 1:A:13:IEU:H 1:A:13:IEU:HD13 7 0.1 (1,901) 1:A:156:ILE:H 1:A:169:LEU:HD13 7 0.1 (1,901) 1:A:156:ILE:H 1:A:169:LEU:HD13 7 0.1 (1,874) 1:A:64:VAL:HG23 1:A:66:ARG:H 8 0.1 (1,874) 1:A:64:VAL:HG23 1:A:66:ARG:H 8 0.1 (1,874) 1:A:64:VAL:HG23 1:A:66:ARG:H 8 0.1 (1,850) 1:A:112:ASP:H 1:A:113:VAL:HG23 10	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,977) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD12 4 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD11 4 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD11 4 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD12 4 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD13 4 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 4 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD11 4 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD12 4 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD12 4 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD12 4 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 4 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD11 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD11 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD12 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD13 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD13 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD12 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD12 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD12 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD12 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD11 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD12 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 12 0.1 (1,977) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 11:A:100:ILE:HD13 12 0.1 (1,977) 1:A:13	(1,983)	1:A:100:ILE:HD13	1:A:113:VAL:HG13	12	0.1
(1,977) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD13 4 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD11 4 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD12 4 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD13 4 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 4 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD11 4 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD11 4 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD12 4 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 4 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD13 4 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD11 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD11 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD11 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD13 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD13 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD12 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD12 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD13 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 12 0.1 (1,977) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 12 0.1 (1,992) 1:A:106:ASN:HD21 1:A:107:ASN:H 4 0.1 (1,913) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:14:SER:H 15 0.1 (1,913) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:14:SER:H 15 0.1 (1,913) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:14:SER:H 15 0.1 (1,912) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:14:SER:H 15 0.1 (1,912) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:16:ILE:HD13 7 0.1 (1,901) 1:A:156:ILE:H 1:A:169:LEU:HD13 7 0.1 (1,901) 1:A:156:ILE:H 1:A:169:LEU:HD13 7 0.1 (1,901) 1:A:156:ILE:H 1:A:169:LEU:HD13 7 0.1 (1,850) 1:A:112:ASP:H 1:A:169:LEU:HD13 7 0.1 (1,850) 1:A:112:ASP:H 1:A:169:LEU:HD13 7 0.1 (1,850) 1:A:112:ASP:H 1:A:169:LEU:HD13 7 0.1 (1,850) 1:A:112:	(1,977)	1:A:113:VAL:HG11	1:A:100:ILE:HD11	4	0.1
(1,977) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD11 4 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD12 4 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 4 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD11 4 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD12 4 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD12 4 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 4 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD13 4 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD11 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD12 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD12 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD13 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD13 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD13 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD11 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD12 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD12 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD12 12 0.1 (1,930) 1:A:10:ASN:H 1:A:10:ILE:HD13 12 0.1 (1,930) 1:A:13:IS:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 12 0.1 (1,931) 1:A:13:IS:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 12 0.1 (1,997) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 12 0.1 (1,990) 1:A:10:ASN:H 1.A:10:ASR:H 15 0.1 (1,913) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:14:SER:H 15 0.1 (1,912) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:14:SER:H 15 0.1 (1,912) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:10:TASN:HD12 1 0.1 (1,912) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:10:TASN:HD12 5 0.1 (1,912) 1:A:13:LEU:HD13 1:A	(1,977)	1:A:113:VAL:HG11	1:A:100:ILE:HD12	4	0.1
(1,977) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD12 4 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD11 4 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD11 4 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD12 4 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD12 4 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 4 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD13 4 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD12 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD12 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD12 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD13 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD11 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD12 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD12 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD12 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD12 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD12 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD12 12 0.1 (1,979) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 12 0.1 (1,930) 1:A:106:ASN:HD21 1:A:107:ASN:HD21 2 0.1 (1,913) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:14:SER:H 15 0.1 (1,912) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:14:SER:H 15 0.1 (1,912) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:14:SER:H 15 0.1 (1,912) 1:A:13:LEU:H 1:A:13:LEU:HD11 5 0.1 (1,901) 1:A:156:ILE:H 1:A:169:LEU:HD12 7 0.1 (1,901) 1:A:156:ILE:H 1:A:169:LEU:HD13 7 0.1 (1,901) 1:A:156:ILE:H 1:A:169:LEU:HD12 7 0.1 (1,801) 1:A:156:ILE:H 1:A:169:LEU:HD13 7 0.1 (1,801) 1:A:156:ILE:H 1:A:169:LEU:HD13 7 0.1 (1,802) 1:A:64:VAL:HG22 1:A:66:ARG:H 8 0.1 (1,874) 1:A:64:VAL:HG23 1:A:66:ARG:H 8 0.1 (1,874) 1:A:64:VAL:HG23 1:A:66:ARG:H 8 0.1 (1,874) 1:A:64:VAL:HG23 1:A:66:ARG:H 8 0.1 (1,850) 1:A:112:ASP:H 1:A:113:VAL:HG23 10 0.1 (1,850) 1:A:112:ASP:H 1:A:113:VAL:HG23 10 0.1	(1,977)	1:A:113:VAL:HG11	1:A:100:ILE:HD13	4	0.1
(1,977) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD13 4 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD11 4 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD12 4 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 4 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD13 4 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD11 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD12 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD12 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD13 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD13 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD11 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD13 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD12 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD12 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 12 0.1 (1,930) 1:A:106:ASN:HD13 1:A:100:ILE:HD13 12 0.1 (1,930) 1:A:106:ASN:HD21 1:A:107:ASN:HD21 2 0.1 (1,929) 1:A:106:ASN:HD21 1:A:107:ASN:H 4 0.1 (1,913) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:14:SER:H 15 0.1 (1,913) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:14:SER:H 15 0.1 (1,913) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:14:SER:H 15 0.1 (1,913) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:14:SER:H 15 0.1 (1,912) 1:A:13:LEU:H 1:A:13:LEU:HD11 5 0.1 (1,912) 1:A:13:LEU:H 1:A:13:LEU:HD11 7 0.1 (1,901) 1:A:156:ILE:H 1:A:169:LEU:HD11 7 0.1 (1,901) 1:A:156:ILE:H 1:A:169:LEU:HD11 7 0.1 (1,901) 1:A:16:ASP:H 1:A:169:LEU:HD13 7 0.1 (1,801) 1:A:16:ASP:H 1:A:169:LEU:HD13 7 0.1 (1,874) 1:A:64:VAL:HG21 1:A:66:ARG:H 8 0.1 (1,874) 1:A:64:VAL:HG22 1:A:66:ARG:H 8 0.1 (1,874) 1:A:64:VAL:HG23 1:A:66:ARG:H 8 0.1 (1,874) 1:A:64:VAL:HG23 1:A:66:ARG:H 8 0.1 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG21 19 0.1 (1,850) 1:A:112:ASP:H 1:A:113:VAL:HG22 10 0.1 (1,850) 1:A:112:ASP:H 1:A:113:VAL:HG23 10 0.1	(1,977)	1:A:113:VAL:HG12	1:A:100:ILE:HD11	4	0.1
(1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD11 4 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD12 4 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 4 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD11 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD12 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD12 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD12 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD11 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD11 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD11 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD13 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD11 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD11 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD12 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD12 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD12 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 12 0.1 (1,930) 1:A:13:S-BU:HD13 1:A:10:TASN:H 4 0.1 (1,930) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:10:TASN:H 4 0.1 (1,913) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:14:SER:H 15 0.1 (1,913) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:14:SER:H 15 0.1 (1,913) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:14:SER:H 15 0.1 (1,913) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:14:SER:H 15 0.1 (1,912) 1:A:13:LEU:H 1:A:13:LEU:HD11 5 0.1 (1,912) 1:A:13:LEU:H 1:A:13:LEU:HD11 7 0.1 (1,901) 1:A:156:ILE:H 1:A:169:LEU:HD13 7 0.1 (1,901) 1:A:156:ILE:H 1:A:169:LEU:HD13 7 0.1 (1,890) 1:A:16:ASP:H 1:A:169:LEU:HD13 7 0.1 (1,891) 1:A:156:ILE:H 1:A:169:LEU:HD13 7 0.1 (1,891) 1:A:16:AG:VAL:HG21 1:A:66:ARG:H 8 0.1 (1,874) 1:A:64:VAL:HG22 1:A:66:ARG:H 8 0.1 (1,874) 1:A:64:VAL:HG23 1:A:66:ARG:H 8 0.1 (1,874) 1:A:64:VAL:HG23 1:A:66:ARG:H 8 0.1 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG23 19 0.1 (1,860) 1:A:112:ASP:H 1:A:113:VAL:HG22 10 0.1 (1,850) 1:A:112:ASP:H 1:A:113:VAL:HG23 10 0.1	(1,977)	1:A:113:VAL:HG12	1:A:100:ILE:HD12	4	0.1
(1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD12 4 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD13 4 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD11 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD12 12 0.1 (1,977) 1:A:13:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD12 12 0.1 (1,977) 1:A:13:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD13 12 0.1 (1,977) 1:A:13:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD13 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD11 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD12 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD13 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD11 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD11 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD12 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD12 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD12 12 0.1 (1,930) 1:A:107:ASN:H 1:A:107:ASN:HD21 2 0.1 (1,930) 1:A:106:ASN:HD21 1:A:107:ASN:HD21 2 0.1 (1,913) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:14:SER:H 15 0.1 (1,913) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:14:SER:H 15 0.1 (1,913) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:14:SER:H 15 0.1 (1,913) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:14:SER:H 15 0.1 (1,912) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:14:SER:H 15 0.1 (1,912) 1:A:13:LEU:H 1:A:13:LEU:HD11 5 0.1 (1,912) 1:A:13:LEU:H 1:A:13:LEU:HD11 7 0.1 (1,901) 1:A:156:ILE:H 1:A:169:LEU:HD11 7 0.1 (1,901) 1:A:156:ILE:H 1:A:169:LEU:HD11 7 0.1 (1,901) 1:A:156:ILE:H 1:A:169:LEU:HD13 7 0.1 (1,89) 1:A:16:A6:VAL:HG21 1:A:66:ARG:H 8 0.1 (1,874) 1:A:64:VAL:HG22 1:A:66:ARG:H 8 0.1 (1,874) 1:A:64:VAL:HG23 1:A:66:ARG:H 8 0.1 (1,874) 1:A:64:VAL:HG23 1:A:66:ARG:H 8 0.1 (1,874) 1:A:64:VAL:HG23 1:A:66:ARG:H 8 0.1 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG22 19 0.1 (1,850) 1:A:112:ASP:H 1:A:113:VAL:HG23 10 0.1 (1,850) 1:A:112:ASP:H 1:A:113:VAL:HG23 10 0.1	(1,977)	1:A:113:VAL:HG12	1:A:100:ILE:HD13	4	0.1
(1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 4 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD11 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD12 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD13 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD13 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD11 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD11 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD12 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD11 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD11 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD12 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD12 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD12 12 0.1 (1,930) 1:A:107:ASN:H 1:A:107:ASN:HD21 12 0.1 (1,930) 1:A:107:ASN:H 1:A:107:ASN:HD21 12 0.1 (1,913) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:14:SER:H 15 0.1 (1,913) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:14:SER:H 15 0.1 (1,913) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:14:SER:H 15 0.1 (1,913) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:14:SER:H 15 0.1 (1,912) 1:A:13:LEU:H 1:A:13:LEU:HD11 5 0.1 (1,912) 1:A:13:LEU:H 1:A:13:LEU:HD11 5 0.1 (1,912) 1:A:13:LEU:H 1:A:13:LEU:HD11 7 0.1 (1,901) 1:A:15:G:ILE:H 1:A:169:LEU:HD11 7 0.1 (1,901) 1:A:15:G:ILE:H 1:A:169:LEU:HD11 7 0.1 (1,801) 1:A:16:A6:VAL:HG21 1:A:66:ARG:H 8 0.1 (1,874) 1:A:64:VAL:HG21 1:A:66:ARG:H 8 0.1 (1,874) 1:A:64:VAL:HG23 1:A:66:ARG:H 8 0.1 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG21 19 0.1 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG22 19 0.1 (1,850) 1:A:112:ASP:H 1:A:113:VAL:HG23 10 0.1	(1,977)	1:A:113:VAL:HG13	1:A:100:ILE:HD11	4	0.1
(1,977) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD11 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD12 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD13 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD11 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD13 12 0.1 (1,977) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 12 0.1 (1,977) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD11 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD12 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD12 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD12 12 0.1 (1,977) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 12 0.1 (1,977) 1:A:13:IA:IA:IA:IA:IB:IA:IA:IA:IA:IA:IA:IA:IA:IA:IA:IA:IA:IA:	(1,977)	1:A:113:VAL:HG13	1:A:100:ILE:HD12	4	0.1
(1,977) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD12 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD13 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD11 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD12 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD12 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 12 0.1 (1,970) 1:A:100:ASN:HD21 1:A:14:SER:H 15 0.1 (1,913) 1:A:13:LEU:HD	(1,977)	1:A:113:VAL:HG13	1:A:100:ILE:HD13	4	0.1
(1,977) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD13 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD11 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD12 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD12 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD12 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 12 0.1 (1,977) 1:A:13:LEV:HG13 1:A:100:ILE:HD13 12 0.1 (1,970) 1:A:107:ASN:HD21 2 0.1 (1,970) 1:A:106:ASN:HD21 1:A:107:ASN:HD21 2 0.1 (1,929) 1:A:106:ASN:HD21 1:A:14:SER:H 15 0.1 (1,913) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:14:SER:H 15 0.1 (1,913) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:13:LEU:HD13	(1,977)	1:A:113:VAL:HG11	1:A:100:ILE:HD11	12	0.1
(1,977) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD11 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD12 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD13 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD11 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD12 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 12 0.1 (1,977) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 12 0.1 (1,930) 1:A:107:ASN:H 1:A:107:ASN:HD21 2 0.1 (1,990) 1:A:106:ASN:HD21 1:A:107:ASN:HD21 2 0.1 (1,913) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:14:SER:H 15 0.1 (1,913) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:14:SER:H 15 0.1 (1,912) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:13:LEU:HD11 5 0.1 (1,912) 1:A:13:LEU:H <t< td=""><td>(1,977)</td><td>1:A:113:VAL:HG11</td><td>1:A:100:ILE:HD12</td><td>12</td><td>0.1</td></t<>	(1,977)	1:A:113:VAL:HG11	1:A:100:ILE:HD12	12	0.1
(1,977) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD12 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD13 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD11 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD12 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 12 0.1 (1,977) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 12 0.1 (1,977) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 12 0.1 (1,930) 1:A:107:ASN:H 12 0.1 (1,930) 1:A:106:ASN:HD21 1:A:107:ASN:HD21 2 0.1 (1,929) 1:A:106:ASN:HD21 1:A:107:ASN:HD21 2 0.1 (1,913) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:14:SER:H 15 0.1 (1,913) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:13:LEU:HD13 1:A:13:LEU:HD13 1:A:13:LEU:HD13 5 0.1 (1,912) 1:A:13:LEU:H 1:A:13:LEU:HD13 5 0.1 0.1 (1	(1,977)	1:A:113:VAL:HG11	1:A:100:ILE:HD13	12	0.1
(1,977) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD12 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD13 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD11 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD12 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 12 0.1 (1,977) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 12 0.1 (1,977) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 12 0.1 (1,930) 1:A:107:ASN:H 12 0.1 (1,930) 1:A:106:ASN:HD21 1:A:107:ASN:HD21 2 0.1 (1,929) 1:A:106:ASN:HD21 1:A:107:ASN:HD21 2 0.1 (1,913) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:14:SER:H 15 0.1 (1,913) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:13:LEU:HD13 1:A:13:LEU:HD13 1:A:13:LEU:HD13 5 0.1 (1,912) 1:A:13:LEU:H 1:A:13:LEU:HD13 5 0.1 0.1 (1	(1,977)	1:A:113:VAL:HG12	1:A:100:ILE:HD11	12	0.1
(1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD11 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD12 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 12 0.1 (1,977) 1:A:107:ASN:H 1:A:107:ASN:HD21 2 0.1 (1,930) 1:A:107:ASN:HD21 1:A:107:ASN:HD21 2 0.1 (1,929) 1:A:106:ASN:HD21 1:A:107:ASN:H 4 0.1 (1,929) 1:A:106:ASN:HD21 1:A:107:ASN:H 4 0.1 (1,913) 1:A:106:ASN:HD21 1:A:107:ASN:H 4 0.1 (1,913) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:14:SER:H 15 0.1 (1,913) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:14:SER:H 15 0.1 (1,913) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:14:SER:H 15 0.1 (1,914) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:14:SER:H 15 0.1 (1,912) 1:A:13:LEU:HD13 5 0.1 (1,912) 1:A:13:LEU:H 1:A:13:LEU:HD12 7		1:A:113:VAL:HG12	1:A:100:ILE:HD12	12	0.1
(1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD12 12 0.1 (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 12 0.1 (1,930) 1:A:107:ASN:H 1:A:107:ASN:HD21 2 0.1 (1,929) 1:A:106:ASN:HD21 1:A:107:ASN:H 4 0.1 (1,913) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:14:SER:H 15 0.1 (1,913) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:14:SER:H 15 0.1 (1,913) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:14:SER:H 15 0.1 (1,913) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:14:SER:H 15 0.1 (1,912) 1:A:13:LEU:H 1:A:13:LEU:HD11 5 0.1 (1,912) 1:A:13:LEU:H 1:A:13:LEU:HD12 5 0.1 (1,912) 1:A:13:LEU:H 1:A:169:LEU:HD13 5 0.1 (1,910) 1:A:156:ILE:H 1:A:169:LEU:HD11 7 0.1 (1,901) 1:A:162:ASP:H 1:A:169:LEU:HD12 7 0.1 (1,89) 1:A:162:ASP:H 1:A:169:LEU:HD13 <t< td=""><td>` '</td><td>1:A:113:VAL:HG12</td><td>1:A:100:ILE:HD13</td><td>12</td><td>0.1</td></t<>	` '	1:A:113:VAL:HG12	1:A:100:ILE:HD13	12	0.1
(1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 12 0.1 (1,930) 1:A:107:ASN:H 1:A:107:ASN:HD21 2 0.1 (1,929) 1:A:106:ASN:HD21 1:A:107:ASN:H 4 0.1 (1,913) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:14:SER:H 15 0.1 (1,913) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:14:SER:H 15 0.1 (1,913) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:14:SER:H 15 0.1 (1,912) 1:A:13:LEU:H 1:A:13:LEU:HD11 5 0.1 (1,912) 1:A:13:LEU:H 1:A:13:LEU:HD12 5 0.1 (1,912) 1:A:13:LEU:H 1:A:169:LEU:HD13 5 0.1 (1,901) 1:A:156:ILE:H 1:A:169:LEU:HD11 7 0.1 (1,901) 1:A:156:ILE:H 1:A:169:LEU:HD12 7 0.1 (1,901) 1:A:156:ILE:H 1:A:169:LEU:HD13 7 0.1 (1,89) 1:A:162:ASP:H 1:A:169:LEU:HD13 7 0.1 (1,874) 1:A:64:VAL:HG21 1:A:66:ARG:H 8 </td <td>(1,977)</td> <td>1:A:113:VAL:HG13</td> <td>1:A:100:ILE:HD11</td> <td>12</td> <td>0.1</td>	(1,977)	1:A:113:VAL:HG13	1:A:100:ILE:HD11	12	0.1
(1,930) 1:A:107:ASN:H 1:A:107:ASN:HD21 2 0.1 (1,929) 1:A:106:ASN:HD21 1:A:107:ASN:H 4 0.1 (1,913) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:14:SER:H 15 0.1 (1,913) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:14:SER:H 15 0.1 (1,913) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:14:SER:H 15 0.1 (1,912) 1:A:13:LEU:H 1:A:13:LEU:HD11 5 0.1 (1,912) 1:A:13:LEU:H 1:A:13:LEU:HD12 5 0.1 (1,912) 1:A:13:LEU:H 1:A:13:LEU:HD13 5 0.1 (1,912) 1:A:15:6:ILE:H 1:A:169:LEU:HD11 7 0.1 (1,901) 1:A:15:6:ILE:H 1:A:169:LEU:HD12 7 0.1 (1,901) 1:A:15:6:ILE:H 1:A:169:LEU:HD13 7 0.1 (1,89) 1:A:162:ASP:H 1:A:163:GLY:H 20 0.1 (1,874) 1:A:64:VAL:HG21 1:A:66:ARG:H 8 0.1 (1,874) 1:A:64:VAL:HG23 1:A:66:ARG:H 8	/	1:A:113:VAL:HG13	1:A:100:ILE:HD12	12	0.1
(1,930) 1:A:107:ASN:H 1:A:107:ASN:HD21 2 0.1 (1,929) 1:A:106:ASN:HD21 1:A:107:ASN:H 4 0.1 (1,913) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:14:SER:H 15 0.1 (1,913) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:14:SER:H 15 0.1 (1,913) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:14:SER:H 15 0.1 (1,912) 1:A:13:LEU:H 1:A:13:LEU:HD11 5 0.1 (1,912) 1:A:13:LEU:H 1:A:13:LEU:HD12 5 0.1 (1,912) 1:A:13:LEU:H 1:A:16:LE:HD13 5 0.1 (1,901) 1:A:156:ILE:H 1:A:169:LEU:HD13 7 0.1 (1,901) 1:A:156:ILE:H 1:A:169:LEU:HD13 7 0.1 (1,801) 1:A:162:ASP:H 1:A:163:GLY:H 20 0.1 (1,874) 1:A:64:VAL:HG21 1:A:66:ARG:H 8 0.1 (1,874) 1:A:64:VAL:HG23 1:A:66:ARG:H 8 0.1 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG22 19	(1,977)	1:A:113:VAL:HG13	1:A:100:ILE:HD13	12	0.1
(1,913) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:14:SER:H 15 0.1 (1,913) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:14:SER:H 15 0.1 (1,913) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:14:SER:H 15 0.1 (1,912) 1:A:13:LEU:H 1:A:13:LEU:HD11 5 0.1 (1,912) 1:A:13:LEU:H 1:A:13:LEU:HD12 5 0.1 (1,912) 1:A:13:LEU:H 1:A:13:LEU:HD13 5 0.1 (1,912) 1:A:156:ILE:H 1:A:169:LEU:HD13 5 0.1 (1,901) 1:A:156:ILE:H 1:A:169:LEU:HD12 7 0.1 (1,901) 1:A:156:ILE:H 1:A:169:LEU:HD13 7 0.1 (1,901) 1:A:166:ILE:H 1:A:169:LEU:HD13 7 0.1 (1,801) 1:A:162:ASP:H 1:A:163:GLY:H 20 0.1 (1,874) 1:A:64:VAL:HG21 1:A:66:ARG:H 8 0.1 (1,874) 1:A:64:VAL:HG23 1:A:66:ARG:H 8 0.1 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG21 19	(1,930)	1:A:107:ASN:H	1:A:107:ASN:HD21	2	0.1
(1,913) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:14:SER:H 15 0.1 (1,913) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:14:SER:H 15 0.1 (1,912) 1:A:13:LEU:H 1:A:13:LEU:HD11 5 0.1 (1,912) 1:A:13:LEU:H 1:A:13:LEU:HD12 5 0.1 (1,912) 1:A:13:LEU:H 1:A:13:LEU:HD13 5 0.1 (1,912) 1:A:156:ILE:H 1:A:169:LEU:HD13 5 0.1 (1,901) 1:A:156:ILE:H 1:A:169:LEU:HD12 7 0.1 (1,901) 1:A:156:ILE:H 1:A:169:LEU:HD13 7 0.1 (1,901) 1:A:156:ILE:H 1:A:163:GLY:H 20 0.1 (1,89) 1:A:162:ASP:H 1:A:163:GLY:H 20 0.1 (1,874) 1:A:64:VAL:HG21 1:A:66:ARG:H 8 0.1 (1,874) 1:A:64:VAL:HG22 1:A:66:ARG:H 8 0.1 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG21 19 0.1 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG23 19	(1,929)	1:A:106:ASN:HD21	1:A:107:ASN:H	4	0.1
(1,913) 1:A:13:LEU:HD13 1:A:14:SER:H 15 0.1 (1,912) 1:A:13:LEU:H 1:A:13:LEU:HD11 5 0.1 (1,912) 1:A:13:LEU:H 1:A:13:LEU:HD12 5 0.1 (1,912) 1:A:13:LEU:H 1:A:13:LEU:HD13 5 0.1 (1,901) 1:A:156:ILE:H 1:A:169:LEU:HD11 7 0.1 (1,901) 1:A:156:ILE:H 1:A:169:LEU:HD12 7 0.1 (1,901) 1:A:156:ILE:H 1:A:169:LEU:HD13 7 0.1 (1,801) 1:A:162:ASP:H 1:A:163:GLY:H 20 0.1 (1,89) 1:A:162:ASP:H 1:A:66:ARG:H 8 0.1 (1,874) 1:A:64:VAL:HG21 1:A:66:ARG:H 8 0.1 (1,874) 1:A:64:VAL:HG23 1:A:66:ARG:H 8 0.1 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG21 19 0.1 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG23 19 0.1 (1,850) 1:A:112:ASP:H 1:A:113:VAL:HG21 10	(1,913)	1:A:13:LEU:HD11	1:A:14:SER:H	15	0.1
(1,912) 1:A:13:LEU:H 1:A:13:LEU:HD11 5 0.1 (1,912) 1:A:13:LEU:H 1:A:13:LEU:HD12 5 0.1 (1,912) 1:A:13:LEU:H 1:A:13:LEU:HD13 5 0.1 (1,901) 1:A:156:ILE:H 1:A:169:LEU:HD11 7 0.1 (1,901) 1:A:156:ILE:H 1:A:169:LEU:HD12 7 0.1 (1,901) 1:A:166:ILE:H 1:A:169:LEU:HD13 7 0.1 (1,89) 1:A:162:ASP:H 1:A:163:GLY:H 20 0.1 (1,89) 1:A:162:ASP:H 1:A:66:ARG:H 8 0.1 (1,874) 1:A:64:VAL:HG21 1:A:66:ARG:H 8 0.1 (1,874) 1:A:64:VAL:HG22 1:A:66:ARG:H 8 0.1 (1,874) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG21 19 0.1 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG22 19 0.1 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG23 19 0.1 (1,850) 1:A:112:ASP:H 1:A:113:VAL:HG22 10 <	(1,913)	1:A:13:LEU:HD12	1:A:14:SER:H	15	0.1
(1,912) 1:A:13:LEU:H 1:A:13:LEU:HD12 5 0.1 (1,912) 1:A:13:LEU:H 1:A:13:LEU:HD13 5 0.1 (1,901) 1:A:156:ILE:H 1:A:169:LEU:HD11 7 0.1 (1,901) 1:A:156:ILE:H 1:A:169:LEU:HD12 7 0.1 (1,901) 1:A:156:ILE:H 1:A:169:LEU:HD13 7 0.1 (1,89) 1:A:162:ASP:H 1:A:163:GLY:H 20 0.1 (1,874) 1:A:64:VAL:HG21 1:A:66:ARG:H 8 0.1 (1,874) 1:A:64:VAL:HG22 1:A:66:ARG:H 8 0.1 (1,874) 1:A:64:VAL:HG23 1:A:66:ARG:H 8 0.1 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG21 19 0.1 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG22 19 0.1 (1,850) 1:A:112:ASP:H 1:A:113:VAL:HG21 10 0.1 (1,850) 1:A:112:ASP:H 1:A:113:VAL:HG23 10 0.1	(1,913)	1:A:13:LEU:HD13	1:A:14:SER:H	15	0.1
(1,912) 1:A:13:LEU:H 1:A:13:LEU:HD13 5 0.1 (1,901) 1:A:156:ILE:H 1:A:169:LEU:HD11 7 0.1 (1,901) 1:A:156:ILE:H 1:A:169:LEU:HD12 7 0.1 (1,901) 1:A:156:ILE:H 1:A:169:LEU:HD13 7 0.1 (1,89) 1:A:162:ASP:H 1:A:163:GLY:H 20 0.1 (1,874) 1:A:64:VAL:HG21 1:A:66:ARG:H 8 0.1 (1,874) 1:A:64:VAL:HG22 1:A:66:ARG:H 8 0.1 (1,874) 1:A:64:VAL:HG23 1:A:66:ARG:H 8 0.1 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG21 19 0.1 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG22 19 0.1 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG23 19 0.1 (1,850) 1:A:112:ASP:H 1:A:113:VAL:HG21 10 0.1 (1,850) 1:A:112:ASP:H 1:A:113:VAL:HG23 10 0.1	(1,912)	1:A:13:LEU:H	1:A:13:LEU:HD11	5	0.1
(1,901) 1:A:156:ILE:H 1:A:169:LEU:HD11 7 0.1 (1,901) 1:A:156:ILE:H 1:A:169:LEU:HD12 7 0.1 (1,901) 1:A:156:ILE:H 1:A:169:LEU:HD13 7 0.1 (1,80) 1:A:162:ASP:H 1:A:163:GLY:H 20 0.1 (1,874) 1:A:64:VAL:HG21 1:A:66:ARG:H 8 0.1 (1,874) 1:A:64:VAL:HG22 1:A:66:ARG:H 8 0.1 (1,874) 1:A:64:VAL:HG23 1:A:66:ARG:H 8 0.1 (1,874) 1:A:62:GLU:H 1:A:66:ARG:H 8 0.1 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG21 19 0.1 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG22 19 0.1 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG23 19 0.1 (1,850) 1:A:112:ASP:H 1:A:113:VAL:HG21 10 0.1 (1,850) 1:A:112:ASP:H 1:A:113:VAL:HG22 10 0.1 (1,850) 1:A:112:ASP:H 1:A:113:VAL:HG23 10 0.1	(1,912)	1:A:13:LEU:H	1:A:13:LEU:HD12	5	0.1
(1,901) 1:A:156:ILE:H 1:A:169:LEU:HD12 7 0.1 (1,901) 1:A:156:ILE:H 1:A:169:LEU:HD13 7 0.1 (1,89) 1:A:162:ASP:H 1:A:163:GLY:H 20 0.1 (1,874) 1:A:64:VAL:HG21 1:A:66:ARG:H 8 0.1 (1,874) 1:A:64:VAL:HG22 1:A:66:ARG:H 8 0.1 (1,874) 1:A:64:VAL:HG23 1:A:66:ARG:H 8 0.1 (1,874) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG21 19 0.1 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG22 19 0.1 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG23 19 0.1 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG23 19 0.1 (1,862) 1:A:112:ASP:H 1:A:113:VAL:HG21 10 0.1 (1,850) 1:A:112:ASP:H 1:A:113:VAL:HG22 10 0.1 (1,850) 1:A:112:ASP:H 1:A:113:VAL:HG23 10 0.1	(1,912)	1:A:13:LEU:H	1:A:13:LEU:HD13	5	0.1
(1,901) 1:A:156:ILE:H 1:A:169:LEU:HD13 7 0.1 (1,89) 1:A:162:ASP:H 1:A:163:GLY:H 20 0.1 (1,874) 1:A:64:VAL:HG21 1:A:66:ARG:H 8 0.1 (1,874) 1:A:64:VAL:HG22 1:A:66:ARG:H 8 0.1 (1,874) 1:A:64:VAL:HG23 1:A:66:ARG:H 8 0.1 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG21 19 0.1 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG22 19 0.1 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG23 19 0.1 (1,850) 1:A:112:ASP:H 1:A:113:VAL:HG21 10 0.1 (1,850) 1:A:112:ASP:H 1:A:113:VAL:HG22 10 0.1 (1,850) 1:A:112:ASP:H 1:A:113:VAL:HG23 10 0.1	(1,901)	1:A:156:ILE:H	1:A:169:LEU:HD11	7	0.1
(1,89) 1:A:162:ASP:H 1:A:163:GLY:H 20 0.1 (1,874) 1:A:64:VAL:HG21 1:A:66:ARG:H 8 0.1 (1,874) 1:A:64:VAL:HG22 1:A:66:ARG:H 8 0.1 (1,874) 1:A:64:VAL:HG23 1:A:66:ARG:H 8 0.1 (1,874) 1:A:64:VAL:HG23 19 0.1 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG21 19 0.1 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG22 19 0.1 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG23 19 0.1 (1,850) 1:A:112:ASP:H 1:A:113:VAL:HG21 10 0.1 (1,850) 1:A:112:ASP:H 1:A:113:VAL:HG22 10 0.1 (1,850) 1:A:112:ASP:H 1:A:113:VAL:HG23 10 0.1	(1,901)	1:A:156:ILE:H	1:A:169:LEU:HD12	7	0.1
(1,874) 1:A:64:VAL:HG21 1:A:66:ARG:H 8 0.1 (1,874) 1:A:64:VAL:HG22 1:A:66:ARG:H 8 0.1 (1,874) 1:A:64:VAL:HG23 1:A:66:ARG:H 8 0.1 (1,874) 1:A:64:VAL:HG23 19 0.1 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG21 19 0.1 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG23 19 0.1 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG23 19 0.1 (1,850) 1:A:112:ASP:H 1:A:113:VAL:HG21 10 0.1 (1,850) 1:A:112:ASP:H 1:A:113:VAL:HG22 10 0.1 (1,850) 1:A:112:ASP:H 1:A:113:VAL:HG23 10 0.1	(1,901)	1:A:156:ILE:H	1:A:169:LEU:HD13	7	0.1
(1,874) 1:A:64:VAL:HG22 1:A:66:ARG:H 8 0.1 (1,874) 1:A:64:VAL:HG23 1:A:66:ARG:H 8 0.1 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG21 19 0.1 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG22 19 0.1 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG23 19 0.1 (1,862) 1:A:112:ASP:H 1:A:113:VAL:HG21 10 0.1 (1,850) 1:A:112:ASP:H 1:A:113:VAL:HG22 10 0.1 (1,850) 1:A:112:ASP:H 1:A:113:VAL:HG23 10 0.1	(1,89)	1:A:162:ASP:H	1:A:163:GLY:H	20	0.1
(1,874) 1:A:64:VAL:HG22 1:A:66:ARG:H 8 0.1 (1,874) 1:A:64:VAL:HG23 1:A:66:ARG:H 8 0.1 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG21 19 0.1 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG22 19 0.1 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG23 19 0.1 (1,862) 1:A:112:ASP:H 1:A:113:VAL:HG21 10 0.1 (1,850) 1:A:112:ASP:H 1:A:113:VAL:HG22 10 0.1 (1,850) 1:A:112:ASP:H 1:A:113:VAL:HG23 10 0.1 (1,850) 1:A:112:ASP:H 1:A:113:VAL:HG23 10 0.1		1:A:64:VAL:HG21	1:A:66:ARG:H	8	0.1
(1,874) 1:A:64:VAL:HG23 1:A:66:ARG:H 8 0.1 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG21 19 0.1 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG22 19 0.1 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG23 19 0.1 (1,862) 1:A:112:ASP:H 1:A:113:VAL:HG21 10 0.1 (1,850) 1:A:112:ASP:H 1:A:113:VAL:HG22 10 0.1 (1,850) 1:A:112:ASP:H 1:A:113:VAL:HG23 10 0.1	. ,	1:A:64:VAL:HG22	1:A:66:ARG:H	8	0.1
(1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG21 19 0.1 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG22 19 0.1 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG23 19 0.1 (1,850) 1:A:112:ASP:H 1:A:113:VAL:HG21 10 0.1 (1,850) 1:A:112:ASP:H 1:A:113:VAL:HG22 10 0.1 (1,850) 1:A:112:ASP:H 1:A:113:VAL:HG23 10 0.1	· · /	1:A:64:VAL:HG23	1:A:66:ARG:H		0.1
(1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG22 19 0.1 (1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG23 19 0.1 (1,850) 1:A:112:ASP:H 1:A:113:VAL:HG21 10 0.1 (1,850) 1:A:112:ASP:H 1:A:113:VAL:HG22 10 0.1 (1,850) 1:A:112:ASP:H 1:A:113:VAL:HG23 10 0.1					
(1,862) 1:A:62:GLU:H 1:A:64:VAL:HG23 19 0.1 (1,850) 1:A:112:ASP:H 1:A:113:VAL:HG21 10 0.1 (1,850) 1:A:112:ASP:H 1:A:113:VAL:HG22 10 0.1 (1,850) 1:A:112:ASP:H 1:A:113:VAL:HG23 10 0.1	· · /	1:A:62:GLU:H	1:A:64:VAL:HG22	19	0.1
(1,850) 1:A:112:ASP:H 1:A:113:VAL:HG21 10 0.1 (1,850) 1:A:112:ASP:H 1:A:113:VAL:HG22 10 0.1 (1,850) 1:A:112:ASP:H 1:A:113:VAL:HG23 10 0.1	/	1:A:62:GLU:H	1:A:64:VAL:HG23		
(1,850) 1:A:112:ASP:H 1:A:113:VAL:HG22 10 0.1 (1,850) 1:A:112:ASP:H 1:A:113:VAL:HG23 10 0.1	` ,	1:A:112:ASP:H	1:A:113:VAL:HG21	10	0.1
(1,850) 1:A:112:ASP:H 1:A:113:VAL:HG23 10 0.1	, ,		1:A:113:VAL:HG22		
	· · /	1:A:112:ASP:H		10	0.1
	/	1:A:33:LYS:H			
(1,837) 1:A:33:LYS:H 1:A:35:VAL:HG12 6 0.1	/				



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,837)	1:A:33:LYS:H	1:A:35:VAL:HG13	6	0.1
(1,834)	1:A:71:VAL:HG11	1:A:75:LYS:H	7	0.1
(1,834)	1:A:71:VAL:HG12	1:A:75:LYS:H	7	0.1
(1,834)	1:A:71:VAL:HG13	1:A:75:LYS:H	7	0.1
(1,816)	1:A:67:GLY:H	1:A:72:LEU:HD21	20	0.1
(1,816)	1:A:67:GLY:H	1:A:72:LEU:HD22	20	0.1
(1,816)	1:A:67:GLY:H	1:A:72:LEU:HD23	20	0.1
(1,814)	1:A:27:VAL:HG11	1:A:173:LYS:H	10	0.1
(1,814)	1:A:27:VAL:HG12	1:A:173:LYS:H	10	0.1
(1,814)	1:A:27:VAL:HG13	1:A:173:LYS:H	10	0.1
(1,79)	1:A:13:LEU:H	1:A:14:SER:H	6	0.1
(1,79)	1:A:13:LEU:H	1:A:14:SER:H	16	0.1
(1,775)	1:A:71:VAL:HG11	1:A:77:VAL:H	18	0.1
(1,775)	1:A:71:VAL:HG12	1:A:77:VAL:H	18	0.1
(1,775)	1:A:71:VAL:HG13	1:A:77:VAL:H	18	0.1
(1,743)	1:A:42:ILE:HD11	1:A:44:LEU:HD11	7	0.1
(1,743)	1:A:42:ILE:HD11	1:A:44:LEU:HD12	7	0.1
(1,743)	1:A:42:ILE:HD11	1:A:44:LEU:HD13	7	0.1
(1,743)	1:A:42:ILE:HD12	1:A:44:LEU:HD11	7	0.1
(1,743)	1:A:42:ILE:HD12	1:A:44:LEU:HD12	7	0.1
(1,743)	1:A:42:ILE:HD12	1:A:44:LEU:HD13	7	0.1
(1,743)	1:A:42:ILE:HD13	1:A:44:LEU:HD11	7	0.1
(1,743)	1:A:42:ILE:HD13	1:A:44:LEU:HD12	7	0.1
(1,743)	1:A:42:ILE:HD13	1:A:44:LEU:HD13	7	0.1
(1,730)	1:A:27:VAL:HG11	1:A:120:ILE:HD11	18	0.1
(1,730)	1:A:27:VAL:HG11	1:A:120:ILE:HD12	18	0.1
(1,730)	1:A:27:VAL:HG11	1:A:120:ILE:HD13	18	0.1
(1,730)	1:A:27:VAL:HG12	1:A:120:ILE:HD11	18	0.1
(1,730)	1:A:27:VAL:HG12	1:A:120:ILE:HD12	18	0.1
(1,730)	1:A:27:VAL:HG12	1:A:120:ILE:HD13	18	0.1
(1,730)	1:A:27:VAL:HG13	1:A:120:ILE:HD11	18	0.1
(1,730)	1:A:27:VAL:HG13	1:A:120:ILE:HD12	18	0.1
(1,730)	1:A:27:VAL:HG13	1:A:120:ILE:HD13	18	0.1
(1,668)	1:A:55:ALA:H	1:A:56:GLU:H	5	0.1
(1,592)	1:A:128:LEU:HD21	1:A:136:LEU:HD21	12	0.1
(1,592)	1:A:128:LEU:HD21	1:A:136:LEU:HD22	12	0.1
(1,592)	1:A:128:LEU:HD21	1:A:136:LEU:HD23	12	0.1
(1,592)	1:A:128:LEU:HD22	1:A:136:LEU:HD21	12	0.1
(1,592)	1:A:128:LEU:HD22	1:A:136:LEU:HD22	12	0.1
(1,592)	1:A:128:LEU:HD22	1:A:136:LEU:HD23	12	0.1
(1,592)	1:A:128:LEU:HD23	1:A:136:LEU:HD21	12	0.1
(1,592)	1:A:128:LEU:HD23	1:A:136:LEU:HD22	12	0.1
	1	<u> </u>		d on next mage



Continued from previous page...

(1,592) 1:A:128:LEU:HD23 1:A:136:LEU:HD23 12 0.1 (1,565) 1:A:68:ILE:HD11 1:A:139:PHE:HZ 2 0.1 (1,565) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:139:PHE:HZ 2 0.1 (1,565) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:139:PHE:HZ 2 0.1 (1,565) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:176:ILE:HD11 12 0.1 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD12 12 0.1 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD13 12 0.1 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD13 12 0.1 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD13 12 0.1 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:124:VAL:HG21 3 0.1 (1,557) 1:A:92:ILE:HD11 1:A:124:VAL:HG23 3 0.1 (1,557) 1:A:92:ILE:HD12 1:A:124:VAL:HG23 3 0.1 (1,557) 1:A:92:ILE:HD12 1:A:124:VAL:HG23 3 0.1 (1,557) 1:A:92:ILE:HD13 1:A:124:VAL:HG21 3 0.1 (1,557) 1:A:92:ILE:HD13	
(1,565) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:139:PHE:HZ 2 0.1 (1,565) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:139:PHE:HZ 2 0.1 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD11 12 0.1 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD12 12 0.1 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD13 12 0.1 (1,561) 1:A:92:ILE:HD11 1:A:124:VAL:HG21 3 0.1 (1,557) 1:A:92:ILE:HD11 1:A:124:VAL:HG22 3 0.1 (1,557) 1:A:92:ILE:HD12 1:A:124:VAL:HG23 3 0.1 (1,557) 1:A:92:ILE:HD12 1:A:124:VAL:HG22 3 0.1 (1,557) 1:A:92:ILE:HD12 1:A:124:VAL:HG23 3 0.1 (1,557) 1:A:92:ILE:HD13 1:A:124:VAL:HG21 3 0.1 (1,557) 1:A:92:ILE:HD13 1:A:124:VAL:HG21 3 0.1 (1,557) 1:A:92:ILE:HD13 1:A:124:VAL:HG21 3 0.1	
(1,565) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:139:PHE:HZ 2 0.1 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD11 12 0.1 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD12 12 0.1 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD13 12 0.1 (1,561) 1:A:92:ILE:HD11 1:A:124:VAL:HG21 3 0.1 (1,557) 1:A:92:ILE:HD11 1:A:124:VAL:HG22 3 0.1 (1,557) 1:A:92:ILE:HD12 1:A:124:VAL:HG23 3 0.1 (1,557) 1:A:92:ILE:HD12 1:A:124:VAL:HG21 3 0.1 (1,557) 1:A:92:ILE:HD12 1:A:124:VAL:HG23 3 0.1 (1,557) 1:A:92:ILE:HD13 1:A:124:VAL:HG21 3 0.1 (1,557) 1:A:92:ILE:HD13 1:A:124:VAL:HG21 3 0.1 (1,557) 1:A:92:ILE:HD13 1:A:124:VAL:HG21 3 0.1 (1,557) 1:A:92:ILE:HD13 1:A:124:VAL:HG22 3 0.1	
(1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD11 12 0.1 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD12 12 0.1 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD13 12 0.1 (1,561) 1:A:92:ILE:HD11 1:A:124:VAL:HG21 3 0.1 (1,557) 1:A:92:ILE:HD11 1:A:124:VAL:HG22 3 0.1 (1,557) 1:A:92:ILE:HD11 1:A:124:VAL:HG23 3 0.1 (1,557) 1:A:92:ILE:HD12 1:A:124:VAL:HG21 3 0.1 (1,557) 1:A:92:ILE:HD12 1:A:124:VAL:HG23 3 0.1 (1,557) 1:A:92:ILE:HD13 1:A:124:VAL:HG21 3 0.1 (1,557) 1:A:92:ILE:HD13 1:A:124:VAL:HG21 3 0.1 (1,557) 1:A:92:ILE:HD13 1:A:124:VAL:HG21 3 0.1 (1,557) 1:A:92:ILE:HD13 1:A:124:VAL:HG22 3 0.1	
(1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD12 12 0.1 (1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD13 12 0.1 (1,557) 1:A:92:ILE:HD11 1:A:124:VAL:HG21 3 0.1 (1,557) 1:A:92:ILE:HD11 1:A:124:VAL:HG22 3 0.1 (1,557) 1:A:92:ILE:HD12 1:A:124:VAL:HG23 3 0.1 (1,557) 1:A:92:ILE:HD12 1:A:124:VAL:HG21 3 0.1 (1,557) 1:A:92:ILE:HD12 1:A:124:VAL:HG22 3 0.1 (1,557) 1:A:92:ILE:HD13 1:A:124:VAL:HG21 3 0.1 (1,557) 1:A:92:ILE:HD13 1:A:124:VAL:HG21 3 0.1 (1,557) 1:A:92:ILE:HD13 1:A:124:VAL:HG21 3 0.1	
(1,561) 1:A:28:TYR:HD1 1:A:176:ILE:HD13 12 0.1 (1,557) 1:A:92:ILE:HD11 1:A:124:VAL:HG21 3 0.1 (1,557) 1:A:92:ILE:HD11 1:A:124:VAL:HG22 3 0.1 (1,557) 1:A:92:ILE:HD11 1:A:124:VAL:HG23 3 0.1 (1,557) 1:A:92:ILE:HD12 1:A:124:VAL:HG21 3 0.1 (1,557) 1:A:92:ILE:HD12 1:A:124:VAL:HG22 3 0.1 (1,557) 1:A:92:ILE:HD12 1:A:124:VAL:HG23 3 0.1 (1,557) 1:A:92:ILE:HD13 1:A:124:VAL:HG21 3 0.1 (1,557) 1:A:92:ILE:HD13 1:A:124:VAL:HG21 3 0.1 (1,557) 1:A:92:ILE:HD13 1:A:124:VAL:HG22 3 0.1	
(1,557) 1:A:92:ILE:HD11 1:A:124:VAL:HG21 3 0.1 (1,557) 1:A:92:ILE:HD11 1:A:124:VAL:HG22 3 0.1 (1,557) 1:A:92:ILE:HD11 1:A:124:VAL:HG23 3 0.1 (1,557) 1:A:92:ILE:HD12 1:A:124:VAL:HG21 3 0.1 (1,557) 1:A:92:ILE:HD12 1:A:124:VAL:HG22 3 0.1 (1,557) 1:A:92:ILE:HD12 1:A:124:VAL:HG23 3 0.1 (1,557) 1:A:92:ILE:HD13 1:A:124:VAL:HG21 3 0.1 (1,557) 1:A:92:ILE:HD13 1:A:124:VAL:HG22 3 0.1 (1,557) 1:A:92:ILE:HD13 1:A:124:VAL:HG22 3 0.1	
(1,557) 1:A:92:ILE:HD11 1:A:124:VAL:HG22 3 0.1 (1,557) 1:A:92:ILE:HD11 1:A:124:VAL:HG23 3 0.1 (1,557) 1:A:92:ILE:HD12 1:A:124:VAL:HG21 3 0.1 (1,557) 1:A:92:ILE:HD12 1:A:124:VAL:HG22 3 0.1 (1,557) 1:A:92:ILE:HD12 1:A:124:VAL:HG23 3 0.1 (1,557) 1:A:92:ILE:HD13 1:A:124:VAL:HG21 3 0.1 (1,557) 1:A:92:ILE:HD13 1:A:124:VAL:HG21 3 0.1 (1,557) 1:A:92:ILE:HD13 1:A:124:VAL:HG22 3 0.1	
(1,557) 1:A:92:ILE:HD11 1:A:124:VAL:HG23 3 0.1 (1,557) 1:A:92:ILE:HD12 1:A:124:VAL:HG21 3 0.1 (1,557) 1:A:92:ILE:HD12 1:A:124:VAL:HG22 3 0.1 (1,557) 1:A:92:ILE:HD12 1:A:124:VAL:HG23 3 0.1 (1,557) 1:A:92:ILE:HD13 1:A:124:VAL:HG21 3 0.1 (1,557) 1:A:92:ILE:HD13 1:A:124:VAL:HG22 3 0.1	
(1,557) 1:A:92:ILE:HD12 1:A:124:VAL:HG21 3 0.1 (1,557) 1:A:92:ILE:HD12 1:A:124:VAL:HG22 3 0.1 (1,557) 1:A:92:ILE:HD12 1:A:124:VAL:HG23 3 0.1 (1,557) 1:A:92:ILE:HD13 1:A:124:VAL:HG21 3 0.1 (1,557) 1:A:92:ILE:HD13 1:A:124:VAL:HG22 3 0.1 (1,557) 1:A:92:ILE:HD13 1:A:124:VAL:HG22 3 0.1	
(1,557) 1:A:92:ILE:HD12 1:A:124:VAL:HG22 3 0.1 (1,557) 1:A:92:ILE:HD12 1:A:124:VAL:HG23 3 0.1 (1,557) 1:A:92:ILE:HD13 1:A:124:VAL:HG21 3 0.1 (1,557) 1:A:92:ILE:HD13 1:A:124:VAL:HG22 3 0.1 (1,557) 1:A:92:ILE:HD13 1:A:124:VAL:HG22 3 0.1	
(1,557) 1:A:92:ILE:HD12 1:A:124:VAL:HG23 3 0.1 (1,557) 1:A:92:ILE:HD13 1:A:124:VAL:HG21 3 0.1 (1,557) 1:A:92:ILE:HD13 1:A:124:VAL:HG22 3 0.1	
(1,557) 1:A:92:ILE:HD13 1:A:124:VAL:HG21 3 0.1 (1,557) 1:A:92:ILE:HD13 1:A:124:VAL:HG22 3 0.1	
(1,557) 1:A:92:ILE:HD13 1:A:124:VAL:HG22 3 0.1	
(1,557) 1:A:92:ILE:HD13 1:A:124:VAL:HG23 3 0.1	
(1,557) 1:A:92:ILE:HD11 1:A:124:VAL:HG21 7 0.1	
(1,557) 1:A:92:ILE:HD11 1:A:124:VAL:HG22 7 0.1	
(1,557) 1:A:92:ILE:HD11 1:A:124:VAL:HG23 7 0.1	
(1,557) 1:A:92:ILE:HD12 1:A:124:VAL:HG21 7 0.1	
(1,557) 1:A:92:ILE:HD12 1:A:124:VAL:HG22 7 0.1	
(1,557) 1:A:92:ILE:HD12 1:A:124:VAL:HG23 7 0.1	
(1,557) 1:A:92:ILE:HD13 1:A:124:VAL:HG21 7 0.1	
(1,557) 1:A:92:ILE:HD13 1:A:124:VAL:HG22 7 0.1	
(1,557) 1:A:92:ILE:HD13 1:A:124:VAL:HG23 7 0.1	
(1,553) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD21 13 0.1	
(1,553) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD22 13 0.1	
(1,553) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD23 13 0.1	
(1,553) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD21 13 0.1	
(1,553) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD22 13 0.1	
(1,553) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD23 13 0.1	
(1,553) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD21 13 0.1	
(1,553) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD22 13 0.1	
(1,553) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD23 13 0.1	
(1,55) 1:A:30:PHE:H 1:A:70:ILE:HD11 10 0.1	
(1,55) 1:A:30:PHE:H 1:A:70:ILE:HD12 10 0.1	
(1,55) 1:A:30:PHE:H 1:A:70:ILE:HD13 10 0.1	
(1,513) 1:A:127:LEU:HD21 1:A:133:PHE:HD1 3 0.1	
(1,513) 1:A:127:LEU:HD21 1:A:133:PHE:HD2 3 0.1	
(1,513) 1:A:127:LEU:HD22 1:A:133:PHE:HD1 3 0.1	
(1,513) 1:A:127:LEU:HD22 1:A:133:PHE:HD2 3 0.1	
(1,513) 1:A:127:LEU:HD23 1:A:133:PHE:HD1 3 0.1	



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,513)	1:A:127:LEU:HD23	1:A:133:PHE:HD2	3	0.1
(1,513)	1:A:127:LEU:HD21	1:A:133:PHE:HD1	12	0.1
(1,513)	1:A:127:LEU:HD21	1:A:133:PHE:HD2	12	0.1
(1,513)	1:A:127:LEU:HD22	1:A:133:PHE:HD1	12	0.1
(1,513)	1:A:127:LEU:HD22	1:A:133:PHE:HD2	12	0.1
(1,513)	1:A:127:LEU:HD23	1:A:133:PHE:HD1	12	0.1
(1,513)	1:A:127:LEU:HD23	1:A:133:PHE:HD2	12	0.1
(1,475)	1:A:23:VAL:H	1:A:28:TYR:HD1	13	0.1
(1,449)	1:A:4:TYR:HD1	1:A:15:SER:H	14	0.1
(1,415)	1:A:131:ASP:H	1:A:134:LYS:H	17	0.1
(1,391)	1:A:23:VAL:HG11	1:A:26:LEU:H	15	0.1
(1,391)	1:A:23:VAL:HG12	1:A:26:LEU:H	15	0.1
(1,391)	1:A:23:VAL:HG13	1:A:26:LEU:H	15	0.1
(1,391)	1:A:23:VAL:HG11	1:A:26:LEU:H	19	0.1
(1,391)	1:A:23:VAL:HG12	1:A:26:LEU:H	19	0.1
(1,391)	1:A:23:VAL:HG13	1:A:26:LEU:H	19	0.1
(1,373)	1:A:175:ALA:H	1:A:176:ILE:HD11	20	0.1
(1,373)	1:A:175:ALA:H	1:A:176:ILE:HD12	20	0.1
(1,373)	1:A:175:ALA:H	1:A:176:ILE:HD13	20	0.1
(1,360)	1:A:161:VAL:H	1:A:164:THR:H	19	0.1
(1,291)	1:A:182:LEU:HD21	1:A:183:GLU:H	3	0.1
(1,291)	1:A:182:LEU:HD22	1:A:183:GLU:H	3	0.1
(1,291)	1:A:182:LEU:HD23	1:A:183:GLU:H	3	0.1
(1,265)	1:A:70:ILE:H	1:A:72:LEU:HD11	13	0.1
(1,265)	1:A:70:ILE:H	1:A:72:LEU:HD12	13	0.1
(1,265)	1:A:70:ILE:H	1:A:72:LEU:HD13	13	0.1
(1,241)	1:A:37:ARG:H	1:A:66:ARG:H	1	0.1
(1,223)	1:A:6:ASP:H	1:A:13:LEU:HD11	5	0.1
(1,223)	1:A:6:ASP:H	1:A:13:LEU:HD12	5	0.1
(1,223)	1:A:6:ASP:H	1:A:13:LEU:HD13	5	0.1
(1,160)	1:A:44:LEU:H	1:A:44:LEU:HD11	9	0.1
(1,160)	1:A:44:LEU:H	1:A:44:LEU:HD12	9	0.1
(1,160)	1:A:44:LEU:H	1:A:44:LEU:HD13	9	0.1
(1,1087)	1:A:90:ALA:O	1:A:94:LYS:H	20	0.1
(1,1045)	1:A:155:ILE:H	1:A:170:MET:O	16	0.1
(1,1031)	1:A:79:MET:O	1:A:138:PHE:H	15	0.1
(1,983)	1:A:100:ILE:HD11	1:A:113:VAL:HG11	8	0.09
(1,983)	1:A:100:ILE:HD11	1:A:113:VAL:HG12	8	0.09
(1,983)	1:A:100:ILE:HD11	1:A:113:VAL:HG13	8	0.09
(1,983)	1:A:100:ILE:HD12	1:A:113:VAL:HG11	8	0.09
(1,983)	1:A:100:ILE:HD12	1:A:113:VAL:HG12	8	0.09
(1,983)	1:A:100:ILE:HD12	1:A:113:VAL:HG13	8	0.09
()- 20)				ord on mort mage



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,983)	1:A:100:ILE:HD13	1:A:113:VAL:HG11	8	0.09
(1,983)	1:A:100:ILE:HD13	1:A:113:VAL:HG12	8	0.09
(1,983)	1:A:100:ILE:HD13	1:A:113:VAL:HG13	8	0.09
(1,98)	1:A:36:VAL:HG11	1:A:67:GLY:H	17	0.09
(1,98)	1:A:36:VAL:HG12	1:A:67:GLY:H	17	0.09
(1,98)	1:A:36:VAL:HG13	1:A:67:GLY:H	17	0.09
(1,977)	1:A:113:VAL:HG11	1:A:100:ILE:HD11	8	0.09
(1,977)	1:A:113:VAL:HG11	1:A:100:ILE:HD12	8	0.09
(1,977)	1:A:113:VAL:HG11	1:A:100:ILE:HD13	8	0.09
(1,977)	1:A:113:VAL:HG12	1:A:100:ILE:HD11	8	0.09
(1,977)	1:A:113:VAL:HG12	1:A:100:ILE:HD12	8	0.09
(1,977)	1:A:113:VAL:HG12	1:A:100:ILE:HD13	8	0.09
(1,977)	1:A:113:VAL:HG13	1:A:100:ILE:HD11	8	0.09
(1,977)	1:A:113:VAL:HG13	1:A:100:ILE:HD12	8	0.09
(1,977)	1:A:113:VAL:HG13	1:A:100:ILE:HD13	8	0.09
(1,947)	1:A:152:GLN:HE21	1:A:176:ILE:HD11	4	0.09
(1,947)	1:A:152:GLN:HE21	1:A:176:ILE:HD12	4	0.09
(1,947)	1:A:152:GLN:HE21	1:A:176:ILE:HD13	4	0.09
(1,947)	1:A:152:GLN:HE22	1:A:176:ILE:HD11	4	0.09
(1,947)	1:A:152:GLN:HE22	1:A:176:ILE:HD12	4	0.09
(1,947)	1:A:152:GLN:HE22	1:A:176:ILE:HD13	4	0.09
(1,937)	1:A:124:VAL:HG21	1:A:125:VAL:HG11	9	0.09
(1,937)	1:A:124:VAL:HG21	1:A:125:VAL:HG12	9	0.09
(1,937)	1:A:124:VAL:HG21	1:A:125:VAL:HG13	9	0.09
(1,937)	1:A:124:VAL:HG22	1:A:125:VAL:HG11	9	0.09
(1,937)	1:A:124:VAL:HG22	1:A:125:VAL:HG12	9	0.09
(1,937)	1:A:124:VAL:HG22	1:A:125:VAL:HG13	9	0.09
(1,937)	1:A:124:VAL:HG23	1:A:125:VAL:HG11	9	0.09
(1,937)	1:A:124:VAL:HG23	1:A:125:VAL:HG12	9	0.09
(1,937)	1:A:124:VAL:HG23	1:A:125:VAL:HG13	9	0.09
(1,930)	1:A:107:ASN:H	1:A:107:ASN:HD21	11	0.09
(1,929)	1:A:106:ASN:HD21	1:A:107:ASN:H	12	0.09
(1,916)	1:A:13:LEU:HD11	1:A:176:ILE:HD11	13	0.09
(1,916)	1:A:13:LEU:HD11	1:A:176:ILE:HD12	13	0.09
(1,916)	1:A:13:LEU:HD11	1:A:176:ILE:HD13	13	0.09
(1,916)	1:A:13:LEU:HD12	1:A:176:ILE:HD11	13	0.09
(1,916)	1:A:13:LEU:HD12	1:A:176:ILE:HD12	13	0.09
(1,916)	1:A:13:LEU:HD12	1:A:176:ILE:HD13	13	0.09
(1,916)	1:A:13:LEU:HD13	1:A:176:ILE:HD11	13	0.09
(1,916)	1:A:13:LEU:HD13	1:A:176:ILE:HD12	13	0.09
(1,916)	1:A:13:LEU:HD13	1:A:176:ILE:HD13	13	0.09
(1,897)	1:A:36:VAL:HG21	1:A:44:LEU:H	19	0.09
	I	İ		nd on nort nago



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,897)	1:A:36:VAL:HG22	1:A:44:LEU:H	19	0.09
(1,897)	1:A:36:VAL:HG23	1:A:44:LEU:H	19	0.09
(1,896)	1:A:2:LEU:HD11	1:A:180:LYS:H	18	0.09
(1,896)	1:A:2:LEU:HD12	1:A:180:LYS:H	18	0.09
(1,896)	1:A:2:LEU:HD13	1:A:180:LYS:H	18	0.09
(1,888)	1:A:123:TRP:H	1:A:124:VAL:HG21	3	0.09
(1,888)	1:A:123:TRP:H	1:A:124:VAL:HG22	3	0.09
(1,888)	1:A:123:TRP:H	1:A:124:VAL:HG23	3	0.09
(1,874)	1:A:64:VAL:HG21	1:A:66:ARG:H	3	0.09
(1,874)	1:A:64:VAL:HG22	1:A:66:ARG:H	3	0.09
(1,874)	1:A:64:VAL:HG23	1:A:66:ARG:H	3	0.09
(1,850)	1:A:112:ASP:H	1:A:113:VAL:HG21	12	0.09
(1,850)	1:A:112:ASP:H	1:A:113:VAL:HG22	12	0.09
(1,850)	1:A:112:ASP:H	1:A:113:VAL:HG23	12	0.09
(1,835)	1:A:140:ILE:HD11	1:A:146:GLU:H	10	0.09
(1,835)	1:A:140:ILE:HD12	1:A:146:GLU:H	10	0.09
(1,835)	1:A:140:ILE:HD13	1:A:146:GLU:H	10	0.09
(1,833)	1:A:75:LYS:H	1:A:76:LEU:HD11	18	0.09
(1,833)	1:A:75:LYS:H	1:A:76:LEU:HD12	18	0.09
(1,833)	1:A:75:LYS:H	1:A:76:LEU:HD13	18	0.09
(1,829)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:128:LEU:H	15	0.09
(1,829)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:128:LEU:H	15	0.09
(1,829)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:128:LEU:H	15	0.09
(1,814)	1:A:27:VAL:HG11	1:A:173:LYS:H	6	0.09
(1,814)	1:A:27:VAL:HG12	1:A:173:LYS:H	6	0.09
(1,814)	1:A:27:VAL:HG13	1:A:173:LYS:H	6	0.09
(1,814)	1:A:27:VAL:HG11	1:A:173:LYS:H	15	0.09
(1,814)	1:A:27:VAL:HG12	1:A:173:LYS:H	15	0.09
(1,814)	1:A:27:VAL:HG13	1:A:173:LYS:H	15	0.09
(1,804)	1:A:75:LYS:H	1:A:76:LEU:HD21	12	0.09
(1,804)	1:A:75:LYS:H	1:A:76:LEU:HD22	12	0.09
(1,804)	1:A:75:LYS:H	1:A:76:LEU:HD23	12	0.09
(1,798)	1:A:169:LEU:HD21	1:A:170:MET:H	6	0.09
(1,798)	1:A:169:LEU:HD22	1:A:170:MET:H	6	0.09
(1,798)	1:A:169:LEU:HD23	1:A:170:MET:H	6	0.09
(1,797)	1:A:92:ILE:HD11	1:A:96:MET:H	16	0.09
(1,797)	1:A:92:ILE:HD12	1:A:96:MET:H	16	0.09
(1,797)	1:A:92:ILE:HD13	1:A:96:MET:H	16	0.09
(1,79)	1:A:13:LEU:H	1:A:14:SER:H	19	0.09
(1,786)	1:A:121:GLN:HE21	1:A:125:VAL:HG21	12	0.09
(1,786)	1:A:121:GLN:HE21	1:A:125:VAL:HG22	12	0.09
(1,786)	1:A:121:GLN:HE21	1:A:125:VAL:HG23	12	0.09



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,751)	1:A:36:VAL:HG11	1:A:44:LEU:HD21	14	0.09
(1,751)	1:A:36:VAL:HG11	1:A:44:LEU:HD22	14	0.09
(1,751)	1:A:36:VAL:HG11	1:A:44:LEU:HD23	14	0.09
(1,751)	1:A:36:VAL:HG12	1:A:44:LEU:HD21	14	0.09
(1,751)	1:A:36:VAL:HG12	1:A:44:LEU:HD22	14	0.09
(1,751)	1:A:36:VAL:HG12	1:A:44:LEU:HD23	14	0.09
(1,751)	1:A:36:VAL:HG13	1:A:44:LEU:HD21	14	0.09
(1,751)	1:A:36:VAL:HG13	1:A:44:LEU:HD22	14	0.09
(1,751)	1:A:36:VAL:HG13	1:A:44:LEU:HD23	14	0.09
(1,730)	1:A:27:VAL:HG11	1:A:120:ILE:HD11	3	0.09
(1,730)	1:A:27:VAL:HG11	1:A:120:ILE:HD12	3	0.09
(1,730)	1:A:27:VAL:HG11	1:A:120:ILE:HD13	3	0.09
(1,730)	1:A:27:VAL:HG12	1:A:120:ILE:HD11	3	0.09
(1,730)	1:A:27:VAL:HG12	1:A:120:ILE:HD12	3	0.09
(1,730)	1:A:27:VAL:HG12	1:A:120:ILE:HD13	3	0.09
(1,730)	1:A:27:VAL:HG13	1:A:120:ILE:HD11	3	0.09
(1,730)	1:A:27:VAL:HG13	1:A:120:ILE:HD12	3	0.09
(1,730)	1:A:27:VAL:HG13	1:A:120:ILE:HD13	3	0.09
(1,650)	1:A:38:LYS:H	1:A:41:GLU:H	13	0.09
(1,647)	1:A:103:MET:H	1:A:105:LYS:H	2	0.09
(1,553)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:128:LEU:HD21	5	0.09
(1,553)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:128:LEU:HD22	5	0.09
(1,553)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:128:LEU:HD23	5	0.09
(1,553)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:128:LEU:HD21	5	0.09
(1,553)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:128:LEU:HD22	5	0.09
(1,553)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:128:LEU:HD23	5	0.09
(1,553)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:128:LEU:HD21	5	0.09
(1,553)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:128:LEU:HD22	5	0.09
(1,553)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:128:LEU:HD23	5	0.09
(1,540)	1:A:133:PHE:HD1	1:A:136:LEU:HD21	12	0.09
(1,540)	1:A:133:PHE:HD1	1:A:136:LEU:HD22	12	0.09
(1,540)	1:A:133:PHE:HD1	1:A:136:LEU:HD23	12	0.09
(1,540)	1:A:133:PHE:HD2	1:A:136:LEU:HD21	12	0.09
(1,540)	1:A:133:PHE:HD2	1:A:136:LEU:HD22	12	0.09
(1,540)	1:A:133:PHE:HD2	1:A:136:LEU:HD23	12	0.09
(1,537)	1:A:99:VAL:HG21	1:A:116:PHE:HE1	8	0.09
(1,537)	1:A:99:VAL:HG22	1:A:116:PHE:HE1	8	0.09
(1,537)	1:A:99:VAL:HG23	1:A:116:PHE:HE1	8	0.09
(1,512)	1:A:127:LEU:HD21	1:A:136:LEU:HD21	15	0.09
(1,512)	1:A:127:LEU:HD21	1:A:136:LEU:HD22	15	0.09
(1,512)	1:A:127:LEU:HD21	1:A:136:LEU:HD23	15	0.09
(1,512)	1:A:127:LEU:HD22	1:A:136:LEU:HD21	15	0.09
	1 3			ord on next mage



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,512)	1:A:127:LEU:HD22	1:A:136:LEU:HD22	15	0.09
(1,512)	1:A:127:LEU:HD22	1:A:136:LEU:HD23	15	0.09
(1,512)	1:A:127:LEU:HD23	1:A:136:LEU:HD21	15	0.09
(1,512)	1:A:127:LEU:HD23	1:A:136:LEU:HD22	15	0.09
(1,512)	1:A:127:LEU:HD23	1:A:136:LEU:HD23	15	0.09
(1,455)	1:A:8:PHE:H	1:A:11:ASP:H	6	0.09
(1,453)	1:A:71:VAL:H	1:A:74:HIS:H	9	0.09
(1,439)	1:A:140:ILE:HD11	1:A:144:ALA:H	3	0.09
(1,439)	1:A:140:ILE:HD12	1:A:144:ALA:H	3	0.09
(1,439)	1:A:140:ILE:HD13	1:A:144:ALA:H	3	0.09
(1,439)	1:A:140:ILE:HD11	1:A:144:ALA:H	14	0.09
(1,439)	1:A:140:ILE:HD12	1:A:144:ALA:H	14	0.09
(1,439)	1:A:140:ILE:HD13	1:A:144:ALA:H	14	0.09
(1,376)	1:A:33:LYS:H	1:A:35:VAL:H	2	0.09
(1,376)	1:A:33:LYS:H	1:A:35:VAL:H	9	0.09
(1,376)	1:A:33:LYS:H	1:A:35:VAL:H	13	0.09
(1,360)	1:A:161:VAL:H	1:A:164:THR:H	8	0.09
(1,265)	1:A:70:ILE:H	1:A:72:LEU:HD11	4	0.09
(1,265)	1:A:70:ILE:H	1:A:72:LEU:HD12	4	0.09
(1,265)	1:A:70:ILE:H	1:A:72:LEU:HD13	4	0.09
(1,265)	1:A:70:ILE:H	1:A:72:LEU:HD11	6	0.09
(1,265)	1:A:70:ILE:H	1:A:72:LEU:HD12	6	0.09
(1,265)	1:A:70:ILE:H	1:A:72:LEU:HD13	6	0.09
(1,240)	1:A:65:GLU:H	1:A:66:ARG:H	7	0.09
(1,223)	1:A:6:ASP:H	1:A:13:LEU:HD11	13	0.09
(1,223)	1:A:6:ASP:H	1:A:13:LEU:HD12	13	0.09
(1,223)	1:A:6:ASP:H	1:A:13:LEU:HD13	13	0.09
(1,174)	1:A:22:LEU:H	1:A:28:TYR:HD1	13	0.09
(1,148)	1:A:71:VAL:HG11	1:A:78:GLU:H	4	0.09
(1,148)	1:A:71:VAL:HG12	1:A:78:GLU:H	4	0.09
(1,148)	1:A:71:VAL:HG13	1:A:78:GLU:H	4	0.09
(1,148)	1:A:71:VAL:HG11	1:A:78:GLU:H	16	0.09
(1,148)	1:A:71:VAL:HG12	1:A:78:GLU:H	16	0.09
(1,148)	1:A:71:VAL:HG13	1:A:78:GLU:H	16	0.09
(1,1075)	1:A:37:ARG:H	1:A:65:GLU:O	17	0.09
(1,1073)	1:A:37:ARG:O	1:A:65:GLU:H	5	0.09
(1,105)	1:A:127:LEU:HD21	1:A:128:LEU:H	9	0.09
(1,105)	1:A:127:LEU:HD22	1:A:128:LEU:H	9	0.09
(1,105)	1:A:127:LEU:HD23	1:A:128:LEU:H	9	0.09
(1,1045)	1:A:155:ILE:H	1:A:170:MET:O	4	0.09
(1,1045)	1:A:155:ILE:H	1:A:170:MET:O	9	0.09
(1,1031)	1:A:79:MET:O	1:A:138:PHE:H	10	0.09
/	<u> </u>	I		d on mort mage



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1031)	1:A:79:MET:O	1:A:138:PHE:H	12	0.09
(1,1027)	1:A:77:VAL:O	1:A:140:ILE:H	17	0.09
(1,1011)	1:A:2:LEU:O	1:A:16:ASP:H	3	0.09
(1,101)	1:A:150:ASN:H	1:A:151:GLY:H	3	0.09
(1,1)	1:A:3:ILE:H	1:A:179:GLU:H	3	0.09
(1,983)	1:A:100:ILE:HD11	1:A:113:VAL:HG11	9	0.08
(1,983)	1:A:100:ILE:HD11	1:A:113:VAL:HG12	9	0.08
(1,983)	1:A:100:ILE:HD11	1:A:113:VAL:HG13	9	0.08
(1,983)	1:A:100:ILE:HD12	1:A:113:VAL:HG11	9	0.08
(1,983)	1:A:100:ILE:HD12	1:A:113:VAL:HG12	9	0.08
(1,983)	1:A:100:ILE:HD12	1:A:113:VAL:HG13	9	0.08
(1,983)	1:A:100:ILE:HD13	1:A:113:VAL:HG11	9	0.08
(1,983)	1:A:100:ILE:HD13	1:A:113:VAL:HG12	9	0.08
(1,983)	1:A:100:ILE:HD13	1:A:113:VAL:HG13	9	0.08
(1,983)	1:A:100:ILE:HD11	1:A:113:VAL:HG11	17	0.08
(1,983)	1:A:100:ILE:HD11	1:A:113:VAL:HG12	17	0.08
(1,983)	1:A:100:ILE:HD11	1:A:113:VAL:HG13	17	0.08
(1,983)	1:A:100:ILE:HD12	1:A:113:VAL:HG11	17	0.08
(1,983)	1:A:100:ILE:HD12	1:A:113:VAL:HG12	17	0.08
(1,983)	1:A:100:ILE:HD12	1:A:113:VAL:HG13	17	0.08
(1,983)	1:A:100:ILE:HD13	1:A:113:VAL:HG11	17	0.08
(1,983)	1:A:100:ILE:HD13	1:A:113:VAL:HG12	17	0.08
(1,983)	1:A:100:ILE:HD13	1:A:113:VAL:HG13	17	0.08
(1,977)	1:A:113:VAL:HG11	1:A:100:ILE:HD11	9	0.08
(1,977)	1:A:113:VAL:HG11	1:A:100:ILE:HD12	9	0.08
(1,977)	1:A:113:VAL:HG11	1:A:100:ILE:HD13	9	0.08
(1,977)	1:A:113:VAL:HG12	1:A:100:ILE:HD11	9	0.08
(1,977)	1:A:113:VAL:HG12	1:A:100:ILE:HD12	9	0.08
(1,977)	1:A:113:VAL:HG12	1:A:100:ILE:HD13	9	0.08
(1,977)	1:A:113:VAL:HG13	1:A:100:ILE:HD11	9	0.08
(1,977)	1:A:113:VAL:HG13	1:A:100:ILE:HD12	9	0.08
(1,977)	1:A:113:VAL:HG13	1:A:100:ILE:HD13	9	0.08
(1,977)	1:A:113:VAL:HG11	1:A:100:ILE:HD11	17	0.08
(1,977)	1:A:113:VAL:HG11	1:A:100:ILE:HD12	17	0.08
(1,977)	1:A:113:VAL:HG11	1:A:100:ILE:HD13	17	0.08
(1,977)	1:A:113:VAL:HG12	1:A:100:ILE:HD11	17	0.08
(1,977)	1:A:113:VAL:HG12	1:A:100:ILE:HD12	17	0.08
(1,977)	1:A:113:VAL:HG12	1:A:100:ILE:HD13	17	0.08
(1,977)	1:A:113:VAL:HG13	1:A:100:ILE:HD11	17	0.08
(1,977)	1:A:113:VAL:HG13	1:A:100:ILE:HD12	17	0.08
(1,977)	1:A:113:VAL:HG13	1:A:100:ILE:HD13	17	0.08
(1,950)	1:A:160:ASP:H	1:A:166:VAL:HG11	18	0.08



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,950)	1:A:160:ASP:H	1:A:166:VAL:HG12	18	0.08
(1,950)	1:A:160:ASP:H	1:A:166:VAL:HG13	18	0.08
(1,943)	1:A:150:ASN:H	1:A:150:ASN:HD21	8	0.08
(1,910)	1:A:4:TYR:HB2	1:A:14:SER:H	12	0.08
(1,897)	1:A:36:VAL:HG21	1:A:44:LEU:H	2	0.08
(1,897)	1:A:36:VAL:HG22	1:A:44:LEU:H	2	0.08
(1,897)	1:A:36:VAL:HG23	1:A:44:LEU:H	2	0.08
(1,891)	1:A:36:VAL:HG11	1:A:45:ALA:H	7	0.08
(1,891)	1:A:36:VAL:HG12	1:A:45:ALA:H	7	0.08
(1,891)	1:A:36:VAL:HG13	1:A:45:ALA:H	7	0.08
(1,89)	1:A:162:ASP:H	1:A:163:GLY:H	9	0.08
(1,876)	1:A:155:ILE:H	1:A:169:LEU:HD21	14	0.08
(1,876)	1:A:155:ILE:H	1:A:169:LEU:HD22	14	0.08
(1,876)	1:A:155:ILE:H	1:A:169:LEU:HD23	14	0.08
(1,874)	1:A:64:VAL:HG21	1:A:66:ARG:H	5	0.08
(1,874)	1:A:64:VAL:HG22	1:A:66:ARG:H	5	0.08
(1,874)	1:A:64:VAL:HG23	1:A:66:ARG:H	5	0.08
(1,874)	1:A:64:VAL:HG21	1:A:66:ARG:H	7	0.08
(1,874)	1:A:64:VAL:HG22	1:A:66:ARG:H	7	0.08
(1,874)	1:A:64:VAL:HG23	1:A:66:ARG:H	7	0.08
(1,874)	1:A:64:VAL:HG21	1:A:66:ARG:H	10	0.08
(1,874)	1:A:64:VAL:HG22	1:A:66:ARG:H	10	0.08
(1,874)	1:A:64:VAL:HG23	1:A:66:ARG:H	10	0.08
(1,874)	1:A:64:VAL:HG21	1:A:66:ARG:H	12	0.08
(1,874)	1:A:64:VAL:HG22	1:A:66:ARG:H	12	0.08
(1,874)	1:A:64:VAL:HG23	1:A:66:ARG:H	12	0.08
(1,864)	1:A:35:VAL:HG21	1:A:70:ILE:H	2	0.08
(1,864)	1:A:35:VAL:HG22	1:A:70:ILE:H	2	0.08
(1,864)	1:A:35:VAL:HG23	1:A:70:ILE:H	2	0.08
(1,862)	1:A:62:GLU:H	1:A:64:VAL:HG21	8	0.08
(1,862)	1:A:62:GLU:H	1:A:64:VAL:HG22	8	0.08
(1,862)	1:A:62:GLU:H	1:A:64:VAL:HG23	8	0.08
(1,860)	1:A:139:PHE:H	1:A:153:VAL:HG21	2	0.08
(1,860)	1:A:139:PHE:H	1:A:153:VAL:HG22	2	0.08
(1,860)	1:A:139:PHE:H	1:A:153:VAL:HG23	2	0.08
(1,860)	1:A:139:PHE:H	1:A:153:VAL:HG21	17	0.08
(1,860)	1:A:139:PHE:H	1:A:153:VAL:HG22	17	0.08
(1,860)	1:A:139:PHE:H	1:A:153:VAL:HG23	17	0.08
(1,832)	1:A:120:ILE:HD11	1:A:174:GLU:H	8	0.08
(1,832)	1:A:120:ILE:HD12	1:A:174:GLU:H	8	0.08
(1,832)	1:A:120:ILE:HD13	1:A:174:GLU:H	8	0.08
(1,83)	1:A:4:TYR:H	1:A:4:TYR:HD1	3	0.08



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,829)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:128:LEU:H	6	0.08
(1,829)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:128:LEU:H	6	0.08
(1,829)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:128:LEU:H	6	0.08
(1,808)	1:A:121:GLN:HE22	1:A:125:VAL:HG11	3	0.08
(1,808)	1:A:121:GLN:HE22	1:A:125:VAL:HG12	3	0.08
(1,808)	1:A:121:GLN:HE22	1:A:125:VAL:HG13	3	0.08
(1,798)	1:A:169:LEU:HD21	1:A:170:MET:H	14	0.08
(1,798)	1:A:169:LEU:HD22	1:A:170:MET:H	14	0.08
(1,798)	1:A:169:LEU:HD23	1:A:170:MET:H	14	0.08
(1,797)	1:A:92:ILE:HD11	1:A:96:MET:H	8	0.08
(1,797)	1:A:92:ILE:HD12	1:A:96:MET:H	8	0.08
(1,797)	1:A:92:ILE:HD13	1:A:96:MET:H	8	0.08
(1,751)	1:A:36:VAL:HG11	1:A:44:LEU:HD21	18	0.08
(1,751)	1:A:36:VAL:HG11	1:A:44:LEU:HD22	18	0.08
(1,751)	1:A:36:VAL:HG11	1:A:44:LEU:HD23	18	0.08
(1,751)	1:A:36:VAL:HG12	1:A:44:LEU:HD21	18	0.08
(1,751)	1:A:36:VAL:HG12	1:A:44:LEU:HD22	18	0.08
(1,751)	1:A:36:VAL:HG12	1:A:44:LEU:HD23	18	0.08
(1,751)	1:A:36:VAL:HG13	1:A:44:LEU:HD21	18	0.08
(1,751)	1:A:36:VAL:HG13	1:A:44:LEU:HD22	18	0.08
(1,751)	1:A:36:VAL:HG13	1:A:44:LEU:HD23	18	0.08
(1,730)	1:A:27:VAL:HG11	1:A:120:ILE:HD11	7	0.08
(1,730)	1:A:27:VAL:HG11	1:A:120:ILE:HD12	7	0.08
(1,730)	1:A:27:VAL:HG11	1:A:120:ILE:HD13	7	0.08
(1,730)	1:A:27:VAL:HG12	1:A:120:ILE:HD11	7	0.08
(1,730)	1:A:27:VAL:HG12	1:A:120:ILE:HD12	7	0.08
(1,730)	1:A:27:VAL:HG12	1:A:120:ILE:HD13	7	0.08
(1,730)	1:A:27:VAL:HG13	1:A:120:ILE:HD11	7	0.08
(1,730)	1:A:27:VAL:HG13	1:A:120:ILE:HD12	7	0.08
(1,730)	1:A:27:VAL:HG13	1:A:120:ILE:HD13	7	0.08
(1,684)	1:A:132:ARG:H	1:A:135:ASN:H	7	0.08
(1,66)	1:A:137:ALA:H	1:A:156:ILE:H	13	0.08
(1,59)	1:A:123:TRP:HE1	1:A:127:LEU:HD21	5	0.08
(1,59)	1:A:123:TRP:HE1	1:A:127:LEU:HD22	5	0.08
(1,59)	1:A:123:TRP:HE1	1:A:127:LEU:HD23	5	0.08
(1,576)	1:A:128:LEU:HD11	1:A:155:ILE:HD11	3	0.08
(1,576)	1:A:128:LEU:HD11	1:A:155:ILE:HD12	3	0.08
(1,576)	1:A:128:LEU:HD11	1:A:155:ILE:HD13	3	0.08
(1,576)	1:A:128:LEU:HD12	1:A:155:ILE:HD11	3	0.08
(1,576)	1:A:128:LEU:HD12	1:A:155:ILE:HD12	3	0.08
(1,576)	1:A:128:LEU:HD12	1:A:155:ILE:HD13	3	0.08
(1,576)	1:A:128:LEU:HD13	1:A:155:ILE:HD11	3	0.08



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,576)	1:A:128:LEU:HD13	1:A:155:ILE:HD12	3	0.08
(1,576)	1:A:128:LEU:HD13	1:A:155:ILE:HD13	3	0.08
(1,540)	1:A:133:PHE:HD1	1:A:136:LEU:HD21	4	0.08
(1,540)	1:A:133:PHE:HD1	1:A:136:LEU:HD22	4	0.08
(1,540)	1:A:133:PHE:HD1	1:A:136:LEU:HD23	4	0.08
(1,540)	1:A:133:PHE:HD2	1:A:136:LEU:HD21	4	0.08
(1,540)	1:A:133:PHE:HD2	1:A:136:LEU:HD22	4	0.08
(1,540)	1:A:133:PHE:HD2	1:A:136:LEU:HD23	4	0.08
(1,537)	1:A:99:VAL:HG21	1:A:116:PHE:HE1	20	0.08
(1,537)	1:A:99:VAL:HG22	1:A:116:PHE:HE1	20	0.08
(1,537)	1:A:99:VAL:HG23	1:A:116:PHE:HE1	20	0.08
(1,517)	1:A:127:LEU:HD11	1:A:133:PHE:HD1	8	0.08
(1,517)	1:A:127:LEU:HD11	1:A:133:PHE:HD2	8	0.08
(1,517)	1:A:127:LEU:HD12	1:A:133:PHE:HD1	8	0.08
(1,517)	1:A:127:LEU:HD12	1:A:133:PHE:HD2	8	0.08
(1,517)	1:A:127:LEU:HD13	1:A:133:PHE:HD1	8	0.08
(1,517)	1:A:127:LEU:HD13	1:A:133:PHE:HD2	8	0.08
(1,513)	1:A:127:LEU:HD21	1:A:133:PHE:HD1	4	0.08
(1,513)	1:A:127:LEU:HD21	1:A:133:PHE:HD2	4	0.08
(1,513)	1:A:127:LEU:HD22	1:A:133:PHE:HD1	4	0.08
(1,513)	1:A:127:LEU:HD22	1:A:133:PHE:HD2	4	0.08
(1,513)	1:A:127:LEU:HD23	1:A:133:PHE:HD1	4	0.08
(1,513)	1:A:127:LEU:HD23	1:A:133:PHE:HD2	4	0.08
(1,479)	1:A:152:GLN:HE22	1:A:172:VAL:H	19	0.08
(1,43)	1:A:82:TYR:H	1:A:82:TYR:HD1	9	0.08
(1,388)	1:A:116:PHE:HD1	1:A:174:GLU:H	18	0.08
(1,388)	1:A:116:PHE:HD2	1:A:174:GLU:H	18	0.08
(1,341)	1:A:95:PHE:HD1	1:A:98:ASN:H	6	0.08
(1,341)	1:A:95:PHE:HD2	1:A:98:ASN:H	6	0.08
(1,341)	1:A:95:PHE:HD1	1:A:98:ASN:H	9	0.08
(1,341)	1:A:95:PHE:HD2	1:A:98:ASN:H	9	0.08
(1,341)	1:A:95:PHE:HD1	1:A:98:ASN:H	17	0.08
(1,341)	1:A:95:PHE:HD2	1:A:98:ASN:H	17	0.08
(1,309)	1:A:63:HIS:H	1:A:64:VAL:HG21	3	0.08
(1,309)	1:A:63:HIS:H	1:A:64:VAL:HG22	3	0.08
(1,309)	1:A:63:HIS:H	1:A:64:VAL:HG23	3	0.08
(1,248)	1:A:76:LEU:HD11	1:A:77:VAL:H	20	0.08
(1,248)	1:A:76:LEU:HD12	1:A:77:VAL:H	20	0.08
(1,248)	1:A:76:LEU:HD13	1:A:77:VAL:H	20	0.08
(1,241)	1:A:37:ARG:H	1:A:66:ARG:H	9	0.08
(1,240)	1:A:65:GLU:H	1:A:66:ARG:H	8	0.08
(1,225)	1:A:95:PHE:HD1	1:A:99:VAL:H	Continue	0.08



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,225)	1:A:95:PHE:HD2	1:A:99:VAL:H	20	0.08
(1,224)	1:A:6:ASP:H	1:A:13:LEU:HD21	8	0.08
(1,224)	1:A:6:ASP:H	1:A:13:LEU:HD22	8	0.08
(1,224)	1:A:6:ASP:H	1:A:13:LEU:HD23	8	0.08
(1,223)	1:A:6:ASP:H	1:A:13:LEU:HD11	4	0.08
(1,223)	1:A:6:ASP:H	1:A:13:LEU:HD12	4	0.08
(1,223)	1:A:6:ASP:H	1:A:13:LEU:HD13	4	0.08
(1,20)	1:A:35:VAL:H	1:A:69:ASP:H	2	0.08
(1,183)	1:A:171:LEU:HD21	1:A:172:VAL:H	14	0.08
(1,183)	1:A:171:LEU:HD22	1:A:172:VAL:H	14	0.08
(1,183)	1:A:171:LEU:HD23	1:A:172:VAL:H	14	0.08
(1,178)	1:A:91:TYR:HD1	1:A:153:VAL:H	11	0.08
(1,178)	1:A:91:TYR:HD1	1:A:153:VAL:H	13	0.08
(1,174)	1:A:22:LEU:H	1:A:28:TYR:HD1	10	0.08
(1,159)	1:A:2:LEU:HD11	1:A:179:GLU:H	19	0.08
(1,159)	1:A:2:LEU:HD12	1:A:179:GLU:H	19	0.08
(1,159)	1:A:2:LEU:HD13	1:A:179:GLU:H	19	0.08
(1,15)	1:A:138:PHE:HD1	1:A:154:ALA:H	11	0.08
(1,15)	1:A:138:PHE:HD2	1:A:154:ALA:H	11	0.08
(1,120)	1:A:91:TYR:H	1:A:91:TYR:HD1	4	0.08
(1,1135)	1:A:23:VAL:O	1:A:27:VAL:H	8	0.08
(1,1105)	1:A:99:VAL:O	1:A:103:MET:H	2	0.08
(1,1070)	1:A:35:VAL:O	1:A:67:GLY:N	13	0.08
(1,105)	1:A:127:LEU:HD21	1:A:128:LEU:H	16	0.08
(1,105)	1:A:127:LEU:HD22	1:A:128:LEU:H	16	0.08
(1,105)	1:A:127:LEU:HD23	1:A:128:LEU:H	16	0.08
(1,1045)	1:A:155:ILE:H	1:A:170:MET:O	10	0.08
(1,1031)	1:A:79:MET:O	1:A:138:PHE:H	2	0.08
(1,1031)	1:A:79:MET:O	1:A:138:PHE:H	4	0.08
(1,1031)	1:A:79:MET:O	1:A:138:PHE:H	8	0.08
(1,101)	1:A:150:ASN:H	1:A:151:GLY:H	4	0.08
(1,100)	1:A:58:ASP:H	1:A:59:GLY:H	18	0.08
(1,984)	1:A:100:ILE:HD11	1:A:113:VAL:HG21	20	0.07
(1,984)	1:A:100:ILE:HD11	1:A:113:VAL:HG22	20	0.07
(1,984)	1:A:100:ILE:HD11	1:A:113:VAL:HG23	20	0.07
(1,984)	1:A:100:ILE:HD12	1:A:113:VAL:HG21	20	0.07
(1,984)	1:A:100:ILE:HD12	1:A:113:VAL:HG22	20	0.07
(1,984)	1:A:100:ILE:HD12	1:A:113:VAL:HG23	20	0.07
(1,984)	1:A:100:ILE:HD13	1:A:113:VAL:HG21	20	0.07
(1,984)	1:A:100:ILE:HD13	1:A:113:VAL:HG22	20	0.07
(1,984)	1:A:100:ILE:HD13	1:A:113:VAL:HG23	20	0.07
(1,953)	1:A:166:VAL:H	1:A:166:VAL:HG11	6 Continue	0.07



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,953)	1:A:166:VAL:H	1:A:166:VAL:HG12	6	0.07
(1,953)	1:A:166:VAL:H	1:A:166:VAL:HG13	6	0.07
(1,951)	1:A:161:VAL:H	1:A:166:VAL:HG11	5	0.07
(1,951)	1:A:161:VAL:H	1:A:166:VAL:HG12	5	0.07
(1,951)	1:A:161:VAL:H	1:A:166:VAL:HG13	5	0.07
(1,950)	1:A:160:ASP:H	1:A:166:VAL:HG11	9	0.07
(1,950)	1:A:160:ASP:H	1:A:166:VAL:HG12	9	0.07
(1,950)	1:A:160:ASP:H	1:A:166:VAL:HG13	9	0.07
(1,93)	1:A:39:GLU:H	1:A:40:GLY:H	9	0.07
(1,917)	1:A:13:LEU:HD11	1:A:177:ILE:H	3	0.07
(1,917)	1:A:13:LEU:HD12	1:A:177:ILE:H	3	0.07
(1,917)	1:A:13:LEU:HD13	1:A:177:ILE:H	3	0.07
(1,902)	1:A:136:LEU:HD21	1:A:156:ILE:H	2	0.07
(1,902)	1:A:136:LEU:HD22	1:A:156:ILE:H	2	0.07
(1,902)	1:A:136:LEU:HD23	1:A:156:ILE:H	2	0.07
(1,896)	1:A:2:LEU:HD11	1:A:180:LYS:H	4	0.07
(1,896)	1:A:2:LEU:HD12	1:A:180:LYS:H	4	0.07
(1,896)	1:A:2:LEU:HD13	1:A:180:LYS:H	4	0.07
(1,88)	1:A:76:LEU:HD21	1:A:141:GLY:H	9	0.07
(1,88)	1:A:76:LEU:HD22	1:A:141:GLY:H	9	0.07
(1,88)	1:A:76:LEU:HD23	1:A:141:GLY:H	9	0.07
(1,861)	1:A:139:PHE:H	1:A:156:ILE:HD11	7	0.07
(1,861)	1:A:139:PHE:H	1:A:156:ILE:HD12	7	0.07
(1,861)	1:A:139:PHE:H	1:A:156:ILE:HD13	7	0.07
(1,856)	1:A:22:LEU:HD11	1:A:29:GLU:H	9	0.07
(1,856)	1:A:22:LEU:HD12	1:A:29:GLU:H	9	0.07
(1,856)	1:A:22:LEU:HD13	1:A:29:GLU:H	9	0.07
(1,850)	1:A:112:ASP:H	1:A:113:VAL:HG21	5	0.07
(1,850)	1:A:112:ASP:H	1:A:113:VAL:HG22	5	0.07
(1,850)	1:A:112:ASP:H	1:A:113:VAL:HG23	5	0.07
(1,850)	1:A:112:ASP:H	1:A:113:VAL:HG21	13	0.07
(1,850)	1:A:112:ASP:H	1:A:113:VAL:HG22	13	0.07
(1,850)	1:A:112:ASP:H	1:A:113:VAL:HG23	13	0.07
(1,850)	1:A:112:ASP:H	1:A:113:VAL:HG21	15	0.07
(1,850)	1:A:112:ASP:H	1:A:113:VAL:HG22	15	0.07
(1,850)	1:A:112:ASP:H	1:A:113:VAL:HG23	15	0.07
(1,850)	1:A:112:ASP:H	1:A:113:VAL:HG21	18	0.07
(1,850)	1:A:112:ASP:H	1:A:113:VAL:HG22	18	0.07
(1,850)	1:A:112:ASP:H	1:A:113:VAL:HG23	18	0.07
(1,814)	1:A:27:VAL:HG11	1:A:173:LYS:H	1	0.07
(1,814)	1:A:27:VAL:HG12	1:A:173:LYS:H	1	0.07
(1,814)	1:A:27:VAL:HG13	1:A:173:LYS:H	1	0.07



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,804)	1:A:75:LYS:H	1:A:76:LEU:HD21	6	0.07
(1,804)	1:A:75:LYS:H	1:A:76:LEU:HD22	6	0.07
(1,804)	1:A:75:LYS:H	1:A:76:LEU:HD23	6	0.07
(1,798)	1:A:169:LEU:HD21	1:A:170:MET:H	12	0.07
(1,798)	1:A:169:LEU:HD22	1:A:170:MET:H	12	0.07
(1,798)	1:A:169:LEU:HD23	1:A:170:MET:H	12	0.07
(1,775)	1:A:71:VAL:HG11	1:A:77:VAL:H	2	0.07
(1,775)	1:A:71:VAL:HG12	1:A:77:VAL:H	2	0.07
(1,775)	1:A:71:VAL:HG13	1:A:77:VAL:H	2	0.07
(1,756)	1:A:2:LEU:HD21	1:A:182:LEU:HD21	17	0.07
(1,756)	1:A:2:LEU:HD21	1:A:182:LEU:HD22	17	0.07
(1,756)	1:A:2:LEU:HD21	1:A:182:LEU:HD23	17	0.07
(1,756)	1:A:2:LEU:HD22	1:A:182:LEU:HD21	17	0.07
(1,756)	1:A:2:LEU:HD22	1:A:182:LEU:HD22	17	0.07
(1,756)	1:A:2:LEU:HD22	1:A:182:LEU:HD23	17	0.07
(1,756)	1:A:2:LEU:HD23	1:A:182:LEU:HD21	17	0.07
(1,756)	1:A:2:LEU:HD23	1:A:182:LEU:HD22	17	0.07
(1,756)	1:A:2:LEU:HD23	1:A:182:LEU:HD23	17	0.07
(1,751)	1:A:36:VAL:HG11	1:A:44:LEU:HD21	2	0.07
(1,751)	1:A:36:VAL:HG11	1:A:44:LEU:HD22	2	0.07
(1,751)	1:A:36:VAL:HG11	1:A:44:LEU:HD23	2	0.07
(1,751)	1:A:36:VAL:HG12	1:A:44:LEU:HD21	2	0.07
(1,751)	1:A:36:VAL:HG12	1:A:44:LEU:HD22	2	0.07
(1,751)	1:A:36:VAL:HG12	1:A:44:LEU:HD23	2	0.07
(1,751)	1:A:36:VAL:HG13	1:A:44:LEU:HD21	2	0.07
(1,751)	1:A:36:VAL:HG13	1:A:44:LEU:HD22	2	0.07
(1,751)	1:A:36:VAL:HG13	1:A:44:LEU:HD23	2	0.07
(1,743)	1:A:42:ILE:HD11	1:A:44:LEU:HD11	19	0.07
(1,743)	1:A:42:ILE:HD11	1:A:44:LEU:HD12	19	0.07
(1,743)	1:A:42:ILE:HD11	1:A:44:LEU:HD13	19	0.07
(1,743)	1:A:42:ILE:HD12	1:A:44:LEU:HD11	19	0.07
(1,743)	1:A:42:ILE:HD12	1:A:44:LEU:HD12	19	0.07
(1,743)	1:A:42:ILE:HD12	1:A:44:LEU:HD13	19	0.07
(1,743)	1:A:42:ILE:HD13	1:A:44:LEU:HD11	19	0.07
(1,743)	1:A:42:ILE:HD13	1:A:44:LEU:HD12	19	0.07
(1,743)	1:A:42:ILE:HD13	1:A:44:LEU:HD13	19	0.07
(1,730)	1:A:27:VAL:HG11	1:A:120:ILE:HD11	4	0.07
(1,730)	1:A:27:VAL:HG11	1:A:120:ILE:HD12	4	0.07
(1,730)	1:A:27:VAL:HG11	1:A:120:ILE:HD13	4	0.07
(1,730)	1:A:27:VAL:HG12	1:A:120:ILE:HD11	4	0.07
(1,730)	1:A:27:VAL:HG12	1:A:120:ILE:HD12	4	0.07
(1,730)	1:A:27:VAL:HG12	1:A:120:ILE:HD13	4	0.07



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,730)	1:A:27:VAL:HG13	1:A:120:ILE:HD11	4	0.07
(1,730)	1:A:27:VAL:HG13	1:A:120:ILE:HD12	4	0.07
(1,730)	1:A:27:VAL:HG13	1:A:120:ILE:HD13	4	0.07
(1,648)	1:A:56:GLU:H	1:A:57:ASP:H	4	0.07
(1,592)	1:A:128:LEU:HD21	1:A:136:LEU:HD21	17	0.07
(1,592)	1:A:128:LEU:HD21	1:A:136:LEU:HD22	17	0.07
(1,592)	1:A:128:LEU:HD21	1:A:136:LEU:HD23	17	0.07
(1,592)	1:A:128:LEU:HD22	1:A:136:LEU:HD21	17	0.07
(1,592)	1:A:128:LEU:HD22	1:A:136:LEU:HD22	17	0.07
(1,592)	1:A:128:LEU:HD22	1:A:136:LEU:HD23	17	0.07
(1,592)	1:A:128:LEU:HD23	1:A:136:LEU:HD21	17	0.07
(1,592)	1:A:128:LEU:HD23	1:A:136:LEU:HD22	17	0.07
(1,592)	1:A:128:LEU:HD23	1:A:136:LEU:HD23	17	0.07
(1,59)	1:A:123:TRP:HE1	1:A:127:LEU:HD21	20	0.07
(1,59)	1:A:123:TRP:HE1	1:A:127:LEU:HD22	20	0.07
(1,59)	1:A:123:TRP:HE1	1:A:127:LEU:HD23	20	0.07
(1,577)	1:A:128:LEU:HD21	1:A:155:ILE:HD11	17	0.07
(1,577)	1:A:128:LEU:HD21	1:A:155:ILE:HD12	17	0.07
(1,577)	1:A:128:LEU:HD21	1:A:155:ILE:HD13	17	0.07
(1,577)	1:A:128:LEU:HD22	1:A:155:ILE:HD11	17	0.07
(1,577)	1:A:128:LEU:HD22	1:A:155:ILE:HD12	17	0.07
(1,577)	1:A:128:LEU:HD22	1:A:155:ILE:HD13	17	0.07
(1,577)	1:A:128:LEU:HD23	1:A:155:ILE:HD11	17	0.07
(1,577)	1:A:128:LEU:HD23	1:A:155:ILE:HD12	17	0.07
(1,577)	1:A:128:LEU:HD23	1:A:155:ILE:HD13	17	0.07
(1,565)	1:A:68:ILE:HD11	1:A:139:PHE:HZ	16	0.07
(1,565)	1:A:68:ILE:HD12	1:A:139:PHE:HZ	16	0.07
(1,565)	1:A:68:ILE:HD13	1:A:139:PHE:HZ	16	0.07
(1,553)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:128:LEU:HD21	11	0.07
(1,553)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:128:LEU:HD22	11	0.07
(1,553)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:128:LEU:HD23	11	0.07
(1,553)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:128:LEU:HD21	11	0.07
(1,553)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:128:LEU:HD22	11	0.07
(1,553)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:128:LEU:HD23	11	0.07
(1,553)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:128:LEU:HD21	11	0.07
(1,553)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:128:LEU:HD22	11	0.07
(1,553)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:128:LEU:HD23	11	0.07
(1,553)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:128:LEU:HD21	16	0.07
(1,553)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:128:LEU:HD22	16	0.07
(1,553)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:128:LEU:HD23	16	0.07
(1,553)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:128:LEU:HD21	16	0.07
(1,553)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:128:LEU:HD22	16	0.07
_ ` ' /	<u> </u>	<u> </u>		nd on mort nago



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,553)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:128:LEU:HD23	16	0.07
(1,553)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:128:LEU:HD21	16	0.07
(1,553)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:128:LEU:HD22	16	0.07
(1,553)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:128:LEU:HD23	16	0.07
(1,518)	1:A:22:LEU:HD11	1:A:28:TYR:HD1	3	0.07
(1,518)	1:A:22:LEU:HD12	1:A:28:TYR:HD1	3	0.07
(1,518)	1:A:22:LEU:HD13	1:A:28:TYR:HD1	3	0.07
(1,513)	1:A:127:LEU:HD21	1:A:133:PHE:HD1	17	0.07
(1,513)	1:A:127:LEU:HD21	1:A:133:PHE:HD2	17	0.07
(1,513)	1:A:127:LEU:HD22	1:A:133:PHE:HD1	17	0.07
(1,513)	1:A:127:LEU:HD22	1:A:133:PHE:HD2	17	0.07
(1,513)	1:A:127:LEU:HD23	1:A:133:PHE:HD1	17	0.07
(1,513)	1:A:127:LEU:HD23	1:A:133:PHE:HD2	17	0.07
(1,500)	1:A:138:PHE:HD1	1:A:153:VAL:HG21	5	0.07
(1,500)	1:A:138:PHE:HD1	1:A:153:VAL:HG22	5	0.07
(1,500)	1:A:138:PHE:HD1	1:A:153:VAL:HG23	5	0.07
(1,500)	1:A:138:PHE:HD2	1:A:153:VAL:HG21	5	0.07
(1,500)	1:A:138:PHE:HD2	1:A:153:VAL:HG22	5	0.07
(1,500)	1:A:138:PHE:HD2	1:A:153:VAL:HG23	5	0.07
(1,500)	1:A:138:PHE:HD1	1:A:153:VAL:HG21	13	0.07
(1,500)	1:A:138:PHE:HD1	1:A:153:VAL:HG22	13	0.07
(1,500)	1:A:138:PHE:HD1	1:A:153:VAL:HG23	13	0.07
(1,500)	1:A:138:PHE:HD2	1:A:153:VAL:HG21	13	0.07
(1,500)	1:A:138:PHE:HD2	1:A:153:VAL:HG22	13	0.07
(1,500)	1:A:138:PHE:HD2	1:A:153:VAL:HG23	13	0.07
(1,43)	1:A:82:TYR:H	1:A:82:TYR:HD1	14	0.07
(1,415)	1:A:131:ASP:H	1:A:134:LYS:H	5	0.07
(1,415)	1:A:131:ASP:H	1:A:134:LYS:H	10	0.07
(1,415)	1:A:131:ASP:H	1:A:134:LYS:H	12	0.07
(1,409)	1:A:22:LEU:HD21	1:A:25:ASP:H	18	0.07
(1,409)	1:A:22:LEU:HD22	1:A:25:ASP:H	18	0.07
(1,409)	1:A:22:LEU:HD23	1:A:25:ASP:H	18	0.07
(1,4)	1:A:28:TYR:H	1:A:28:TYR:HD1	20	0.07
(1,391)	1:A:23:VAL:HG11	1:A:26:LEU:H	5	0.07
(1,391)	1:A:23:VAL:HG12	1:A:26:LEU:H	5	0.07
(1,391)	1:A:23:VAL:HG13	1:A:26:LEU:H	5	0.07
(1,391)	1:A:23:VAL:HG11	1:A:26:LEU:H	17	0.07
(1,391)	1:A:23:VAL:HG12	1:A:26:LEU:H	17	0.07
(1,391)	1:A:23:VAL:HG13	1:A:26:LEU:H	17	0.07
(1,389)	1:A:172:VAL:HG21	1:A:174:GLU:H	6	0.07
(1,389)	1:A:172:VAL:HG22	1:A:174:GLU:H	6	0.07
(1,389)	1:A:172:VAL:HG23	1:A:174:GLU:H	6	0.07



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

(1,388) 1:A:116:PHE:HD1 1:A:174:GLU:H 20 0.0 (1,388) 1:A:116:PHE:HD2 1:A:174:GLU:H 20 0.0 (1,379) 1:A:33:LYS:H 1:A:35:VAL:HG21 17 0.0 (1,379) 1:A:33:LYS:H 1:A:35:VAL:HG22 17 0.0 (1,379) 1:A:33:LYS:H 1:A:35:VAL:HG23 17 0.0 (1,291) 1:A:182:LEU:HD21 1:A:183:GLU:H 8 0.0 (1,291) 1:A:182:LEU:HD22 1:A:183:GLU:H 8 0.0 (1,291) 1:A:182:LEU:HD23 1:A:183:GLU:H 8 0.0 (1,291) 1:A:182:LEU:HD23 1:A:183:GLU:H 8 0.0 (1,288) 1:A:2:LEU:HD13 1:A:183:GLU:H 8 0.0 (1,288) 1:A:2:LEU:HD12 1:A:3:ILE:H 7 0.0 (1,288) 1:A:2:LEU:HD13 1:A:3:ILE:H 7 0.0 (1,288) 1:A:109:ASP:H 1:A:113:VAL:HG21 4 0.0 (1,222) 1:A:109:ASP:H 1:A:113:VAL:HG23 4)7)7
(1,379) 1:A:33:LYS:H 1:A:35:VAL:HG21 17 0.0 (1,379) 1:A:33:LYS:H 1:A:35:VAL:HG22 17 0.0 (1,379) 1:A:33:LYS:H 1:A:35:VAL:HG23 17 0.0 (1,291) 1:A:182:LEU:HD21 1:A:183:GLU:H 8 0.0 (1,291) 1:A:182:LEU:HD22 1:A:183:GLU:H 8 0.0 (1,291) 1:A:182:LEU:HD23 1:A:183:GLU:H 8 0.0 (1,291) 1:A:182:LEU:HD23 1:A:183:GLU:H 8 0.0 (1,288) 1:A:2:LEU:HD11 1:A:3:ILE:H 7 0.0 (1,288) 1:A:2:LEU:HD12 1:A:3:ILE:H 7 0.0 (1,288) 1:A:2:LEU:HD13 1:A:3:ILE:H 7 0.0 (1,288) 1:A:109:ASP:H 1:A:113:VAL:HG21 4 0.0 (1,240) 1:A:109:ASP:H 1:A:113:VAL:HG22 4 0.0 (1,222) 1:A:109:ASP:H 1:A:113:VAL:HG21 19 0.0 (1,222) 1:A:109:ASP:H 1:A:113:VAL:HG22 19)7
(1,379) 1:A:33:LYS:H 1:A:35:VAL:HG22 17 0.0 (1,379) 1:A:33:LYS:H 1:A:35:VAL:HG23 17 0.0 (1,291) 1:A:182:LEU:HD21 1:A:183:GLU:H 8 0.0 (1,291) 1:A:182:LEU:HD22 1:A:183:GLU:H 8 0.0 (1,291) 1:A:182:LEU:HD23 1:A:183:GLU:H 8 0.0 (1,291) 1:A:182:LEU:HD13 1:A:3:ILE:H 7 0.0 (1,288) 1:A:2:LEU:HD11 1:A:3:ILE:H 7 0.0 (1,288) 1:A:2:LEU:HD12 1:A:3:ILE:H 7 0.0 (1,288) 1:A:2:LEU:HD13 1:A:3:ILE:H 7 0.0 (1,288) 1:A:109:ASP:H 1:A:113:VAL:HG21 4 0.0 (1,240) 1:A:109:ASP:H 1:A:113:VAL:HG22 4 0.0 (1,222) 1:A:109:ASP:H 1:A:113:VAL:HG21 19 0.0 (1,222) 1:A:109:ASP:H 1:A:113:VAL:HG22 19 0.0 (1,222) 1:A:109:ASP:H 1:A:113:VAL:HG23 19	
(1,379) 1:A:33:LYS:H 1:A:35:VAL:HG23 17 0.0 (1,291) 1:A:182:LEU:HD21 1:A:183:GLU:H 8 0.0 (1,291) 1:A:182:LEU:HD22 1:A:183:GLU:H 8 0.0 (1,291) 1:A:182:LEU:HD23 1:A:183:GLU:H 8 0.0 (1,291) 1:A:182:LEU:HD23 1:A:183:GLU:H 8 0.0 (1,288) 1:A:2:LEU:HD11 1:A:3:ILE:H 7 0.0 (1,288) 1:A:2:LEU:HD12 1:A:3:ILE:H 7 0.0 (1,288) 1:A:2:LEU:HD13 1:A:3:ILE:H 7 0.0 (1,288) 1:A:2:LEU:HD13 1:A:3:ILE:H 7 0.0 (1,240) 1:A:65:GLU:H 1:A:66:ARG:H 16 0.0 (1,240) 1:A:109:ASP:H 1:A:113:VAL:HG21 4 0.0 (1,222) 1:A:109:ASP:H 1:A:113:VAL:HG23 4 0.0 (1,222) 1:A:109:ASP:H 1:A:113:VAL:HG22 19 0.0 (1,222) 1:A:109:ASP:H 1:A:113:VAL:HG23 19 0.0 (1,222) 1:A:109:ASP:H 1:A:113:VAL:HG23 19 </td <td>7</td>	7
(1,291) 1:A:182:LEU:HD21 1:A:183:GLU:H 8 0.0 (1,291) 1:A:182:LEU:HD22 1:A:183:GLU:H 8 0.0 (1,291) 1:A:182:LEU:HD23 1:A:183:GLU:H 8 0.0 (1,288) 1:A:2:LEU:HD11 1:A:3:ILE:H 7 0.0 (1,288) 1:A:2:LEU:HD12 1:A:3:ILE:H 7 0.0 (1,288) 1:A:2:LEU:HD13 1:A:3:ILE:H 7 0.0 (1,288) 1:A:65:GLU:H 1:A:66:ARG:H 16 0.0 (1,240) 1:A:65:GLU:H 1:A:13:VAL:HG21 4 0.0 (1,222) 1:A:109:ASP:H 1:A:113:VAL:HG22 4 0.0 (1,222) 1:A:109:ASP:H 1:A:113:VAL:HG23 4 0.0 (1,222) 1:A:109:ASP:H 1:A:113:VAL:HG22 19 0.0 (1,222) 1:A:109:ASP:H 1:A:113:VAL:HG23 19 0.0 (1,222) 1:A:109:ASP:H 1:A:113:VAL:HG23 19 0.0	11
(1,291) 1:A:182:LEU:HD22 1:A:183:GLU:H 8 0.0 (1,291) 1:A:182:LEU:HD23 1:A:183:GLU:H 8 0.0 (1,288) 1:A:2:LEU:HD11 1:A:3:ILE:H 7 0.0 (1,288) 1:A:2:LEU:HD12 1:A:3:ILE:H 7 0.0 (1,288) 1:A:2:LEU:HD13 1:A:3:ILE:H 7 0.0 (1,288) 1:A:65:GLU:H 1:A:66:ARG:H 16 0.0 (1,240) 1:A:65:GLU:H 1:A:66:ARG:H 16 0.0 (1,222) 1:A:109:ASP:H 1:A:113:VAL:HG21 4 0.0 (1,222) 1:A:109:ASP:H 1:A:113:VAL:HG23 4 0.0 (1,222) 1:A:109:ASP:H 1:A:113:VAL:HG21 19 0.0 (1,222) 1:A:109:ASP:H 1:A:113:VAL:HG22 19 0.0 (1,222) 1:A:109:ASP:H 1:A:113:VAL:HG23 19 0.0 (1,222) 1:A:109:ASP:H 1:A:113:VAL:HG23 19 0.0)7
(1,291) 1:A:182:LEU:HD23 1:A:183:GLU:H 8 0.0 (1,288) 1:A:2:LEU:HD11 1:A:3:ILE:H 7 0.0 (1,288) 1:A:2:LEU:HD12 1:A:3:ILE:H 7 0.0 (1,288) 1:A:2:LEU:HD13 1:A:3:ILE:H 7 0.0 (1,288) 1:A:65:GLU:H 1:A:66:ARG:H 16 0.0 (1,240) 1:A:65:GLU:H 1:A:66:ARG:H 16 0.0 (1,222) 1:A:109:ASP:H 1:A:113:VAL:HG21 4 0.0 (1,222) 1:A:109:ASP:H 1:A:113:VAL:HG23 4 0.0 (1,222) 1:A:109:ASP:H 1:A:113:VAL:HG21 19 0.0 (1,222) 1:A:109:ASP:H 1:A:113:VAL:HG22 19 0.0 (1,222) 1:A:109:ASP:H 1:A:113:VAL:HG23 19 0.0)7
(1,288) 1:A:2:LEU:HD11 1:A:3:ILE:H 7 0.0 (1,288) 1:A:2:LEU:HD12 1:A:3:ILE:H 7 0.0 (1,288) 1:A:2:LEU:HD13 1:A:3:ILE:H 7 0.0 (1,240) 1:A:65:GLU:H 1:A:66:ARG:H 16 0.0 (1,222) 1:A:109:ASP:H 1:A:113:VAL:HG21 4 0.0 (1,222) 1:A:109:ASP:H 1:A:113:VAL:HG22 4 0.0 (1,222) 1:A:109:ASP:H 1:A:113:VAL:HG23 4 0.0 (1,222) 1:A:109:ASP:H 1:A:113:VAL:HG21 19 0.0 (1,222) 1:A:109:ASP:H 1:A:113:VAL:HG22 19 0.0 (1,222) 1:A:109:ASP:H 1:A:113:VAL:HG23 19 0.0)7
(1,288) 1:A:2:LEU:HD12 1:A:3:ILE:H 7 0.0 (1,288) 1:A:2:LEU:HD13 1:A:3:ILE:H 7 0.0 (1,240) 1:A:65:GLU:H 1:A:66:ARG:H 16 0.0 (1,222) 1:A:109:ASP:H 1:A:113:VAL:HG21 4 0.0 (1,222) 1:A:109:ASP:H 1:A:113:VAL:HG22 4 0.0 (1,222) 1:A:109:ASP:H 1:A:113:VAL:HG23 4 0.0 (1,222) 1:A:109:ASP:H 1:A:113:VAL:HG21 19 0.0 (1,222) 1:A:109:ASP:H 1:A:113:VAL:HG22 19 0.0 (1,222) 1:A:109:ASP:H 1:A:113:VAL:HG23 19 0.0)7
(1,288) 1:A:2:LEU:HD13 1:A:3:ILE:H 7 0.0 (1,240) 1:A:65:GLU:H 1:A:66:ARG:H 16 0.0 (1,222) 1:A:109:ASP:H 1:A:113:VAL:HG21 4 0.0 (1,222) 1:A:109:ASP:H 1:A:113:VAL:HG22 4 0.0 (1,222) 1:A:109:ASP:H 1:A:113:VAL:HG23 4 0.0 (1,222) 1:A:109:ASP:H 1:A:113:VAL:HG21 19 0.0 (1,222) 1:A:109:ASP:H 1:A:113:VAL:HG22 19 0.0 (1,222) 1:A:109:ASP:H 1:A:113:VAL:HG23 19 0.0)7
(1,240) 1:A:65:GLU:H 1:A:66:ARG:H 16 0.0 (1,222) 1:A:109:ASP:H 1:A:113:VAL:HG21 4 0.0 (1,222) 1:A:109:ASP:H 1:A:113:VAL:HG22 4 0.0 (1,222) 1:A:109:ASP:H 1:A:113:VAL:HG23 4 0.0 (1,222) 1:A:109:ASP:H 1:A:113:VAL:HG21 19 0.0 (1,222) 1:A:109:ASP:H 1:A:113:VAL:HG22 19 0.0 (1,222) 1:A:109:ASP:H 1:A:113:VAL:HG23 19 0.0)7
(1,222) 1:A:109:ASP:H 1:A:113:VAL:HG21 4 0.0 (1,222) 1:A:109:ASP:H 1:A:113:VAL:HG22 4 0.0 (1,222) 1:A:109:ASP:H 1:A:113:VAL:HG23 4 0.0 (1,222) 1:A:109:ASP:H 1:A:113:VAL:HG21 19 0.0 (1,222) 1:A:109:ASP:H 1:A:113:VAL:HG22 19 0.0 (1,222) 1:A:109:ASP:H 1:A:113:VAL:HG23 19 0.0	7
(1,222) 1:A:109:ASP:H 1:A:113:VAL:HG22 4 0.0 (1,222) 1:A:109:ASP:H 1:A:113:VAL:HG23 4 0.0 (1,222) 1:A:109:ASP:H 1:A:113:VAL:HG21 19 0.0 (1,222) 1:A:109:ASP:H 1:A:113:VAL:HG22 19 0.0 (1,222) 1:A:109:ASP:H 1:A:113:VAL:HG23 19 0.0 (1,222) 1:A:109:ASP:H 1:A:113:VAL:HG23 19 0.0	7
(1,222) 1:A:109:ASP:H 1:A:113:VAL:HG23 4 0.0 (1,222) 1:A:109:ASP:H 1:A:113:VAL:HG21 19 0.0 (1,222) 1:A:109:ASP:H 1:A:113:VAL:HG22 19 0.0 (1,222) 1:A:109:ASP:H 1:A:113:VAL:HG23 19 0.0 (1,222) 1:A:109:ASP:H 1:A:113:VAL:HG23 19 0.0)7
(1,222) 1:A:109:ASP:H 1:A:113:VAL:HG21 19 0.0 (1,222) 1:A:109:ASP:H 1:A:113:VAL:HG22 19 0.0 (1,222) 1:A:109:ASP:H 1:A:113:VAL:HG23 19 0.0	7
(1,222) 1:A:109:ASP:H 1:A:113:VAL:HG21 19 0.0 (1,222) 1:A:109:ASP:H 1:A:113:VAL:HG22 19 0.0 (1,222) 1:A:109:ASP:H 1:A:113:VAL:HG23 19 0.0)7
(1,222) 1:A:109:ASP:H 1:A:113:VAL:HG23 19 0.0	7
)7
(1,183) 1:A:171:LEU:HD21 1:A:172:VAL:H 15 0.0)7
)7
(1,183) 1:A:171:LEU:HD22 1:A:172:VAL:H 15 0.0)7
(1,183) 1:A:171:LEU:HD23 1:A:172:VAL:H 15 0.0	7
(1,181) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:172:VAL:H 5 0.0)7
(1,181) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:172:VAL:H 17 0.0	7
(1,160) 1:A:44:LEU:H 1:A:44:LEU:HD11 8 0.0)7
(1,160) 1:A:44:LEU:H 1:A:44:LEU:HD12 8 0.0)7
(1,160) 1:A:44:LEU:H 1:A:44:LEU:HD13 8 0.0	7
(1,160) 1:A:44:LEU:H 1:A:44:LEU:HD11 13 0.0)7
(1,160) 1:A:44:LEU:H 1:A:44:LEU:HD12 13 0.0)7
(1,160) 1:A:44:LEU:H 1:A:44:LEU:HD13 13 0.0)7
(1,148) 1:A:71:VAL:HG11 1:A:78:GLU:H 9 0.0)7
(1,148) 1:A:71:VAL:HG12 1:A:78:GLU:H 9 0.0	7
(1,148) 1:A:71:VAL:HG13 1:A:78:GLU:H 9 0.0)7
(1,146) 1:A:78:GLU:H 1:A:139:PHE:HZ 11 0.0)7
(1,146) 1:A:78:GLU:H 1:A:139:PHE:HZ 17 0.0)7
(1,135) 1:A:23:VAL:H 1:A:26:LEU:H 3 0.0)7
(1,130) 1:A:132:ARG:H 1:A:133:PHE:HD1 4 0.0)7
(1,130) 1:A:132:ARG:H 1:A:133:PHE:HD2 4 0.0)7
(1,1129) 1:A:122:GLY:O 1:A:126:SER:H 14 0.0)7
(1,1129) 1:A:122:GLY:O 1:A:126:SER:H 18 0.0)7
(1,1087) 1:A:90:ALA:O 1:A:94:LYS:H 4 0.0)7
(1,1087) 1:A:90:ALA:O 1:A:94:LYS:H 11 0.0)7
(1,108) 1:A:15:SER:H 1:A:18:PHE:HD1 7 0.0	



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

(1,108) 1:A:15:SER:H 1:A:16:PHE:HD2 7 0.07 (1,1053) 1:A:15:SER:H 1:A:166:VAL:O 2 0.07 (1,105) 1:A:127:LEU:HD21 1:A:128:LEU:H 15 0.07 (1,105) 1:A:127:LEU:HD22 1:A:128:LEU:H 15 0.07 (1,1045) 1:A:155:ILE:H 1:A:170:MET:O 12 0.07 (1,1045) 1:A:155:ILE:H 1:A:170:MET:O 20 0.07 (1,1045) 1:A:155:ILE:H 1:A:170:MET:O 20 0.07 (1,1045) 1:A:4:TYR:O 1:A:138:PHE:H 18 0.07 (1,1015) 1:A:4:TYR:O 1:A:14:SER:H 17 0.07 (1,101) 1:A:3:ILE:H 1:A:179:GLU:H 16 0.07 (1,100) 1:A:58:ASP:H 1:A:59:GLY:H 12 0.07 (1,101 1:A:3:ILE:H 1:A:179:GLU:H 16 0.07 (1,985) 1:A:99:VAL:HG11 1:A:172:VAL:HG11 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG12 1:A:172:VAL:HG12 12 <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)
(1,105) 1:A:127:LEU:HD21 1:A:128:LEU:H 15 0.07 (1,105) 1:A:127:LEU:HD22 1:A:128:LEU:H 15 0.07 (1,105) 1:A:127:LEU:HD23 1:A:128:LEU:H 15 0.07 (1,1045) 1:A:155:ILE:H 1:A:170:MET:O 12 0.07 (1,1045) 1:A:155:ILE:H 1:A:170:MET:O 20 0.07 (1,1031) 1:A:79:MET:O 1:A:138:PHE:H 18 0.07 (1,1031) 1:A:79:MET:O 1:A:14:SER:H 17 0.07 (1,1001) 1:A:3:ILE:H 1:A:179:GLU:H 16 0.07 (1,100) 1:A:3:ILE:H 1:A:172:VAL:HG11 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG11 1:A:172:VAL:HG12 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG11 1:A:172:VAL:HG13 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG12 1:A:172:VAL:HG13 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:172:VAL:HG13 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:172:VAL	(1,108)	1:A:15:SER:H	1:A:18:PHE:HD2	7	0.07
(1,105) 1:A:127:LEU:HD22 1:A:128:LEU:H 15 0.07 (1,105) 1:A:127:LEU:HD23 1:A:128:LEU:H 15 0.07 (1,1045) 1:A:155:ILE:H 1:A:170:MET:O 12 0.07 (1,1045) 1:A:155:ILE:H 1:A:170:MET:O 20 0.07 (1,1031) 1:A:79:MET:O 1:A:138:PHE:H 18 0.07 (1,1015) 1:A:4:TYR:O 1:A:14:SER:H 17 0.07 (1,100) 1:A:58:ASP:H 1:A:59:GLY:H 12 0.07 (1,100) 1:A:58:ASP:H 1:A:179:GLU:H 16 0.07 (1,985) 1:A:99:VAL:HG11 1:A:172:VAL:HG11 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG11 1:A:172:VAL:HG13 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG12 1:A:172:VAL:HG11 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG12 1:A:172:VAL:HG13 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:172:VAL:HG11 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:172:VAL:H	(1,1053)	1:A:159:ARG:H	1:A:166:VAL:O	2	0.07
(1,105) 1:A:127:LEU:HD23 1:A:128:LEU:H 15 0.07 (1,1045) 1:A:155:ILE:H 1:A:170:MET:O 12 0.07 (1,1045) 1:A:155:ILE:H 1:A:170:MET:O 20 0.07 (1,1031) 1:A:79:MET:O 1:A:138:PHE:H 18 0.07 (1,105) 1:A:479:MET:O 1:A:14:SER:H 17 0.07 (1,100) 1:A:58:ASP:H 1:A:59:GLY:H 12 0.07 (1,100) 1:A:3:ILE:H 1:A:179:GLU:H 16 0.07 (1,1) 1:A:3:ILE:H 1:A:172:VAL:HG11 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG11 1:A:172:VAL:HG12 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG11 1:A:172:VAL:HG13 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG12 1:A:172:VAL:HG12 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:172:VAL:HG11 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:172:VAL:HG12 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:172:VAL:HG13<	(1,105)	1:A:127:LEU:HD21	1:A:128:LEU:H	15	0.07
(1,1045) 1:A:155:ILE:H 1:A:170:MET:O 12 0.07 (1,1045) 1:A:155:ILE:H 1:A:170:MET:O 20 0.07 (1,1031) 1:A:79:MET:O 1:A:138:PHE:H 18 0.07 (1,1015) 1:A:4:TYR:O 1:A:14:SER:H 17 0.07 (1,100) 1:A:58:ASP:H 1:A:59:GLY:H 12 0.07 (1,1) 1:A:3:ILE:H 1:A:179:GLU:H 16 0.07 (1,985) 1:A:99:VAL:HG11 1:A:172:VAL:HG11 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG11 1:A:172:VAL:HG12 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG12 1:A:172:VAL:HG13 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG12 1:A:172:VAL:HG13 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:172:VAL:HG13 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:172:VAL:HG11 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:172:VAL:HG11 12 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL	(1,105)	1:A:127:LEU:HD22	1:A:128:LEU:H	15	0.07
(1,1045) 1:A:155:ILE:H 1:A:170:MET:O 20 0.07 (1,1031) 1:A:79:MET:O 1:A:138:PHE:H 18 0.07 (1,1015) 1:A:4:TYR:O 1:A:14:SER:H 17 0.07 (1,100) 1:A:58:ASP:H 1:A:59:GLY:H 12 0.07 (1,1) 1:A:3:ILE:H 1:A:179:GLU:H 16 0.07 (1,985) 1:A:99:VAL:HG11 1:A:172:VAL:HG11 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG11 1:A:172:VAL:HG12 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG11 1:A:172:VAL:HG13 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG12 1:A:172:VAL:HG12 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG12 1:A:172:VAL:HG13 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:172:	(1,105)	1:A:127:LEU:HD23	1:A:128:LEU:H	15	0.07
(1,1031) 1:A:79:MET:O 1:A:138:PHE:H 18 0.07 (1,1015) 1:A:4:TYR:O 1:A:14:SER:H 17 0.07 (1,100) 1:A:58:ASP:H 1:A:59:GLY:H 12 0.07 (1,1) 1:A:3:ILE:H 1:A:179:GLU:H 16 0.07 (1,985) 1:A:99:VAL:HG11 1:A:172:VAL:HG11 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG11 1:A:172:VAL:HG12 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG11 1:A:172:VAL:HG13 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG12 1:A:172:VAL:HG11 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG12 1:A:172:VAL:HG13 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:172:VAL:HG13 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:172:VAL:HG11 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:172:VAL:HG13 12 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG11 1 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD11 1:A	(1,1045)	1:A:155:ILE:H	1:A:170:MET:O	12	0.07
(1,1015) 1:A:4:TYR:O 1:A:14:SER:H 17 0.07 (1,100) 1:A:58:ASP:H 1:A:59:GLY:H 12 0.07 (1,1) 1:A:3:ILE:H 1:A:179:GLU:H 16 0.07 (1,985) 1:A:99:VAL:HG11 1:A:172:VAL:HG11 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG11 1:A:172:VAL:HG12 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG11 1:A:172:VAL:HG13 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG12 1:A:172:VAL:HG13 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG12 1:A:172:VAL:HG13 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG12 1:A:172:VAL:HG13 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:172:VAL:HG13 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:172:VAL:HG13 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:172:VAL:HG13 12 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG13 1 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD11 <t< td=""><td>(1,1045)</td><td>1:A:155:ILE:H</td><td>1:A:170:MET:O</td><td>20</td><td>0.07</td></t<>	(1,1045)	1:A:155:ILE:H	1:A:170:MET:O	20	0.07
(1,100) 1:A:58:ASP:H 1:A:59:GLY:H 12 0.07 (1,1) 1:A:3:ILE:H 1:A:179:GLU:H 16 0.07 (1,985) 1:A:99:VAL:HG11 1:A:172:VAL:HG11 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG11 1:A:172:VAL:HG12 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG11 1:A:172:VAL:HG13 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG12 1:A:172:VAL:HG11 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG12 1:A:172:VAL:HG13 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG12 1:A:172:VAL:HG13 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:172:VAL:HG11 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:172:VAL:HG11 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:172:VAL:HG13 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:172:VAL:HG11 12 0.06 (1,985) 1:A:199:VAL:HG13 1:A:172:VAL:HG13 12 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD11	(1,1031)	1:A:79:MET:O	1:A:138:PHE:H	18	0.07
(1,1) 1:A:3:ILE:H 1:A:179:GLU:H 16 0.07 (1,985) 1:A:99:VAL:HG11 1:A:172:VAL:HG11 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG11 1:A:172:VAL:HG12 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG11 1:A:172:VAL:HG13 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG12 1:A:172:VAL:HG12 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG12 1:A:172:VAL:HG13 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:172:VAL:HG13 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:172:VAL:HG12 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:172:VAL:HG13 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:172:VAL:HG13 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:172:VAL:HG13 12 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:13:VAL:HG11 1 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG13 1 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD13 <td>(1,1015)</td> <td>1:A:4:TYR:O</td> <td>1:A:14:SER:H</td> <td>17</td> <td>0.07</td>	(1,1015)	1:A:4:TYR:O	1:A:14:SER:H	17	0.07
(1,985) 1:A:99:VAL:HG11 1:A:172:VAL:HG11 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG11 1:A:172:VAL:HG12 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG11 1:A:172:VAL:HG13 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG12 1:A:172:VAL:HG11 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG12 1:A:172:VAL:HG12 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:172:VAL:HG13 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:172:VAL:HG12 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:172:VAL:HG12 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:172:VAL:HG13 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:172:VAL:HG12 12 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG11 1 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG12 1 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG13 1 0.06 (1,983) 1:A:100:I	(1,100)	1:A:58:ASP:H	1:A:59:GLY:H	12	0.07
(1,985) 1:A:99:VAL:HG11 1:A:172:VAL:HG12 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG11 1:A:172:VAL:HG13 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG12 1:A:172:VAL:HG11 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG12 1:A:172:VAL:HG13 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:172:VAL:HG11 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:172:VAL:HG12 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:172:VAL:HG12 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:172:VAL:HG13 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:172:VAL:HG13 12 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG13 12 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG11 1 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG13 1 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG13 1 0.06 (1,983) 1:A:100:	(1,1)	1:A:3:ILE:H	1:A:179:GLU:H	16	0.07
(1,985) 1:A:99:VAL:HG11 1:A:172:VAL:HG13 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG12 1:A:172:VAL:HG11 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG12 1:A:172:VAL:HG12 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:172:VAL:HG13 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:172:VAL:HG11 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:172:VAL:HG12 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:172:VAL:HG12 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:172:VAL:HG12 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:172:VAL:HG13 12 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG13 1 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG13 1 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG12 1 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG13 1 0.06 (1,983) 1:A:100:I	(1,985)	1:A:99:VAL:HG11	1:A:172:VAL:HG11	12	0.06
(1,985) 1:A:99:VAL:HG12 1:A:172:VAL:HG11 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG12 1:A:172:VAL:HG12 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG12 1:A:172:VAL:HG13 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:172:VAL:HG11 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:172:VAL:HG12 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:172:VAL:HG13 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:172:VAL:HG13 12 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG11 1 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG13 1 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG11 1 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG13 1 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG11 1 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG13 1 0.06 (1,983) 1:A:100:I	(1,985)	1:A:99:VAL:HG11	1:A:172:VAL:HG12	12	0.06
(1,985) 1:A:99:VAL:HG12 1:A:172:VAL:HG13 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG12 1:A:172:VAL:HG13 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:172:VAL:HG11 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:172:VAL:HG12 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:172:VAL:HG13 12 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG11 1 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG12 1 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG13 1 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG12 1 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG13 1 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG13 1 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG13 1 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG13 5 0.06 (1,983) 1:A:100:I	(1,985)	1:A:99:VAL:HG11	1:A:172:VAL:HG13	12	0.06
(1,985) 1:A:99:VAL:HG12 1:A:172:VAL:HG13 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:172:VAL:HG11 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:172:VAL:HG12 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:172:VAL:HG13 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:172:VAL:HG13 12 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG11 1 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG13 1 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG11 1 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG13 1 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG11 1 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG13 1 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG13 1 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG13 5 0.06 (1,983) 1:A:100:I	(1,985)	1:A:99:VAL:HG12	1:A:172:VAL:HG11	12	0.06
(1,985) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:172:VAL:HG11 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:172:VAL:HG12 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:172:VAL:HG13 12 0.06 (1,985) 1:A:199:VAL:HG13 1:A:172:VAL:HG13 12 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG11 1 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG13 1 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG11 1 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG12 1 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG13 1 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG11 1 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG13 1 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG13 5 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG13 5 0.06 (1,983) 1:A:100:	(1,985)	1:A:99:VAL:HG12	1:A:172:VAL:HG12	12	0.06
(1,985) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:172:VAL:HG13 12 0.06 (1,985) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:172:VAL:HG13 12 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG11 1 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG12 1 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG13 1 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG11 1 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG13 1 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG11 1 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG12 1 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG13 1 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG12 5 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG13 5 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG12 5 0.06 (1,983) 1:A:100:I	(1,985)	1:A:99:VAL:HG12	1:A:172:VAL:HG13	12	0.06
(1,985) 1:A:99:VAL:HG13 1:A:172:VAL:HG13 12 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG11 1 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG12 1 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG13 1 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG11 1 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG13 1 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG11 1 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG12 1 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG13 1 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG11 5 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG13 5 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG13 5 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG13 5 0.06 (1,983) 1:A:100:I	(1,985)	1:A:99:VAL:HG13	1:A:172:VAL:HG11	12	0.06
(1,983) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG11 1 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG12 1 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG13 1 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG11 1 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG12 1 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG13 1 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG12 1 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG13 1 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG11 5 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG13 5 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG11 5 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG13 5 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG13 5 0.06 (1,983) 1:A:100:I	(1,985)	1:A:99:VAL:HG13	1:A:172:VAL:HG12	12	0.06
(1,983) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG12 1 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG13 1 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG11 1 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG12 1 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG13 1 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG11 1 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG13 1 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG11 5 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG13 5 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG11 5 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG12 5 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG13 5 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG13 5 0.06 (1,983) 1:A:100:I	(1,985)	1:A:99:VAL:HG13	1:A:172:VAL:HG13	12	0.06
(1,983) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG13 1 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG11 1 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG12 1 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG13 1 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG11 1 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG12 1 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG11 5 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG12 5 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG13 5 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG11 5 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG13 5 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG13 5 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG13 5 0.06 (1,983) 1:A:100:I	(1,983)	1:A:100:ILE:HD11	1:A:113:VAL:HG11	1	0.06
(1,983) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG11 1 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG12 1 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG13 1 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG11 1 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG12 1 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG13 1 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG11 5 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG13 5 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG11 5 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG12 5 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG13 5 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG13 5 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG13 5 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG11 5 0.06	(1,983)	1:A:100:ILE:HD11	1:A:113:VAL:HG12	1	0.06
(1,983) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG12 1 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG13 1 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG11 1 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG12 1 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG13 1 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG12 5 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG13 5 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG11 5 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG12 5 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG13 5 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG13 5 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG11 5 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG11 5 0.06	(1,983)	1:A:100:ILE:HD11	1:A:113:VAL:HG13	1	0.06
(1,983) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG13 1 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG11 1 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG12 1 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG13 1 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG11 5 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG13 5 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG11 5 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG12 5 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG13 5 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG13 5 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG11 5 0.06	(1,983)	1:A:100:ILE:HD12	1:A:113:VAL:HG11	1	0.06
(1,983) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG11 1 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG12 1 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG13 1 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG11 5 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG12 5 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG11 5 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG12 5 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG13 5 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG13 5 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG11 5 0.06	(1,983)	1:A:100:ILE:HD12	1:A:113:VAL:HG12	1	0.06
(1,983) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG12 1 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG13 1 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG11 5 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG12 5 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG13 5 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG11 5 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG12 5 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG13 5 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG11 5 0.06	(1,983)	1:A:100:ILE:HD12	1:A:113:VAL:HG13	1	0.06
(1,983) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG13 1 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG11 5 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG12 5 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG13 5 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG11 5 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG12 5 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG13 5 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG11 5 0.06	(1,983)	1:A:100:ILE:HD13	1:A:113:VAL:HG11	1	0.06
(1,983) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG11 5 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG12 5 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG13 5 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG11 5 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG12 5 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG13 5 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG11 5 0.06	(1,983)	1:A:100:ILE:HD13	1:A:113:VAL:HG12	1	0.06
(1,983) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG12 5 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG13 5 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG11 5 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG12 5 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG13 5 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG11 5 0.06	(1,983)	1:A:100:ILE:HD13	1:A:113:VAL:HG13	1	0.06
(1,983) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG13 5 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG11 5 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG12 5 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG13 5 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG11 5 0.06	(1,983)	1:A:100:ILE:HD11	1:A:113:VAL:HG11	5	0.06
(1,983) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG11 5 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG12 5 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG13 5 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG11 5 0.06	(1,983)	1:A:100:ILE:HD11	1:A:113:VAL:HG12	5	0.06
(1,983) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG12 5 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG13 5 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG11 5 0.06	(1,983)	1:A:100:ILE:HD11	1:A:113:VAL:HG13	5	0.06
(1,983) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG13 5 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG11 5 0.06	(1,983)	1:A:100:ILE:HD12	1:A:113:VAL:HG11	5	0.06
(1,983) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG13 5 0.06 (1,983) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG11 5 0.06	(1,983)	1:A:100:ILE:HD12	1:A:113:VAL:HG12	5	0.06
(1,983) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG11 5 0.06		1:A:100:ILE:HD12	1:A:113:VAL:HG13	5	0.06
(1.083) $1 \cdot \Delta \cdot 100 \cdot \text{H.E.+HD} \cdot 13 = 1 \cdot \Delta \cdot 113 \cdot \text{VAI} \cdot \text{HC} \cdot 12 = 5 = 0.06$		1:A:100:ILE:HD13	1:A:113:VAL:HG11	5	0.06
(1,000) 1.A.100.1LE.11D10 1.A.110.VAL.11G12 0 0.00	(1,983)	1:A:100:ILE:HD13	1:A:113:VAL:HG12	5	0.06
(1,983) 1:A:100:ILE:HD13 1:A:113:VAL:HG13 5 0.06	(1,983)	1:A:100:ILE:HD13	1:A:113:VAL:HG13	5	0.06
(1,983) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG11 11 0.06		1:A:100:ILE:HD11	1:A:113:VAL:HG11	11	0.06
(1,983) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG12 11 0.06		1:A:100:ILE:HD11	1:A:113:VAL:HG12	11	0.06
(1,983) 1:A:100:ILE:HD11 1:A:113:VAL:HG13 11 0.06	(1,983)	1:A:100:ILE:HD11	1:A:113:VAL:HG13	11	0.06
(1,983) 1:A:100:ILE:HD12 1:A:113:VAL:HG11 11 0.06	(1,983)	1:A:100:ILE:HD12	1:A:113:VAL:HG11	11	0.06



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,983)	1:A:100:ILE:HD12	1:A:113:VAL:HG12	11	0.06
(1,983)	1:A:100:ILE:HD12	1:A:113:VAL:HG13	11	0.06
(1,983)	1:A:100:ILE:HD13	1:A:113:VAL:HG11	11	0.06
(1,983)	1:A:100:ILE:HD13	1:A:113:VAL:HG12	11	0.06
(1,983)	1:A:100:ILE:HD13	1:A:113:VAL:HG13	11	0.06
(1,98)	1:A:36:VAL:HG11	1:A:67:GLY:H	2	0.06
(1,98)	1:A:36:VAL:HG12	1:A:67:GLY:H	2	0.06
(1,98)	1:A:36:VAL:HG13	1:A:67:GLY:H	2	0.06
(1,977)	1:A:113:VAL:HG11	1:A:100:ILE:HD11	1	0.06
(1,977)	1:A:113:VAL:HG11	1:A:100:ILE:HD12	1	0.06
(1,977)	1:A:113:VAL:HG11	1:A:100:ILE:HD13	1	0.06
(1,977)	1:A:113:VAL:HG12	1:A:100:ILE:HD11	1	0.06
(1,977)	1:A:113:VAL:HG12	1:A:100:ILE:HD12	1	0.06
(1,977)	1:A:113:VAL:HG12	1:A:100:ILE:HD13	1	0.06
(1,977)	1:A:113:VAL:HG13	1:A:100:ILE:HD11	1	0.06
(1,977)	1:A:113:VAL:HG13	1:A:100:ILE:HD12	1	0.06
(1,977)	1:A:113:VAL:HG13	1:A:100:ILE:HD13	1	0.06
(1,977)	1:A:113:VAL:HG11	1:A:100:ILE:HD11	5	0.06
(1,977)	1:A:113:VAL:HG11	1:A:100:ILE:HD12	5	0.06
(1,977)	1:A:113:VAL:HG11	1:A:100:ILE:HD13	5	0.06
(1,977)	1:A:113:VAL:HG12	1:A:100:ILE:HD11	5	0.06
(1,977)	1:A:113:VAL:HG12	1:A:100:ILE:HD12	5	0.06
(1,977)	1:A:113:VAL:HG12	1:A:100:ILE:HD13	5	0.06
(1,977)	1:A:113:VAL:HG13	1:A:100:ILE:HD11	5	0.06
(1,977)	1:A:113:VAL:HG13	1:A:100:ILE:HD12	5	0.06
(1,977)	1:A:113:VAL:HG13	1:A:100:ILE:HD13	5	0.06
(1,977)	1:A:113:VAL:HG11	1:A:100:ILE:HD11	11	0.06
(1,977)	1:A:113:VAL:HG11	1:A:100:ILE:HD12	11	0.06
(1,977)	1:A:113:VAL:HG11	1:A:100:ILE:HD13	11	0.06
(1,977)	1:A:113:VAL:HG12	1:A:100:ILE:HD11	11	0.06
(1,977)	1:A:113:VAL:HG12	1:A:100:ILE:HD12	11	0.06
(1,977)	1:A:113:VAL:HG12	1:A:100:ILE:HD13	11	0.06
(1,977)	1:A:113:VAL:HG13	1:A:100:ILE:HD11	11	0.06
(1,977)	1:A:113:VAL:HG13	1:A:100:ILE:HD12	11	0.06
(1,977)	1:A:113:VAL:HG13	1:A:100:ILE:HD13	11	0.06
(1,951)	1:A:161:VAL:H	1:A:166:VAL:HG11	13	0.06
(1,951)	1:A:161:VAL:H	1:A:166:VAL:HG12	13	0.06
(1,951)	1:A:161:VAL:H	1:A:166:VAL:HG13	13	0.06
(1,948)	1:A:158:TYR:H	1:A:158:TYR:HB2	17	0.06
(1,944)	1:A:152:GLN:HE21	1:A:171:LEU:HD21	14	0.06
(1,944)	1:A:152:GLN:HE21	1:A:171:LEU:HD22	14	0.06
(1,944)	1:A:152:GLN:HE21	1:A:171:LEU:HD23	14	0.06



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,944)	1:A:152:GLN:HE22	1:A:171:LEU:HD21	14	0.06
(1,944)	1:A:152:GLN:HE22	1:A:171:LEU:HD22	14	0.06
(1,944)	1:A:152:GLN:HE22	1:A:171:LEU:HD23	14	0.06
(1,901)	1:A:156:ILE:H	1:A:169:LEU:HD11	2	0.06
(1,901)	1:A:156:ILE:H	1:A:169:LEU:HD12	2	0.06
(1,901)	1:A:156:ILE:H	1:A:169:LEU:HD13	2	0.06
(1,901)	1:A:156:ILE:H	1:A:169:LEU:HD11	13	0.06
(1,901)	1:A:156:ILE:H	1:A:169:LEU:HD12	13	0.06
(1,901)	1:A:156:ILE:H	1:A:169:LEU:HD13	13	0.06
(1,900)	1:A:2:LEU:HD21	1:A:179:GLU:H	13	0.06
(1,900)	1:A:2:LEU:HD22	1:A:179:GLU:H	13	0.06
(1,900)	1:A:2:LEU:HD23	1:A:179:GLU:H	13	0.06
(1,90)	1:A:161:VAL:H	1:A:163:GLY:H	10	0.06
(1,897)	1:A:36:VAL:HG21	1:A:44:LEU:H	18	0.06
(1,897)	1:A:36:VAL:HG22	1:A:44:LEU:H	18	0.06
(1,897)	1:A:36:VAL:HG23	1:A:44:LEU:H	18	0.06
(1,891)	1:A:36:VAL:HG11	1:A:45:ALA:H	8	0.06
(1,891)	1:A:36:VAL:HG12	1:A:45:ALA:H	8	0.06
(1,891)	1:A:36:VAL:HG13	1:A:45:ALA:H	8	0.06
(1,888)	1:A:123:TRP:H	1:A:124:VAL:HG21	7	0.06
(1,888)	1:A:123:TRP:H	1:A:124:VAL:HG22	7	0.06
(1,888)	1:A:123:TRP:H	1:A:124:VAL:HG23	7	0.06
(1,883)	1:A:140:ILE:HD11	1:A:145:ALA:H	8	0.06
(1,883)	1:A:140:ILE:HD12	1:A:145:ALA:H	8	0.06
(1,883)	1:A:140:ILE:HD13	1:A:145:ALA:H	8	0.06
(1,881)	1:A:77:VAL:HG11	1:A:145:ALA:H	14	0.06
(1,881)	1:A:77:VAL:HG12	1:A:145:ALA:H	14	0.06
(1,881)	1:A:77:VAL:HG13	1:A:145:ALA:H	14	0.06
(1,868)	1:A:113:VAL:HG21	1:A:115:ALA:H	13	0.06
(1,868)	1:A:113:VAL:HG22	1:A:115:ALA:H	13	0.06
(1,868)	1:A:113:VAL:HG23	1:A:115:ALA:H	13	0.06
(1,850)	1:A:112:ASP:H	1:A:113:VAL:HG21	14	0.06
(1,850)	1:A:112:ASP:H	1:A:113:VAL:HG22	14	0.06
(1,850)	1:A:112:ASP:H	1:A:113:VAL:HG23	14	0.06
(1,842)	1:A:113:VAL:HG11	1:A:117:LYS:H	1	0.06
(1,842)	1:A:113:VAL:HG12	1:A:117:LYS:H	1	0.06
(1,842)	1:A:113:VAL:HG13	1:A:117:LYS:H	1	0.06
(1,834)	1:A:71:VAL:HG11	1:A:75:LYS:H	20	0.06
(1,834)	1:A:71:VAL:HG12	1:A:75:LYS:H	20	0.06
(1,834)	1:A:71:VAL:HG13	1:A:75:LYS:H	20	0.06
(1,833)	1:A:75:LYS:H	1:A:76:LEU:HD11	2	0.06
(1,833)	1:A:75:LYS:H	1:A:76:LEU:HD12	2	0.06



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,833)	1:A:75:LYS:H	1:A:76:LEU:HD13	2	0.06
(1,829)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:128:LEU:H	3	0.06
(1,829)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:128:LEU:H	3	0.06
(1,829)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:128:LEU:H	3	0.06
(1,829)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:128:LEU:H	16	0.06
(1,829)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:128:LEU:H	16	0.06
(1,829)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:128:LEU:H	16	0.06
(1,816)	1:A:67:GLY:H	1:A:72:LEU:HD21	17	0.06
(1,816)	1:A:67:GLY:H	1:A:72:LEU:HD22	17	0.06
(1,816)	1:A:67:GLY:H	1:A:72:LEU:HD23	17	0.06
(1,814)	1:A:27:VAL:HG11	1:A:173:LYS:H	11	0.06
(1,814)	1:A:27:VAL:HG12	1:A:173:LYS:H	11	0.06
(1,814)	1:A:27:VAL:HG13	1:A:173:LYS:H	11	0.06
(1,798)	1:A:169:LEU:HD21	1:A:170:MET:H	13	0.06
(1,798)	1:A:169:LEU:HD22	1:A:170:MET:H	13	0.06
(1,798)	1:A:169:LEU:HD23	1:A:170:MET:H	13	0.06
(1,751)	1:A:36:VAL:HG11	1:A:44:LEU:HD21	7	0.06
(1,751)	1:A:36:VAL:HG11	1:A:44:LEU:HD22	7	0.06
(1,751)	1:A:36:VAL:HG11	1:A:44:LEU:HD23	7	0.06
(1,751)	1:A:36:VAL:HG12	1:A:44:LEU:HD21	7	0.06
(1,751)	1:A:36:VAL:HG12	1:A:44:LEU:HD22	7	0.06
(1,751)	1:A:36:VAL:HG12	1:A:44:LEU:HD23	7	0.06
(1,751)	1:A:36:VAL:HG13	1:A:44:LEU:HD21	7	0.06
(1,751)	1:A:36:VAL:HG13	1:A:44:LEU:HD22	7	0.06
(1,751)	1:A:36:VAL:HG13	1:A:44:LEU:HD23	7	0.06
(1,742)	1:A:36:VAL:HG11	1:A:44:LEU:HD11	16	0.06
(1,742)	1:A:36:VAL:HG11	1:A:44:LEU:HD12	16	0.06
(1,742)	1:A:36:VAL:HG11	1:A:44:LEU:HD13	16	0.06
(1,742)	1:A:36:VAL:HG12	1:A:44:LEU:HD11	16	0.06
(1,742)	1:A:36:VAL:HG12	1:A:44:LEU:HD12	16	0.06
(1,742)	1:A:36:VAL:HG12	1:A:44:LEU:HD13	16	0.06
(1,742)	1:A:36:VAL:HG13	1:A:44:LEU:HD11	16	0.06
(1,742)	1:A:36:VAL:HG13	1:A:44:LEU:HD12	16	0.06
(1,742)	1:A:36:VAL:HG13	1:A:44:LEU:HD13	16	0.06
(1,691)	1:A:6:ASP:H	1:A:11:ASP:H	12	0.06
(1,66)	1:A:137:ALA:H	1:A:156:ILE:H	15	0.06
(1,639)	1:A:73:ASN:H	1:A:75:LYS:H	18	0.06
(1,62)	1:A:27:VAL:HG11	1:A:123:TRP:HE1	3	0.06
(1,62)	1:A:27:VAL:HG12	1:A:123:TRP:HE1	3	0.06
(1,62)	1:A:27:VAL:HG13	1:A:123:TRP:HE1	3	0.06
(1,609)	1:A:80:ASN:H	1:A:82:TYR:H	4	0.06
(1,592)	1:A:128:LEU:HD21	1:A:136:LEU:HD21	6	0.06



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

Key	$rac{d\ from\ previous\ page}{\mathbf{Atom-1}}$	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,592)	1:A:128:LEU:HD21		6	0.06
(1,592) $(1,592)$	1:A:128:LEU:HD21		6	0.06
(1,592)	1:A:128:LEU:HD22	1:A:136:LEU:HD21	6	0.06
(1,592)	1:A:128:LEU:HD22	1:A:136:LEU:HD22	6	0.06
(1,592)	1:A:128:LEU:HD22	1:A:136:LEU:HD23	6	0.06
(1,592)	1:A:128:LEU:HD23	1:A:136:LEU:HD21	6	0.06
(1,592)	1:A:128:LEU:HD23	1:A:136:LEU:HD22	6	0.06
(1,592)	1:A:128:LEU:HD23	1:A:136:LEU:HD23	6	0.06
(1,592)	1:A:128:LEU:HD21	1:A:136:LEU:HD21	13	0.06
(1,592)	1:A:128:LEU:HD21	1:A:136:LEU:HD22	13	0.06
(1,592)	1:A:128:LEU:HD21	1:A:136:LEU:HD23	13	0.06
(1,592)	1:A:128:LEU:HD22	1:A:136:LEU:HD21	13	0.06
(1,592)	1:A:128:LEU:HD22	1:A:136:LEU:HD22	13	0.06
(1,592)	1:A:128:LEU:HD22	1:A:136:LEU:HD23	13	0.06
(1,592)	1:A:128:LEU:HD23	1:A:136:LEU:HD21	13	0.06
(1,592)	1:A:128:LEU:HD23	1:A:136:LEU:HD22	13	0.06
(1,592)	1:A:128:LEU:HD23	1:A:136:LEU:HD23	13	0.06
(1,591)	1:A:136:LEU:HD21	1:A:155:ILE:HD11	9	0.06
(1,591)	1:A:136:LEU:HD21	1:A:155:ILE:HD12	9	0.06
(1,591)	1:A:136:LEU:HD21	1:A:155:ILE:HD13	9	0.06
(1,591)	1:A:136:LEU:HD22	1:A:155:ILE:HD11	9	0.06
(1,591)	1:A:136:LEU:HD22	1:A:155:ILE:HD12	9	0.06
(1,591)	1:A:136:LEU:HD22	1:A:155:ILE:HD13	9	0.06
(1,591)	1:A:136:LEU:HD23	1:A:155:ILE:HD11	9	0.06
(1,591)	1:A:136:LEU:HD23	1:A:155:ILE:HD12	9	0.06
(1,591)	1:A:136:LEU:HD23	1:A:155:ILE:HD13	9	0.06
(1,587)	1:A:156:ILE:HD11	1:A:171:LEU:HD21	18	0.06
(1,587)	1:A:156:ILE:HD11	1:A:171:LEU:HD22	18	0.06
(1,587)	1:A:156:ILE:HD11	1:A:171:LEU:HD23	18	0.06
(1,587)	1:A:156:ILE:HD12	1:A:171:LEU:HD21	18	0.06
(1,587)	1:A:156:ILE:HD12	1:A:171:LEU:HD22	18	0.06
(1,587)	1:A:156:ILE:HD12	1:A:171:LEU:HD23	18	0.06
(1,587)	1:A:156:ILE:HD13	1:A:171:LEU:HD21	18	0.06
(1,587)	1:A:156:ILE:HD13	1:A:171:LEU:HD22	18	0.06
(1,587)	1:A:156:ILE:HD13	1:A:171:LEU:HD23	18	0.06
(1,577)	1:A:128:LEU:HD21	1:A:155:ILE:HD11	8	0.06
(1,577)	1:A:128:LEU:HD21	1:A:155:ILE:HD12	8	0.06
(1,577)	1:A:128:LEU:HD21	1:A:155:ILE:HD13	8	0.06
(1,577)	1:A:128:LEU:HD22	1:A:155:ILE:HD11	8	0.06
(1,577)	1:A:128:LEU:HD22	1:A:155:ILE:HD12	8	0.06
(1,577)	1:A:128:LEU:HD22	1:A:155:ILE:HD13	8	0.06
(1,577)	1:A:128:LEU:HD23	1:A:155:ILE:HD11	8	0.06



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,577)	1:A:128:LEU:HD23	1:A:155:ILE:HD12	8	0.06
(1,577)	1:A:128:LEU:HD23	1:A:155:ILE:HD13	8	0.06
(1,569)	1:A:116:PHE:HE1	1:A:120:ILE:HD11	14	0.06
(1,569)	1:A:116:PHE:HE1	1:A:120:ILE:HD12	14	0.06
(1,569)	1:A:116:PHE:HE1	1:A:120:ILE:HD13	14	0.06
(1,557)	1:A:92:ILE:HD11	1:A:124:VAL:HG21	8	0.06
(1,557)	1:A:92:ILE:HD11	1:A:124:VAL:HG22	8	0.06
(1,557)	1:A:92:ILE:HD11	1:A:124:VAL:HG23	8	0.06
(1,557)	1:A:92:ILE:HD12	1:A:124:VAL:HG21	8	0.06
(1,557)	1:A:92:ILE:HD12	1:A:124:VAL:HG22	8	0.06
(1,557)	1:A:92:ILE:HD12	1:A:124:VAL:HG23	8	0.06
(1,557)	1:A:92:ILE:HD13	1:A:124:VAL:HG21	8	0.06
(1,557)	1:A:92:ILE:HD13	1:A:124:VAL:HG22	8	0.06
(1,557)	1:A:92:ILE:HD13	1:A:124:VAL:HG23	8	0.06
(1,537)	1:A:99:VAL:HG21	1:A:116:PHE:HE1	11	0.06
(1,537)	1:A:99:VAL:HG22	1:A:116:PHE:HE1	11	0.06
(1,537)	1:A:99:VAL:HG23	1:A:116:PHE:HE1	11	0.06
(1,532)	1:A:99:VAL:HG11	1:A:172:VAL:HG11	12	0.06
(1,532)	1:A:99:VAL:HG11	1:A:172:VAL:HG12	12	0.06
(1,532)	1:A:99:VAL:HG11	1:A:172:VAL:HG13	12	0.06
(1,532)	1:A:99:VAL:HG12	1:A:172:VAL:HG11	12	0.06
(1,532)	1:A:99:VAL:HG12	1:A:172:VAL:HG12	12	0.06
(1,532)	1:A:99:VAL:HG12	1:A:172:VAL:HG13	12	0.06
(1,532)	1:A:99:VAL:HG13	1:A:172:VAL:HG11	12	0.06
(1,532)	1:A:99:VAL:HG13	1:A:172:VAL:HG12	12	0.06
(1,532)	1:A:99:VAL:HG13	1:A:172:VAL:HG13	12	0.06
(1,517)	1:A:127:LEU:HD11	1:A:133:PHE:HD1	12	0.06
(1,517)	1:A:127:LEU:HD11	1:A:133:PHE:HD2	12	0.06
(1,517)	1:A:127:LEU:HD12	1:A:133:PHE:HD1	12	0.06
(1,517)	1:A:127:LEU:HD12	1:A:133:PHE:HD2	12	0.06
(1,517)	1:A:127:LEU:HD13	1:A:133:PHE:HD1	12	0.06
(1,517)	1:A:127:LEU:HD13	1:A:133:PHE:HD2	12	0.06
(1,500)	1:A:138:PHE:HD1	1:A:153:VAL:HG21	11	0.06
(1,500)	1:A:138:PHE:HD1	1:A:153:VAL:HG22	11	0.06
(1,500)	1:A:138:PHE:HD1	1:A:153:VAL:HG23	11	0.06
(1,500)	1:A:138:PHE:HD2	1:A:153:VAL:HG21	11	0.06
(1,500)	1:A:138:PHE:HD2	1:A:153:VAL:HG22	11	0.06
(1,500)	1:A:138:PHE:HD2	1:A:153:VAL:HG23	11	0.06
(1,500)	1:A:138:PHE:HD1	1:A:153:VAL:HG21	18	0.06
(1,500)	1:A:138:PHE:HD1	1:A:153:VAL:HG22	18	0.06
(1,500)	1:A:138:PHE:HD1	1:A:153:VAL:HG23	18	0.06
(1,500)	1:A:138:PHE:HD2	1:A:153:VAL:HG21	18	0.06



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

(1,500)		$\mathbf{Atom} extbf{-2}$	Model	Violation (Å)
	1:A:138:PHE:HD2	1:A:153:VAL:HG22	18	0.06
(1,500)	1:A:138:PHE:HD2	1:A:153:VAL:HG23	18	0.06
(1,463)	1:A:16:ASP:H	1:A:18:PHE:H	11	0.06
(1,441)	1:A:146:GLU:H	1:A:148:ALA:H	19	0.06
(1,43)	1:A:82:TYR:H	1:A:82:TYR:HD1	1	0.06
(1,415)	1:A:131:ASP:H	1:A:134:LYS:H	9	0.06
(1,391)	1:A:23:VAL:HG11	1:A:26:LEU:H	6	0.06
(1,391)	1:A:23:VAL:HG12	1:A:26:LEU:H	6	0.06
(1,391)	1:A:23:VAL:HG13	1:A:26:LEU:H	6	0.06
(1,389)	1:A:172:VAL:HG21	1:A:174:GLU:H	4	0.06
(1,389)	1:A:172:VAL:HG22	1:A:174:GLU:H	4	0.06
(1,389)	1:A:172:VAL:HG23	1:A:174:GLU:H	4	0.06
(1,379)	1:A:33:LYS:H	1:A:35:VAL:HG21	12	0.06
(1,379)	1:A:33:LYS:H	1:A:35:VAL:HG22	12	0.06
(1,379)	1:A:33:LYS:H	1:A:35:VAL:HG23	12	0.06
(1,379)	1:A:33:LYS:H	1:A:35:VAL:HG21	19	0.06
(1,379)	1:A:33:LYS:H	1:A:35:VAL:HG22	19	0.06
(1,379)	1:A:33:LYS:H	1:A:35:VAL:HG23	19	0.06
(1,361)	1:A:161:VAL:HG11	1:A:164:THR:H	1	0.06
(1,361)	1:A:161:VAL:HG12	1:A:164:THR:H	1	0.06
(1,361)	1:A:161:VAL:HG13	1:A:164:THR:H	1	0.06
(1,341)	1:A:95:PHE:HD1	1:A:98:ASN:H	15	0.06
(1,341)	1:A:95:PHE:HD2	1:A:98:ASN:H	15	0.06
(1,270)	1:A:26:LEU:HD21	1:A:121:GLN:H	6	0.06
(1,270)	1:A:26:LEU:HD22	1:A:121:GLN:H	6	0.06
(1,270)	1:A:26:LEU:HD23	1:A:121:GLN:H	6	0.06
(1,265)	1:A:70:ILE:H	1:A:72:LEU:HD11	1	0.06
(1,265)	1:A:70:ILE:H	1:A:72:LEU:HD12	1	0.06
(1,265)	1:A:70:ILE:H	1:A:72:LEU:HD13	1	0.06
(1,265)	1:A:70:ILE:H	1:A:72:LEU:HD11	12	0.06
(1,265)	1:A:70:ILE:H	1:A:72:LEU:HD12	12	0.06
(1,265)	1:A:70:ILE:H	1:A:72:LEU:HD13	12	0.06
(1,252)	1:A:68:ILE:H	1:A:72:LEU:HD21	2	0.06
(1,252)	1:A:68:ILE:H	1:A:72:LEU:HD22	2	0.06
(1,252)	1:A:68:ILE:H	1:A:72:LEU:HD23	2	0.06
(1,243)	1:A:66:ARG:H	1:A:72:LEU:HD21	13	0.06
(1,243)	1:A:66:ARG:H	1:A:72:LEU:HD22	13	0.06
(1,243)	1:A:66:ARG:H	1:A:72:LEU:HD23	13	0.06
(1,241)	1:A:37:ARG:H	1:A:66:ARG:H	5	0.06
(1,225)	1:A:95:PHE:HD1	1:A:99:VAL:H	18	0.06
(1,225)	1:A:95:PHE:HD2	1:A:99:VAL:H	18	0.06
(1,224)	1:A:6:ASP:H	1:A:13:LEU:HD21	9	0.06



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,224)	1:A:6:ASP:H	1:A:13:LEU:HD22	9	0.06
(1,224)	1:A:6:ASP:H	1:A:13:LEU:HD23	9	0.06
(1,191)	1:A:64:VAL:HG11	1:A:65:GLU:H	5	0.06
(1,191)	1:A:64:VAL:HG12	1:A:65:GLU:H	5	0.06
(1,191)	1:A:64:VAL:HG13	1:A:65:GLU:H	5	0.06
(1,191)	1:A:64:VAL:HG11	1:A:65:GLU:H	11	0.06
(1,191)	1:A:64:VAL:HG12	1:A:65:GLU:H	11	0.06
(1,191)	1:A:64:VAL:HG13	1:A:65:GLU:H	11	0.06
(1,183)	1:A:171:LEU:HD21	1:A:172:VAL:H	20	0.06
(1,183)	1:A:171:LEU:HD22	1:A:172:VAL:H	20	0.06
(1,183)	1:A:171:LEU:HD23	1:A:172:VAL:H	20	0.06
(1,160)	1:A:44:LEU:H	1:A:44:LEU:HD11	15	0.06
(1,160)	1:A:44:LEU:H	1:A:44:LEU:HD12	15	0.06
(1,160)	1:A:44:LEU:H	1:A:44:LEU:HD13	15	0.06
(1,159)	1:A:2:LEU:HD11	1:A:179:GLU:H	1	0.06
(1,159)	1:A:2:LEU:HD12	1:A:179:GLU:H	1	0.06
(1,159)	1:A:2:LEU:HD13	1:A:179:GLU:H	1	0.06
(1,148)	1:A:71:VAL:HG11	1:A:78:GLU:H	19	0.06
(1,148)	1:A:71:VAL:HG12	1:A:78:GLU:H	19	0.06
(1,148)	1:A:71:VAL:HG13	1:A:78:GLU:H	19	0.06
(1,146)	1:A:78:GLU:H	1:A:139:PHE:HZ	2	0.06
(1,146)	1:A:78:GLU:H	1:A:139:PHE:HZ	8	0.06
(1,135)	1:A:23:VAL:H	1:A:26:LEU:H	8	0.06
(1,122)	1:A:17:SER:H	1:A:18:PHE:H	9	0.06
(1,1136)	1:A:23:VAL:O	1:A:27:VAL:N	8	0.06
(1,1113)	1:A:114:ASP:O	1:A:118:LYS:H	9	0.06
(1,1105)	1:A:99:VAL:O	1:A:103:MET:H	13	0.06
(1,1093)	1:A:93:LYS:O	1:A:97:LYS:H	10	0.06
(1,1093)	1:A:93:LYS:O	1:A:97:LYS:H	17	0.06
(1,1093)	1:A:93:LYS:O	1:A:97:LYS:H	18	0.06
(1,1088)	1:A:90:ALA:O	1:A:94:LYS:N	4	0.06
(1,1087)	1:A:90:ALA:O	1:A:94:LYS:H	9	0.06
(1,1077)	1:A:85:ALA:O	1:A:89:LYS:H	7	0.06
(1,1075)	1:A:37:ARG:H	1:A:65:GLU:O	2	0.06
(1,1075)	1:A:37:ARG:H	1:A:65:GLU:O	11	0.06
(1,1059)	1:A:28:TYR:O	1:A:171:LEU:H	1	0.06
(1,105)	1:A:127:LEU:HD21	1:A:128:LEU:H	18	0.06
(1,105)	1:A:127:LEU:HD22	1:A:128:LEU:H	18	0.06
(1,105)	1:A:127:LEU:HD23	1:A:128:LEU:H	18	0.06
(1,105)	1:A:127:LEU:HD21	1:A:128:LEU:H	19	0.06
(1,105)	1:A:127:LEU:HD22	1:A:128:LEU:H	19	0.06
(1,105)	1:A:127:LEU:HD23	1:A:128:LEU:H	19	0.06



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1027)	1:A:77:VAL:O	1:A:140:ILE:H	11	0.06
(1,1027)	1:A:77:VAL:O	1:A:140:ILE:H	12	0.06
(1,1015)	1:A:4:TYR:O	1:A:14:SER:H	18	0.06
(1,1013)	1:A:2:LEU:H	1:A:16:ASP:O	10	0.06
(1,1)	1:A:3:ILE:H	1:A:179:GLU:H	10	0.06
(1,1)	1:A:3:ILE:H	1:A:179:GLU:H	13	0.06
(1,985)	1:A:99:VAL:HG11	1:A:172:VAL:HG11	5	0.05
(1,985)	1:A:99:VAL:HG11	1:A:172:VAL:HG12	5	0.05
(1,985)	1:A:99:VAL:HG11	1:A:172:VAL:HG13	5	0.05
(1,985)	1:A:99:VAL:HG12	1:A:172:VAL:HG11	5	0.05
(1,985)	1:A:99:VAL:HG12	1:A:172:VAL:HG12	5	0.05
(1,985)	1:A:99:VAL:HG12	1:A:172:VAL:HG13	5	0.05
(1,985)	1:A:99:VAL:HG13	1:A:172:VAL:HG11	5	0.05
(1,985)	1:A:99:VAL:HG13	1:A:172:VAL:HG12	5	0.05
(1,985)	1:A:99:VAL:HG13	1:A:172:VAL:HG13	5	0.05
(1,983)	1:A:100:ILE:HD11	1:A:113:VAL:HG11	15	0.05
(1,983)	1:A:100:ILE:HD11	1:A:113:VAL:HG12	15	0.05
(1,983)	1:A:100:ILE:HD11	1:A:113:VAL:HG13	15	0.05
(1,983)	1:A:100:ILE:HD12	1:A:113:VAL:HG11	15	0.05
(1,983)	1:A:100:ILE:HD12	1:A:113:VAL:HG12	15	0.05
(1,983)	1:A:100:ILE:HD12	1:A:113:VAL:HG13	15	0.05
(1,983)	1:A:100:ILE:HD13	1:A:113:VAL:HG11	15	0.05
(1,983)	1:A:100:ILE:HD13	1:A:113:VAL:HG12	15	0.05
(1,983)	1:A:100:ILE:HD13	1:A:113:VAL:HG13	15	0.05
(1,977)	1:A:113:VAL:HG11	1:A:100:ILE:HD11	15	0.05
(1,977)	1:A:113:VAL:HG11	1:A:100:ILE:HD12	15	0.05
(1,977)	1:A:113:VAL:HG11	1:A:100:ILE:HD13	15	0.05
(1,977)	1:A:113:VAL:HG12	1:A:100:ILE:HD11	15	0.05
(1,977)	1:A:113:VAL:HG12	1:A:100:ILE:HD12	15	0.05
(1,977)	1:A:113:VAL:HG12	1:A:100:ILE:HD13	15	0.05
(1,977)	1:A:113:VAL:HG13	1:A:100:ILE:HD11	15	0.05
(1,977)	1:A:113:VAL:HG13	1:A:100:ILE:HD12	15	0.05
(1,977)	1:A:113:VAL:HG13	1:A:100:ILE:HD13	15	0.05
(1,948)	1:A:158:TYR:H	1:A:158:TYR:HB2	16	0.05
(1,93)	1:A:39:GLU:H	1:A:40:GLY:H	1	0.05
(1,923)	1:A:30:PHE:HB2	1:A:169:LEU:H	5	0.05
(1,92)	1:A:161:VAL:HG11	1:A:163:GLY:H	10	0.05
(1,92)	1:A:161:VAL:HG12	1:A:163:GLY:H	10	0.05
(1,92)	1:A:161:VAL:HG13	1:A:163:GLY:H	10	0.05
(1,917)	1:A:13:LEU:HD11	1:A:177:ILE:H	20	0.05
(1,917)	1:A:13:LEU:HD12	1:A:177:ILE:H	20	0.05
(1,917)	1:A:13:LEU:HD13	1:A:177:ILE:H	20	0.05



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,912)	1:A:13:LEU:H	1:A:13:LEU:HD11	6	0.05
(1,912)	1:A:13:LEU:H	1:A:13:LEU:HD12	6	0.05
(1,912)	1:A:13:LEU:H	1:A:13:LEU:HD13	6	0.05
(1,901)	1:A:156:ILE:H	1:A:169:LEU:HD11	14	0.05
(1,901)	1:A:156:ILE:H	1:A:169:LEU:HD12	14	0.05
(1,901)	1:A:156:ILE:H	1:A:169:LEU:HD13	14	0.05
(1,897)	1:A:36:VAL:HG21	1:A:44:LEU:H	20	0.05
(1,897)	1:A:36:VAL:HG22	1:A:44:LEU:H	20	0.05
(1,897)	1:A:36:VAL:HG23	1:A:44:LEU:H	20	0.05
(1,896)	1:A:2:LEU:HD11	1:A:180:LYS:H	9	0.05
(1,896)	1:A:2:LEU:HD12	1:A:180:LYS:H	9	0.05
(1,896)	1:A:2:LEU:HD13	1:A:180:LYS:H	9	0.05
(1,891)	1:A:36:VAL:HG11	1:A:45:ALA:H	4	0.05
(1,891)	1:A:36:VAL:HG12	1:A:45:ALA:H	4	0.05
(1,891)	1:A:36:VAL:HG13	1:A:45:ALA:H	4	0.05
(1,872)	1:A:66:ARG:H	1:A:72:LEU:HD11	2	0.05
(1,872)	1:A:66:ARG:H	1:A:72:LEU:HD12	2	0.05
(1,872)	1:A:66:ARG:H	1:A:72:LEU:HD13	2	0.05
(1,862)	1:A:62:GLU:H	1:A:64:VAL:HG21	9	0.05
(1,862)	1:A:62:GLU:H	1:A:64:VAL:HG22	9	0.05
(1,862)	1:A:62:GLU:H	1:A:64:VAL:HG23	9	0.05
(1,862)	1:A:62:GLU:H	1:A:64:VAL:HG21	17	0.05
(1,862)	1:A:62:GLU:H	1:A:64:VAL:HG22	17	0.05
(1,862)	1:A:62:GLU:H	1:A:64:VAL:HG23	17	0.05
(1,861)	1:A:139:PHE:H	1:A:156:ILE:HD11	11	0.05
(1,861)	1:A:139:PHE:H	1:A:156:ILE:HD12	11	0.05
(1,861)	1:A:139:PHE:H	1:A:156:ILE:HD13	11	0.05
(1,860)	1:A:139:PHE:H	1:A:153:VAL:HG21	5	0.05
(1,860)	1:A:139:PHE:H	1:A:153:VAL:HG22	5	0.05
(1,860)	1:A:139:PHE:H	1:A:153:VAL:HG23	5	0.05
(1,850)	1:A:112:ASP:H	1:A:113:VAL:HG21	2	0.05
(1,850)	1:A:112:ASP:H	1:A:113:VAL:HG22	2	0.05
(1,850)	1:A:112:ASP:H	1:A:113:VAL:HG23	2	0.05
(1,850)	1:A:112:ASP:H	1:A:113:VAL:HG21	3	0.05
(1,850)	1:A:112:ASP:H	1:A:113:VAL:HG22	3	0.05
(1,850)	1:A:112:ASP:H	1:A:113:VAL:HG23	3	0.05
(1,850)	1:A:112:ASP:H	1:A:113:VAL:HG21	4	0.05
(1,850)	1:A:112:ASP:H	1:A:113:VAL:HG22	4	0.05
(1,850)	1:A:112:ASP:H	1:A:113:VAL:HG23	4	0.05
(1,850)	1:A:112:ASP:H	1:A:113:VAL:HG21	6	0.05
(1,850)	1:A:112:ASP:H	1:A:113:VAL:HG22	6	0.05
(1,850)	1:A:112:ASP:H	1:A:113:VAL:HG23	6	0.05



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,850)	1:A:112:ASP:H	1:A:113:VAL:HG21	7	0.05
(1,850)	1:A:112:ASP:H	1:A:113:VAL:HG22	7	0.05
(1,850)	1:A:112:ASP:H	1:A:113:VAL:HG23	7	0.05
(1,850)	1:A:112:ASP:H	1:A:113:VAL:HG21	8	0.05
(1,850)	1:A:112:ASP:H	1:A:113:VAL:HG22	8	0.05
(1,850)	1:A:112:ASP:H	1:A:113:VAL:HG23	8	0.05
(1,850)	1:A:112:ASP:H	1:A:113:VAL:HG21	9	0.05
(1,850)	1:A:112:ASP:H	1:A:113:VAL:HG22	9	0.05
(1,850)	1:A:112:ASP:H	1:A:113:VAL:HG23	9	0.05
(1,850)	1:A:112:ASP:H	1:A:113:VAL:HG21	11	0.05
(1,850)	1:A:112:ASP:H	1:A:113:VAL:HG22	11	0.05
(1,850)	1:A:112:ASP:H	1:A:113:VAL:HG23	11	0.05
(1,842)	1:A:113:VAL:HG11	1:A:117:LYS:H	7	0.05
(1,842)	1:A:113:VAL:HG12	1:A:117:LYS:H	7	0.05
(1,842)	1:A:113:VAL:HG13	1:A:117:LYS:H	7	0.05
(1,833)	1:A:75:LYS:H	1:A:76:LEU:HD11	10	0.05
(1,833)	1:A:75:LYS:H	1:A:76:LEU:HD12	10	0.05
(1,833)	1:A:75:LYS:H	1:A:76:LEU:HD13	10	0.05
(1,833)	1:A:75:LYS:H	1:A:76:LEU:HD11	20	0.05
(1,833)	1:A:75:LYS:H	1:A:76:LEU:HD12	20	0.05
(1,833)	1:A:75:LYS:H	1:A:76:LEU:HD13	20	0.05
(1,829)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:128:LEU:H	4	0.05
(1,829)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:128:LEU:H	4	0.05
(1,829)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:128:LEU:H	4	0.05
(1,829)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:128:LEU:H	14	0.05
(1,829)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:128:LEU:H	14	0.05
(1,829)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:128:LEU:H	14	0.05
(1,829)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:128:LEU:H	20	0.05
(1,829)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:128:LEU:H	20	0.05
(1,829)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:128:LEU:H	20	0.05
(1,820)	1:A:76:LEU:HD21	1:A:140:ILE:H	10	0.05
(1,820)	1:A:76:LEU:HD22	1:A:140:ILE:H	10	0.05
(1,820)	1:A:76:LEU:HD23	1:A:140:ILE:H	10	0.05
(1,816)	1:A:67:GLY:H	1:A:72:LEU:HD21	14	0.05
(1,816)	1:A:67:GLY:H	1:A:72:LEU:HD22	14	0.05
(1,816)	1:A:67:GLY:H	1:A:72:LEU:HD23	14	0.05
(1,797)	1:A:92:ILE:HD11	1:A:96:MET:H	19	0.05
(1,797)	1:A:92:ILE:HD12	1:A:96:MET:H	19	0.05
(1,797)	1:A:92:ILE:HD13	1:A:96:MET:H	19	0.05
(1,76)	1:A:4:TYR:HD1	1:A:14:SER:H	1	0.05
(1,732)	1:A:42:ILE:HD11	1:A:44:LEU:HD21	7	0.05
(1,732)	1:A:42:ILE:HD11	1:A:44:LEU:HD22	7	0.05



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,732)	1:A:42:ILE:HD11	1:A:44:LEU:HD23	7	0.05
(1,732)	1:A:42:ILE:HD12	1:A:44:LEU:HD21	7	0.05
(1,732)	1:A:42:ILE:HD12	1:A:44:LEU:HD22	7	0.05
(1,732)	1:A:42:ILE:HD12	1:A:44:LEU:HD23	7	0.05
(1,732)	1:A:42:ILE:HD13	1:A:44:LEU:HD21	7	0.05
(1,732)	1:A:42:ILE:HD13	1:A:44:LEU:HD22	7	0.05
(1,732)	1:A:42:ILE:HD13	1:A:44:LEU:HD23	7	0.05
(1,725)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:172:VAL:HG11	13	0.05
(1,725)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:172:VAL:HG12	13	0.05
(1,725)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:172:VAL:HG13	13	0.05
(1,725)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:172:VAL:HG11	13	0.05
(1,725)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:172:VAL:HG12	13	0.05
(1,725)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:172:VAL:HG13	13	0.05
(1,725)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:172:VAL:HG11	13	0.05
(1,725)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:172:VAL:HG12	13	0.05
(1,725)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:172:VAL:HG13	13	0.05
(1,684)	1:A:132:ARG:H	1:A:135:ASN:H	14	0.05
(1,668)	1:A:55:ALA:H	1:A:56:GLU:H	19	0.05
(1,665)	1:A:108:ARG:H	1:A:109:ASP:H	13	0.05
(1,66)	1:A:137:ALA:H	1:A:156:ILE:H	8	0.05
(1,62)	1:A:27:VAL:HG11	1:A:123:TRP:HE1	5	0.05
(1,62)	1:A:27:VAL:HG12	1:A:123:TRP:HE1	5	0.05
(1,62)	1:A:27:VAL:HG13	1:A:123:TRP:HE1	5	0.05
(1,62)	1:A:27:VAL:HG11	1:A:123:TRP:HE1	13	0.05
(1,62)	1:A:27:VAL:HG12	1:A:123:TRP:HE1	13	0.05
(1,62)	1:A:27:VAL:HG13	1:A:123:TRP:HE1	13	0.05
(1,62)	1:A:27:VAL:HG11	1:A:123:TRP:HE1	20	0.05
(1,62)	1:A:27:VAL:HG12	1:A:123:TRP:HE1	20	0.05
(1,62)	1:A:27:VAL:HG13	1:A:123:TRP:HE1	20	0.05
(1,611)	1:A:126:SER:H	1:A:129:ALA:H	7	0.05
(1,592)	1:A:128:LEU:HD21	1:A:136:LEU:HD21	4	0.05
(1,592)	1:A:128:LEU:HD21	1:A:136:LEU:HD22	4	0.05
(1,592)	1:A:128:LEU:HD21	1:A:136:LEU:HD23	4	0.05
(1,592)	1:A:128:LEU:HD22	1:A:136:LEU:HD21	4	0.05
(1,592)	1:A:128:LEU:HD22	1:A:136:LEU:HD22	4	0.05
(1,592)	1:A:128:LEU:HD22	1:A:136:LEU:HD23	4	0.05
(1,592)	1:A:128:LEU:HD23	1:A:136:LEU:HD21	4	0.05
(1,592)	1:A:128:LEU:HD23	1:A:136:LEU:HD22	4	0.05
(1,592)	1:A:128:LEU:HD23	1:A:136:LEU:HD23	4	0.05
(1,592)	1:A:128:LEU:HD21	1:A:136:LEU:HD21	20	0.05
(1,592)	1:A:128:LEU:HD21	1:A:136:LEU:HD22	20	0.05
(1,592)	1:A:128:LEU:HD21	1:A:136:LEU:HD23	20	0.05



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,592)	1:A:128:LEU:HD22	1:A:136:LEU:HD21	20	0.05
(1,592)	1:A:128:LEU:HD22	1:A:136:LEU:HD22	20	0.05
(1,592)	1:A:128:LEU:HD22	1:A:136:LEU:HD23	20	0.05
(1,592)	1:A:128:LEU:HD23	1:A:136:LEU:HD21	20	0.05
(1,592)	1:A:128:LEU:HD23	1:A:136:LEU:HD22	20	0.05
(1,592)	1:A:128:LEU:HD23	1:A:136:LEU:HD23	20	0.05
(1,574)	1:A:30:PHE:HD1	1:A:70:ILE:HD11	2	0.05
(1,574)	1:A:30:PHE:HD1	1:A:70:ILE:HD12	2	0.05
(1,574)	1:A:30:PHE:HD1	1:A:70:ILE:HD13	2	0.05
(1,574)	1:A:30:PHE:HD2	1:A:70:ILE:HD11	2	0.05
(1,574)	1:A:30:PHE:HD2	1:A:70:ILE:HD12	2	0.05
(1,574)	1:A:30:PHE:HD2	1:A:70:ILE:HD13	2	0.05
(1,570)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:120:ILE:HD11	13	0.05
(1,570)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:120:ILE:HD12	13	0.05
(1,570)	1:A:95:PHE:HE1	1:A:120:ILE:HD13	13	0.05
(1,569)	1:A:116:PHE:HE1	1:A:120:ILE:HD11	1	0.05
(1,569)	1:A:116:PHE:HE1	1:A:120:ILE:HD12	1	0.05
(1,569)	1:A:116:PHE:HE1	1:A:120:ILE:HD13	1	0.05
(1,554)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:128:LEU:HD11	10	0.05
(1,554)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:128:LEU:HD12	10	0.05
(1,554)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:128:LEU:HD13	10	0.05
(1,554)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:128:LEU:HD11	10	0.05
(1,554)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:128:LEU:HD12	10	0.05
(1,554)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:128:LEU:HD13	10	0.05
(1,554)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:128:LEU:HD11	10	0.05
(1,554)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:128:LEU:HD12	10	0.05
(1,554)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:128:LEU:HD13	10	0.05
(1,532)	1:A:99:VAL:HG11	1:A:172:VAL:HG11	5	0.05
(1,532)	1:A:99:VAL:HG11	1:A:172:VAL:HG12	5	0.05
(1,532)	1:A:99:VAL:HG11	1:A:172:VAL:HG13	5	0.05
(1,532)	1:A:99:VAL:HG12	1:A:172:VAL:HG11	5	0.05
(1,532)	1:A:99:VAL:HG12	1:A:172:VAL:HG12	5	0.05
(1,532)	1:A:99:VAL:HG12	1:A:172:VAL:HG13	5	0.05
(1,532)	1:A:99:VAL:HG13	1:A:172:VAL:HG11	5	0.05
(1,532)	1:A:99:VAL:HG13	1:A:172:VAL:HG12	5	0.05
(1,532)	1:A:99:VAL:HG13	1:A:172:VAL:HG13	5	0.05
(1,520)	1:A:22:LEU:HD21	1:A:28:TYR:HD1	14	0.05
(1,520)	1:A:22:LEU:HD22	1:A:28:TYR:HD1	14	0.05
(1,520)	1:A:22:LEU:HD23	1:A:28:TYR:HD1	14	0.05
(1,480)	1:A:152:GLN:HE22	1:A:171:LEU:HD21	14	0.05
(1,480)	1:A:152:GLN:HE22	1:A:171:LEU:HD22	14	0.05
(1,480)	1:A:152:GLN:HE22	1:A:171:LEU:HD23	14	0.05



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,472)	1:A:7:ILE:HD11	1:A:176:ILE:H	2	0.05
(1,472)	1:A:7:ILE:HD12	1:A:176:ILE:H	2	0.05
(1,472)	1:A:7:ILE:HD13	1:A:176:ILE:H	2	0.05
(1,461)	1:A:22:LEU:HD11	1:A:171:LEU:H	16	0.05
(1,461)	1:A:22:LEU:HD12	1:A:171:LEU:H	16	0.05
(1,461)	1:A:22:LEU:HD13	1:A:171:LEU:H	16	0.05
(1,458)	1:A:164:THR:H	1:A:166:VAL:H	10	0.05
(1,43)	1:A:82:TYR:H	1:A:82:TYR:HD1	6	0.05
(1,409)	1:A:22:LEU:HD21	1:A:25:ASP:H	10	0.05
(1,409)	1:A:22:LEU:HD22	1:A:25:ASP:H	10	0.05
(1,409)	1:A:22:LEU:HD23	1:A:25:ASP:H	10	0.05
(1,391)	1:A:23:VAL:HG11	1:A:26:LEU:H	13	0.05
(1,391)	1:A:23:VAL:HG12	1:A:26:LEU:H	13	0.05
(1,391)	1:A:23:VAL:HG13	1:A:26:LEU:H	13	0.05
(1,391)	1:A:23:VAL:HG11	1:A:26:LEU:H	16	0.05
(1,391)	1:A:23:VAL:HG12	1:A:26:LEU:H	16	0.05
(1,391)	1:A:23:VAL:HG13	1:A:26:LEU:H	16	0.05
(1,383)	1:A:106:ASN:H	1:A:108:ARG:H	1	0.05
(1,383)	1:A:106:ASN:H	1:A:108:ARG:H	2	0.05
(1,343)	1:A:98:ASN:H	1:A:100:ILE:HD11	9	0.05
(1,343)	1:A:98:ASN:H	1:A:100:ILE:HD12	9	0.05
(1,343)	1:A:98:ASN:H	1:A:100:ILE:HD13	9	0.05
(1,343)	1:A:98:ASN:H	1:A:100:ILE:HD11	17	0.05
(1,343)	1:A:98:ASN:H	1:A:100:ILE:HD12	17	0.05
(1,343)	1:A:98:ASN:H	1:A:100:ILE:HD13	17	0.05
(1,341)	1:A:95:PHE:HD1	1:A:98:ASN:H	5	0.05
(1,341)	1:A:95:PHE:HD2	1:A:98:ASN:H	5	0.05
(1,288)	1:A:2:LEU:HD11	1:A:3:ILE:H	1	0.05
(1,288)	1:A:2:LEU:HD12	1:A:3:ILE:H	1	0.05
(1,288)	1:A:2:LEU:HD13	1:A:3:ILE:H	1	0.05
(1,288)	1:A:2:LEU:HD11	1:A:3:ILE:H	15	0.05
(1,288)	1:A:2:LEU:HD12	1:A:3:ILE:H	15	0.05
(1,288)	1:A:2:LEU:HD13	1:A:3:ILE:H	15	0.05
(1,253)	1:A:68:ILE:H	1:A:72:LEU:HD11	4	0.05
(1,253)	1:A:68:ILE:H	1:A:72:LEU:HD12	4	0.05
(1,253)	1:A:68:ILE:H	1:A:72:LEU:HD13	4	0.05
(1,253)	1:A:68:ILE:H	1:A:72:LEU:HD11	12	0.05
(1,253)	1:A:68:ILE:H	1:A:72:LEU:HD12	12	0.05
(1,253)	1:A:68:ILE:H	1:A:72:LEU:HD13	12	0.05
(1,224)	1:A:6:ASP:H	1:A:13:LEU:HD21	7	0.05
(1,224)	1:A:6:ASP:H	1:A:13:LEU:HD22	7	0.05
(1,224)	1:A:6:ASP:H	1:A:13:LEU:HD23	7	0.05



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,222)	1:A:109:ASP:H	1:A:113:VAL:HG21	9	0.05
(1,222)	1:A:109:ASP:H	1:A:113:VAL:HG22	9	0.05
(1,222)	1:A:109:ASP:H	1:A:113:VAL:HG23	9	0.05
(1,222)	1:A:109:ASP:H	1:A:113:VAL:HG21	17	0.05
(1,222)	1:A:109:ASP:H	1:A:113:VAL:HG22	17	0.05
(1,222)	1:A:109:ASP:H	1:A:113:VAL:HG23	17	0.05
(1,220)	1:A:109:ASP:H	1:A:113:VAL:H	20	0.05
(1,206)	1:A:159:ARG:H	1:A:168:THR:H	16	0.05
(1,191)	1:A:64:VAL:HG11	1:A:65:GLU:H	6	0.05
(1,191)	1:A:64:VAL:HG12	1:A:65:GLU:H	6	0.05
(1,191)	1:A:64:VAL:HG13	1:A:65:GLU:H	6	0.05
(1,191)	1:A:64:VAL:HG11	1:A:65:GLU:H	10	0.05
(1,191)	1:A:64:VAL:HG12	1:A:65:GLU:H	10	0.05
(1,191)	1:A:64:VAL:HG13	1:A:65:GLU:H	10	0.05
(1,179)	1:A:92:ILE:HD11	1:A:153:VAL:H	3	0.05
(1,179)	1:A:92:ILE:HD12	1:A:153:VAL:H	3	0.05
(1,179)	1:A:92:ILE:HD13	1:A:153:VAL:H	3	0.05
(1,174)	1:A:22:LEU:H	1:A:28:TYR:HD1	4	0.05
(1,168)	1:A:110:LYS:H	1:A:113:VAL:HG21	8	0.05
(1,168)	1:A:110:LYS:H	1:A:113:VAL:HG22	8	0.05
(1,168)	1:A:110:LYS:H	1:A:113:VAL:HG23	8	0.05
(1,148)	1:A:71:VAL:HG11	1:A:78:GLU:H	18	0.05
(1,148)	1:A:71:VAL:HG12	1:A:78:GLU:H	18	0.05
(1,148)	1:A:71:VAL:HG13	1:A:78:GLU:H	18	0.05
(1,118)	1:A:71:VAL:HG11	1:A:74:HIS:H	6	0.05
(1,118)	1:A:71:VAL:HG12	1:A:74:HIS:H	6	0.05
(1,118)	1:A:71:VAL:HG13	1:A:74:HIS:H	6	0.05
(1,1129)	1:A:122:GLY:O	1:A:126:SER:H	2	0.05
(1,1129)	1:A:122:GLY:O	1:A:126:SER:H	3	0.05
(1,1129)	1:A:122:GLY:O	1:A:126:SER:H	4	0.05
(1,1129)	1:A:122:GLY:O	1:A:126:SER:H	6	0.05
(1,1129)	1:A:122:GLY:O	1:A:126:SER:H	7	0.05
(1,1129)	1:A:122:GLY:O	1:A:126:SER:H	9	0.05
(1,1129)	1:A:122:GLY:O	1:A:126:SER:H	13	0.05
(1,1105)	1:A:99:VAL:O	1:A:103:MET:H	18	0.05
(1,1099)	1:A:96:MET:O	1:A:100:ILE:H	5	0.05
(1,1099)	1:A:96:MET:O	1:A:100:ILE:H	8	0.05
(1,1099)	1:A:96:MET:O	1:A:100:ILE:H	9	0.05
(1,1099)	1:A:96:MET:O	1:A:100:ILE:H	18	0.05
(1,108)	1:A:15:SER:H	1:A:18:PHE:HD1	3	0.05
(1,108)	1:A:15:SER:H	1:A:18:PHE:HD2	3	0.05
(1,1079)	1:A:86:SER:O	1:A:90:ALA:H	2	0.05



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1069)	1:A:35:VAL:O	1:A:67:GLY:H	11	0.05
(1,1069)	1:A:35:VAL:O	1:A:67:GLY:H	12	0.05
(1,1059)	1:A:28:TYR:O	1:A:171:LEU:H	9	0.05
(1,1046)	1:A:155:ILE:N	1:A:170:MET:O	16	0.05
(1,1045)	1:A:155:ILE:H	1:A:170:MET:O	2	0.05
(1,1035)	1:A:137:ALA:O	1:A:156:ILE:H	3	0.05
(1,1031)	1:A:79:MET:O	1:A:138:PHE:H	1	0.05
(1,1031)	1:A:79:MET:O	1:A:138:PHE:H	19	0.05
(1,1031)	1:A:79:MET:O	1:A:138:PHE:H	20	0.05
(1,1029)	1:A:77:VAL:H	1:A:140:ILE:O	9	0.05
(1,1027)	1:A:77:VAL:O	1:A:140:ILE:H	15	0.05
(1,1025)	1:A:5:LYS:H	1:A:177:ILE:O	5	0.05
(1,1016)	1:A:4:TYR:O	1:A:14:SER:N	17	0.05
(1,1013)	1:A:2:LEU:H	1:A:16:ASP:O	7	0.05
(1,996)	1:A:35:VAL:HG21	1:A:72:LEU:HD11	17	0.04
(1,996)	1:A:35:VAL:HG21	1:A:72:LEU:HD12	17	0.04
(1,996)	1:A:35:VAL:HG21	1:A:72:LEU:HD13	17	0.04
(1,996)	1:A:35:VAL:HG22	1:A:72:LEU:HD11	17	0.04
(1,996)	1:A:35:VAL:HG22	1:A:72:LEU:HD12	17	0.04
(1,996)	1:A:35:VAL:HG22	1:A:72:LEU:HD13	17	0.04
(1,996)	1:A:35:VAL:HG23	1:A:72:LEU:HD11	17	0.04
(1,996)	1:A:35:VAL:HG23	1:A:72:LEU:HD12	17	0.04
(1,996)	1:A:35:VAL:HG23	1:A:72:LEU:HD13	17	0.04
(1,985)	1:A:99:VAL:HG11	1:A:172:VAL:HG11	1	0.04
(1,985)	1:A:99:VAL:HG11	1:A:172:VAL:HG12	1	0.04
(1,985)	1:A:99:VAL:HG11	1:A:172:VAL:HG13	1	0.04
(1,985)	1:A:99:VAL:HG12	1:A:172:VAL:HG11	1	0.04
(1,985)	1:A:99:VAL:HG12	1:A:172:VAL:HG12	1	0.04
(1,985)	1:A:99:VAL:HG12	1:A:172:VAL:HG13	1	0.04
(1,985)	1:A:99:VAL:HG13	1:A:172:VAL:HG11	1	0.04
(1,985)	1:A:99:VAL:HG13	1:A:172:VAL:HG12	1	0.04
(1,985)	1:A:99:VAL:HG13	1:A:172:VAL:HG13	1	0.04
(1,983)	1:A:100:ILE:HD11	1:A:113:VAL:HG11	3	0.04
(1,983)	1:A:100:ILE:HD11	1:A:113:VAL:HG12	3	0.04
(1,983)	1:A:100:ILE:HD11	1:A:113:VAL:HG13	3	0.04
(1,983)	1:A:100:ILE:HD12	1:A:113:VAL:HG11	3	0.04
(1,983)	1:A:100:ILE:HD12	1:A:113:VAL:HG12	3	0.04
(1,983)	1:A:100:ILE:HD12	1:A:113:VAL:HG13	3	0.04
(1,983)	1:A:100:ILE:HD13	1:A:113:VAL:HG11	3	0.04
(1,983)	1:A:100:ILE:HD13	1:A:113:VAL:HG12	3	0.04
(1,983)	1:A:100:ILE:HD13	1:A:113:VAL:HG13	3	0.04
(1,98)	1:A:36:VAL:HG11	1:A:67:GLY:H	11	0.04



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

(1,98) 1:A:36:VAL:HG13 1:A:67:GLY:H 11 0. (1,977) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD11 3 0. (1,977) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD12 3 0. (1,977) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD13 3 0. (1,977) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD11 3 0. (1,977) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD13 3 0. (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD11 3 0. (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD12 3 0. (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD21 5 0. (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD23 5 0. (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD21 5 0.	04 04 04 04 04 04 04 04 04 04
(1,977) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD11 3 0. (1,977) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD12 3 0. (1,977) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD13 3 0. (1,977) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD11 3 0. (1,977) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD12 3 0. (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 3 0. (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD12 3 0. (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 3 0. (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 3 0. (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 3 0. (1,974) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD21 5 0. (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD23 5 0. (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD21 5 0. (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD21 5 0.	04 04 04 04 04 04 04 04 04 04 04
(1,977) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD12 3 0. (1,977) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD13 3 0. (1,977) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD11 3 0. (1,977) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD12 3 0. (1,977) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD13 3 0. (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD11 3 0. (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD12 3 0. (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 3 0. (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 3 0. (1,974) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD21 5 0. (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD23 5 0. (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD21 5 0. (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD21 5 0.	04 04 04 04 04 04 04 04 04 04
(1,977) 1:A:113:VAL:HG11 1:A:100:ILE:HD13 3 0. (1,977) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD11 3 0. (1,977) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD12 3 0. (1,977) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD13 3 0. (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD11 3 0. (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD12 3 0. (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 3 0. (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 3 0. (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD21 5 0. (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD23 5 0. (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD21 5 0. (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD21 5 0.	04 04 04 04 04 04 04 04 04
(1,977) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD11 3 0. (1,977) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD12 3 0. (1,977) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD13 3 0. (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD11 3 0. (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD12 3 0. (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 3 0. (1,977) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD21 5 0. (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD22 5 0. (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD23 5 0. (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD21 5 0. (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD21 5 0.	04 04 04 04 04 04 04 04
(1,977) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD12 3 0. (1,977) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD13 3 0. (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD11 3 0. (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD12 3 0. (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 3 0. (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD21 5 0. (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD23 5 0. (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD23 5 0. (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD21 5 0.	04 04 04 04 04 04 04
(1,977) 1:A:113:VAL:HG12 1:A:100:ILE:HD13 3 0. (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD11 3 0. (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD12 3 0. (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 3 0. (1,977) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD21 5 0. (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD22 5 0. (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD23 5 0. (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD21 5 0.	04 04 04 04 04 04
(1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD11 3 0. (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD12 3 0. (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 3 0. (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD21 5 0. (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD22 5 0. (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD23 5 0. (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD21 5 0.	04 04 04 04 04
(1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD12 3 0. (1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 3 0. (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD21 5 0. (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD22 5 0. (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD23 5 0. (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD21 5 0.	04 04 04 04
(1,977) 1:A:113:VAL:HG13 1:A:100:ILE:HD13 3 0. (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD21 5 0. (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD22 5 0. (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD23 5 0. (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD21 5 0.	04 04 04
(1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD21 5 0. (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD22 5 0. (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD23 5 0. (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD21 5 0.	04 04
(1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD22 5 0. (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD23 5 0. (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD21 5 0.	04
(1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD23 5 0. (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD21 5 0.	
(1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD21 5 0.	04
(1.944) $1 \cdot A \cdot 152 \cdot GLN \cdot HE22$ $1 \cdot A \cdot 171 \cdot LEII \cdot HD22$ 5	04
(1,011) $(1.0.102.0DIV.11D22$ $(1.0.111.DE0.11D22$ $(0.0.11D22)$	04
(1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD23 5 0.	04
	04
(1,929) 1:A:106:ASN:HD21 1:A:107:ASN:H 5 0.	04
(1,921) 1:A:30:PHE:HB2 1:A:31:LYS:H 13 0.	04
(1,921) 1:A:30:PHE:HB2 1:A:31:LYS:H 14 0.	04
(1,897) 1:A:36:VAL:HG21 1:A:44:LEU:H 1 0.	04
(1,897) 1:A:36:VAL:HG22 1:A:44:LEU:H 1 0.	04
(1,897) 1:A:36:VAL:HG23 1:A:44:LEU:H 1 0.	04
(1,897) 1:A:36:VAL:HG21 1:A:44:LEU:H 5 0.	04
(1,897) 1:A:36:VAL:HG22 1:A:44:LEU:H 5 0.	04
(1,897) 1:A:36:VAL:HG23 1:A:44:LEU:H 5 0.	04
(1,897) 1:A:36:VAL:HG21 1:A:44:LEU:H 12 0.	04
(1,897) 1:A:36:VAL:HG22 1:A:44:LEU:H 12 0.	04
(1,897) 1:A:36:VAL:HG23 1:A:44:LEU:H 12 0.	04
(1,889) 1:A:44:LEU:HD11 1:A:45:ALA:H 1 0.	04
(1,889) 1:A:44:LEU:HD12 1:A:45:ALA:H 1 0.	04
(1,889) 1:A:44:LEU:HD13 1:A:45:ALA:H 1 0.	04
	04
	04
	04
	04
	04
	04
	04
	04
(1,885) 1:A:31:LYS:H 1:A:70:ILE:HD13 12 0.	04



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,881)	1:A:77:VAL:HG11	1:A:145:ALA:H	19	0.04
(1,881)	1:A:77:VAL:HG12	1:A:145:ALA:H	19	0.04
(1,881)	1:A:77:VAL:HG13	1:A:145:ALA:H	19	0.04
(1,862)	1:A:62:GLU:H	1:A:64:VAL:HG21	20	0.04
(1,862)	1:A:62:GLU:H	1:A:64:VAL:HG22	20	0.04
(1,862)	1:A:62:GLU:H	1:A:64:VAL:HG23	20	0.04
(1,860)	1:A:139:PHE:H	1:A:153:VAL:HG21	6	0.04
(1,860)	1:A:139:PHE:H	1:A:153:VAL:HG22	6	0.04
(1,860)	1:A:139:PHE:H	1:A:153:VAL:HG23	6	0.04
(1,850)	1:A:112:ASP:H	1:A:113:VAL:HG21	1	0.04
(1,850)	1:A:112:ASP:H	1:A:113:VAL:HG22	1	0.04
(1,850)	1:A:112:ASP:H	1:A:113:VAL:HG23	1	0.04
(1,841)	1:A:26:LEU:HD11	1:A:117:LYS:H	7	0.04
(1,841)	1:A:26:LEU:HD12	1:A:117:LYS:H	7	0.04
(1,841)	1:A:26:LEU:HD13	1:A:117:LYS:H	7	0.04
(1,837)	1:A:33:LYS:H	1:A:35:VAL:HG11	2	0.04
(1,837)	1:A:33:LYS:H	1:A:35:VAL:HG12	2	0.04
(1,837)	1:A:33:LYS:H	1:A:35:VAL:HG13	2	0.04
(1,835)	1:A:140:ILE:HD11	1:A:146:GLU:H	14	0.04
(1,835)	1:A:140:ILE:HD12	1:A:146:GLU:H	14	0.04
(1,835)	1:A:140:ILE:HD13	1:A:146:GLU:H	14	0.04
(1,834)	1:A:71:VAL:HG11	1:A:75:LYS:H	2	0.04
(1,834)	1:A:71:VAL:HG12	1:A:75:LYS:H	2	0.04
(1,834)	1:A:71:VAL:HG13	1:A:75:LYS:H	2	0.04
(1,833)	1:A:75:LYS:H	1:A:76:LEU:HD11	8	0.04
(1,833)	1:A:75:LYS:H	1:A:76:LEU:HD12	8	0.04
(1,833)	1:A:75:LYS:H	1:A:76:LEU:HD13	8	0.04
(1,832)	1:A:120:ILE:HD11	1:A:174:GLU:H	10	0.04
(1,832)	1:A:120:ILE:HD12	1:A:174:GLU:H	10	0.04
(1,832)	1:A:120:ILE:HD13	1:A:174:GLU:H	10	0.04
(1,829)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:128:LEU:H	2	0.04
(1,829)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:128:LEU:H	2	0.04
(1,829)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:128:LEU:H	2	0.04
(1,829)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:128:LEU:H	8	0.04
(1,829)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:128:LEU:H	8	0.04
(1,829)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:128:LEU:H	8	0.04
(1,829)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:128:LEU:H	18	0.04
(1,829)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:128:LEU:H	18	0.04
(1,829)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:128:LEU:H	18	0.04
(1,829)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:128:LEU:H	19	0.04
(1,829)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:128:LEU:H	19	0.04
(1,829)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:128:LEU:H	19	0.04



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,824)	1:A:42:ILE:HD11	1:A:43:VAL:H	16	0.04
(1,824)	1:A:42:ILE:HD12	1:A:43:VAL:H	16	0.04
(1,824)	1:A:42:ILE:HD13	1:A:43:VAL:H	16	0.04
(1,816)	1:A:67:GLY:H	1:A:72:LEU:HD21	12	0.04
(1,816)	1:A:67:GLY:H	1:A:72:LEU:HD22	12	0.04
(1,816)	1:A:67:GLY:H	1:A:72:LEU:HD23	12	0.04
(1,798)	1:A:169:LEU:HD21	1:A:170:MET:H	15	0.04
(1,798)	1:A:169:LEU:HD22	1:A:170:MET:H	15	0.04
(1,798)	1:A:169:LEU:HD23	1:A:170:MET:H	15	0.04
(1,797)	1:A:92:ILE:HD11	1:A:96:MET:H	6	0.04
(1,797)	1:A:92:ILE:HD12	1:A:96:MET:H	6	0.04
(1,797)	1:A:92:ILE:HD13	1:A:96:MET:H	6	0.04
(1,786)	1:A:121:GLN:HE21	1:A:125:VAL:HG21	9	0.04
(1,786)	1:A:121:GLN:HE21	1:A:125:VAL:HG22	9	0.04
(1,786)	1:A:121:GLN:HE21	1:A:125:VAL:HG23	9	0.04
(1,782)	1:A:22:LEU:HD21	1:A:26:LEU:H	7	0.04
(1,782)	1:A:22:LEU:HD22	1:A:26:LEU:H	7	0.04
(1,782)	1:A:22:LEU:HD23	1:A:26:LEU:H	7	0.04
(1,775)	1:A:71:VAL:HG11	1:A:77:VAL:H	15	0.04
(1,775)	1:A:71:VAL:HG12	1:A:77:VAL:H	15	0.04
(1,775)	1:A:71:VAL:HG13	1:A:77:VAL:H	15	0.04
(1,775)	1:A:71:VAL:HG11	1:A:77:VAL:H	20	0.04
(1,775)	1:A:71:VAL:HG12	1:A:77:VAL:H	20	0.04
(1,775)	1:A:71:VAL:HG13	1:A:77:VAL:H	20	0.04
(1,774)	1:A:23:VAL:HG11	1:A:28:TYR:H	11	0.04
(1,774)	1:A:23:VAL:HG12	1:A:28:TYR:H	11	0.04
(1,774)	1:A:23:VAL:HG13	1:A:28:TYR:H	11	0.04
(1,774)	1:A:23:VAL:HG11	1:A:28:TYR:H	13	0.04
(1,774)	1:A:23:VAL:HG12	1:A:28:TYR:H	13	0.04
(1,774)	1:A:23:VAL:HG13	1:A:28:TYR:H	13	0.04
(1,751)	1:A:36:VAL:HG11	1:A:44:LEU:HD21	17	0.04
(1,751)	1:A:36:VAL:HG11	1:A:44:LEU:HD22	17	0.04
(1,751)	1:A:36:VAL:HG11	1:A:44:LEU:HD23	17	0.04
(1,751)	1:A:36:VAL:HG12	1:A:44:LEU:HD21	17	0.04
(1,751)	1:A:36:VAL:HG12	1:A:44:LEU:HD22	17	0.04
(1,751)	1:A:36:VAL:HG12	1:A:44:LEU:HD23	17	0.04
(1,751)	1:A:36:VAL:HG13	1:A:44:LEU:HD21	17	0.04
(1,751)	1:A:36:VAL:HG13	1:A:44:LEU:HD22	17	0.04
(1,751)	1:A:36:VAL:HG13	1:A:44:LEU:HD23	17	0.04
(1,734)	1:A:36:VAL:HG11	1:A:42:ILE:HD11	16	0.04
(1,734)	1:A:36:VAL:HG11	1:A:42:ILE:HD12	16	0.04
(1,734)	1:A:36:VAL:HG11	1:A:42:ILE:HD13	16	0.04



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,734)	1:A:36:VAL:HG12	1:A:42:ILE:HD11	16	0.04
(1,734)	1:A:36:VAL:HG12	1:A:42:ILE:HD12	16	0.04
(1,734)	1:A:36:VAL:HG12	1:A:42:ILE:HD13	16	0.04
(1,734)	1:A:36:VAL:HG13	1:A:42:ILE:HD11	16	0.04
(1,734)	1:A:36:VAL:HG13	1:A:42:ILE:HD12	16	0.04
(1,734)	1:A:36:VAL:HG13	1:A:42:ILE:HD13	16	0.04
(1,730)	1:A:27:VAL:HG11	1:A:120:ILE:HD11	6	0.04
(1,730)	1:A:27:VAL:HG11	1:A:120:ILE:HD12	6	0.04
(1,730)	1:A:27:VAL:HG11	1:A:120:ILE:HD13	6	0.04
(1,730)	1:A:27:VAL:HG12	1:A:120:ILE:HD11	6	0.04
(1,730)	1:A:27:VAL:HG12	1:A:120:ILE:HD12	6	0.04
(1,730)	1:A:27:VAL:HG12	1:A:120:ILE:HD13	6	0.04
(1,730)	1:A:27:VAL:HG13	1:A:120:ILE:HD11	6	0.04
(1,730)	1:A:27:VAL:HG13	1:A:120:ILE:HD12	6	0.04
(1,730)	1:A:27:VAL:HG13	1:A:120:ILE:HD13	6	0.04
(1,709)	1:A:99:VAL:HG11	1:A:172:VAL:HG21	8	0.04
(1,709)	1:A:99:VAL:HG11	1:A:172:VAL:HG22	8	0.04
(1,709)	1:A:99:VAL:HG11	1:A:172:VAL:HG23	8	0.04
(1,709)	1:A:99:VAL:HG12	1:A:172:VAL:HG21	8	0.04
(1,709)	1:A:99:VAL:HG12	1:A:172:VAL:HG22	8	0.04
(1,709)	1:A:99:VAL:HG12	1:A:172:VAL:HG23	8	0.04
(1,709)	1:A:99:VAL:HG13	1:A:172:VAL:HG21	8	0.04
(1,709)	1:A:99:VAL:HG13	1:A:172:VAL:HG22	8	0.04
(1,709)	1:A:99:VAL:HG13	1:A:172:VAL:HG23	8	0.04
(1,668)	1:A:55:ALA:H	1:A:56:GLU:H	6	0.04
(1,663)	1:A:149:GLU:H	1:A:151:GLY:H	19	0.04
(1,655)	1:A:52:GLU:H	1:A:53:GLU:H	5	0.04
(1,59)	1:A:123:TRP:HE1	1:A:127:LEU:HD21	17	0.04
(1,59)	1:A:123:TRP:HE1	1:A:127:LEU:HD22	17	0.04
(1,59)	1:A:123:TRP:HE1	1:A:127:LEU:HD23	17	0.04
(1,582)	1:A:161:VAL:HG21	1:A:163:GLY:H	10	0.04
(1,582)	1:A:161:VAL:HG22	1:A:163:GLY:H	10	0.04
(1,582)	1:A:161:VAL:HG23	1:A:163:GLY:H	10	0.04
(1,58)	1:A:8:PHE:H	1:A:8:PHE:HE1	7	0.04
(1,577)	1:A:128:LEU:HD21	1:A:155:ILE:HD11	5	0.04
(1,577)	1:A:128:LEU:HD21	1:A:155:ILE:HD12	5	0.04
(1,577)	1:A:128:LEU:HD21	1:A:155:ILE:HD13	5	0.04
(1,577)	1:A:128:LEU:HD22	1:A:155:ILE:HD11	5	0.04
(1,577)	1:A:128:LEU:HD22	1:A:155:ILE:HD12	5	0.04
(1,577)	1:A:128:LEU:HD22	1:A:155:ILE:HD13	5	0.04
(1,577)	1:A:128:LEU:HD23	1:A:155:ILE:HD11	5	0.04
(1,577)	1:A:128:LEU:HD23	1:A:155:ILE:HD12	5	0.04



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

(1,577) 1:A:128:LEU:HD23 1:A:155:ILE:HD13 5 0.04 (1,566) 1:A:68:ILE:HD11 1:A:139:PHE:HE1 2 0.04 (1,566) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:139:PHE:HE1 2 0.04 (1,566) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:139:PHE:HE1 15 0.04 (1,566) 1:A:68:ILE:HD11 1:A:139:PHE:HE1 15 0.04 (1,566) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:139:PHE:HE1 15 0.04 (1,566) 1:A:68:ILE:HD11 1:A:139:PHE:HE1 17 0.04 (1,566) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:139:PHE:HZ 17 0.04 (1,565) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:139:PHE:HZ 17 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD11 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD13 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD11 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:176:ILE:HD12 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD13	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,566) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:139:PHE:HE1 2 0.04 (1,566) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:139:PHE:HE1 2 0.04 (1,566) 1:A:68:ILE:HD11 1:A:139:PHE:HE1 15 0.04 (1,566) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:139:PHE:HE1 15 0.04 (1,565) 1:A:68:ILE:HD11 1:A:139:PHE:HZ 17 0.04 (1,565) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:139:PHE:HZ 17 0.04 (1,565) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:139:PHE:HZ 17 0.04 (1,565) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:139:PHE:HZ 17 0.04 (1,566) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD12 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD13 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD11 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:176:ILE:HD13 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:176:ILE:HD13 9 0.04 (1,560) 1:A:124:VAL:HG11	(1,577)	1:A:128:LEU:HD23	1:A:155:ILE:HD13	5	0.04
(1,566) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:139:PHE:HE1 15 0.04 (1,566) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:139:PHE:HE1 15 0.04 (1,566) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:139:PHE:HE1 15 0.04 (1,566) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:139:PHE:HE1 15 0.04 (1,566) 1:A:68:ILE:HD11 1:A:139:PHE:HE1 15 0.04 (1,565) 1:A:68:ILE:HD11 1:A:139:PHE:HZ 17 0.04 (1,565) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:139:PHE:HZ 17 0.04 (1,565) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:139:PHE:HZ 17 0.04 (1,565) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:139:PHE:HZ 17 0.04 (1,566) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD11 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD11 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD13 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD13 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD13 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD13 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD13 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD13 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:176:ILE:HD13 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:176:ILE:HD13 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:176:ILE:HD13 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:176:ILE:HD13 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:176:ILE:HD13 9 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD12 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD13 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD13 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD13 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD13 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD13 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD13 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD13 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD13 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD13 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD13 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD13 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD13 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD13 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD13 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD13 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD13 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD13 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD13 6 0.04 (1,555) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD13 6 0.04 ((1,566)	1:A:68:ILE:HD11	1:A:139:PHE:HE1	2	0.04
(1,566) 1:A:68:ILE:HD11 1:A:139:PHE:HE1 15 0.04 (1,566) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:139:PHE:HE1 15 0.04 (1,566) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:139:PHE:HE1 15 0.04 (1,565) 1:A:68:ILE:HD11 1:A:139:PHE:HZ 17 0.04 (1,565) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:139:PHE:HZ 17 0.04 (1,565) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:139:PHE:HZ 17 0.04 (1,566) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:139:PHE:HZ 17 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD11 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD12 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD12 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD13 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD13 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD13 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD13 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:176:ILE:HD13 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:176:ILE:HD13 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:176:ILE:HD13 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:176:ILE:HD13 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:176:ILE:HD11 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:176:ILE:HD13 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:176:ILE:HD13 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:176:ILE:HD13 9 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD13 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD13 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD13 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD13 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD13 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD13 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD13 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD13 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD13 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD13 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD13 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD13 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD13 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD13 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD13 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD13 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD13 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD13 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD13 6 0.04 (1,555) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD13 6 0.04	(1,566)	1:A:68:ILE:HD12	1:A:139:PHE:HE1	2	0.04
(1,566) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:139:PHE:HE1 15 0.04 (1,566) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:139:PHE:HZ 17 0.04 (1,565) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:139:PHE:HZ 17 0.04 (1,565) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:139:PHE:HZ 17 0.04 (1,566) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:139:PHE:HZ 17 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD11 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD13 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD13 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD13 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:176:ILE:HD13 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:176:ILE:HD13 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:176:ILE:HD13 9 0.04 (1,560) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD13 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11<	(1,566)	1:A:68:ILE:HD13	1:A:139:PHE:HE1	2	0.04
(1,566) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:139:PHE:HE1 15 0.04 (1,565) 1:A:68:ILE:HD11 1:A:139:PHE:HZ 17 0.04 (1,565) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:139:PHE:HZ 17 0.04 (1,565) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:139:PHE:HZ 17 0.04 (1,566) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD11 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD11 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD12 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD13 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD13 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD13 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD12 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD13 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD12 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:176:ILE:HD13 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:176:ILE:HD11 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:176:ILE:HD11 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:176:ILE:HD12 9 0.04 (1,550) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:176:ILE:HD13 9 0.04 (1,550) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:176:ILE:HD13 9 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD13 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD11 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD12 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD13 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD11 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD11 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD11 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD11 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD11 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD11 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD11 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD11 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD11 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD11 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD12 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD11 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD12 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD11 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD12 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD12 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD12 6 0.04 (1,555) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD11 6 0.04 (1,555) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD12 6	(1,566)	1:A:68:ILE:HD11	1:A:139:PHE:HE1	15	0.04
(1,565) 1:A:68:ILE:HD11 1:A:139:PHE:HZ 17 0.04 (1,565) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:139:PHE:HZ 17 0.04 (1,566) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:139:PHE:HZ 17 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD11 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD12 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD13 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD13 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD13 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD13 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD12 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD13 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:176:ILE:HD13 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:176:ILE:HD13 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:176:ILE:HD13 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:176:ILE:HD13 9 0.04 (1,550) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:176:ILE:HD13 9 0.04 (1,550) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:176:ILE:HD13 9 0.04 (1,550) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:176:ILE:HD13 9 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD13 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD13 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD13 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD13 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD13 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD13 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD12 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD13 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD13 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD13 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD11 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD13 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD13 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD13 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD13 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD13 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD13 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD13 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD13 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD13 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD13 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD13 6 0.04 (1,5554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD13 6 0.04 (1,5554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD13	(1,566)	1:A:68:ILE:HD12	1:A:139:PHE:HE1	15	0.04
(1,565) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:139:PHE:HZ 17 0.04 (1,560) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:139:PHE:HZ 17 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD11 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD12 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD13 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD13 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD13 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD13 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD13 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:176:ILE:HD13 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:176:ILE:HD13 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:176:ILE:HD13 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:176:ILE:HD13 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:176:ILE:HD13 9 0.04 (1,550) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:176:ILE:HD13 9 0.04 (1,550) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:128:LEU:HD13 9 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD13 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD13 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD13 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD11 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD11 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD13 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD13 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD13 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD13 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD11 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD13 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD13 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD13 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD13 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD13 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD13 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD14 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD14 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD14 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD14 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD14 6 0.04 (1,555) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD14 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD14 6 0.04 (1,555) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD14 6 0.04 (1,555) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD14 6 0.04 (1,555) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD14	(1,566)	1:A:68:ILE:HD13	1:A:139:PHE:HE1	15	0.04
(1,565) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:139:PHE:HZ 17 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD11 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD12 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD13 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD11 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD13 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:176:ILE:HD13 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:176:ILE:HD11 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:176:ILE:HD12 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:176:ILE:HD13 9 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD13 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD13 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD13 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL	(1,565)	1:A:68:ILE:HD11	1:A:139:PHE:HZ	17	0.04
(1,560) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD11 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD12 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD13 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD11 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD13 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:176:ILE:HD13 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:176:ILE:HD11 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:176:ILE:HD13 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:176:ILE:HD13 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:176:ILE:HD13 9 0.04 (1,550) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:176:ILE:HD13 9 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD13 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD13 3 0.04 (1,554) 1:A:124:V	(1,565)	1:A:68:ILE:HD12	1:A:139:PHE:HZ	17	0.04
(1,560) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD12 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD13 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD11 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD13 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:176:ILE:HD13 9 0.04 (1,550) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:176:ILE:HD13 9 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD13 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD13 3 0.04 (1,554) 1:A:124:V	(1,565)	1:A:68:ILE:HD13	1:A:139:PHE:HZ	17	0.04
(1,560) 1:A:171:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD13 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD11 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD12 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:176:ILE:HD13 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:176:ILE:HD12 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:176:ILE:HD13 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:128:LEU:HD13 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD13 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD13 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD13 3 0.04 (1,554) 1:A:124:V	(1,560)	1:A:171:LEU:HD11	1:A:176:ILE:HD11	9	0.04
(1,560) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD11 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD12 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD13 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:176:ILE:HD11 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:176:ILE:HD12 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:176:ILE:HD13 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:176:ILE:HD13 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:128:LEU:HD13 9 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD12 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD13 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD13 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD13 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD13 3 0.04 (1,554) 1:A:124:V	(1,560)	1:A:171:LEU:HD11	1:A:176:ILE:HD12	9	0.04
(1,560) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD12 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD13 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:176:ILE:HD11 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:176:ILE:HD12 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:176:ILE:HD13 9 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD11 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD12 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD13 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD11 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD13 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD13 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD13 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD13 3 0.04 (1,554) 1:A:124:V	(1,560)	1:A:171:LEU:HD11	1:A:176:ILE:HD13	9	0.04
(1,560) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD13 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD13 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:176:ILE:HD11 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:176:ILE:HD12 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:176:ILE:HD13 9 0.04 (1,560) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD11 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD12 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD13 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD11 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD13 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD13 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD11 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD13 3 0.04 (1,554) 1:A:124:V	(1,560)	1:A:171:LEU:HD12	1:A:176:ILE:HD11	9	0.04
(1,560) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:176:ILE:HD11 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:176:ILE:HD12 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:176:ILE:HD13 9 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD11 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD12 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD13 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD11 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD12 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD13 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD11 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD13 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD13 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD11 6 0.04 (1,554) 1:A:124:V	· · /	1:A:171:LEU:HD12	1:A:176:ILE:HD12	9	0.04
(1,560) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:176:ILE:HD11 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:176:ILE:HD12 9 0.04 (1,560) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:176:ILE:HD13 9 0.04 (1,564) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD11 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD12 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD13 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD11 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD12 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD13 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD13 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD13 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD13 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD13 6 0.04 (1,554) 1:A:124:V		1:A:171:LEU:HD12	1:A:176:ILE:HD13	9	0.04
(1,560) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:176:ILE:HD13 9 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD11 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD12 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD13 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD12 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD12 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD13 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD13 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD12 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD13 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD11 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD12 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD13 6 0.04 (1,554) 1:A:124:V	(' /	1:A:171:LEU:HD13	1:A:176:ILE:HD11	9	0.04
(1,560) 1:A:171:LEU:HD13 1:A:176:ILE:HD13 9 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD11 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD12 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD13 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD12 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD13 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD13 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD12 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD13 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD11 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD12 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD13 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD13 6 0.04 (1,554) 1:A:124:V	(' /	1:A:171:LEU:HD13	1:A:176:ILE:HD12	9	
(1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD11 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD12 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD13 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD11 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD12 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD13 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD11 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD12 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD13 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD11 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD12 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD13 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD13 6 0.04 (1,554) 1:A:124:V	,	1:A:171:LEU:HD13	1:A:176:ILE:HD13	9	0.04
(1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD12 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD13 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD11 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD12 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD13 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD11 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD12 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD13 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD12 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD13 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD11 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD13 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD12 6 0.04 (1,554) 1:A:124:V	/	1:A:124:VAL:HG11	1:A:128:LEU:HD11	3	0.04
(1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD13 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD11 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD12 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD13 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD11 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD12 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD13 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD12 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD13 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD11 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD12 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD13 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD12 6 0.04 (1,554) 1:A:124:V	(1,554)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:128:LEU:HD12	3	0.04
(1,554) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD11 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD12 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD13 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD11 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD12 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD13 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD11 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD13 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD11 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD12 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD13 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD11 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD12 6 0.04 (1,553) 1:A:124:V	(1,554)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:128:LEU:HD13	3	0.04
(1,554) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD13 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD11 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD12 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD13 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD11 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD12 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD13 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD12 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD13 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD13 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD12 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD12 6 0.04 (1,555) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD21 4 0.04 (1,553) 1:A:124:V	. , ,	1:A:124:VAL:HG12	1:A:128:LEU:HD11	3	0.04
(1,554) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD13 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD11 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD12 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD13 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD11 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD12 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD13 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD12 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD13 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD13 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD12 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD13 6 0.04 (1,555) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD21 4 0.04 (1,553) 1:A:124:V	(' /	1:A:124:VAL:HG12	1:A:128:LEU:HD12	3	0.04
(1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD12 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD13 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD11 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD12 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD13 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD11 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD13 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD11 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD12 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD12 6 0.04 (1,553) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD21 4 0.04 (1,553) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD23 4 0.04 (1,553) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD21 4 0.04 (1,553) 1:A:124:V	(' /	1:A:124:VAL:HG12	1:A:128:LEU:HD13	3	0.04
(1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD12 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD13 3 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD11 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD12 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD13 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD12 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD13 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD11 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD12 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD12 6 0.04 (1,553) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD21 4 0.04 (1,553) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD23 4 0.04 (1,553) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD21 4 0.04 (1,553) 1:A:124:V	(' /	1:A:124:VAL:HG13	1:A:128:LEU:HD11	3	0.04
(1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD11 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD12 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD13 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD11 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD12 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD13 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD12 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD13 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD13 6 0.04 (1,553) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD21 4 0.04 (1,553) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD23 4 0.04 (1,553) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD21 4 0.04 (1,553) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD21 4 0.04	(' /	1:A:124:VAL:HG13	1:A:128:LEU:HD12	3	0.04
(1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD12 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD13 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD11 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD12 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD13 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD12 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD13 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD13 6 0.04 (1,553) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD21 4 0.04 (1,553) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD23 4 0.04 (1,553) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD23 4 0.04 (1,553) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD21 4 0.04 (1,553) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD21 4 0.04	(1,554)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:128:LEU:HD13	3	0.04
(1,554) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD13 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD11 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD12 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD13 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD11 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD12 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD13 6 0.04 (1,553) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD21 4 0.04 (1,553) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD23 4 0.04 (1,553) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD21 4 0.04 (1,553) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD21 4 0.04	(1,554)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:128:LEU:HD11	6	0.04
(1,554) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD11 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD12 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD13 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD11 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD12 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD13 6 0.04 (1,553) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD21 4 0.04 (1,553) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD22 4 0.04 (1,553) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD23 4 0.04 (1,553) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD21 4 0.04	(1,554)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:128:LEU:HD12	6	0.04
(1,554) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD12 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD13 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD11 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD12 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD13 6 0.04 (1,553) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD21 4 0.04 (1,553) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD22 4 0.04 (1,553) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD23 4 0.04 (1,553) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD21 4 0.04	(1,554)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:128:LEU:HD13	6	0.04
(1,554) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD12 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD13 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD11 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD12 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD13 6 0.04 (1,553) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD21 4 0.04 (1,553) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD23 4 0.04 (1,553) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD23 4 0.04 (1,553) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD21 4 0.04	/	1:A:124:VAL:HG12	1:A:128:LEU:HD11	6	0.04
(1,554) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD13 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD11 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD12 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD13 6 0.04 (1,553) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD21 4 0.04 (1,553) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD22 4 0.04 (1,553) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD23 4 0.04 (1,553) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD21 4 0.04	, ,	1:A:124:VAL:HG12	1:A:128:LEU:HD12	6	0.04
(1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD11 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD12 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD13 6 0.04 (1,553) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD21 4 0.04 (1,553) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD22 4 0.04 (1,553) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD23 4 0.04 (1,553) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD21 4 0.04	_ `	1:A:124:VAL:HG12	1:A:128:LEU:HD13		
(1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD12 6 0.04 (1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD13 6 0.04 (1,553) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD21 4 0.04 (1,553) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD22 4 0.04 (1,553) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD23 4 0.04 (1,553) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD21 4 0.04		1:A:124:VAL:HG13	1:A:128:LEU:HD11		
(1,554) 1:A:124:VAL:HG13 1:A:128:LEU:HD13 6 0.04 (1,553) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD21 4 0.04 (1,553) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD22 4 0.04 (1,553) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD23 4 0.04 (1,553) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD21 4 0.04	, , ,	1:A:124:VAL:HG13	1:A:128:LEU:HD12		
(1,553) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD21 4 0.04 (1,553) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD22 4 0.04 (1,553) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD23 4 0.04 (1,553) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD21 4 0.04		1:A:124:VAL:HG13	1:A:128:LEU:HD13		
(1,553) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD22 4 0.04 (1,553) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD23 4 0.04 (1,553) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD21 4 0.04			1:A:128:LEU:HD21	4	0.04
(1,553) 1:A:124:VAL:HG11 1:A:128:LEU:HD23 4 0.04 (1,553) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD21 4 0.04					
(1,553) 1:A:124:VAL:HG12 1:A:128:LEU:HD21 4 0.04		1:A:124:VAL:HG11	1:A:128:LEU:HD23	4	0.04
	,	1:A:124:VAL:HG12	1:A:128:LEU:HD21	4	0.04
	· · /			4	



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,553)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:128:LEU:HD23	4	0.04
(1,553)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:128:LEU:HD21	4	0.04
(1,553)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:128:LEU:HD22	4	0.04
(1,553)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:128:LEU:HD23	4	0.04
(1,55)	1:A:30:PHE:H	1:A:70:ILE:HD11	2	0.04
(1,55)	1:A:30:PHE:H	1:A:70:ILE:HD12	2	0.04
(1,55)	1:A:30:PHE:H	1:A:70:ILE:HD13	2	0.04
(1,55)	1:A:30:PHE:H	1:A:70:ILE:HD11	11	0.04
(1,55)	1:A:30:PHE:H	1:A:70:ILE:HD12	11	0.04
(1,55)	1:A:30:PHE:H	1:A:70:ILE:HD13	11	0.04
(1,542)	1:A:35:VAL:HG21	1:A:72:LEU:HD11	17	0.04
(1,542)	1:A:35:VAL:HG21	1:A:72:LEU:HD12	17	0.04
(1,542)	1:A:35:VAL:HG21	1:A:72:LEU:HD13	17	0.04
(1,542)	1:A:35:VAL:HG22	1:A:72:LEU:HD11	17	0.04
(1,542)	1:A:35:VAL:HG22	1:A:72:LEU:HD12	17	0.04
(1,542)	1:A:35:VAL:HG22	1:A:72:LEU:HD13	17	0.04
(1,542)	1:A:35:VAL:HG23	1:A:72:LEU:HD11	17	0.04
(1,542)	1:A:35:VAL:HG23	1:A:72:LEU:HD12	17	0.04
(1,542)	1:A:35:VAL:HG23	1:A:72:LEU:HD13	17	0.04
(1,532)	1:A:99:VAL:HG11	1:A:172:VAL:HG11	1	0.04
(1,532)	1:A:99:VAL:HG11	1:A:172:VAL:HG12	1	0.04
(1,532)	1:A:99:VAL:HG11	1:A:172:VAL:HG13	1	0.04
(1,532)	1:A:99:VAL:HG12	1:A:172:VAL:HG11	1	0.04
(1,532)	1:A:99:VAL:HG12	1:A:172:VAL:HG12	1	0.04
(1,532)	1:A:99:VAL:HG12	1:A:172:VAL:HG13	1	0.04
(1,532)	1:A:99:VAL:HG13	1:A:172:VAL:HG11	1	0.04
(1,532)	1:A:99:VAL:HG13	1:A:172:VAL:HG12	1	0.04
(1,532)	1:A:99:VAL:HG13	1:A:172:VAL:HG13	1	0.04
(1,52)	1:A:138:PHE:H	1:A:153:VAL:HG11	7	0.04
(1,52)	1:A:138:PHE:H	1:A:153:VAL:HG12	7	0.04
(1,52)	1:A:138:PHE:H	1:A:153:VAL:HG13	7	0.04
(1,512)	1:A:127:LEU:HD21	1:A:136:LEU:HD21	9	0.04
(1,512)	1:A:127:LEU:HD21	1:A:136:LEU:HD22	9	0.04
(1,512)	1:A:127:LEU:HD21	1:A:136:LEU:HD23	9	0.04
(1,512)	1:A:127:LEU:HD22	1:A:136:LEU:HD21	9	0.04
(1,512)	1:A:127:LEU:HD22	1:A:136:LEU:HD22	9	0.04
(1,512)	1:A:127:LEU:HD22	1:A:136:LEU:HD23	9	0.04
(1,512)	1:A:127:LEU:HD23	1:A:136:LEU:HD21	9	0.04
(1,512)	1:A:127:LEU:HD23	1:A:136:LEU:HD22	9	0.04
(1,512)	1:A:127:LEU:HD23	1:A:136:LEU:HD23	9	0.04
(1,512)	1:A:127:LEU:HD21	1:A:136:LEU:HD21	20	0.04
(1,512)	1:A:127:LEU:HD21	1:A:136:LEU:HD22	20	0.04



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,512)	1:A:127:LEU:HD21	1:A:136:LEU:HD23	20	0.04
(1,512)	1:A:127:LEU:HD22	1:A:136:LEU:HD21	20	0.04
(1,512)	1:A:127:LEU:HD22	1:A:136:LEU:HD22	20	0.04
(1,512)	1:A:127:LEU:HD22	1:A:136:LEU:HD23	20	0.04
(1,512)	1:A:127:LEU:HD23	1:A:136:LEU:HD21	20	0.04
(1,512)	1:A:127:LEU:HD23	1:A:136:LEU:HD22	20	0.04
(1,512)	1:A:127:LEU:HD23	1:A:136:LEU:HD23	20	0.04
(1,501)	1:A:91:TYR:HD1	1:A:153:VAL:HG21	20	0.04
(1,501)	1:A:91:TYR:HD1	1:A:153:VAL:HG22	20	0.04
(1,501)	1:A:91:TYR:HD1	1:A:153:VAL:HG23	20	0.04
(1,480)	1:A:152:GLN:HE22	1:A:171:LEU:HD21	5	0.04
(1,480)	1:A:152:GLN:HE22	1:A:171:LEU:HD22	5	0.04
(1,480)	1:A:152:GLN:HE22	1:A:171:LEU:HD23	5	0.04
(1,452)	1:A:96:MET:H	1:A:100:ILE:HD11	7	0.04
(1,452)	1:A:96:MET:H	1:A:100:ILE:HD12	7	0.04
(1,452)	1:A:96:MET:H	1:A:100:ILE:HD13	7	0.04
(1,441)	1:A:146:GLU:H	1:A:148:ALA:H	12	0.04
(1,440)	1:A:147:GLY:H	1:A:148:ALA:H	4	0.04
(1,439)	1:A:140:ILE:HD11	1:A:144:ALA:H	2	0.04
(1,439)	1:A:140:ILE:HD12	1:A:144:ALA:H	2	0.04
(1,439)	1:A:140:ILE:HD13	1:A:144:ALA:H	2	0.04
(1,439)	1:A:140:ILE:HD11	1:A:144:ALA:H	5	0.04
(1,439)	1:A:140:ILE:HD12	1:A:144:ALA:H	5	0.04
(1,439)	1:A:140:ILE:HD13	1:A:144:ALA:H	5	0.04
(1,439)	1:A:140:ILE:HD11	1:A:144:ALA:H	8	0.04
(1,439)	1:A:140:ILE:HD12	1:A:144:ALA:H	8	0.04
(1,439)	1:A:140:ILE:HD13	1:A:144:ALA:H	8	0.04
(1,43)	1:A:82:TYR:H	1:A:82:TYR:HD1	12	0.04
(1,43)	1:A:82:TYR:H	1:A:82:TYR:HD1	18	0.04
(1,415)	1:A:131:ASP:H	1:A:134:LYS:H	14	0.04
(1,415)	1:A:131:ASP:H	1:A:134:LYS:H	20	0.04
(1,41)	1:A:158:TYR:H	1:A:158:TYR:HE1	20	0.04
(1,409)	1:A:22:LEU:HD21	1:A:25:ASP:H	1	0.04
(1,409)	1:A:22:LEU:HD22	1:A:25:ASP:H	1	0.04
(1,409)	1:A:22:LEU:HD23	1:A:25:ASP:H	1	0.04
(1,409)	1:A:22:LEU:HD21	1:A:25:ASP:H	3	0.04
(1,409)	1:A:22:LEU:HD22	1:A:25:ASP:H	3	0.04
(1,409)	1:A:22:LEU:HD23	1:A:25:ASP:H	3	0.04
(1,409)	1:A:22:LEU:HD21	1:A:25:ASP:H	4	0.04
(1,409)	1:A:22:LEU:HD22	1:A:25:ASP:H	4	0.04
(1,409)	1:A:22:LEU:HD23	1:A:25:ASP:H	4	0.04
(1,409)	1:A:22:LEU:HD21	1:A:25:ASP:H	13	0.04



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

(1,409) 1:A (1,406) 1 (1,391) 1:A	:22:LEU:HD22 :22:LEU:HD23 :A:25:ASP:H	1:A:25:ASP:H 1:A:25:ASP:H	13	0.04
(1,406) 1 (1,391) 1:A	:A:25:ASP:H		4.0	
(1,391) 1:A			13	0.04
() /		1:A:26:LEU:H	8	0.04
(1 301) 1.1	::23:VAL:HG11	1:A:26:LEU:H	8	0.04
+ $(1,091) + 1.A$:23:VAL:HG12	1:A:26:LEU:H	8	0.04
(1,391) 1:A	:23:VAL:HG13	1:A:26:LEU:H	8	0.04
(1,383) 1:	A:106:ASN:H	1:A:108:ARG:H	13	0.04
(1,360) 1:	A:161:VAL:H	1:A:164:THR:H	10	0.04
(1,343) 1	:A:98:ASN:H	1:A:100:ILE:HD11	4	0.04
(1,343) 1	:A:98:ASN:H	1:A:100:ILE:HD12	4	0.04
(1,343) 1	:A:98:ASN:H	1:A:100:ILE:HD13	4	0.04
(1,341) 1:A	1:95:PHE:HD1	1:A:98:ASN:H	14	0.04
(1,341) 1:A	A:95:PHE:HD2	1:A:98:ASN:H	14	0.04
(1,309) 1	:A:63:HIS:H	1:A:64:VAL:HG21	20	0.04
(1,309) 1	:A:63:HIS:H	1:A:64:VAL:HG22	20	0.04
(1,309) 1	:A:63:HIS:H	1:A:64:VAL:HG23	20	0.04
(1,286) 1	:A:64:VAL:H	1:A:65:GLU:H	4	0.04
\ \ \ \ \ \ \ \ \ \ \ \ \ \ \ \ \ \ \	:A:62:GLU:H	1:A:64:VAL:H	11	0.04
(1,240) 1:	:A:65:GLU:H	1:A:66:ARG:H	6	0.04
(1,225) 1:A	A:95:PHE:HD1	1:A:99:VAL:H	15	0.04
(1,225) 1:A	A:95:PHE:HD2	1:A:99:VAL:H	15	0.04
(1,223) 1	I:A:6:ASP:H	1:A:13:LEU:HD11	19	0.04
(1,223) 1	1:A:6:ASP:H	1:A:13:LEU:HD12	19	0.04
(1,223) 1	I:A:6:ASP:H	1:A:13:LEU:HD13	19	0.04
(1,222) 1:	A:109:ASP:H	1:A:113:VAL:HG21	12	0.04
(1,222) 1:	A:109:ASP:H	1:A:113:VAL:HG22	12	0.04
(1,222) 1:	A:109:ASP:H	1:A:113:VAL:HG23	12	0.04
(1,222) 1:	A:109:ASP:H	1:A:113:VAL:HG21	18	0.04
(1,222) 1:	A:109:ASP:H	1:A:113:VAL:HG22	18	0.04
(1,222) 1:	A:109:ASP:H	1:A:113:VAL:HG23	18	0.04
(1,192) 1:	:A:37:ARG:H	1:A:72:LEU:HD21	8	0.04
(1,192) 1:	:A:37:ARG:H	1:A:72:LEU:HD22	8	0.04
(1,192) 1:	:A:37:ARG:H	1:A:72:LEU:HD23	8	0.04
(1,191) 1:A	:64:VAL:HG11	1:A:65:GLU:H	7	0.04
	:64:VAL:HG12	1:A:65:GLU:H	7	0.04
(1,191) 1:A	:64:VAL:HG13	1:A:65:GLU:H	7	0.04
(1,183) 1:A:	:171:LEU:HD21	1:A:172:VAL:H	6	0.04
	:171:LEU:HD22	1:A:172:VAL:H	6	0.04
	:171:LEU:HD23	1:A:172:VAL:H	6	0.04
	:171:LEU:HD21	1:A:172:VAL:H	11	0.04
(1,183) 1:A:	:171:LEU:HD22	1:A:172:VAL:H	11	0.04
(1,183) 1:A:	:171:LEU:HD23	1:A:172:VAL:H	11	0.04



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,179)	1:A:92:ILE:HD11	1:A:153:VAL:H	10	0.04
(1,179)	1:A:92:ILE:HD12	1:A:153:VAL:H	10	0.04
(1,179)	1:A:92:ILE:HD13	1:A:153:VAL:H	10	0.04
(1,174)	1:A:22:LEU:H	1:A:28:TYR:HD1	8	0.04
(1,164)	1:A:8:PHE:HD1	1:A:152:GLN:H	19	0.04
(1,164)	1:A:8:PHE:HD2	1:A:152:GLN:H	19	0.04
(1,160)	1:A:44:LEU:H	1:A:44:LEU:HD11	11	0.04
(1,160)	1:A:44:LEU:H	1:A:44:LEU:HD12	11	0.04
(1,160)	1:A:44:LEU:H	1:A:44:LEU:HD13	11	0.04
(1,160)	1:A:44:LEU:H	1:A:44:LEU:HD11	12	0.04
(1,160)	1:A:44:LEU:H	1:A:44:LEU:HD12	12	0.04
(1,160)	1:A:44:LEU:H	1:A:44:LEU:HD13	12	0.04
(1,160)	1:A:44:LEU:H	1:A:44:LEU:HD11	19	0.04
(1,160)	1:A:44:LEU:H	1:A:44:LEU:HD12	19	0.04
(1,160)	1:A:44:LEU:H	1:A:44:LEU:HD13	19	0.04
(1,159)	1:A:2:LEU:HD11	1:A:179:GLU:H	4	0.04
(1,159)	1:A:2:LEU:HD12	1:A:179:GLU:H	4	0.04
(1,159)	1:A:2:LEU:HD13	1:A:179:GLU:H	4	0.04
(1,159)	1:A:2:LEU:HD11	1:A:179:GLU:H	7	0.04
(1,159)	1:A:2:LEU:HD12	1:A:179:GLU:H	7	0.04
(1,159)	1:A:2:LEU:HD13	1:A:179:GLU:H	7	0.04
(1,159)	1:A:2:LEU:HD11	1:A:179:GLU:H	20	0.04
(1,159)	1:A:2:LEU:HD12	1:A:179:GLU:H	20	0.04
(1,159)	1:A:2:LEU:HD13	1:A:179:GLU:H	20	0.04
(1,148)	1:A:71:VAL:HG11	1:A:78:GLU:H	1	0.04
(1,148)	1:A:71:VAL:HG12	1:A:78:GLU:H	1	0.04
(1,148)	1:A:71:VAL:HG13	1:A:78:GLU:H	1	0.04
(1,148)	1:A:71:VAL:HG11	1:A:78:GLU:H	13	0.04
(1,148)	1:A:71:VAL:HG12	1:A:78:GLU:H	13	0.04
(1,148)	1:A:71:VAL:HG13	1:A:78:GLU:H	13	0.04
(1,135)	1:A:23:VAL:H	1:A:26:LEU:H	4	0.04
(1,135)	1:A:23:VAL:H	1:A:26:LEU:H	10	0.04
(1,135)	1:A:23:VAL:H	1:A:26:LEU:H	13	0.04
(1,120)	1:A:91:TYR:H	1:A:91:TYR:HD1	19	0.04
(1,1129)	1:A:122:GLY:O	1:A:126:SER:H	10	0.04
(1,1129)	1:A:122:GLY:O	1:A:126:SER:H	19	0.04
(1,1129)	1:A:122:GLY:O	1:A:126:SER:H	20	0.04
(1,1119)	1:A:117:LYS:O	1:A:121:GLN:H	2	0.04
(1,1106)	1:A:99:VAL:O	1:A:103:MET:N	2	0.04
(1,1099)	1:A:96:MET:O	1:A:100:ILE:H	2	0.04
(1,1099)	1:A:96:MET:O	1:A:100:ILE:H	11	0.04
(1,1099)	1:A:96:MET:O	1:A:100:ILE:H	13	0.04



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1093)	1:A:93:LYS:O	1:A:97:LYS:H	7	0.04
(1,1093)	1:A:93:LYS:O	1:A:97:LYS:H	13	0.04
(1,1088)	1:A:90:ALA:O	1:A:94:LYS:N	20	0.04
(1,1087)	1:A:90:ALA:O	1:A:94:LYS:H	2	0.04
(1,1087)	1:A:90:ALA:O	1:A:94:LYS:H	14	0.04
(1,108)	1:A:15:SER:H	1:A:18:PHE:HD1	9	0.04
(1,108)	1:A:15:SER:H	1:A:18:PHE:HD2	9	0.04
(1,1079)	1:A:86:SER:O	1:A:90:ALA:H	7	0.04
(1,1079)	1:A:86:SER:O	1:A:90:ALA:H	12	0.04
(1,1055)	1:A:161:VAL:O	1:A:164:THR:H	9	0.04
(1,1045)	1:A:155:ILE:H	1:A:170:MET:O	1	0.04
(1,1045)	1:A:155:ILE:H	1:A:170:MET:O	8	0.04
(1,1045)	1:A:155:ILE:H	1:A:170:MET:O	13	0.04
(1,1045)	1:A:155:ILE:H	1:A:170:MET:O	15	0.04
(1,1037)	1:A:137:ALA:H	1:A:156:ILE:O	13	0.04
(1,1031)	1:A:79:MET:O	1:A:138:PHE:H	3	0.04
(1,1019)	1:A:3:ILE:O	1:A:179:GLU:H	9	0.04
(1,1015)	1:A:4:TYR:O	1:A:14:SER:H	5	0.04
(1,1015)	1:A:4:TYR:O	1:A:14:SER:H	15	0.04
(1,1015)	1:A:4:TYR:O	1:A:14:SER:H	16	0.04
(1,1015)	1:A:4:TYR:O	1:A:14:SER:H	20	0.04
(1,1013)	1:A:2:LEU:H	1:A:16:ASP:O	8	0.04
(1,1011)	1:A:2:LEU:O	1:A:16:ASP:H	6	0.04
(1,1011)	1:A:2:LEU:O	1:A:16:ASP:H	14	0.04
(1,996)	1:A:35:VAL:HG21	1:A:72:LEU:HD11	13	0.03
(1,996)	1:A:35:VAL:HG21	1:A:72:LEU:HD12	13	0.03
(1,996)	1:A:35:VAL:HG21	1:A:72:LEU:HD13	13	0.03
(1,996)	1:A:35:VAL:HG22	1:A:72:LEU:HD11	13	0.03
(1,996)	1:A:35:VAL:HG22	1:A:72:LEU:HD12	13	0.03
(1,996)	1:A:35:VAL:HG22	1:A:72:LEU:HD13	13	0.03
(1,996)	1:A:35:VAL:HG23	1:A:72:LEU:HD11	13	0.03
(1,996)	1:A:35:VAL:HG23	1:A:72:LEU:HD12	13	0.03
(1,996)	1:A:35:VAL:HG23	1:A:72:LEU:HD13	13	0.03
(1,985)	1:A:99:VAL:HG11	1:A:172:VAL:HG11	3	0.03
(1,985)	1:A:99:VAL:HG11	1:A:172:VAL:HG12	3	0.03
(1,985)	1:A:99:VAL:HG11	1:A:172:VAL:HG13	3	0.03
(1,985)	1:A:99:VAL:HG12	1:A:172:VAL:HG11	3	0.03
(1,985)	1:A:99:VAL:HG12	1:A:172:VAL:HG12	3	0.03
(1,985)	1:A:99:VAL:HG12	1:A:172:VAL:HG13	3	0.03
(1,985)	1:A:99:VAL:HG13	1:A:172:VAL:HG11	3	0.03
(1,985)	1:A:99:VAL:HG13	1:A:172:VAL:HG12	3	0.03
(1,985)	1:A:99:VAL:HG13	1:A:172:VAL:HG13	3	0.03



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,983)	1:A:100:ILE:HD11	1:A:113:VAL:HG11	10	0.03
(1,983)	1:A:100:ILE:HD11	1:A:113:VAL:HG12	10	0.03
(1,983)	1:A:100:ILE:HD11	1:A:113:VAL:HG13	10	0.03
(1,983)	1:A:100:ILE:HD12	1:A:113:VAL:HG11	10	0.03
(1,983)	1:A:100:ILE:HD12	1:A:113:VAL:HG12	10	0.03
(1,983)	1:A:100:ILE:HD12	1:A:113:VAL:HG13	10	0.03
(1,983)	1:A:100:ILE:HD13	1:A:113:VAL:HG11	10	0.03
(1,983)	1:A:100:ILE:HD13	1:A:113:VAL:HG12	10	0.03
(1,983)	1:A:100:ILE:HD13	1:A:113:VAL:HG13	10	0.03
(1,983)	1:A:100:ILE:HD11	1:A:113:VAL:HG11	14	0.03
(1,983)	1:A:100:ILE:HD11	1:A:113:VAL:HG12	14	0.03
(1,983)	1:A:100:ILE:HD11	1:A:113:VAL:HG13	14	0.03
(1,983)	1:A:100:ILE:HD12	1:A:113:VAL:HG11	14	0.03
(1,983)	1:A:100:ILE:HD12	1:A:113:VAL:HG12	14	0.03
(1,983)	1:A:100:ILE:HD12	1:A:113:VAL:HG13	14	0.03
(1,983)	1:A:100:ILE:HD13	1:A:113:VAL:HG11	14	0.03
(1,983)	1:A:100:ILE:HD13	1:A:113:VAL:HG12	14	0.03
(1,983)	1:A:100:ILE:HD13	1:A:113:VAL:HG13	14	0.03
(1,977)	1:A:113:VAL:HG11	1:A:100:ILE:HD11	10	0.03
(1,977)	1:A:113:VAL:HG11	1:A:100:ILE:HD12	10	0.03
(1,977)	1:A:113:VAL:HG11	1:A:100:ILE:HD13	10	0.03
(1,977)	1:A:113:VAL:HG12	1:A:100:ILE:HD11	10	0.03
(1,977)	1:A:113:VAL:HG12	1:A:100:ILE:HD12	10	0.03
(1,977)	1:A:113:VAL:HG12	1:A:100:ILE:HD13	10	0.03
(1,977)	1:A:113:VAL:HG13	1:A:100:ILE:HD11	10	0.03
(1,977)	1:A:113:VAL:HG13	1:A:100:ILE:HD12	10	0.03
(1,977)	1:A:113:VAL:HG13	1:A:100:ILE:HD13	10	0.03
(1,977)	1:A:113:VAL:HG11	1:A:100:ILE:HD11	14	0.03
(1,977)	1:A:113:VAL:HG11	1:A:100:ILE:HD12	14	0.03
(1,977)	1:A:113:VAL:HG11	1:A:100:ILE:HD13	14	0.03
(1,977)	1:A:113:VAL:HG12	1:A:100:ILE:HD11	14	0.03
(1,977)	1:A:113:VAL:HG12	1:A:100:ILE:HD12	14	0.03
(1,977)	1:A:113:VAL:HG12	1:A:100:ILE:HD13	14	0.03
(1,977)	1:A:113:VAL:HG13	1:A:100:ILE:HD11	14	0.03
(1,977)	1:A:113:VAL:HG13	1:A:100:ILE:HD12	14	0.03
(1,977)	1:A:113:VAL:HG13	1:A:100:ILE:HD13	14	0.03
(1,945)	1:A:152:GLN:HE21	1:A:172:VAL:H	11	0.03
(1,945)	1:A:152:GLN:HE22	1:A:172:VAL:H	11	0.03
(1,944)	1:A:152:GLN:HE21	1:A:171:LEU:HD21	9	0.03
(1,944)	1:A:152:GLN:HE21	1:A:171:LEU:HD22	9	0.03
(1,944)	1:A:152:GLN:HE21	1:A:171:LEU:HD23	9	0.03
(1,944)	1:A:152:GLN:HE22	1:A:171:LEU:HD21	9	0.03



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,944)	1:A:152:GLN:HE22	1:A:171:LEU:HD22	9	0.03
(1,944)	1:A:152:GLN:HE22	1:A:171:LEU:HD23	9	0.03
(1,929)	1:A:106:ASN:HD21	1:A:107:ASN:H	18	0.03
(1,921)	1:A:30:PHE:HB2	1:A:31:LYS:H	15	0.03
(1,921)	1:A:30:PHE:HB2	1:A:31:LYS:H	16	0.03
(1,91)	1:A:163:GLY:H	1:A:164:THR:H	20	0.03
(1,90)	1:A:161:VAL:H	1:A:163:GLY:H	3	0.03
(1,896)	1:A:2:LEU:HD11	1:A:180:LYS:H	11	0.03
(1,896)	1:A:2:LEU:HD12	1:A:180:LYS:H	11	0.03
(1,896)	1:A:2:LEU:HD13	1:A:180:LYS:H	11	0.03
(1,888)	1:A:123:TRP:H	1:A:124:VAL:HG21	4	0.03
(1,888)	1:A:123:TRP:H	1:A:124:VAL:HG22	4	0.03
(1,888)	1:A:123:TRP:H	1:A:124:VAL:HG23	4	0.03
(1,888)	1:A:123:TRP:H	1:A:124:VAL:HG21	6	0.03
(1,888)	1:A:123:TRP:H	1:A:124:VAL:HG22	6	0.03
(1,888)	1:A:123:TRP:H	1:A:124:VAL:HG23	6	0.03
(1,888)	1:A:123:TRP:H	1:A:124:VAL:HG21	11	0.03
(1,888)	1:A:123:TRP:H	1:A:124:VAL:HG22	11	0.03
(1,888)	1:A:123:TRP:H	1:A:124:VAL:HG23	11	0.03
(1,88)	1:A:76:LEU:HD21	1:A:141:GLY:H	6	0.03
(1,88)	1:A:76:LEU:HD22	1:A:141:GLY:H	6	0.03
(1,88)	1:A:76:LEU:HD23	1:A:141:GLY:H	6	0.03
(1,874)	1:A:64:VAL:HG21	1:A:66:ARG:H	1	0.03
(1,874)	1:A:64:VAL:HG22	1:A:66:ARG:H	1	0.03
(1,874)	1:A:64:VAL:HG23	1:A:66:ARG:H	1	0.03
(1,874)	1:A:64:VAL:HG21	1:A:66:ARG:H	19	0.03
(1,874)	1:A:64:VAL:HG22	1:A:66:ARG:H	19	0.03
(1,874)	1:A:64:VAL:HG23	1:A:66:ARG:H	19	0.03
(1,862)	1:A:62:GLU:H	1:A:64:VAL:HG21	15	0.03
(1,862)	1:A:62:GLU:H	1:A:64:VAL:HG22	15	0.03
(1,862)	1:A:62:GLU:H	1:A:64:VAL:HG23	15	0.03
(1,861)	1:A:139:PHE:H	1:A:156:ILE:HD11	16	0.03
(1,861)	1:A:139:PHE:H	1:A:156:ILE:HD12	16	0.03
(1,861)	1:A:139:PHE:H	1:A:156:ILE:HD13	16	0.03
(1,860)	1:A:139:PHE:H	1:A:153:VAL:HG21	1	0.03
(1,860)	1:A:139:PHE:H	1:A:153:VAL:HG22	1	0.03
(1,860)	1:A:139:PHE:H	1:A:153:VAL:HG23	1	0.03
(1,860)	1:A:139:PHE:H	1:A:153:VAL:HG21	11	0.03
(1,860)	1:A:139:PHE:H	1:A:153:VAL:HG22	11	0.03
(1,860)	1:A:139:PHE:H	1:A:153:VAL:HG23	11	0.03
(1,860)	1:A:139:PHE:H	1:A:153:VAL:HG21	13	0.03
(1,860)	1:A:139:PHE:H	1:A:153:VAL:HG22	13	0.03
() , , , , ,				ord on mort mage



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,860)	1:A:139:PHE:H	1:A:153:VAL:HG23	13	0.03
(1,860)	1:A:139:PHE:H	1:A:153:VAL:HG21	20	0.03
(1,860)	1:A:139:PHE:H	1:A:153:VAL:HG22	20	0.03
(1,860)	1:A:139:PHE:H	1:A:153:VAL:HG23	20	0.03
(1,850)	1:A:112:ASP:H	1:A:113:VAL:HG21	19	0.03
(1,850)	1:A:112:ASP:H	1:A:113:VAL:HG22	19	0.03
(1,850)	1:A:112:ASP:H	1:A:113:VAL:HG23	19	0.03
(1,850)	1:A:112:ASP:H	1:A:113:VAL:HG21	20	0.03
(1,850)	1:A:112:ASP:H	1:A:113:VAL:HG22	20	0.03
(1,850)	1:A:112:ASP:H	1:A:113:VAL:HG23	20	0.03
(1,842)	1:A:113:VAL:HG11	1:A:117:LYS:H	3	0.03
(1,842)	1:A:113:VAL:HG12	1:A:117:LYS:H	3	0.03
(1,842)	1:A:113:VAL:HG13	1:A:117:LYS:H	3	0.03
(1,837)	1:A:33:LYS:H	1:A:35:VAL:HG11	15	0.03
(1,837)	1:A:33:LYS:H	1:A:35:VAL:HG12	15	0.03
(1,837)	1:A:33:LYS:H	1:A:35:VAL:HG13	15	0.03
(1,832)	1:A:120:ILE:HD11	1:A:174:GLU:H	17	0.03
(1,832)	1:A:120:ILE:HD12	1:A:174:GLU:H	17	0.03
(1,832)	1:A:120:ILE:HD13	1:A:174:GLU:H	17	0.03
(1,829)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:128:LEU:H	1	0.03
(1,829)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:128:LEU:H	1	0.03
(1,829)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:128:LEU:H	1	0.03
(1,829)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:128:LEU:H	10	0.03
(1,829)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:128:LEU:H	10	0.03
(1,829)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:128:LEU:H	10	0.03
(1,808)	1:A:121:GLN:HE22	1:A:125:VAL:HG11	17	0.03
(1,808)	1:A:121:GLN:HE22	1:A:125:VAL:HG12	17	0.03
(1,808)	1:A:121:GLN:HE22	1:A:125:VAL:HG13	17	0.03
(1,802)	1:A:44:LEU:H	1:A:44:LEU:HD21	2	0.03
(1,802)	1:A:44:LEU:H	1:A:44:LEU:HD22	2	0.03
(1,802)	1:A:44:LEU:H	1:A:44:LEU:HD23	2	0.03
(1,798)	1:A:169:LEU:HD21	1:A:170:MET:H	9	0.03
(1,798)	1:A:169:LEU:HD22	1:A:170:MET:H	9	0.03
(1,798)	1:A:169:LEU:HD23	1:A:170:MET:H	9	0.03
(1,794)	1:A:42:ILE:H	1:A:42:ILE:HD11	8	0.03
(1,794)	1:A:42:ILE:H	1:A:42:ILE:HD12	8	0.03
(1,794)	1:A:42:ILE:H	1:A:42:ILE:HD13	8	0.03
(1,775)	1:A:71:VAL:HG11	1:A:77:VAL:H	11	0.03
(1,775)	1:A:71:VAL:HG12	1:A:77:VAL:H	11	0.03
(1,775)	1:A:71:VAL:HG13	1:A:77:VAL:H	11	0.03
(1,775)	1:A:71:VAL:HG11	1:A:77:VAL:H	14	0.03
(1,775)	1:A:71:VAL:HG12	1:A:77:VAL:H	14	0.03



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,775)	1:A:71:VAL:HG13	1:A:77:VAL:H	14	0.03
(1,775)	1:A:71:VAL:HG11	1:A:77:VAL:H	16	0.03
(1,775)	1:A:71:VAL:HG12	1:A:77:VAL:H	16	0.03
(1,775)	1:A:71:VAL:HG13	1:A:77:VAL:H	16	0.03
(1,773)	1:A:35:VAL:HG11	1:A:69:ASP:H	2	0.03
(1,773)	1:A:35:VAL:HG12	1:A:69:ASP:H	2	0.03
(1,773)	1:A:35:VAL:HG13	1:A:69:ASP:H	2	0.03
(1,756)	1:A:2:LEU:HD21	1:A:182:LEU:HD21	19	0.03
(1,756)	1:A:2:LEU:HD21	1:A:182:LEU:HD22	19	0.03
(1,756)	1:A:2:LEU:HD21	1:A:182:LEU:HD23	19	0.03
(1,756)	1:A:2:LEU:HD22	1:A:182:LEU:HD21	19	0.03
(1,756)	1:A:2:LEU:HD22	1:A:182:LEU:HD22	19	0.03
(1,756)	1:A:2:LEU:HD22	1:A:182:LEU:HD23	19	0.03
(1,756)	1:A:2:LEU:HD23	1:A:182:LEU:HD21	19	0.03
(1,756)	1:A:2:LEU:HD23	1:A:182:LEU:HD22	19	0.03
(1,756)	1:A:2:LEU:HD23	1:A:182:LEU:HD23	19	0.03
(1,751)	1:A:36:VAL:HG11	1:A:44:LEU:HD21	6	0.03
(1,751)	1:A:36:VAL:HG11	1:A:44:LEU:HD22	6	0.03
(1,751)	1:A:36:VAL:HG11	1:A:44:LEU:HD23	6	0.03
(1,751)	1:A:36:VAL:HG12	1:A:44:LEU:HD21	6	0.03
(1,751)	1:A:36:VAL:HG12	1:A:44:LEU:HD22	6	0.03
(1,751)	1:A:36:VAL:HG12	1:A:44:LEU:HD23	6	0.03
(1,751)	1:A:36:VAL:HG13	1:A:44:LEU:HD21	6	0.03
(1,751)	1:A:36:VAL:HG13	1:A:44:LEU:HD22	6	0.03
(1,751)	1:A:36:VAL:HG13	1:A:44:LEU:HD23	6	0.03
(1,750)	1:A:35:VAL:HG11	1:A:44:LEU:HD21	20	0.03
(1,750)	1:A:35:VAL:HG11	1:A:44:LEU:HD22	20	0.03
(1,750)	1:A:35:VAL:HG11	1:A:44:LEU:HD23	20	0.03
(1,750)	1:A:35:VAL:HG12	1:A:44:LEU:HD21	20	0.03
(1,750)	1:A:35:VAL:HG12	1:A:44:LEU:HD22	20	0.03
(1,750)	1:A:35:VAL:HG12	1:A:44:LEU:HD23	20	0.03
(1,750)	1:A:35:VAL:HG13	1:A:44:LEU:HD21	20	0.03
(1,750)	1:A:35:VAL:HG13	1:A:44:LEU:HD22	20	0.03
(1,750)	1:A:35:VAL:HG13	1:A:44:LEU:HD23	20	0.03
(1,731)	1:A:140:ILE:HD11	1:A:153:VAL:HG21	14	0.03
(1,731)	1:A:140:ILE:HD11	1:A:153:VAL:HG22	14	0.03
(1,731)	1:A:140:ILE:HD11	1:A:153:VAL:HG23	14	0.03
(1,731)	1:A:140:ILE:HD12	1:A:153:VAL:HG21	14	0.03
(1,731)	1:A:140:ILE:HD12	1:A:153:VAL:HG22	14	0.03
(1,731)	1:A:140:ILE:HD12	1:A:153:VAL:HG23	14	0.03
(1,731)	1:A:140:ILE:HD13	1:A:153:VAL:HG21	14	0.03
(1,731)	1:A:140:ILE:HD13	1:A:153:VAL:HG22	14	0.03



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,731)	1:A:140:ILE:HD13	1:A:153:VAL:HG23	14	0.03
(1,730)	1:A:27:VAL:HG11	1:A:120:ILE:HD11	16	0.03
(1,730)	1:A:27:VAL:HG11	1:A:120:ILE:HD12	16	0.03
(1,730)	1:A:27:VAL:HG11	1:A:120:ILE:HD13	16	0.03
(1,730)	1:A:27:VAL:HG12	1:A:120:ILE:HD11	16	0.03
(1,730)	1:A:27:VAL:HG12	1:A:120:ILE:HD12	16	0.03
(1,730)	1:A:27:VAL:HG12	1:A:120:ILE:HD13	16	0.03
(1,730)	1:A:27:VAL:HG13	1:A:120:ILE:HD11	16	0.03
(1,730)	1:A:27:VAL:HG13	1:A:120:ILE:HD12	16	0.03
(1,730)	1:A:27:VAL:HG13	1:A:120:ILE:HD13	16	0.03
(1,730)	1:A:27:VAL:HG11	1:A:120:ILE:HD11	20	0.03
(1,730)	1:A:27:VAL:HG11	1:A:120:ILE:HD12	20	0.03
(1,730)	1:A:27:VAL:HG11	1:A:120:ILE:HD13	20	0.03
(1,730)	1:A:27:VAL:HG12	1:A:120:ILE:HD11	20	0.03
(1,730)	1:A:27:VAL:HG12	1:A:120:ILE:HD12	20	0.03
(1,730)	1:A:27:VAL:HG12	1:A:120:ILE:HD13	20	0.03
(1,730)	1:A:27:VAL:HG13	1:A:120:ILE:HD11	20	0.03
(1,730)	1:A:27:VAL:HG13	1:A:120:ILE:HD12	20	0.03
(1,730)	1:A:27:VAL:HG13	1:A:120:ILE:HD13	20	0.03
(1,725)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:172:VAL:HG11	4	0.03
(1,725)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:172:VAL:HG12	4	0.03
(1,725)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:172:VAL:HG13	4	0.03
(1,725)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:172:VAL:HG11	4	0.03
(1,725)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:172:VAL:HG12	4	0.03
(1,725)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:172:VAL:HG13	4	0.03
(1,725)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:172:VAL:HG11	4	0.03
(1,725)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:172:VAL:HG12	4	0.03
(1,725)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:172:VAL:HG13	4	0.03
(1,725)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:172:VAL:HG11	16	0.03
(1,725)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:172:VAL:HG12	16	0.03
(1,725)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:172:VAL:HG13	16	0.03
(1,725)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:172:VAL:HG11	16	0.03
(1,725)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:172:VAL:HG12	16	0.03
(1,725)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:172:VAL:HG13	16	0.03
(1,725)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:172:VAL:HG11	16	0.03
(1,725)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:172:VAL:HG12	16	0.03
(1,725)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:172:VAL:HG13	16	0.03
(1,691)	1:A:6:ASP:H	1:A:11:ASP:H	20	0.03
(1,670)	1:A:37:ARG:H	1:A:67:GLY:H	8	0.03
(1,66)	1:A:137:ALA:H	1:A:156:ILE:H	9	0.03
(1,655)	1:A:52:GLU:H	1:A:53:GLU:H	3	0.03
(1,622)	1:A:67:GLY:H	1:A:69:ASP:H	2	0.03
/	1	<u> </u>		d on next mage



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

(1,62) 1:A:27:VAL:HG11 1:A:123:TRP:HE1 6 0.03 (1,62) 1:A:27:VAL:HG12 1:A:123:TRP:HE1 6 0.03 (1,62) 1:A:27:VAL:HG13 1:A:123:TRP:HE1 6 0.03 (1,60) 1:A:27:VAL:HG21 1:A:123:TRP:HE1 4 0.03 (1,60) 1:A:27:VAL:HG23 1:A:123:TRP:HE1 4 0.03 (1,591) 1:A:136:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD11 16 0.03 (1,591) 1:A:136:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD12 16 0.03 (1,591) 1:A:136:LEU:HD22 1:A:155:ILE:HD13 16 0.03 (1,591) 1:A:136:LEU:HD23 1:A:155:ILE:HD11 16 0.03 (1,591) 1:A:136:LEU:HD23 1:A:155:ILE:HD13 16 0.03 (1,591) 1:A:136:LEU:HD23	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,62) 1:A:27:VAL:HG13 1:A:123:TRP:HE1 6 0.03 (1,60) 1:A:27:VAL:HG21 1:A:123:TRP:HE1 4 0.03 (1,60) 1:A:27:VAL:HG22 1:A:123:TRP:HE1 4 0.03 (1,60) 1:A:27:VAL:HG23 1:A:123:TRP:HE1 4 0.03 (1,591) 1:A:136:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD11 16 0.03 (1,591) 1:A:136:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD12 16 0.03 (1,591) 1:A:136:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD13 16 0.03 (1,591) 1:A:136:LEU:HD22 1:A:155:ILE:HD13 16 0.03 (1,591) 1:A:136:LEU:HD22 1:A:155:ILE:HD13 16 0.03 (1,591) 1:A:136:LEU:HD23 1:A:155:ILE:HD13 16 0.03 (1,591) 1:A:136:LEU:HD23 1:A:155:ILE:HD11 16 0.03 (1,591) 1:A:136:LEU:HD23 1:A:155:ILE:HD13 16 0.03 (1,591) 1:A:133:PHE:HD1 1:A:136:LEU:HD11 20 0.03 (1,585) 1:A:133:PHE:H	(1,62)	1:A:27:VAL:HG11	1:A:123:TRP:HE1	6	0.03
(1,60) 1:A:27:VAL:HG21 1:A:123:TRP:HE1 4 0.03 (1,60) 1:A:27:VAL:HG22 1:A:123:TRP:HE1 4 0.03 (1,60) 1:A:27:VAL:HG23 1:A:123:TRP:HE1 4 0.03 (1,591) 1:A:136:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD11 16 0.03 (1,591) 1:A:136:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD13 16 0.03 (1,591) 1:A:136:LEU:HD22 1:A:155:ILE:HD11 16 0.03 (1,591) 1:A:136:LEU:HD22 1:A:155:ILE:HD11 16 0.03 (1,591) 1:A:136:LEU:HD22 1:A:155:ILE:HD12 16 0.03 (1,591) 1:A:136:LEU:HD22 1:A:155:ILE:HD13 16 0.03 (1,591) 1:A:136:LEU:HD23 1:A:155:ILE:HD13 16 0.03 (1,591) 1:A:136:LEU:HD23 1:A:155:ILE:HD12 16 0.03 (1,591) 1:A:136:LEU:HD23 1:A:155:ILE:HD13 16 0.03 (1,585) 1:A:133:PHE:HD1 1:A:136:LEU:HD11 20 0.03 (1,585) 1:A:133:P	(1,62)	1:A:27:VAL:HG12	1:A:123:TRP:HE1	6	0.03
(1,60) 1:A:27:VAL:HG22 1:A:123:TRP:HE1 4 0.03 (1,60) 1:A:27:VAL:HG23 1:A:123:TRP:HE1 4 0.03 (1,591) 1:A:136:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD11 16 0.03 (1,591) 1:A:136:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD12 16 0.03 (1,591) 1:A:136:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD12 16 0.03 (1,591) 1:A:136:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD13 16 0.03 (1,591) 1:A:136:LEU:HD22 1:A:155:ILE:HD11 16 0.03 (1,591) 1:A:136:LEU:HD22 1:A:155:ILE:HD11 16 0.03 (1,591) 1:A:136:LEU:HD22 1:A:155:ILE:HD11 16 0.03 (1,591) 1:A:136:LEU:HD22 1:A:155:ILE:HD12 16 0.03 (1,591) 1:A:136:LEU:HD23 1:A:155:ILE:HD13 16 0.03 (1,591) 1:A:136:LEU:HD23 1:A:155:ILE:HD11 16 0.03 (1,591) 1:A:136:LEU:HD23 1:A:155:ILE:HD11 16 0.03 (1,591) 1:A:136:LEU:HD23 1:A:155:ILE:HD11 16 0.03 (1,591) 1:A:136:LEU:HD23 1:A:155:ILE:HD11 10 0.03 (1,585) 1:A:133:PHE:HD1 1:A:136:LEU:HD11 20 0.03 (1,585) 1:A:133:PHE:HD1 1:A:136:LEU:HD11 20 0.03 (1,585) 1:A:133:PHE:HD1 1:A:136:LEU:HD12 20 0.03 (1,585) 1:A:133:PHE:HD1 1:A:136:LEU:HD11 20 0.03 (1,585) 1:A:133:PHE:HD2 1:A:136:LEU:HD11 20 0.03 (1,585) 1:A:133:PHE:HD2 1:A:136:LEU:HD12 20 0.03 (1,585) 1:A:133:PHE:HD2 1:A:136:LEU:HD11 20 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD11 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD11 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD11 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD11 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD11 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD22 1:A:155:ILE:HD11 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD11 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD11 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD11 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD22 1:A:155:ILE:HD11 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD11 1 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD22 1:A:155:ILE:HD11 1 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD23 1:A:155:ILE:HD11 1 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD23 1:A:155:ILE:HD11 1 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD11 1 1 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD22 1:A:155:ILE:HD11 1 1 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD11 1 1 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD22 1:A:155:ILE:HD11 1 1 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD11 1 1 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:	(1,62)	1:A:27:VAL:HG13	1:A:123:TRP:HE1	6	0.03
(1,60) 1:A:27:VAL:HG23 1:A:123:TRP:HE1 4 0.03 (1,591) 1:A:136:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD11 16 0.03 (1,591) 1:A:136:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD12 16 0.03 (1,591) 1:A:136:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD13 16 0.03 (1,591) 1:A:136:LEU:HD22 1:A:155:ILE:HD11 16 0.03 (1,591) 1:A:136:LEU:HD22 1:A:155:ILE:HD13 16 0.03 (1,591) 1:A:136:LEU:HD23 1:A:155:ILE:HD13 16 0.03 (1,591) 1:A:136:LEU:HD23 1:A:155:ILE:HD11 16 0.03 (1,591) 1:A:136:LEU:HD23 1:A:155:ILE:HD12 16 0.03 (1,591) 1:A:136:LEU:HD23 1:A:155:ILE:HD12 16 0.03 (1,591) 1:A:136:LEU:HD23 1:A:155:ILE:HD11 16 0.03 (1,591) 1:A:136:LEU:HD23 1:A:155:ILE:HD11 20 0.03 (1,585) 1:A:133:PHE:HD1 1:A:136:LEU:HD11 20 0.03 (1,585) 1	(1,60)	1:A:27:VAL:HG21	1:A:123:TRP:HE1	4	0.03
(1,591) 1:A:136:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD11 16 0.03 (1,591) 1:A:136:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD12 16 0.03 (1,591) 1:A:136:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD13 16 0.03 (1,591) 1:A:136:LEU:HD22 1:A:155:ILE:HD11 16 0.03 (1,591) 1:A:136:LEU:HD22 1:A:155:ILE:HD12 16 0.03 (1,591) 1:A:136:LEU:HD23 1:A:155:ILE:HD13 16 0.03 (1,591) 1:A:136:LEU:HD23 1:A:155:ILE:HD11 16 0.03 (1,591) 1:A:136:LEU:HD23 1:A:155:ILE:HD13 16 0.03 (1,591) 1:A:136:LEU:HD23 1:A:155:ILE:HD13 16 0.03 (1,591) 1:A:136:LEU:HD23 1:A:155:ILE:HD13 16 0.03 (1,591) 1:A:133:PHE:HD1 1:A:136:LEU:HD11 20 0.03 (1,585) 1:A:133:PHE:HD1 1:A:136:LEU:HD12 20 0.03 (1,585) 1:A:133:PHE:HD1 1:A:136:LEU:HD13 20 0.03 (1,585) <th< td=""><td>(1,60)</td><td>1:A:27:VAL:HG22</td><td>1:A:123:TRP:HE1</td><td>4</td><td>0.03</td></th<>	(1,60)	1:A:27:VAL:HG22	1:A:123:TRP:HE1	4	0.03
(1,591) 1:A:136:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD12 16 0.03 (1,591) 1:A:136:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD13 16 0.03 (1,591) 1:A:136:LEU:HD22 1:A:155:ILE:HD11 16 0.03 (1,591) 1:A:136:LEU:HD22 1:A:155:ILE:HD12 16 0.03 (1,591) 1:A:136:LEU:HD22 1:A:155:ILE:HD13 16 0.03 (1,591) 1:A:136:LEU:HD23 1:A:155:ILE:HD11 16 0.03 (1,591) 1:A:136:LEU:HD23 1:A:155:ILE:HD12 16 0.03 (1,591) 1:A:136:LEU:HD23 1:A:155:ILE:HD12 16 0.03 (1,591) 1:A:133:PHE:HD1 1:A:136:LEU:HD13 16 0.03 (1,585) 1:A:133:PHE:HD1 1:A:136:LEU:HD12 20 0.03 (1,585) 1:A:133:PHE:HD1 1:A:136:LEU:HD13 20 0.03 (1,585) 1:A:133:PHE:HD2 1:A:136:LEU:HD11 20 0.03 (1,585) 1:A:133:PHE:HD2 1:A:136:LEU:HD12 20 0.03 (1,585) 1	(1,60)	1:A:27:VAL:HG23	1:A:123:TRP:HE1	4	0.03
(1,591) 1:A:136:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD13 16 0.03 (1,591) 1:A:136:LEU:HD22 1:A:155:ILE:HD11 16 0.03 (1,591) 1:A:136:LEU:HD22 1:A:155:ILE:HD12 16 0.03 (1,591) 1:A:136:LEU:HD22 1:A:155:ILE:HD13 16 0.03 (1,591) 1:A:136:LEU:HD23 1:A:155:ILE:HD11 16 0.03 (1,591) 1:A:136:LEU:HD23 1:A:155:ILE:HD12 16 0.03 (1,591) 1:A:136:LEU:HD23 1:A:155:ILE:HD13 16 0.03 (1,591) 1:A:133:PHE:HD1 1:A:136:LEU:HD11 20 0.03 (1,585) 1:A:133:PHE:HD1 1:A:136:LEU:HD12 20 0.03 (1,585) 1:A:133:PHE:HD1 1:A:136:LEU:HD13 20 0.03 (1,585) 1:A:133:PHE:HD2 1:A:136:LEU:HD12 20 0.03 (1,585) 1:A:133:PHE:HD2 1:A:136:LEU:HD12 20 0.03 (1,585) 1:A:133:PHE:HD2 1:A:136:LEU:HD12 20 0.03 (1,585) 1:	(1,591)	1:A:136:LEU:HD21	1:A:155:ILE:HD11	16	0.03
(1,591) 1:A:136:LEU:HD22 1:A:155:ILE:HD11 16 0.03 (1,591) 1:A:136:LEU:HD22 1:A:155:ILE:HD12 16 0.03 (1,591) 1:A:136:LEU:HD22 1:A:155:ILE:HD13 16 0.03 (1,591) 1:A:136:LEU:HD23 1:A:155:ILE:HD11 16 0.03 (1,591) 1:A:136:LEU:HD23 1:A:155:ILE:HD12 16 0.03 (1,591) 1:A:136:LEU:HD23 1:A:155:ILE:HD13 16 0.03 (1,591) 1:A:136:LEU:HD23 1:A:155:ILE:HD11 20 0.03 (1,585) 1:A:133:PHE:HD1 1:A:136:LEU:HD11 20 0.03 (1,585) 1:A:133:PHE:HD1 1:A:136:LEU:HD13 20 0.03 (1,585) 1:A:133:PHE:HD2 1:A:136:LEU:HD11 20 0.03 (1,585) 1:A:133:PHE:HD2 1:A:136:LEU:HD12 20 0.03 (1,585) 1:A:133:PHE:HD2 1:A:136:LEU:HD12 20 0.03 (1,585) 1:A:133:PHE:HD2 1:A:136:LEU:HD12 20 0.03 (1,587) 1:	(1,591)	1:A:136:LEU:HD21	1:A:155:ILE:HD12	16	0.03
(1,591) 1:A:136:LEU:HD22 1:A:155:ILE:HD12 16 0.03 (1,591) 1:A:136:LEU:HD22 1:A:155:ILE:HD13 16 0.03 (1,591) 1:A:136:LEU:HD23 1:A:155:ILE:HD11 16 0.03 (1,591) 1:A:136:LEU:HD23 1:A:155:ILE:HD12 16 0.03 (1,591) 1:A:136:LEU:HD23 1:A:155:ILE:HD13 16 0.03 (1,585) 1:A:133:PHE:HD1 1:A:136:LEU:HD11 20 0.03 (1,585) 1:A:133:PHE:HD1 1:A:136:LEU:HD12 20 0.03 (1,585) 1:A:133:PHE:HD1 1:A:136:LEU:HD13 20 0.03 (1,585) 1:A:133:PHE:HD2 1:A:136:LEU:HD11 20 0.03 (1,585) 1:A:133:PHE:HD2 1:A:136:LEU:HD12 20 0.03 (1,585) 1:A:133:PHE:HD2 1:A:136:LEU:HD12 20 0.03 (1,585) 1:A:133:PHE:HD2 1:A:136:LEU:HD12 20 0.03 (1,587) 1:A:138:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD13 20 0.03 (1,577) 1:A	(1,591)	1:A:136:LEU:HD21	1:A:155:ILE:HD13	16	0.03
(1,591) 1:A:136:LEU:HD22 1:A:155:ILE:HD13 16 0.03 (1,591) 1:A:136:LEU:HD23 1:A:155:ILE:HD11 16 0.03 (1,591) 1:A:136:LEU:HD23 1:A:155:ILE:HD12 16 0.03 (1,591) 1:A:136:LEU:HD23 1:A:155:ILE:HD13 16 0.03 (1,585) 1:A:133:PHE:HD1 1:A:136:LEU:HD11 20 0.03 (1,585) 1:A:133:PHE:HD1 1:A:136:LEU:HD12 20 0.03 (1,585) 1:A:133:PHE:HD2 1:A:136:LEU:HD13 20 0.03 (1,585) 1:A:133:PHE:HD2 1:A:136:LEU:HD11 20 0.03 (1,585) 1:A:133:PHE:HD2 1:A:136:LEU:HD12 20 0.03 (1,585) 1:A:133:PHE:HD2 1:A:136:LEU:HD12 20 0.03 (1,585) 1:A:133:PHE:HD2 1:A:155:ILE:HD11 20 0.03 (1,585) 1:A:133:PHE:HD2 1:A:155:ILE:HD13 20 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD11 4 0.03 (1,577) 1:A:1	(1,591)	1:A:136:LEU:HD22	1:A:155:ILE:HD11	16	0.03
(1,591) 1:A:136:LEU:HD23 1:A:155:ILE:HD11 16 0.03 (1,591) 1:A:136:LEU:HD23 1:A:155:ILE:HD12 16 0.03 (1,591) 1:A:136:LEU:HD23 1:A:155:ILE:HD13 16 0.03 (1,585) 1:A:133:PHE:HD1 1:A:136:LEU:HD11 20 0.03 (1,585) 1:A:133:PHE:HD1 1:A:136:LEU:HD12 20 0.03 (1,585) 1:A:133:PHE:HD2 1:A:136:LEU:HD13 20 0.03 (1,585) 1:A:133:PHE:HD2 1:A:136:LEU:HD11 20 0.03 (1,585) 1:A:133:PHE:HD2 1:A:136:LEU:HD12 20 0.03 (1,585) 1:A:133:PHE:HD2 1:A:136:LEU:HD12 20 0.03 (1,585) 1:A:133:PHE:HD2 1:A:155:ILE:HD12 20 0.03 (1,585) 1:A:133:PHE:HD2 1:A:155:ILE:HD13 20 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD12 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD22 1:A:155:ILE:HD13 4 0.03 (1,577) 1:A:12	(1,591)	1:A:136:LEU:HD22	1:A:155:ILE:HD12	16	0.03
(1,591) 1:A:136:LEU:HD23 1:A:155:ILE:HD12 16 0.03 (1,591) 1:A:136:LEU:HD23 1:A:155:ILE:HD13 16 0.03 (1,585) 1:A:133:PHE:HD1 1:A:136:LEU:HD11 20 0.03 (1,585) 1:A:133:PHE:HD1 1:A:136:LEU:HD12 20 0.03 (1,585) 1:A:133:PHE:HD1 1:A:136:LEU:HD13 20 0.03 (1,585) 1:A:133:PHE:HD2 1:A:136:LEU:HD11 20 0.03 (1,585) 1:A:133:PHE:HD2 1:A:136:LEU:HD12 20 0.03 (1,585) 1:A:133:PHE:HD2 1:A:136:LEU:HD12 20 0.03 (1,585) 1:A:133:PHE:HD2 1:A:136:LEU:HD12 20 0.03 (1,587) 1:A:128:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD11 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD12 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD22 1:A:155:ILE:HD11 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD23 1:A:155:ILE:HD11 4 0.03 (1,577) 1:A:128	(1,591)	1:A:136:LEU:HD22	1:A:155:ILE:HD13	16	0.03
(1,591) 1:A:136:LEU:HD23 1:A:155:ILE:HD13 16 0.03 (1,585) 1:A:133:PHE:HD1 1:A:136:LEU:HD11 20 0.03 (1,585) 1:A:133:PHE:HD1 1:A:136:LEU:HD12 20 0.03 (1,585) 1:A:133:PHE:HD1 1:A:136:LEU:HD13 20 0.03 (1,585) 1:A:133:PHE:HD2 1:A:136:LEU:HD11 20 0.03 (1,585) 1:A:133:PHE:HD2 1:A:136:LEU:HD12 20 0.03 (1,585) 1:A:133:PHE:HD2 1:A:136:LEU:HD12 20 0.03 (1,585) 1:A:133:PHE:HD2 1:A:136:LEU:HD12 20 0.03 (1,585) 1:A:133:PHE:HD2 1:A:136:LEU:HD13 20 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD11 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD13 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD22 1:A:155:ILE:HD11 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD22 1:A:155:ILE:HD12 4 0.03 (1,577) 1:A:128:	(1,591)	1:A:136:LEU:HD23	1:A:155:ILE:HD11	16	0.03
(1,585) 1:A:133:PHE:HD1 1:A:136:LEU:HD11 20 0.03 (1,585) 1:A:133:PHE:HD1 1:A:136:LEU:HD12 20 0.03 (1,585) 1:A:133:PHE:HD1 1:A:136:LEU:HD13 20 0.03 (1,585) 1:A:133:PHE:HD2 1:A:136:LEU:HD11 20 0.03 (1,585) 1:A:133:PHE:HD2 1:A:136:LEU:HD12 20 0.03 (1,585) 1:A:133:PHE:HD2 1:A:136:LEU:HD13 20 0.03 (1,585) 1:A:138:LEU:HD21 1:A:136:LEU:HD13 20 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD11 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD13 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD22 1:A:155:ILE:HD11 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD22 1:A:155:ILE:HD13 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD23 1:A:155:ILE:HD11 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD23 1:A:155:ILE:HD11 4 0.03 (1,577) 1:A:128:	(1,591)	1:A:136:LEU:HD23	1:A:155:ILE:HD12	16	0.03
(1,585) 1:A:133:PHE:HD1 1:A:136:LEU:HD12 20 0.03 (1,585) 1:A:133:PHE:HD1 1:A:136:LEU:HD13 20 0.03 (1,585) 1:A:133:PHE:HD2 1:A:136:LEU:HD11 20 0.03 (1,585) 1:A:133:PHE:HD2 1:A:136:LEU:HD12 20 0.03 (1,585) 1:A:133:PHE:HD2 1:A:136:LEU:HD13 20 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD11 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD12 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD22 1:A:155:ILE:HD13 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD22 1:A:155:ILE:HD12 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD22 1:A:155:ILE:HD13 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD23 1:A:155:ILE:HD11 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD23 1:A:155:ILE:HD13 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD23 1:A:155:ILE:HD11 1 0.03 (1,577) 1:A:128:L	(1,591)	1:A:136:LEU:HD23	1:A:155:ILE:HD13	16	0.03
(1,585) 1:A:133:PHE:HD1 1:A:136:LEU:HD13 20 0.03 (1,585) 1:A:133:PHE:HD2 1:A:136:LEU:HD11 20 0.03 (1,585) 1:A:133:PHE:HD2 1:A:136:LEU:HD12 20 0.03 (1,585) 1:A:133:PHE:HD2 1:A:136:LEU:HD13 20 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD11 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD12 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD13 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD22 1:A:155:ILE:HD12 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD22 1:A:155:ILE:HD12 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD23 1:A:155:ILE:HD13 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD23 1:A:155:ILE:HD11 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD23 1:A:155:ILE:HD11 1 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD11 1 0.03 (1,577) 1:A:128:L	(1,585)	1:A:133:PHE:HD1	1:A:136:LEU:HD11	20	0.03
(1,585) 1:A:133:PHE:HD2 1:A:136:LEU:HD11 20 0.03 (1,585) 1:A:133:PHE:HD2 1:A:136:LEU:HD12 20 0.03 (1,585) 1:A:133:PHE:HD2 1:A:136:LEU:HD13 20 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD11 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD12 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD13 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD22 1:A:155:ILE:HD11 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD22 1:A:155:ILE:HD12 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD23 1:A:155:ILE:HD13 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD23 1:A:155:ILE:HD12 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD23 1:A:155:ILE:HD13 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD11 11 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD13 11 0.03 (1,577) 1:A:128	(1,585)	1:A:133:PHE:HD1	1:A:136:LEU:HD12	20	0.03
(1,585) 1:A:133:PHE:HD2 1:A:136:LEU:HD12 20 0.03 (1,585) 1:A:133:PHE:HD2 1:A:136:LEU:HD13 20 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD11 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD12 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD13 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD22 1:A:155:ILE:HD11 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD22 1:A:155:ILE:HD12 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD23 1:A:155:ILE:HD13 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD23 1:A:155:ILE:HD11 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD23 1:A:155:ILE:HD13 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD11 11 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD12 11 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD22 1:A:155:ILE:HD11 11 0.03 (1,577) 1:A:12	(1,585)	1:A:133:PHE:HD1	1:A:136:LEU:HD13	20	0.03
(1,585) 1:A:133:PHE:HD2 1:A:136:LEU:HD13 20 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD11 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD12 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD13 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD22 1:A:155:ILE:HD11 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD22 1:A:155:ILE:HD12 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD23 1:A:155:ILE:HD13 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD23 1:A:155:ILE:HD11 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD23 1:A:155:ILE:HD12 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD23 1:A:155:ILE:HD13 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD11 11 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD13 11 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD22 1:A:155:ILE:HD11 11 0.03 (1,577) 1:A:12	(1,585)	1:A:133:PHE:HD2	1:A:136:LEU:HD11	20	0.03
(1,577) 1:A:128:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD11 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD12 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD13 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD22 1:A:155:ILE:HD11 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD22 1:A:155:ILE:HD12 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD22 1:A:155:ILE:HD13 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD23 1:A:155:ILE:HD11 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD23 1:A:155:ILE:HD12 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD23 1:A:155:ILE:HD13 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD11 11 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD13 11 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD22 1:A:155:ILE:HD11 11 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD22 1:A:155:ILE:HD11 11 0.03 (1,577) 1:A:1	(1,585)	1:A:133:PHE:HD2	1:A:136:LEU:HD12	20	0.03
(1,577) 1:A:128:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD12 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD13 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD22 1:A:155:ILE:HD11 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD22 1:A:155:ILE:HD12 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD22 1:A:155:ILE:HD13 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD23 1:A:155:ILE:HD11 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD23 1:A:155:ILE:HD12 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD23 1:A:155:ILE:HD13 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD11 11 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD13 11 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD22 1:A:155:ILE:HD11 11 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD22 1:A:155:ILE:HD11 11 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD22 1:A:155:ILE:HD12 11 0.03	(1,585)	1:A:133:PHE:HD2	1:A:136:LEU:HD13	20	0.03
(1,577) 1:A:128:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD13 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD22 1:A:155:ILE:HD11 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD22 1:A:155:ILE:HD12 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD22 1:A:155:ILE:HD13 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD23 1:A:155:ILE:HD11 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD23 1:A:155:ILE:HD12 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD23 1:A:155:ILE:HD13 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD11 11 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD12 11 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD13 11 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD22 1:A:155:ILE:HD11 11 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD22 1:A:155:ILE:HD11 11 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD22 1:A:155:ILE:HD12 11 0.03	(1,577)	1:A:128:LEU:HD21	1:A:155:ILE:HD11	4	0.03
(1,577) 1:A:128:LEU:HD22 1:A:155:ILE:HD11 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD22 1:A:155:ILE:HD12 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD22 1:A:155:ILE:HD13 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD23 1:A:155:ILE:HD11 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD23 1:A:155:ILE:HD12 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD23 1:A:155:ILE:HD13 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD11 11 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD12 11 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD22 1:A:155:ILE:HD11 11 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD22 1:A:155:ILE:HD11 11 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD22 1:A:155:ILE:HD12 11 0.03	(1,577)	1:A:128:LEU:HD21	1:A:155:ILE:HD12	4	0.03
(1,577) 1:A:128:LEU:HD22 1:A:155:ILE:HD12 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD22 1:A:155:ILE:HD13 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD23 1:A:155:ILE:HD11 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD23 1:A:155:ILE:HD12 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD23 1:A:155:ILE:HD13 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD11 11 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD12 11 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD13 11 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD22 1:A:155:ILE:HD11 11 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD22 1:A:155:ILE:HD11 11 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD22 1:A:155:ILE:HD12 11 0.03	(1,577)	1:A:128:LEU:HD21	1:A:155:ILE:HD13	4	0.03
(1,577) 1:A:128:LEU:HD22 1:A:155:ILE:HD13 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD23 1:A:155:ILE:HD11 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD23 1:A:155:ILE:HD12 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD23 1:A:155:ILE:HD13 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD11 11 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD12 11 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD13 11 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD22 1:A:155:ILE:HD11 11 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD22 1:A:155:ILE:HD12 11 0.03	(1,577)	1:A:128:LEU:HD22	1:A:155:ILE:HD11	4	0.03
(1,577) 1:A:128:LEU:HD23 1:A:155:ILE:HD11 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD23 1:A:155:ILE:HD12 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD23 1:A:155:ILE:HD13 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD11 11 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD12 11 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD13 11 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD22 1:A:155:ILE:HD11 11 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD22 1:A:155:ILE:HD12 11 0.03	(1,577)	1:A:128:LEU:HD22	1:A:155:ILE:HD12	4	0.03
(1,577) 1:A:128:LEU:HD23 1:A:155:ILE:HD12 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD23 1:A:155:ILE:HD13 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD11 11 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD12 11 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD13 11 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD22 1:A:155:ILE:HD11 11 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD22 1:A:155:ILE:HD12 11 0.03	(1,577)	1:A:128:LEU:HD22	1:A:155:ILE:HD13	4	0.03
(1,577) 1:A:128:LEU:HD23 1:A:155:ILE:HD13 4 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD11 11 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD12 11 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD13 11 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD22 1:A:155:ILE:HD11 11 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD22 1:A:155:ILE:HD12 11 0.03	(1,577)	1:A:128:LEU:HD23	1:A:155:ILE:HD11	4	0.03
(1,577) 1:A:128:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD11 11 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD12 11 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD13 11 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD22 1:A:155:ILE:HD11 11 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD22 1:A:155:ILE:HD12 11 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD22 1:A:155:ILE:HD12 11 0.03	(1,577)	1:A:128:LEU:HD23	1:A:155:ILE:HD12	4	0.03
(1,577) 1:A:128:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD12 11 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD13 11 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD22 1:A:155:ILE:HD11 11 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD22 1:A:155:ILE:HD12 11 0.03	(1,577)	1:A:128:LEU:HD23	1:A:155:ILE:HD13	4	0.03
(1,577) 1:A:128:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD13 11 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD22 1:A:155:ILE:HD11 11 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD22 1:A:155:ILE:HD12 11 0.03	(1,577)	1:A:128:LEU:HD21	1:A:155:ILE:HD11	11	0.03
(1,577) 1:A:128:LEU:HD22 1:A:155:ILE:HD11 11 0.03 (1,577) 1:A:128:LEU:HD22 1:A:155:ILE:HD12 11 0.03	(1,577)	1:A:128:LEU:HD21	1:A:155:ILE:HD12	11	0.03
(1,577) 1:A:128:LEU:HD22 1:A:155:ILE:HD12 11 0.03	(1,577)	1:A:128:LEU:HD21	1:A:155:ILE:HD13	11	0.03
	_ `	1:A:128:LEU:HD22	1:A:155:ILE:HD11	11	0.03
	(1,577)	1:A:128:LEU:HD22	1:A:155:ILE:HD12	11	0.03
	 	1:A:128:LEU:HD22	1:A:155:ILE:HD13	11	0.03
(1,577) 1:A:128:LEU:HD23 1:A:155:ILE:HD11 11 0.03		1:A:128:LEU:HD23	1:A:155:ILE:HD11	11	0.03
(1,577) 1:A:128:LEU:HD23 1:A:155:ILE:HD12 11 0.03	(1,577)	1:A:128:LEU:HD23	1:A:155:ILE:HD12	11	0.03
(1,577) 1:A:128:LEU:HD23 1:A:155:ILE:HD13 11 0.03	(1,577)	1:A:128:LEU:HD23	1:A:155:ILE:HD13	11	0.03
(1,577) 1:A:128:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD11 12 0.03	(1,577)	1:A:128:LEU:HD21	1:A:155:ILE:HD11	12	0.03
(1,577) 1:A:128:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD12 12 0.03	(1,577)	1:A:128:LEU:HD21	1:A:155:ILE:HD12	12	0.03
(1,577) 1:A:128:LEU:HD21 1:A:155:ILE:HD13 12 0.03	(1,577)	1:A:128:LEU:HD21	1:A:155:ILE:HD13	12	0.03



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,577)	1:A:128:LEU:HD22	1:A:155:ILE:HD11	12	0.03
(1,577)	1:A:128:LEU:HD22	1:A:155:ILE:HD12	12	0.03
(1,577)	1:A:128:LEU:HD22	1:A:155:ILE:HD13	12	0.03
(1,577)	1:A:128:LEU:HD23	1:A:155:ILE:HD11	12	0.03
(1,577)	1:A:128:LEU:HD23	1:A:155:ILE:HD12	12	0.03
(1,577)	1:A:128:LEU:HD23	1:A:155:ILE:HD13	12	0.03
(1,576)	1:A:128:LEU:HD11	1:A:155:ILE:HD11	4	0.03
(1,576)	1:A:128:LEU:HD11	1:A:155:ILE:HD12	4	0.03
(1,576)	1:A:128:LEU:HD11	1:A:155:ILE:HD13	4	0.03
(1,576)	1:A:128:LEU:HD12	1:A:155:ILE:HD11	4	0.03
(1,576)	1:A:128:LEU:HD12	1:A:155:ILE:HD12	4	0.03
(1,576)	1:A:128:LEU:HD12	1:A:155:ILE:HD13	4	0.03
(1,576)	1:A:128:LEU:HD13	1:A:155:ILE:HD11	4	0.03
(1,576)	1:A:128:LEU:HD13	1:A:155:ILE:HD12	4	0.03
(1,576)	1:A:128:LEU:HD13	1:A:155:ILE:HD13	4	0.03
(1,574)	1:A:30:PHE:HD1	1:A:70:ILE:HD11	6	0.03
(1,574)	1:A:30:PHE:HD1	1:A:70:ILE:HD12	6	0.03
(1,574)	1:A:30:PHE:HD1	1:A:70:ILE:HD13	6	0.03
(1,574)	1:A:30:PHE:HD2	1:A:70:ILE:HD11	6	0.03
(1,574)	1:A:30:PHE:HD2	1:A:70:ILE:HD12	6	0.03
(1,574)	1:A:30:PHE:HD2	1:A:70:ILE:HD13	6	0.03
(1,560)	1:A:171:LEU:HD11	1:A:176:ILE:HD11	5	0.03
(1,560)	1:A:171:LEU:HD11	1:A:176:ILE:HD12	5	0.03
(1,560)	1:A:171:LEU:HD11	1:A:176:ILE:HD13	5	0.03
(1,560)	1:A:171:LEU:HD12	1:A:176:ILE:HD11	5	0.03
(1,560)	1:A:171:LEU:HD12	1:A:176:ILE:HD12	5	0.03
(1,560)	1:A:171:LEU:HD12	1:A:176:ILE:HD13	5	0.03
(1,560)	1:A:171:LEU:HD13	1:A:176:ILE:HD11	5	0.03
(1,560)	1:A:171:LEU:HD13	1:A:176:ILE:HD12	5	0.03
(1,560)	1:A:171:LEU:HD13	1:A:176:ILE:HD13	5	0.03
(1,554)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:128:LEU:HD11	18	0.03
(1,554)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:128:LEU:HD12	18	0.03
(1,554)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:128:LEU:HD13	18	0.03
(1,554)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:128:LEU:HD11	18	0.03
(1,554)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:128:LEU:HD12	18	0.03
(1,554)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:128:LEU:HD13	18	0.03
(1,554)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:128:LEU:HD11	18	0.03
(1,554)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:128:LEU:HD12	18	0.03
(1,554)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:128:LEU:HD13	18	0.03
(1,542)	1:A:35:VAL:HG21	1:A:72:LEU:HD11	13	0.03
(1,542)	1:A:35:VAL:HG21	1:A:72:LEU:HD12	13	0.03
(1,542)	1:A:35:VAL:HG21	1:A:72:LEU:HD13	13	0.03



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,542)	1:A:35:VAL:HG22	1:A:72:LEU:HD11	13	0.03
(1,542)	1:A:35:VAL:HG22	1:A:72:LEU:HD12	13	0.03
(1,542)	1:A:35:VAL:HG22	1:A:72:LEU:HD13	13	0.03
(1,542)	1:A:35:VAL:HG23	1:A:72:LEU:HD11	13	0.03
(1,542)	1:A:35:VAL:HG23	1:A:72:LEU:HD12	13	0.03
(1,542)	1:A:35:VAL:HG23	1:A:72:LEU:HD13	13	0.03
(1,532)	1:A:99:VAL:HG11	1:A:172:VAL:HG11	3	0.03
(1,532)	1:A:99:VAL:HG11	1:A:172:VAL:HG12	3	0.03
(1,532)	1:A:99:VAL:HG11	1:A:172:VAL:HG13	3	0.03
(1,532)	1:A:99:VAL:HG12	1:A:172:VAL:HG11	3	0.03
(1,532)	1:A:99:VAL:HG12	1:A:172:VAL:HG12	3	0.03
(1,532)	1:A:99:VAL:HG12	1:A:172:VAL:HG13	3	0.03
(1,532)	1:A:99:VAL:HG13	1:A:172:VAL:HG11	3	0.03
(1,532)	1:A:99:VAL:HG13	1:A:172:VAL:HG12	3	0.03
(1,532)	1:A:99:VAL:HG13	1:A:172:VAL:HG13	3	0.03
(1,500)	1:A:138:PHE:HD1	1:A:153:VAL:HG21	6	0.03
(1,500)	1:A:138:PHE:HD1	1:A:153:VAL:HG22	6	0.03
(1,500)	1:A:138:PHE:HD1	1:A:153:VAL:HG23	6	0.03
(1,500)	1:A:138:PHE:HD2	1:A:153:VAL:HG21	6	0.03
(1,500)	1:A:138:PHE:HD2	1:A:153:VAL:HG22	6	0.03
(1,500)	1:A:138:PHE:HD2	1:A:153:VAL:HG23	6	0.03
(1,484)	1:A:116:PHE:HE1	1:A:175:ALA:H	16	0.03
(1,441)	1:A:146:GLU:H	1:A:148:ALA:H	6	0.03
(1,439)	1:A:140:ILE:HD11	1:A:144:ALA:H	16	0.03
(1,439)	1:A:140:ILE:HD12	1:A:144:ALA:H	16	0.03
(1,439)	1:A:140:ILE:HD13	1:A:144:ALA:H	16	0.03
(1,43)	1:A:82:TYR:H	1:A:82:TYR:HD1	15	0.03
(1,415)	1:A:131:ASP:H	1:A:134:LYS:H	2	0.03
(1,415)	1:A:131:ASP:H	1:A:134:LYS:H	13	0.03
(1,391)	1:A:23:VAL:HG11	1:A:26:LEU:H	14	0.03
(1,391)	1:A:23:VAL:HG12	1:A:26:LEU:H	14	0.03
(1,391)	1:A:23:VAL:HG13	1:A:26:LEU:H	14	0.03
(1,389)	1:A:172:VAL:HG21	1:A:174:GLU:H	1	0.03
(1,389)	1:A:172:VAL:HG22	1:A:174:GLU:H	1	0.03
(1,389)	1:A:172:VAL:HG23	1:A:174:GLU:H	1	0.03
(1,389)	1:A:172:VAL:HG21	1:A:174:GLU:H	7	0.03
(1,389)	1:A:172:VAL:HG22	1:A:174:GLU:H	7	0.03
(1,389)	1:A:172:VAL:HG23	1:A:174:GLU:H	7	0.03
(1,389)	1:A:172:VAL:HG21	1:A:174:GLU:H	11	0.03
(1,389)	1:A:172:VAL:HG22	1:A:174:GLU:H	11	0.03
(1,389)	1:A:172:VAL:HG23	1:A:174:GLU:H	11	0.03
(1,388)	1:A:116:PHE:HD1	1:A:174:GLU:H	16	0.03



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,388)	1:A:116:PHE:HD2	1:A:174:GLU:H	16	0.03
(1,360)	1:A:161:VAL:H	1:A:164:THR:H	16	0.03
(1,341)	1:A:95:PHE:HD1	1:A:98:ASN:H	10	0.03
(1,341)	1:A:95:PHE:HD2	1:A:98:ASN:H	10	0.03
(1,288)	1:A:2:LEU:HD11	1:A:3:ILE:H	9	0.03
(1,288)	1:A:2:LEU:HD12	1:A:3:ILE:H	9	0.03
(1,288)	1:A:2:LEU:HD13	1:A:3:ILE:H	9	0.03
(1,288)	1:A:2:LEU:HD11	1:A:3:ILE:H	11	0.03
(1,288)	1:A:2:LEU:HD12	1:A:3:ILE:H	11	0.03
(1,288)	1:A:2:LEU:HD13	1:A:3:ILE:H	11	0.03
(1,281)	1:A:93:LYS:H	1:A:95:PHE:H	8	0.03
(1,265)	1:A:70:ILE:H	1:A:72:LEU:HD11	2	0.03
(1,265)	1:A:70:ILE:H	1:A:72:LEU:HD12	2	0.03
(1,265)	1:A:70:ILE:H	1:A:72:LEU:HD13	2	0.03
(1,265)	1:A:70:ILE:H	1:A:72:LEU:HD11	15	0.03
(1,265)	1:A:70:ILE:H	1:A:72:LEU:HD12	15	0.03
(1,265)	1:A:70:ILE:H	1:A:72:LEU:HD13	15	0.03
(1,252)	1:A:68:ILE:H	1:A:72:LEU:HD21	1	0.03
(1,252)	1:A:68:ILE:H	1:A:72:LEU:HD22	1	0.03
(1,252)	1:A:68:ILE:H	1:A:72:LEU:HD23	1	0.03
(1,252)	1:A:68:ILE:H	1:A:72:LEU:HD21	9	0.03
(1,252)	1:A:68:ILE:H	1:A:72:LEU:HD22	9	0.03
(1,252)	1:A:68:ILE:H	1:A:72:LEU:HD23	9	0.03
(1,240)	1:A:65:GLU:H	1:A:66:ARG:H	1	0.03
(1,240)	1:A:65:GLU:H	1:A:66:ARG:H	4	0.03
(1,240)	1:A:65:GLU:H	1:A:66:ARG:H	13	0.03
(1,233)	1:A:145:ALA:H	1:A:147:GLY:H	14	0.03
(1,225)	1:A:95:PHE:HD1	1:A:99:VAL:H	13	0.03
(1,225)	1:A:95:PHE:HD2	1:A:99:VAL:H	13	0.03
(1,224)	1:A:6:ASP:H	1:A:13:LEU:HD21	10	0.03
(1,224)	1:A:6:ASP:H	1:A:13:LEU:HD22	10	0.03
(1,224)	1:A:6:ASP:H	1:A:13:LEU:HD23	10	0.03
(1,222)	1:A:109:ASP:H	1:A:113:VAL:HG21	2	0.03
(1,222)	1:A:109:ASP:H	1:A:113:VAL:HG22	2	0.03
(1,222)	1:A:109:ASP:H	1:A:113:VAL:HG23	2	0.03
(1,220)	1:A:109:ASP:H	1:A:113:VAL:H	13	0.03
(1,215)	1:A:21:LYS:H	1:A:28:TYR:HD1	10	0.03
(1,191)	1:A:64:VAL:HG11	1:A:65:GLU:H	12	0.03
(1,191)	1:A:64:VAL:HG12	1:A:65:GLU:H	12	0.03
(1,191)	1:A:64:VAL:HG13	1:A:65:GLU:H	12	0.03
(1,160)	1:A:44:LEU:H	1:A:44:LEU:HD11	16	0.03
(1,160)	1:A:44:LEU:H	1:A:44:LEU:HD12	16	0.03
	l	I		d on nort nago



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

(1.160)	Atom-1	$\bf Atom \hbox{-} 2$	Model	Violation (Å)
(1,160)	1:A:44:LEU:H	1:A:44:LEU:HD13	16	0.03
(1,148)	1:A:71:VAL:HG11	1:A:78:GLU:H	20	0.03
(1,148)	1:A:71:VAL:HG12	1:A:78:GLU:H	20	0.03
(1,148)	1:A:71:VAL:HG13	1:A:78:GLU:H	20	0.03
(1,146)	1:A:78:GLU:H	1:A:139:PHE:HZ	6	0.03
(1,146)	1:A:78:GLU:H	1:A:139:PHE:HZ	12	0.03
(1,146)	1:A:78:GLU:H	1:A:139:PHE:HZ	19	0.03
(1,146)	1:A:78:GLU:H	1:A:139:PHE:HZ	20	0.03
(1,135)	1:A:23:VAL:H	1:A:26:LEU:H	11	0.03
(1,118)	1:A:71:VAL:HG11	1:A:74:HIS:H	3	0.03
(1,118)	1:A:71:VAL:HG12	1:A:74:HIS:H	3	0.03
(1,118)	1:A:71:VAL:HG13	1:A:74:HIS:H	3	0.03
(1,118)	1:A:71:VAL:HG11	1:A:74:HIS:H	4	0.03
(1,118)	1:A:71:VAL:HG12	1:A:74:HIS:H	4	0.03
(1,118)	1:A:71:VAL:HG13	1:A:74:HIS:H	4	0.03
(1,1129)	1:A:122:GLY:O	1:A:126:SER:H	5	0.03
(1,1129)	1:A:122:GLY:O	1:A:126:SER:H	8	0.03
(1,1115)	1:A:115:ALA:O	1:A:119:LYS:H	2	0.03
(1,1105)	1:A:99:VAL:O	1:A:103:MET:H	3	0.03
(1,1105)	1:A:99:VAL:O	1:A:103:MET:H	5	0.03
(1,1100)	1:A:96:MET:O	1:A:100:ILE:N	8	0.03
(1,1099)	1:A:96:MET:O	1:A:100:ILE:H	1	0.03
(1,1099)	1:A:96:MET:O	1:A:100:ILE:H	7	0.03
(1,1099)	1:A:96:MET:O	1:A:100:ILE:H	17	0.03
(1,1093)	1:A:93:LYS:O	1:A:97:LYS:H	2	0.03
(1,1093)	1:A:93:LYS:O	1:A:97:LYS:H	5	0.03
(1,1093)	1:A:93:LYS:O	1:A:97:LYS:H	11	0.03
(1,108)	1:A:15:SER:H	1:A:18:PHE:HD1	8	0.03
(1,108)	1:A:15:SER:H	1:A:18:PHE:HD2	8	0.03
(1,1079)	1:A:86:SER:O	1:A:90:ALA:H	15	0.03
(1,1079)	1:A:86:SER:O	1:A:90:ALA:H	18	0.03
(1,1079)	1:A:86:SER:O	1:A:90:ALA:H	19	0.03
(1,1077)	1:A:85:ALA:O	1:A:89:LYS:H	6	0.03
(1,1077)	1:A:85:ALA:O	1:A:89:LYS:H	9	0.03
(1,1077)	1:A:85:ALA:O	1:A:89:LYS:H	15	0.03
(1,1073)	1:A:37:ARG:O	1:A:65:GLU:H	20	0.03
(1,1069)	1:A:35:VAL:O	1:A:67:GLY:H	4	0.03
(1,1051)	1:A:159:ARG:O	1:A:166:VAL:H	10	0.03
(1,1049)	1:A:157:GLU:H	1:A:168:THR:O	3	0.03
(1,1046)	1:A:155:ILE:N	1:A:170:MET:O	11	0.03
(1,1045)	1:A:155:ILE:H	1:A:170:MET:O	18	0.03
(1,1037)	1:A:137:ALA:H	1:A:156:ILE:O	9	0.03



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1037)	1:A:137:ALA:H	1:A:156:ILE:O	15	0.03
(1,1035)	1:A:137:ALA:O	1:A:156:ILE:H	4	0.03
(1,1031)	1:A:79:MET:O	1:A:138:PHE:H	9	0.03
(1,1031)	1:A:79:MET:O	1:A:138:PHE:H	16	0.03
(1,1027)	1:A:77:VAL:O	1:A:140:ILE:H	6	0.03
(1,1027)	1:A:77:VAL:O	1:A:140:ILE:H	14	0.03
(1,1019)	1:A:3:ILE:O	1:A:179:GLU:H	18	0.03
(1,1015)	1:A:4:TYR:O	1:A:14:SER:H	7	0.03
(1,1015)	1:A:4:TYR:O	1:A:14:SER:H	10	0.03
(1,1015)	1:A:4:TYR:O	1:A:14:SER:H	14	0.03
(1,1015)	1:A:4:TYR:O	1:A:14:SER:H	19	0.03
(1,1013)	1:A:2:LEU:H	1:A:16:ASP:O	9	0.03
(1,1013)	1:A:2:LEU:H	1:A:16:ASP:O	13	0.03
(1,1013)	1:A:2:LEU:H	1:A:16:ASP:O	15	0.03
(1,1011)	1:A:2:LEU:O	1:A:16:ASP:H	9	0.03
(1,1011)	1:A:2:LEU:O	1:A:16:ASP:H	11	0.03
(1,1011)	1:A:2:LEU:O	1:A:16:ASP:H	20	0.03
(1,100)	1:A:58:ASP:H	1:A:59:GLY:H	2	0.03
(1,999)	1:A:120:ILE:HD11	1:A:172:VAL:HG21	11	0.02
(1,999)	1:A:120:ILE:HD11	1:A:172:VAL:HG22	11	0.02
(1,999)	1:A:120:ILE:HD11	1:A:172:VAL:HG23	11	0.02
(1,999)	1:A:120:ILE:HD12	1:A:172:VAL:HG21	11	0.02
(1,999)	1:A:120:ILE:HD12	1:A:172:VAL:HG22	11	0.02
(1,999)	1:A:120:ILE:HD12	1:A:172:VAL:HG23	11	0.02
(1,999)	1:A:120:ILE:HD13	1:A:172:VAL:HG21	11	0.02
(1,999)	1:A:120:ILE:HD13	1:A:172:VAL:HG22	11	0.02
(1,999)	1:A:120:ILE:HD13	1:A:172:VAL:HG23	11	0.02
(1,998)	1:A:68:ILE:HD11	1:A:156:ILE:HD11	15	0.02
(1,998)	1:A:68:ILE:HD11	1:A:156:ILE:HD12	15	0.02
(1,998)	1:A:68:ILE:HD11	1:A:156:ILE:HD13	15	0.02
(1,998)	1:A:68:ILE:HD12	1:A:156:ILE:HD11	15	0.02
(1,998)	1:A:68:ILE:HD12	1:A:156:ILE:HD12	15	0.02
(1,998)	1:A:68:ILE:HD12	1:A:156:ILE:HD13	15	0.02
(1,998)	1:A:68:ILE:HD13	1:A:156:ILE:HD11	15	0.02
(1,998)	1:A:68:ILE:HD13	1:A:156:ILE:HD12	15	0.02
(1,998)	1:A:68:ILE:HD13	1:A:156:ILE:HD13	15	0.02
(1,996)	1:A:35:VAL:HG21	1:A:72:LEU:HD11	6	0.02
(1,996)	1:A:35:VAL:HG21	1:A:72:LEU:HD12	6	0.02
(1,996)	1:A:35:VAL:HG21	1:A:72:LEU:HD13	6	0.02
(1,996)	1:A:35:VAL:HG22	1:A:72:LEU:HD11	6	0.02
(1,996)	1:A:35:VAL:HG22	1:A:72:LEU:HD12	6	0.02
(1,996)	1:A:35:VAL:HG22	1:A:72:LEU:HD13	6	0.02



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

(1,996) 1:A:35:VAL:HG23 1:A:72:LEU:HD11 6 0.02 (1,996) 1:A:35:VAL:HG23 1:A:72:LEU:HD12 6 0.02 (1,996) 1:A:35:VAL:HG23 1:A:72:LEU:HD13 6 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD11 1:A:156:ILE:HD11 15 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD11 1:A:156:ILE:HD11 15 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD11 1:A:156:ILE:HD12 15 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD11 1:A:156:ILE:HD13 15 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:156:ILE:HD13 15 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:156:ILE:HD11 15 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:156:ILE:HD11 15 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:156:ILE:HD13 15 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:156:ILE:HD13 15 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD13 15 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD13 15 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD13 15 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD13 15 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD13 15 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:176:ILE:HD11 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:176:ILE:HD11 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:176:ILE:HD13 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD13 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD11 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD11 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD11 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD11 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD13 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD13 8 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:ILE:HD13 8 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:ILE:HD13 8 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:ILE:HD13 8 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:ILE:HD13 8 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:176:ILE:HD13 8 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD13 8 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:176:ILE:HD13 8 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:176:ILE:HD13 8 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:176:ILE:HD13 8 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:176:ILE:HD13 8 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:176:ILE:HD13 8 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:176:ILE:HD13 8 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:176:ILE:HD13 8 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:176:ILE:HD13 8 0.02 (1,944) 1:A:135:GLN:HE21 1:A:176:ILE:HD13 1	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,986) 1:A:35:VAL:HG23 1:A:72:LEU:HD13 6 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD11 1:A:156:ILE:HD11 15 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD11 1:A:156:ILE:HD12 15 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD11 1:A:156:ILE:HD13 15 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD11 1:A:156:ILE:HD13 15 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:156:ILE:HD11 15 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:156:ILE:HD11 15 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:156:ILE:HD12 15 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:156:ILE:HD13 15 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD13 15 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD13 15 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD11 15 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD13 15 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD13 15 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:176:ILE:HD11 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:176:ILE:HD11 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:176:ILE:HD13 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD13 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD13 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD11 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD13 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD13 8 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:176:ILE:HD13 8 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:176:ILE:HD13 8 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:176:ILE:HD13 8 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:176:ILE:HD13 8 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:176:ILE:HD13 8 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD21 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD21 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD21 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD21 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD21 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD21 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD21 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD21 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD21 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD21 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD21 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD21 3 0.02 (1,944) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:171:LEU:HD21 3 0.02 (1,944) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:171:LEU:HD21 3 0.02 (1,944) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:171:LEU:HD13	(1,996)	1:A:35:VAL:HG23	1:A:72:LEU:HD11	6	0.02
(1,981) 1:A:68:ILE:HD11 1:A:156:ILE:HD12 15 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD11 1:A:156:ILE:HD13 15 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD11 1:A:156:ILE:HD13 15 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:156:ILE:HD13 15 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:156:ILE:HD11 15 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:156:ILE:HD11 15 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:156:ILE:HD13 15 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD13 15 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD11 15 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD11 15 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD12 15 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD14 15 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD14 15 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:176:ILE:HD14 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:176:ILE:HD14 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD14 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD14 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD14 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD14 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD14 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD14 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD13 8 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:ILEU:HD13 8 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:ILEU:HD13 8 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:ILEU:HD13 8 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:ILEU:HD22 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:ILEU:HD22 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:ILEU:HD22 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:ILEU:HD22 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:ILEU:HD21 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:ILEU:HD21 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:ILEU:HD21 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:ILEU:HD21 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:ILEU:HD21 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:ILEU:HD21 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:152:VAL:HG11 8 0.02 (1,932) 1:A:121:GLN:HE21 1:A:161:ILE:HD11 1 0.02 (1,916) 1:A:131:ILEU:HD11 1:A:176:ILE:HD11 1 0.02 (1,916) 1:A:131:ILEU:HD	(1,996)	1:A:35:VAL:HG23	1:A:72:LEU:HD12	6	0.02
(1,981) 1:A:68:ILE:HD11 1:A:156:ILE:HD12 15 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD11 1:A:156:ILE:HD13 15 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:156:ILE:HD11 15 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:156:ILE:HD11 15 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:156:ILE:HD13 15 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:156:ILE:HD13 15 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD11 15 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD11 15 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD12 15 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD12 15 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD13 15 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:176:ILE:HD13 15 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:176:ILE:HD13 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:176:ILE:HD13 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:176:ILE:HD13 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD13 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD13 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD13 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD13 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD13 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:ILE:HD12 8 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD12 8 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD12 8 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD12 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD21 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD21 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD21 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD21 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD21 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD21 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD23 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD23 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD23 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD23 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD23 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:152:VAL:HG11 8 0.02 (1,932) 1:A:121:GLN:HE21 1:A:125:VAL:HG11 1 0.02 (1,96) 1:A:131:LEU:HD11 1:A:176:ILE:	(1,996)	1:A:35:VAL:HG23	1:A:72:LEU:HD13	6	0.02
(1,981) 1:A:68:ILE:HD11 1:A:156:ILE:HD13 15 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:156:ILE:HD12 15 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:156:ILE:HD12 15 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:156:ILE:HD13 15 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD11 15 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD11 15 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD11 15 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD12 15 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD12 15 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD13 15 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:176:ILE:HD11 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:176:ILE:HD12 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:176:ILE:HD12 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD13 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD11 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD13 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD12 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD13 8 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD13 8 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD13 8 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD21 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD21 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD21 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD22 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD23 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD23 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD21 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD21 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD21 3 0.02 (1,932) 1:A:121:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD23 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD23 3 0.02 (1,932) 1:A:121:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD23 3 0.02 (1,932) 1:A:121:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD21 3 0.02 (1,932) 1:A:121:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD21 3 0.02 (1,932) 1:A:121:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD21 3 0.02 (1,932) 1:A:121:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD23 3 0.02 (1,932) 1:A:121:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD23 3 0.02 (1,932) 1:A:121:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD21 1 0.02 (1,932) 1:A:121:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD21 1 1 0.02 (1,932) 1:A:121:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD21 1 1 0.02 (1,916) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD11 1 0.02 (1,916) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:176:IL	(1,981)	1:A:68:ILE:HD11	1:A:156:ILE:HD11	15	0.02
(1,981) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:156:ILE:HD11 15 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:156:ILE:HD12 15 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD13 15 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD11 15 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD11 15 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD11 15 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD13 15 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD13 15 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD13 15 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD11 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:176:ILE:HD11 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:176:ILE:HD12 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD13 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD13 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD13 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD13 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD13 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD13 8 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD13 8 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD13 8 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD21 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD21 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD22 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD21 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD23 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD23 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD21 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD23 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD23 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD23 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD23 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD23 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD21 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:152:VAL:HG11 8 0.02 (1,932) 1:A:121:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD23 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:152:VAL:HG11 8 0.02 (1,932) 1:A:121:GLN:HE21 1:A:125:VAL:HG11 8 0.02 (1,932) 1:A:121:GLN:HE21 1:A:152:VAL:HG11 8 0.02 (1,932) 1:A:121:GLN:HE21 1:A:16:IE:HD11 16 0.02 (1,966) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD11 16 0.02 (1,916) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD11 1 0.02 (1,916) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD11	(1,981)	1:A:68:ILE:HD11	1:A:156:ILE:HD12	15	0.02
(1,981) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:156:ILE:HD12 15 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD13 15 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD11 15 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD11 15 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD12 15 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD12 15 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD11 18 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:176:ILE:HD11 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:176:ILE:HD11 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:176:ILE:HD13 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD13 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD11 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD11 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD13 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD13 8 0.02 (1,945) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD13 8 0.02 (1,945) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD13 8 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD21 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD21 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD21 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD22 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD22 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD23 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD23 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD23 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD22 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD22 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD22 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD23 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD23 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD23 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD23 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD23 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD23 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD23 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD23 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD23 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD23 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD23 3 0.02 (1,946) 1:A:131:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD13 1 0.02 (1,946) 1:A:131:LEU:HD14 1 1:A:176:ILE:HD14 1 0.02 (1,946) 1:A:133:LEU:HD11 1:A:176:IL	(1,981)	1:A:68:ILE:HD11	1:A:156:ILE:HD13	15	0.02
(1,981) 1:A:68:ILE:HD12 1:A:156:ILE:HD13 15 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD11 15 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD12 15 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD13 15 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:176:ILE:HD11 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:176:ILE:HD12 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:176:ILE:HD12 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:176:ILE:HD13 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD13 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD11 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD13 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD13 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD13 8 0.02 (1,948) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD13 8 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD13 8 0.02 (1,945) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD21 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD21 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD22 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD22 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD22 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD22 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD22 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD22 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD22 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD23 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD22 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD23 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD23 3 0.02 (1,932) 1:A:121:GLN:HE21 1:A:125:VAL:HG11 8 0.02 (1,932) 1:A:121:GLN:HE21 1:A:125:VAL:HG11 8 0.02 (1,932) 1:A:121:GLN:HE21 1:A:125:VAL:HG11 8 0.02 (1,932) 1:A:121:GLN:HE21 1:A:125:VAL:HG11 8 0.02 (1,932) 1:A:121:GLN:HE22 1:A:125:VAL:HG11 8 0.02 (1,932) 1:A:121:GLN:HE22 1:A:125:VAL:HG11 1 0.02 (1,940) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD11 16 0.02 (1,940) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD11 1 0.02 (1,940) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD11 1 0.02 (1,940) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD11 1 0.02 (1,940) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD11 1 0.02 (1,940) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD11 1 0.02 (1,946) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD11 1 0.02 (1,946) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD11 1	(1,981)	1:A:68:ILE:HD12	1:A:156:ILE:HD11	15	0.02
(1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD12 15 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD12 15 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD13 15 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:176:ILE:HD11 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:176:ILE:HD13 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD11 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD11 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD12 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD13 8 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD21 3 0.02 (1,944) 1:A:152:G	(1,981)	1:A:68:ILE:HD12	1:A:156:ILE:HD12	15	0.02
(1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD13 15 0.02 (1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD13 15 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:176:ILE:HD11 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:176:ILE:HD12 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD13 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD12 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD12 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD13 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:172:VAL:H 6 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD23 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD23 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD23 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD23 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:	(1,981)	1:A:68:ILE:HD12	1:A:156:ILE:HD13	15	0.02
(1,981) 1:A:68:ILE:HD13 1:A:156:ILE:HD13 15 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:176:ILE:HD11 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:176:ILE:HD12 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD13 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD12 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD13 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD13 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:172:VAL:H 6 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD13 8 0.02 (1,945) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD21 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD23 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD23 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD23 3 0.02 (1,944) 1:A:121:GLN:	(1,981)	1:A:68:ILE:HD13	1:A:156:ILE:HD11	15	0.02
(1,947) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:176:ILE:HD11 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:176:ILE:HD12 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:176:ILE:HD13 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD11 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD13 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD13 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:172:VAL:H 6 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD21 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD22 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD23 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD23 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD23 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD23 3 0.02 (1,944) 1:A:162:GLN:	(1,981)	1:A:68:ILE:HD13	1:A:156:ILE:HD12	15	0.02
(1,947) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:176:ILE:HD12 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:176:ILE:HD13 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD11 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD12 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD13 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:172:VAL:H 6 0.02 (1,945) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD21 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD22 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD23 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD23 3 0.02 (1,932) 1:A:16:LE:HD	(1,981)	1:A:68:ILE:HD13	1:A:156:ILE:HD13	15	0.02
(1,947) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:176:ILE:HD13 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD11 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD12 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD13 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:172:VAL:H 6 0.02 (1,945) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD21 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD21 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD23 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD21 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD21 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD23 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD23 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD23 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:	(1,947)	1:A:152:GLN:HE21	1:A:176:ILE:HD11	8	0.02
(1,947) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:176:ILE:HD13 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD11 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD12 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD13 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:172:VAL:H 6 0.02 (1,945) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD21 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD21 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD23 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD21 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD21 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD23 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD23 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD23 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:	(1,947)	1:A:152:GLN:HE21	1:A:176:ILE:HD12	8	0.02
(1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD12 8 0.02 (1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD13 8 0.02 (1,945) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:172:VAL:H 6 0.02 (1,945) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD21 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD21 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD22 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD23 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD21 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD23 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD23 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD23 3 0.02 (1,932) 1:A:121:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD23 3 0.02 (1,932) 1:A:121:GLN:HE21 1:A:125:VAL:HG11 8 0.02 (1,932) 1:A:16:HE21<		1:A:152:GLN:HE21	1:A:176:ILE:HD13	8	0.02
(1,947) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:176:ILE:HD13 8 0.02 (1,945) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:172:VAL:H 6 0.02 (1,945) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD21 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD22 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD23 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD23 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD21 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD23 3 0.02 (1,932) 1:A:121:GLN:HE21 1:A:125:VAL:HG11 8 0.02 (1,932) 1:A:121:GLN:HE21 1:A:125:VAL:HG13 8 0.02 (1,932) 1:A:130:HEHB	(1,947)	1:A:152:GLN:HE22	1:A:176:ILE:HD11	8	0.02
(1,945) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:172:VAL:H 6 0.02 (1,945) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD21 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD22 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD23 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD23 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD21 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD22 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD23 3 0.02 (1,932) 1:A:121:GLN:HE21 1:A:125:VAL:HG11 8 0.02 (1,932) 1:A:121:GLN:HE21 1:A:125:VAL:HG13 8 0.02 (1,932) 1:A:13:LEU:H	(1,947)	1:A:152:GLN:HE22	1:A:176:ILE:HD12	8	0.02
(1,945) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD21 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD21 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD22 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD23 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD21 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD22 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD23 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD23 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD23 3 0.02 (1,932) 1:A:121:GLN:HE21 1:A:125:VAL:HG11 8 0.02 (1,932) 1:A:121:GLN:HE21 1:A:125:VAL:HG13 8 0.02 (1,932) 1:A:121:GLN:HE22 1:A:125:VAL:HG11 8 0.02 (1,932) 1:A:30:PHE:HB2 1:A:70:ILE:HD11 16 0.02 (1,922) 1:A:30:PHE:	(1,947)	1:A:152:GLN:HE22	1:A:176:ILE:HD13	8	0.02
(1,945) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:172:VAL:H 6 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD21 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD22 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD23 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD21 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD23 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD23 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD23 3 0.02 (1,944) 1:A:121:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD23 3 0.02 (1,932) 1:A:121:GLN:HE21 1:A:125:VAL:HG11 8 0.02 (1,932) 1:A:121:GLN:HE21 1:A:125:VAL:HG13 8 0.02 (1,932) 1:A:121:GLN:HE22 1:A:125:VAL:HG11 8 0.02 (1,932) 1:A:30:PHE:HB2 1:A:70:ILE:HD11 16 0.02 (1,922) 1:A:30:PHE:HB2	(1,945)	1:A:152:GLN:HE21	1:A:172:VAL:H	6	0.02
(1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD21 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD22 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD23 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD21 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD22 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD23 3 0.02 (1,932) 1:A:121:GLN:HE21 1:A:125:VAL:HG11 8 0.02 (1,932) 1:A:121:GLN:HE21 1:A:125:VAL:HG13 8 0.02 (1,932) 1:A:121:GLN:HE22 1:A:125:VAL:HG12 8 0.02 (1,932) 1:A:30:PHE:HB2 1:A:70:ILE:HD11 16 0.02 (1,922) 1:A:30:PHE:	(1,945)	1:A:152:GLN:HE22	1:A:172:VAL:H	6	0.02
(1,944) 1:A:152:GLN:HE21 1:A:171:LEU:HD23 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD21 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD22 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD23 3 0.02 (1,932) 1:A:121:GLN:HE21 1:A:125:VAL:HG11 8 0.02 (1,932) 1:A:121:GLN:HE21 1:A:125:VAL:HG12 8 0.02 (1,932) 1:A:121:GLN:HE21 1:A:125:VAL:HG13 8 0.02 (1,932) 1:A:121:GLN:HE22 1:A:125:VAL:HG12 8 0.02 (1,932) 1:A:121:GLN:HE22 1:A:125:VAL:HG13 8 0.02 (1,932) 1:A:13:LEU:HB22 1:A:10:LE:HD12 8 0.02 (1,922) 1:A:30:PHE:HB2 1:A:70:ILE:HD11 16 0.02 (1,922) 1:A:30:PHE:HB2 1:A:70:ILE:HD13 16 0.02 (1,916) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD11 1 0.02 (1,916) 1:A:13:LEU:HD12 </td <td>` ,</td> <td>1:A:152:GLN:HE21</td> <td>1:A:171:LEU:HD21</td> <td>3</td> <td>0.02</td>	` ,	1:A:152:GLN:HE21	1:A:171:LEU:HD21	3	0.02
(1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD21 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD22 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD23 3 0.02 (1,932) 1:A:121:GLN:HE21 1:A:125:VAL:HG11 8 0.02 (1,932) 1:A:121:GLN:HE21 1:A:125:VAL:HG12 8 0.02 (1,932) 1:A:121:GLN:HE21 1:A:125:VAL:HG13 8 0.02 (1,932) 1:A:121:GLN:HE22 1:A:125:VAL:HG11 8 0.02 (1,932) 1:A:121:GLN:HE22 1:A:125:VAL:HG12 8 0.02 (1,932) 1:A:30:PHE22 1:A:125:VAL:HG13 8 0.02 (1,932) 1:A:30:PHE:HB2 1:A:70:ILE:HD11 16 0.02 (1,922) 1:A:30:PHE:HB2 1:A:70:ILE:HD12 16 0.02 (1,916) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD11 1 0.02 (1,916) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD12 1 0.02 (1,916) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD11 1 0.02 (1,916) 1	(1,944)	1:A:152:GLN:HE21	1:A:171:LEU:HD22	3	0.02
(1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD22 3 0.02 (1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD23 3 0.02 (1,932) 1:A:121:GLN:HE21 1:A:125:VAL:HG11 8 0.02 (1,932) 1:A:121:GLN:HE21 1:A:125:VAL:HG12 8 0.02 (1,932) 1:A:121:GLN:HE21 1:A:125:VAL:HG13 8 0.02 (1,932) 1:A:121:GLN:HE22 1:A:125:VAL:HG11 8 0.02 (1,932) 1:A:121:GLN:HE22 1:A:125:VAL:HG12 8 0.02 (1,932) 1:A:121:GLN:HE22 1:A:125:VAL:HG13 8 0.02 (1,932) 1:A:30:PHE:HB2 1:A:70:ILE:HD11 16 0.02 (1,922) 1:A:30:PHE:HB2 1:A:70:ILE:HD12 16 0.02 (1,922) 1:A:30:PHE:HB2 1:A:70:ILE:HD13 16 0.02 (1,916) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD11 1 0.02 (1,916) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD13 1 0.02 (1,916) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD11 1 0.02 (1,916) <td< td=""><td>(1,944)</td><td>1:A:152:GLN:HE21</td><td>1:A:171:LEU:HD23</td><td>3</td><td>0.02</td></td<>	(1,944)	1:A:152:GLN:HE21	1:A:171:LEU:HD23	3	0.02
(1,944) 1:A:152:GLN:HE22 1:A:171:LEU:HD23 3 0.02 (1,932) 1:A:121:GLN:HE21 1:A:125:VAL:HG11 8 0.02 (1,932) 1:A:121:GLN:HE21 1:A:125:VAL:HG12 8 0.02 (1,932) 1:A:121:GLN:HE21 1:A:125:VAL:HG13 8 0.02 (1,932) 1:A:121:GLN:HE22 1:A:125:VAL:HG11 8 0.02 (1,932) 1:A:121:GLN:HE22 1:A:125:VAL:HG12 8 0.02 (1,932) 1:A:121:GLN:HE22 1:A:125:VAL:HG13 8 0.02 (1,932) 1:A:30:PHE:HB22 1:A:70:ILE:HD11 16 0.02 (1,922) 1:A:30:PHE:HB2 1:A:70:ILE:HD12 16 0.02 (1,922) 1:A:30:PHE:HB2 1:A:70:ILE:HD13 16 0.02 (1,916) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD11 1 0.02 (1,916) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD13 1 0.02 (1,916) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD12 1 0.02 (1,916) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD12 1 0.02 (1,916) <td< td=""><td>(1,944)</td><td>1:A:152:GLN:HE22</td><td>1:A:171:LEU:HD21</td><td>3</td><td>0.02</td></td<>	(1,944)	1:A:152:GLN:HE22	1:A:171:LEU:HD21	3	0.02
(1,932) 1:A:121:GLN:HE21 1:A:125:VAL:HG11 8 0.02 (1,932) 1:A:121:GLN:HE21 1:A:125:VAL:HG12 8 0.02 (1,932) 1:A:121:GLN:HE21 1:A:125:VAL:HG13 8 0.02 (1,932) 1:A:121:GLN:HE22 1:A:125:VAL:HG11 8 0.02 (1,932) 1:A:121:GLN:HE22 1:A:125:VAL:HG12 8 0.02 (1,932) 1:A:121:GLN:HE22 1:A:125:VAL:HG13 8 0.02 (1,932) 1:A:30:PHE:HB22 1:A:70:ILE:HD11 16 0.02 (1,922) 1:A:30:PHE:HB2 1:A:70:ILE:HD12 16 0.02 (1,922) 1:A:30:PHE:HB2 1:A:70:ILE:HD13 16 0.02 (1,922) 1:A:30:PHE:HB2 1:A:70:ILE:HD13 16 0.02 (1,916) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD11 1 0.02 (1,916) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD13 1 0.02 (1,916) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD12 1 0.02 (1,916) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD13 1 0.02 (1,916) 1	(1,944)	1:A:152:GLN:HE22	1:A:171:LEU:HD22	3	0.02
(1,932) 1:A:121:GLN:HE21 1:A:125:VAL:HG12 8 0.02 (1,932) 1:A:121:GLN:HE21 1:A:125:VAL:HG13 8 0.02 (1,932) 1:A:121:GLN:HE22 1:A:125:VAL:HG11 8 0.02 (1,932) 1:A:121:GLN:HE22 1:A:125:VAL:HG12 8 0.02 (1,932) 1:A:121:GLN:HE22 1:A:125:VAL:HG13 8 0.02 (1,932) 1:A:30:PHE:HB22 1:A:70:ILE:HD11 16 0.02 (1,922) 1:A:30:PHE:HB2 1:A:70:ILE:HD12 16 0.02 (1,922) 1:A:30:PHE:HB2 1:A:70:ILE:HD13 16 0.02 (1,916) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD11 1 0.02 (1,916) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD13 1 0.02 (1,916) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD11 1 0.02 (1,916) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD12 1 0.02 (1,916) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD13 1 0.02 (1,916) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD13 1 0.02	(1,944)	1:A:152:GLN:HE22	1:A:171:LEU:HD23	3	0.02
(1,932) 1:A:121:GLN:HE21 1:A:125:VAL:HG13 8 0.02 (1,932) 1:A:121:GLN:HE22 1:A:125:VAL:HG11 8 0.02 (1,932) 1:A:121:GLN:HE22 1:A:125:VAL:HG12 8 0.02 (1,932) 1:A:121:GLN:HE22 1:A:125:VAL:HG13 8 0.02 (1,932) 1:A:30:PHE:HB2 1:A:70:ILE:HD11 16 0.02 (1,922) 1:A:30:PHE:HB2 1:A:70:ILE:HD12 16 0.02 (1,922) 1:A:30:PHE:HB2 1:A:70:ILE:HD13 16 0.02 (1,922) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD13 1 0.02 (1,916) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD12 1 0.02 (1,916) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD11 1 0.02 (1,916) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD12 1 0.02 (1,916) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD13 1 0.02 (1,916) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD13 1 0.02	(1,932)	1:A:121:GLN:HE21	1:A:125:VAL:HG11	8	0.02
(1,932) 1:A:121:GLN:HE22 1:A:125:VAL:HG11 8 0.02 (1,932) 1:A:121:GLN:HE22 1:A:125:VAL:HG12 8 0.02 (1,932) 1:A:121:GLN:HE22 1:A:125:VAL:HG13 8 0.02 (1,922) 1:A:30:PHE:HB2 1:A:70:ILE:HD11 16 0.02 (1,922) 1:A:30:PHE:HB2 1:A:70:ILE:HD12 16 0.02 (1,922) 1:A:30:PHE:HB2 1:A:70:ILE:HD13 16 0.02 (1,916) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD11 1 0.02 (1,916) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD12 1 0.02 (1,916) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD11 1 0.02 (1,916) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD12 1 0.02 (1,916) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD12 1 0.02 (1,916) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD13 1 0.02 (1,916) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD13 1 0.02	(1,932)	1:A:121:GLN:HE21	1:A:125:VAL:HG12	8	0.02
(1,932) 1:A:121:GLN:HE22 1:A:125:VAL:HG12 8 0.02 (1,932) 1:A:121:GLN:HE22 1:A:125:VAL:HG13 8 0.02 (1,922) 1:A:30:PHE:HB2 1:A:70:ILE:HD11 16 0.02 (1,922) 1:A:30:PHE:HB2 1:A:70:ILE:HD12 16 0.02 (1,922) 1:A:30:PHE:HB2 1:A:70:ILE:HD13 16 0.02 (1,916) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD11 1 0.02 (1,916) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD12 1 0.02 (1,916) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD11 1 0.02 (1,916) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD12 1 0.02 (1,916) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD12 1 0.02 (1,916) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD13 1 0.02	(1,932)	1:A:121:GLN:HE21	1:A:125:VAL:HG13	8	0.02
(1,932) 1:A:121:GLN:HE22 1:A:125:VAL:HG13 8 0.02 (1,922) 1:A:30:PHE:HB2 1:A:70:ILE:HD11 16 0.02 (1,922) 1:A:30:PHE:HB2 1:A:70:ILE:HD12 16 0.02 (1,922) 1:A:30:PHE:HB2 1:A:70:ILE:HD13 16 0.02 (1,916) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD11 1 0.02 (1,916) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD12 1 0.02 (1,916) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD11 1 0.02 (1,916) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD12 1 0.02 (1,916) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD12 1 0.02 (1,916) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD13 1 0.02	(1,932)	1:A:121:GLN:HE22	1:A:125:VAL:HG11	8	0.02
(1,922) 1:A:30:PHE:HB2 1:A:70:ILE:HD11 16 0.02 (1,922) 1:A:30:PHE:HB2 1:A:70:ILE:HD12 16 0.02 (1,922) 1:A:30:PHE:HB2 1:A:70:ILE:HD13 16 0.02 (1,916) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD11 1 0.02 (1,916) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD12 1 0.02 (1,916) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD13 1 0.02 (1,916) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD11 1 0.02 (1,916) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD12 1 0.02 (1,916) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD13 1 0.02	(1,932)	1:A:121:GLN:HE22	1:A:125:VAL:HG12	8	0.02
(1,922) 1:A:30:PHE:HB2 1:A:70:ILE:HD11 16 0.02 (1,922) 1:A:30:PHE:HB2 1:A:70:ILE:HD12 16 0.02 (1,922) 1:A:30:PHE:HB2 1:A:70:ILE:HD13 16 0.02 (1,916) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD11 1 0.02 (1,916) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD12 1 0.02 (1,916) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD11 1 0.02 (1,916) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD12 1 0.02 (1,916) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD12 1 0.02 (1,916) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD13 1 0.02	<u> </u>	1:A:121:GLN:HE22	1:A:125:VAL:HG13	8	0.02
(1,922) 1:A:30:PHE:HB2 1:A:70:ILE:HD12 16 0.02 (1,922) 1:A:30:PHE:HB2 1:A:70:ILE:HD13 16 0.02 (1,916) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD11 1 0.02 (1,916) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD12 1 0.02 (1,916) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD13 1 0.02 (1,916) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD11 1 0.02 (1,916) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD12 1 0.02 (1,916) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD13 1 0.02	, ,	1:A:30:PHE:HB2	1:A:70:ILE:HD11	16	0.02
(1,922) 1:A:30:PHE:HB2 1:A:70:ILE:HD13 16 0.02 (1,916) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD11 1 0.02 (1,916) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD12 1 0.02 (1,916) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD13 1 0.02 (1,916) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD11 1 0.02 (1,916) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD12 1 0.02 (1,916) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD13 1 0.02	_ ` ,	1:A:30:PHE:HB2	1:A:70:ILE:HD12		
(1,916) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD11 1 0.02 (1,916) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD12 1 0.02 (1,916) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD13 1 0.02 (1,916) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD11 1 0.02 (1,916) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD12 1 0.02 (1,916) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD13 1 0.02			1:A:70:ILE:HD13		
(1,916) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD12 1 0.02 (1,916) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD13 1 0.02 (1,916) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD11 1 0.02 (1,916) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD12 1 0.02 (1,916) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD13 1 0.02					
(1,916) 1:A:13:LEU:HD11 1:A:176:ILE:HD13 1 0.02 (1,916) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD11 1 0.02 (1,916) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD12 1 0.02 (1,916) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD13 1 0.02	/				
(1,916) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD11 1 0.02 (1,916) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD12 1 0.02 (1,916) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD13 1 0.02	` ,				
(1,916) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD12 1 0.02 (1,916) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD13 1 0.02	, ,				
(1,916) 1:A:13:LEU:HD12 1:A:176:ILE:HD13 1 0.02					
	· · /				
(1,0 10 1,11,10 1,11 1 1 1,11 1 1 0,114 1 1 0,144 1 1 1 1 1 1 1 1 1	(1,916)	1:A:13:LEU:HD13	1:A:176:ILE:HD11	1	0.02



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,916)	1:A:13:LEU:HD13	1:A:176:ILE:HD12	1	0.02
(1,916)	1:A:13:LEU:HD13	1:A:176:ILE:HD13	1	0.02
(1,897)	1:A:36:VAL:HG21	1:A:44:LEU:H	7	0.02
(1,897)	1:A:36:VAL:HG22	1:A:44:LEU:H	7	0.02
(1,897)	1:A:36:VAL:HG23	1:A:44:LEU:H	7	0.02
(1,897)	1:A:36:VAL:HG21	1:A:44:LEU:H	17	0.02
(1,897)	1:A:36:VAL:HG22	1:A:44:LEU:H	17	0.02
(1,897)	1:A:36:VAL:HG23	1:A:44:LEU:H	17	0.02
(1,896)	1:A:2:LEU:HD11	1:A:180:LYS:H	1	0.02
(1,896)	1:A:2:LEU:HD12	1:A:180:LYS:H	1	0.02
(1,896)	1:A:2:LEU:HD13	1:A:180:LYS:H	1	0.02
(1,896)	1:A:2:LEU:HD11	1:A:180:LYS:H	17	0.02
(1,896)	1:A:2:LEU:HD12	1:A:180:LYS:H	17	0.02
(1,896)	1:A:2:LEU:HD13	1:A:180:LYS:H	17	0.02
(1,888)	1:A:123:TRP:H	1:A:124:VAL:HG21	2	0.02
(1,888)	1:A:123:TRP:H	1:A:124:VAL:HG22	2	0.02
(1,888)	1:A:123:TRP:H	1:A:124:VAL:HG23	2	0.02
(1,888)	1:A:123:TRP:H	1:A:124:VAL:HG21	8	0.02
(1,888)	1:A:123:TRP:H	1:A:124:VAL:HG22	8	0.02
(1,888)	1:A:123:TRP:H	1:A:124:VAL:HG23	8	0.02
(1,888)	1:A:123:TRP:H	1:A:124:VAL:HG21	14	0.02
(1,888)	1:A:123:TRP:H	1:A:124:VAL:HG22	14	0.02
(1,888)	1:A:123:TRP:H	1:A:124:VAL:HG23	14	0.02
(1,862)	1:A:62:GLU:H	1:A:64:VAL:HG21	2	0.02
(1,862)	1:A:62:GLU:H	1:A:64:VAL:HG22	2	0.02
(1,862)	1:A:62:GLU:H	1:A:64:VAL:HG23	2	0.02
(1,861)	1:A:139:PHE:H	1:A:156:ILE:HD11	20	0.02
(1,861)	1:A:139:PHE:H	1:A:156:ILE:HD12	20	0.02
(1,861)	1:A:139:PHE:H	1:A:156:ILE:HD13	20	0.02
(1,860)	1:A:139:PHE:H	1:A:153:VAL:HG21	12	0.02
(1,860)	1:A:139:PHE:H	1:A:153:VAL:HG22	12	0.02
(1,860)	1:A:139:PHE:H	1:A:153:VAL:HG23	12	0.02
(1,837)	1:A:33:LYS:H	1:A:35:VAL:HG11	12	0.02
(1,837)	1:A:33:LYS:H	1:A:35:VAL:HG12	12	0.02
(1,837)	1:A:33:LYS:H	1:A:35:VAL:HG13	12	0.02
(1,837)	1:A:33:LYS:H	1:A:35:VAL:HG11	14	0.02
(1,837)	1:A:33:LYS:H	1:A:35:VAL:HG12	14	0.02
(1,837)	1:A:33:LYS:H	1:A:35:VAL:HG13	14	0.02
(1,834)	1:A:71:VAL:HG11	1:A:75:LYS:H	6	0.02
(1,834)	1:A:71:VAL:HG12	1:A:75:LYS:H	6	0.02
(1,834)	1:A:71:VAL:HG13	1:A:75:LYS:H	6	0.02
(1,833)	1:A:75:LYS:H	1:A:76:LEU:HD11	19	0.02



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,833)	1:A:75:LYS:H	1:A:76:LEU:HD12	19	0.02
(1,833)	1:A:75:LYS:H	1:A:76:LEU:HD13	19	0.02
(1,832)	1:A:120:ILE:HD11	1:A:174:GLU:H	19	0.02
(1,832)	1:A:120:ILE:HD12	1:A:174:GLU:H	19	0.02
(1,832)	1:A:120:ILE:HD13	1:A:174:GLU:H	19	0.02
(1,82)	1:A:12:GLU:H	1:A:13:LEU:H	16	0.02
(1,819)	1:A:76:LEU:HD11	1:A:140:ILE:H	7	0.02
(1,819)	1:A:76:LEU:HD12	1:A:140:ILE:H	7	0.02
(1,819)	1:A:76:LEU:HD13	1:A:140:ILE:H	7	0.02
(1,814)	1:A:27:VAL:HG11	1:A:173:LYS:H	7	0.02
(1,814)	1:A:27:VAL:HG12	1:A:173:LYS:H	7	0.02
(1,814)	1:A:27:VAL:HG13	1:A:173:LYS:H	7	0.02
(1,804)	1:A:75:LYS:H	1:A:76:LEU:HD21	13	0.02
(1,804)	1:A:75:LYS:H	1:A:76:LEU:HD22	13	0.02
(1,804)	1:A:75:LYS:H	1:A:76:LEU:HD23	13	0.02
(1,800)	1:A:72:LEU:H	1:A:76:LEU:HD11	11	0.02
(1,800)	1:A:72:LEU:H	1:A:76:LEU:HD12	11	0.02
(1,800)	1:A:72:LEU:H	1:A:76:LEU:HD13	11	0.02
(1,798)	1:A:169:LEU:HD21	1:A:170:MET:H	2	0.02
(1,798)	1:A:169:LEU:HD22	1:A:170:MET:H	2	0.02
(1,798)	1:A:169:LEU:HD23	1:A:170:MET:H	2	0.02
(1,797)	1:A:92:ILE:HD11	1:A:96:MET:H	7	0.02
(1,797)	1:A:92:ILE:HD12	1:A:96:MET:H	7	0.02
(1,797)	1:A:92:ILE:HD13	1:A:96:MET:H	7	0.02
(1,797)	1:A:92:ILE:HD11	1:A:96:MET:H	9	0.02
(1,797)	1:A:92:ILE:HD12	1:A:96:MET:H	9	0.02
(1,797)	1:A:92:ILE:HD13	1:A:96:MET:H	9	0.02
(1,775)	1:A:71:VAL:HG11	1:A:77:VAL:H	1	0.02
(1,775)	1:A:71:VAL:HG12	1:A:77:VAL:H	1	0.02
(1,775)	1:A:71:VAL:HG13	1:A:77:VAL:H	1	0.02
(1,775)	1:A:71:VAL:HG11	1:A:77:VAL:H	5	0.02
(1,775)	1:A:71:VAL:HG12	1:A:77:VAL:H	5	0.02
(1,775)	1:A:71:VAL:HG13	1:A:77:VAL:H	5	0.02
(1,775)	1:A:71:VAL:HG11	1:A:77:VAL:H	17	0.02
(1,775)	1:A:71:VAL:HG12	1:A:77:VAL:H	17	0.02
(1,775)	1:A:71:VAL:HG13	1:A:77:VAL:H	17	0.02
(1,775)	1:A:71:VAL:HG11	1:A:77:VAL:H	19	0.02
(1,775)	1:A:71:VAL:HG12	1:A:77:VAL:H	19	0.02
(1,775)	1:A:71:VAL:HG13	1:A:77:VAL:H	19	0.02
(1,774)	1:A:23:VAL:HG11	1:A:28:TYR:H	7	0.02
(1,774)	1:A:23:VAL:HG12	1:A:28:TYR:H	7	0.02
(1,774)	1:A:23:VAL:HG13	1:A:28:TYR:H	7	0.02



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,774)	1:A:23:VAL:HG11	1:A:28:TYR:H	15	0.02
(1,774)	1:A:23:VAL:HG12	1:A:28:TYR:H	15	0.02
(1,774)	1:A:23:VAL:HG13	1:A:28:TYR:H	15	0.02
(1,766)	1:A:77:VAL:HG11	1:A:140:ILE:HD11	8	0.02
(1,766)	1:A:77:VAL:HG11	1:A:140:ILE:HD12	8	0.02
(1,766)	1:A:77:VAL:HG11	1:A:140:ILE:HD13	8	0.02
(1,766)	1:A:77:VAL:HG12	1:A:140:ILE:HD11	8	0.02
(1,766)	1:A:77:VAL:HG12	1:A:140:ILE:HD12	8	0.02
(1,766)	1:A:77:VAL:HG12	1:A:140:ILE:HD13	8	0.02
(1,766)	1:A:77:VAL:HG13	1:A:140:ILE:HD11	8	0.02
(1,766)	1:A:77:VAL:HG13	1:A:140:ILE:HD12	8	0.02
(1,766)	1:A:77:VAL:HG13	1:A:140:ILE:HD13	8	0.02
(1,728)	1:A:120:ILE:HD11	1:A:172:VAL:HG21	11	0.02
(1,728)	1:A:120:ILE:HD11	1:A:172:VAL:HG22	11	0.02
(1,728)	1:A:120:ILE:HD11	1:A:172:VAL:HG23	11	0.02
(1,728)	1:A:120:ILE:HD12	1:A:172:VAL:HG21	11	0.02
(1,728)	1:A:120:ILE:HD12	1:A:172:VAL:HG22	11	0.02
(1,728)	1:A:120:ILE:HD12	1:A:172:VAL:HG23	11	0.02
(1,728)	1:A:120:ILE:HD13	1:A:172:VAL:HG21	11	0.02
(1,728)	1:A:120:ILE:HD13	1:A:172:VAL:HG22	11	0.02
(1,728)	1:A:120:ILE:HD13	1:A:172:VAL:HG23	11	0.02
(1,725)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:172:VAL:HG11	19	0.02
(1,725)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:172:VAL:HG12	19	0.02
(1,725)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:172:VAL:HG13	19	0.02
(1,725)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:172:VAL:HG11	19	0.02
(1,725)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:172:VAL:HG12	19	0.02
(1,725)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:172:VAL:HG13	19	0.02
(1,725)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:172:VAL:HG11	19	0.02
(1,725)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:172:VAL:HG12	19	0.02
(1,725)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:172:VAL:HG13	19	0.02
(1,691)	1:A:6:ASP:H	1:A:11:ASP:H	18	0.02
(1,684)	1:A:132:ARG:H	1:A:135:ASN:H	10	0.02
(1,663)	1:A:149:GLU:H	1:A:151:GLY:H	4	0.02
(1,66)	1:A:137:ALA:H	1:A:156:ILE:H	18	0.02
(1,66)	1:A:137:ALA:H	1:A:156:ILE:H	19	0.02
(1,655)	1:A:52:GLU:H	1:A:53:GLU:H	10	0.02
(1,639)	1:A:73:ASN:H	1:A:75:LYS:H	13	0.02
(1,60)	1:A:27:VAL:HG21	1:A:123:TRP:HE1	6	0.02
(1,60)	1:A:27:VAL:HG22	1:A:123:TRP:HE1	6	0.02
(1,60)	1:A:27:VAL:HG23	1:A:123:TRP:HE1	6	0.02
(1,599)	1:A:91:TYR:HD1	1:A:153:VAL:HG11	10	0.02
(1,599)	1:A:91:TYR:HD1	1:A:153:VAL:HG12	10	0.02



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,599)	1:A:91:TYR:HD1	1:A:153:VAL:HG13	10	0.02
(1,577)	1:A:128:LEU:HD21	1:A:155:ILE:HD11	3	0.02
(1,577)	1:A:128:LEU:HD21	1:A:155:ILE:HD12	3	0.02
(1,577)	1:A:128:LEU:HD21	1:A:155:ILE:HD13	3	0.02
(1,577)	1:A:128:LEU:HD22	1:A:155:ILE:HD11	3	0.02
(1,577)	1:A:128:LEU:HD22	1:A:155:ILE:HD12	3	0.02
(1,577)	1:A:128:LEU:HD22	1:A:155:ILE:HD13	3	0.02
(1,577)	1:A:128:LEU:HD23	1:A:155:ILE:HD11	3	0.02
(1,577)	1:A:128:LEU:HD23	1:A:155:ILE:HD12	3	0.02
(1,577)	1:A:128:LEU:HD23	1:A:155:ILE:HD13	3	0.02
(1,574)	1:A:30:PHE:HD1	1:A:70:ILE:HD11	17	0.02
(1,574)	1:A:30:PHE:HD1	1:A:70:ILE:HD12	17	0.02
(1,574)	1:A:30:PHE:HD1	1:A:70:ILE:HD13	17	0.02
(1,574)	1:A:30:PHE:HD2	1:A:70:ILE:HD11	17	0.02
(1,574)	1:A:30:PHE:HD2	1:A:70:ILE:HD12	17	0.02
(1,574)	1:A:30:PHE:HD2	1:A:70:ILE:HD13	17	0.02
(1,554)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:128:LEU:HD11	2	0.02
(1,554)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:128:LEU:HD12	2	0.02
(1,554)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:128:LEU:HD13	2	0.02
(1,554)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:128:LEU:HD11	2	0.02
(1,554)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:128:LEU:HD12	2	0.02
(1,554)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:128:LEU:HD13	2	0.02
(1,554)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:128:LEU:HD11	2	0.02
(1,554)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:128:LEU:HD12	2	0.02
(1,554)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:128:LEU:HD13	2	0.02
(1,554)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:128:LEU:HD11	19	0.02
(1,554)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:128:LEU:HD12	19	0.02
(1,554)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:128:LEU:HD13	19	0.02
(1,554)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:128:LEU:HD11	19	0.02
(1,554)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:128:LEU:HD12	19	0.02
(1,554)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:128:LEU:HD13	19	0.02
(1,554)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:128:LEU:HD11	19	0.02
(1,554)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:128:LEU:HD12	19	0.02
(1,554)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:128:LEU:HD13	19	0.02
(1,55)	1:A:30:PHE:H	1:A:70:ILE:HD11	19	0.02
(1,55)	1:A:30:PHE:H	1:A:70:ILE:HD12	19	0.02
(1,55)	1:A:30:PHE:H	1:A:70:ILE:HD13	19	0.02
(1,542)	1:A:35:VAL:HG21	1:A:72:LEU:HD11	6	0.02
(1,542)	1:A:35:VAL:HG21	1:A:72:LEU:HD12	6	0.02
(1,542)	1:A:35:VAL:HG21	1:A:72:LEU:HD13	6	0.02
(1,542)	1:A:35:VAL:HG22	1:A:72:LEU:HD11	6	0.02
(1,542)	1:A:35:VAL:HG22	1:A:72:LEU:HD12	6	0.02



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,542)	1:A:35:VAL:HG22	1:A:72:LEU:HD13	6	0.02
(1,542)	1:A:35:VAL:HG23	1:A:72:LEU:HD11	6	0.02
(1,542)	1:A:35:VAL:HG23	1:A:72:LEU:HD12	6	0.02
(1,542)	1:A:35:VAL:HG23	1:A:72:LEU:HD13	6	0.02
(1,513)	1:A:127:LEU:HD21	1:A:133:PHE:HD1	8	0.02
(1,513)	1:A:127:LEU:HD21	1:A:133:PHE:HD2	8	0.02
(1,513)	1:A:127:LEU:HD22	1:A:133:PHE:HD1	8	0.02
(1,513)	1:A:127:LEU:HD22	1:A:133:PHE:HD2	8	0.02
(1,513)	1:A:127:LEU:HD23	1:A:133:PHE:HD1	8	0.02
(1,513)	1:A:127:LEU:HD23	1:A:133:PHE:HD2	8	0.02
(1,512)	1:A:127:LEU:HD21	1:A:136:LEU:HD21	13	0.02
(1,512)	1:A:127:LEU:HD21	1:A:136:LEU:HD22	13	0.02
(1,512)	1:A:127:LEU:HD21	1:A:136:LEU:HD23	13	0.02
(1,512)	1:A:127:LEU:HD22	1:A:136:LEU:HD21	13	0.02
(1,512)	1:A:127:LEU:HD22	1:A:136:LEU:HD22	13	0.02
(1,512)	1:A:127:LEU:HD22	1:A:136:LEU:HD23	13	0.02
(1,512)	1:A:127:LEU:HD23	1:A:136:LEU:HD21	13	0.02
(1,512)	1:A:127:LEU:HD23	1:A:136:LEU:HD22	13	0.02
(1,512)	1:A:127:LEU:HD23	1:A:136:LEU:HD23	13	0.02
(1,488)	1:A:68:ILE:HD11	1:A:156:ILE:HD11	15	0.02
(1,488)	1:A:68:ILE:HD11	1:A:156:ILE:HD12	15	0.02
(1,488)	1:A:68:ILE:HD11	1:A:156:ILE:HD13	15	0.02
(1,488)	1:A:68:ILE:HD12	1:A:156:ILE:HD11	15	0.02
(1,488)	1:A:68:ILE:HD12	1:A:156:ILE:HD12	15	0.02
(1,488)	1:A:68:ILE:HD12	1:A:156:ILE:HD13	15	0.02
(1,488)	1:A:68:ILE:HD13	1:A:156:ILE:HD11	15	0.02
(1,488)	1:A:68:ILE:HD13	1:A:156:ILE:HD12	15	0.02
(1,488)	1:A:68:ILE:HD13	1:A:156:ILE:HD13	15	0.02
(1,479)	1:A:152:GLN:HE22	1:A:172:VAL:H	11	0.02
(1,463)	1:A:16:ASP:H	1:A:18:PHE:H	16	0.02
(1,463)	1:A:16:ASP:H	1:A:18:PHE:H	20	0.02
(1,461)	1:A:22:LEU:HD11	1:A:171:LEU:H	19	0.02
(1,461)	1:A:22:LEU:HD12	1:A:171:LEU:H	19	0.02
(1,461)	1:A:22:LEU:HD13	1:A:171:LEU:H	19	0.02
(1,453)	1:A:71:VAL:H	1:A:74:HIS:H	1	0.02
(1,441)	1:A:146:GLU:H	1:A:148:ALA:H	2	0.02
(1,441)	1:A:146:GLU:H	1:A:148:ALA:H	17	0.02
(1,43)	1:A:82:TYR:H	1:A:82:TYR:HD1	5	0.02
(1,415)	1:A:131:ASP:H	1:A:134:LYS:H	4	0.02
(1,409)	1:A:22:LEU:HD21	1:A:25:ASP:H	15	0.02
(1,409)	1:A:22:LEU:HD22	1:A:25:ASP:H	15	0.02
(1,409)	1:A:22:LEU:HD23	1:A:25:ASP:H	15	0.02



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,401)	1:A:59:GLY:H	1:A:60:SER:H	15	0.02
(1,389)	1:A:172:VAL:HG21	1:A:174:GLU:H	10	0.02
(1,389)	1:A:172:VAL:HG22	1:A:174:GLU:H	10	0.02
(1,389)	1:A:172:VAL:HG23	1:A:174:GLU:H	10	0.02
(1,388)	1:A:116:PHE:HD1	1:A:174:GLU:H	1	0.02
(1,388)	1:A:116:PHE:HD2	1:A:174:GLU:H	1	0.02
(1,377)	1:A:33:LYS:H	1:A:70:ILE:H	16	0.02
(1,373)	1:A:175:ALA:H	1:A:176:ILE:HD11	4	0.02
(1,373)	1:A:175:ALA:H	1:A:176:ILE:HD12	4	0.02
(1,373)	1:A:175:ALA:H	1:A:176:ILE:HD13	4	0.02
(1,341)	1:A:95:PHE:HD1	1:A:98:ASN:H	12	0.02
(1,341)	1:A:95:PHE:HD2	1:A:98:ASN:H	12	0.02
(1,309)	1:A:63:HIS:H	1:A:64:VAL:HG21	17	0.02
(1,309)	1:A:63:HIS:H	1:A:64:VAL:HG22	17	0.02
(1,309)	1:A:63:HIS:H	1:A:64:VAL:HG23	17	0.02
(1,288)	1:A:2:LEU:HD11	1:A:3:ILE:H	4	0.02
(1,288)	1:A:2:LEU:HD12	1:A:3:ILE:H	4	0.02
(1,288)	1:A:2:LEU:HD13	1:A:3:ILE:H	4	0.02
(1,253)	1:A:68:ILE:H	1:A:72:LEU:HD11	6	0.02
(1,253)	1:A:68:ILE:H	1:A:72:LEU:HD12	6	0.02
(1,253)	1:A:68:ILE:H	1:A:72:LEU:HD13	6	0.02
(1,252)	1:A:68:ILE:H	1:A:72:LEU:HD21	4	0.02
(1,252)	1:A:68:ILE:H	1:A:72:LEU:HD22	4	0.02
(1,252)	1:A:68:ILE:H	1:A:72:LEU:HD23	4	0.02
(1,252)	1:A:68:ILE:H	1:A:72:LEU:HD21	12	0.02
(1,252)	1:A:68:ILE:H	1:A:72:LEU:HD22	12	0.02
(1,252)	1:A:68:ILE:H	1:A:72:LEU:HD23	12	0.02
(1,248)	1:A:76:LEU:HD11	1:A:77:VAL:H	18	0.02
(1,248)	1:A:76:LEU:HD12	1:A:77:VAL:H	18	0.02
(1,248)	1:A:76:LEU:HD13	1:A:77:VAL:H	18	0.02
(1,242)	1:A:64:VAL:HG11	1:A:66:ARG:H	20	0.02
(1,242)	1:A:64:VAL:HG12	1:A:66:ARG:H	20	0.02
(1,242)	1:A:64:VAL:HG13	1:A:66:ARG:H	20	0.02
(1,232)	1:A:145:ALA:H	1:A:148:ALA:H	12	0.02
(1,225)	1:A:95:PHE:HD1	1:A:99:VAL:H	17	0.02
(1,225)	1:A:95:PHE:HD2	1:A:99:VAL:H	17	0.02
(1,222)	1:A:109:ASP:H	1:A:113:VAL:HG21	16	0.02
(1,222)	1:A:109:ASP:H	1:A:113:VAL:HG22	16	0.02
(1,222)	1:A:109:ASP:H	1:A:113:VAL:HG23	16	0.02
(1,213)	1:A:172:VAL:HG21	1:A:176:ILE:H	17	0.02
(1,213)	1:A:172:VAL:HG22	1:A:176:ILE:H	17	0.02
(1,213)	1:A:172:VAL:HG23	1:A:176:ILE:H	17	0.02



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

(1,191) 1:A:64:VAL:HG11 1:A:65:GLU:H 14 (1,191) 1:A:64:VAL:HG12 1:A:65:GLU:H 14 (1,191) 1:A:64:VAL:HG13 1:A:65:GLU:H 14 (1,168) 1:A:110:LYS:H 1:A:113:VAL:HG21 13 (1,168) 1:A:110:LYS:H 1:A:113:VAL:HG22 13 (1,168) 1:A:110:LYS:H 1:A:113:VAL:HG23 13 (1,160) 1:A:44:LEU:H 1:A:44:LEU:HD11 14 (1,160) 1:A:44:LEU:H 1:A:44:LEU:HD12 14 (1,160) 1:A:44:LEU:H 1:A:44:LEU:HD13 14 (1,160) 1:A:44:LEU:H 1:A:44:LEU:HD11 18	0.02 0.02 0.02 0.02 0.02 0.02 0.02 0.02 0.02 0.02 0.02 0.02 0.02
(1,191) 1:A:64:VAL:HG12 1:A:65:GLU:H 14 (1,191) 1:A:64:VAL:HG13 1:A:65:GLU:H 14 (1,168) 1:A:110:LYS:H 1:A:113:VAL:HG21 13 (1,168) 1:A:110:LYS:H 1:A:113:VAL:HG22 13 (1,168) 1:A:110:LYS:H 1:A:113:VAL:HG23 13 (1,160) 1:A:44:LEU:H 1:A:44:LEU:HD11 14 (1,160) 1:A:44:LEU:H 1:A:44:LEU:HD12 14 (1,160) 1:A:44:LEU:H 1:A:44:LEU:HD13 14 (1,160) 1:A:44:LEU:H 1:A:44:LEU:HD11 18	0.02 0.02 0.02 0.02 0.02 0.02 0.02 0.02 0.02
(1,191) 1:A:64:VAL:HG13 1:A:65:GLU:H 14 0 (1,168) 1:A:110:LYS:H 1:A:113:VAL:HG21 13 0 (1,168) 1:A:110:LYS:H 1:A:113:VAL:HG22 13 0 (1,168) 1:A:110:LYS:H 1:A:113:VAL:HG23 13 0 (1,160) 1:A:44:LEU:H 1:A:44:LEU:HD11 14 0 (1,160) 1:A:44:LEU:H 1:A:44:LEU:HD12 14 0 (1,160) 1:A:44:LEU:H 1:A:44:LEU:HD13 14 0 (1,160) 1:A:44:LEU:H 1:A:44:LEU:HD11 18 0	0.02 0.02 0.02 0.02 0.02 0.02 0.02
(1,168) 1:A:110:LYS:H 1:A:113:VAL:HG21 13 (1,168) 1:A:110:LYS:H 1:A:113:VAL:HG22 13 (1,168) 1:A:110:LYS:H 1:A:113:VAL:HG23 13 (1,160) 1:A:44:LEU:H 1:A:44:LEU:HD11 14 (1,160) 1:A:44:LEU:H 1:A:44:LEU:HD12 14 (1,160) 1:A:44:LEU:H 1:A:44:LEU:HD13 14 (1,160) 1:A:44:LEU:H 1:A:44:LEU:HD11 18	0.02 0.02 0.02 0.02 0.02 0.02 0.02
(1,168) 1:A:110:LYS:H 1:A:113:VAL:HG22 13 0 (1,168) 1:A:110:LYS:H 1:A:113:VAL:HG23 13 0 (1,160) 1:A:44:LEU:H 1:A:44:LEU:HD11 14 0 (1,160) 1:A:44:LEU:H 1:A:44:LEU:HD12 14 0 (1,160) 1:A:44:LEU:H 1:A:44:LEU:HD13 14 0 (1,160) 1:A:44:LEU:H 1:A:44:LEU:HD11 18 0	0.02 0.02 0.02 0.02 0.02
(1,168) 1:A:110:LYS:H 1:A:113:VAL:HG23 13 (1,160) 1:A:44:LEU:H 1:A:44:LEU:HD11 14 (1,160) 1:A:44:LEU:H 1:A:44:LEU:HD12 14 (1,160) 1:A:44:LEU:H 1:A:44:LEU:HD13 14 (1,160) 1:A:44:LEU:H 1:A:44:LEU:HD11 18	0.02 0.02 0.02 0.02
(1,160) 1:A:44:LEU:H 1:A:44:LEU:HD11 14 0 (1,160) 1:A:44:LEU:H 1:A:44:LEU:HD12 14 0 (1,160) 1:A:44:LEU:H 1:A:44:LEU:HD13 14 0 (1,160) 1:A:44:LEU:H 1:A:44:LEU:HD11 18 0	0.02 0.02 0.02
(1,160) 1:A:44:LEU:H 1:A:44:LEU:HD12 14 0 (1,160) 1:A:44:LEU:H 1:A:44:LEU:HD13 14 0 (1,160) 1:A:44:LEU:H 1:A:44:LEU:HD11 18 0	0.02
(1,160) 1:A:44:LEU:H 1:A:44:LEU:HD13 14 (1,160) 1:A:44:LEU:H 1:A:44:LEU:HD11 18 (0.02
(1,160) 1:A:44:LEU:H 1:A:44:LEU:HD11 18	
	0.02
(1.100) 1.4.4.1.011.11	
(1,160) 1:A:44:LEU:H 1:A:44:LEU:HD12 18	0.02
(1,160) 1:A:44:LEU:H 1:A:44:LEU:HD13 18	0.02
(1,159) 1:A:2:LEU:HD11 1:A:179:GLU:H 6	0.02
(1,159) 1:A:2:LEU:HD12 1:A:179:GLU:H 6	0.02
(1,159) 1:A:2:LEU:HD13 1:A:179:GLU:H 6	0.02
(1,159) 1:A:2:LEU:HD11 1:A:179:GLU:H 9	0.02
(1,159) 1:A:2:LEU:HD12 1:A:179:GLU:H 9	0.02
(1,159) 1:A:2:LEU:HD13 1:A:179:GLU:H 9	0.02
(1,159) 1:A:2:LEU:HD11 1:A:179:GLU:H 17	0.02
(1,159) 1:A:2:LEU:HD12 1:A:179:GLU:H 17	0.02
(1,159) 1:A:2:LEU:HD13 1:A:179:GLU:H 17 (0.02
(1,149) 1:A:71:VAL:HG21 1:A:78:GLU:H 16	0.02
(1,149) 1:A:71:VAL:HG22 1:A:78:GLU:H 16	0.02
(1,149) 1:A:71:VAL:HG23 1:A:78:GLU:H 16	0.02
(1,146) 1:A:78:GLU:H 1:A:139:PHE:HZ 10 (0.02
(1,135) 1:A:23:VAL:H 1:A:26:LEU:H 2	0.02
(1,120) 1:A:91:TYR:H 1:A:91:TYR:HD1 8	0.02
(1,116) 1:A:74:HIS:H 1:A:76:LEU:HD11 3	0.02
(1,116) 1:A:74:HIS:H 1:A:76:LEU:HD12 3	0.02
	0.02
(1,116) 1:A:74:HIS:H 1:A:76:LEU:HD11 18	0.02
(1,116) 1:A:74:HIS:H 1:A:76:LEU:HD12 18	0.02
(1,116) 1:A:74:HIS:H 1:A:76:LEU:HD13 18	0.02
	0.02
(1,1135) 1:A:23:VAL:O 1:A:27:VAL:H 11 (0.02
(1,1129) 1:A:122:GLY:O 1:A:126:SER:H 1	0.02
(1,1129) 1:A:122:GLY:O 1:A:126:SER:H 12	0.02
(1,1129) 1:A:122:GLY:O 1:A:126:SER:H 15	0.02
(1,1127) 1:A:121:GLN:O 1:A:125:VAL:H 16	0.02
(1,1121) 1:A:118:LYS:O 1:A:122:GLY:H 5	0.02
(1,1115) 1:A:115:ALA:O 1:A:119:LYS:H 1	0.02



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1105)	1:A:99:VAL:O	1:A:103:MET:H	14	0.02
(1,1100)	1:A:96:MET:O	1:A:100:ILE:N	5	0.02
(1,1100)	1:A:96:MET:O	1:A:100:ILE:N	18	0.02
(1,1099)	1:A:96:MET:O	1:A:100:ILE:H	3	0.02
(1,1099)	1:A:96:MET:O	1:A:100:ILE:H	6	0.02
(1,1093)	1:A:93:LYS:O	1:A:97:LYS:H	15	0.02
(1,1093)	1:A:93:LYS:O	1:A:97:LYS:H	19	0.02
(1,1091)	1:A:92:ILE:O	1:A:96:MET:H	8	0.02
(1,1087)	1:A:90:ALA:O	1:A:94:LYS:H	5	0.02
(1,1087)	1:A:90:ALA:O	1:A:94:LYS:H	13	0.02
(1,1079)	1:A:86:SER:O	1:A:90:ALA:H	3	0.02
(1,1079)	1:A:86:SER:O	1:A:90:ALA:H	8	0.02
(1,1079)	1:A:86:SER:O	1:A:90:ALA:H	17	0.02
(1,1075)	1:A:37:ARG:H	1:A:65:GLU:O	4	0.02
(1,1073)	1:A:37:ARG:O	1:A:65:GLU:H	6	0.02
(1,1071)	1:A:35:VAL:H	1:A:67:GLY:O	11	0.02
(1,1069)	1:A:35:VAL:O	1:A:67:GLY:H	1	0.02
(1,1069)	1:A:35:VAL:O	1:A:67:GLY:H	2	0.02
(1,1060)	1:A:28:TYR:O	1:A:171:LEU:N	1	0.02
(1,1055)	1:A:161:VAL:O	1:A:164:THR:H	14	0.02
(1,1053)	1:A:159:ARG:H	1:A:166:VAL:O	7	0.02
(1,1053)	1:A:159:ARG:H	1:A:166:VAL:O	11	0.02
(1,1046)	1:A:155:ILE:N	1:A:170:MET:O	4	0.02
(1,1041)	1:A:139:PHE:H	1:A:154:ALA:O	14	0.02
(1,1034)	1:A:79:MET:N	1:A:138:PHE:O	6	0.02
(1,1028)	1:A:77:VAL:O	1:A:140:ILE:N	17	0.02
(1,1027)	1:A:77:VAL:O	1:A:140:ILE:H	2	0.02
(1,1027)	1:A:77:VAL:O	1:A:140:ILE:H	4	0.02
(1,1021)	1:A:3:ILE:H	1:A:179:GLU:O	16	0.02
(1,1019)	1:A:3:ILE:O	1:A:179:GLU:H	2	0.02
(1,1015)	1:A:4:TYR:O	1:A:14:SER:H	2	0.02
(1,1015)	1:A:4:TYR:O	1:A:14:SER:H	3	0.02
(1,1015)	1:A:4:TYR:O	1:A:14:SER:H	4	0.02
(1,1015)	1:A:4:TYR:O	1:A:14:SER:H	6	0.02
(1,1015)	1:A:4:TYR:O	1:A:14:SER:H	12	0.02
(1,1013)	1:A:2:LEU:H	1:A:16:ASP:O	11	0.02
(1,1013)	1:A:2:LEU:H	1:A:16:ASP:O	17	0.02
(1,1013)	1:A:2:LEU:H	1:A:16:ASP:O	19	0.02
(1,1013)	1:A:2:LEU:H	1:A:16:ASP:O	20	0.02
(1,999)	1:A:120:ILE:HD11	1:A:172:VAL:HG21	17	0.01
(1,999)	1:A:120:ILE:HD11	1:A:172:VAL:HG22	17	0.01
(1,999)	1:A:120:ILE:HD11	1:A:172:VAL:HG23	17	0.01



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,999)	1:A:120:ILE:HD12	1:A:172:VAL:HG21	17	0.01
(1,999)	1:A:120:ILE:HD12	1:A:172:VAL:HG22	17	0.01
(1,999)	1:A:120:ILE:HD12	1:A:172:VAL:HG23	17	0.01
(1,999)	1:A:120:ILE:HD13	1:A:172:VAL:HG21	17	0.01
(1,999)	1:A:120:ILE:HD13	1:A:172:VAL:HG22	17	0.01
(1,999)	1:A:120:ILE:HD13	1:A:172:VAL:HG23	17	0.01
(1,998)	1:A:68:ILE:HD11	1:A:156:ILE:HD11	2	0.01
(1,998)	1:A:68:ILE:HD11	1:A:156:ILE:HD12	2	0.01
(1,998)	1:A:68:ILE:HD11	1:A:156:ILE:HD13	2	0.01
(1,998)	1:A:68:ILE:HD12	1:A:156:ILE:HD11	2	0.01
(1,998)	1:A:68:ILE:HD12	1:A:156:ILE:HD12	2	0.01
(1,998)	1:A:68:ILE:HD12	1:A:156:ILE:HD13	2	0.01
(1,998)	1:A:68:ILE:HD13	1:A:156:ILE:HD11	2	0.01
(1,998)	1:A:68:ILE:HD13	1:A:156:ILE:HD12	2	0.01
(1,998)	1:A:68:ILE:HD13	1:A:156:ILE:HD13	2	0.01
(1,985)	1:A:99:VAL:HG11	1:A:172:VAL:HG11	20	0.01
(1,985)	1:A:99:VAL:HG11	1:A:172:VAL:HG12	20	0.01
(1,985)	1:A:99:VAL:HG11	1:A:172:VAL:HG13	20	0.01
(1,985)	1:A:99:VAL:HG12	1:A:172:VAL:HG11	20	0.01
(1,985)	1:A:99:VAL:HG12	1:A:172:VAL:HG12	20	0.01
(1,985)	1:A:99:VAL:HG12	1:A:172:VAL:HG13	20	0.01
(1,985)	1:A:99:VAL:HG13	1:A:172:VAL:HG11	20	0.01
(1,985)	1:A:99:VAL:HG13	1:A:172:VAL:HG12	20	0.01
(1,985)	1:A:99:VAL:HG13	1:A:172:VAL:HG13	20	0.01
(1,983)	1:A:100:ILE:HD11	1:A:113:VAL:HG11	20	0.01
(1,983)	1:A:100:ILE:HD11	1:A:113:VAL:HG12	20	0.01
(1,983)	1:A:100:ILE:HD11	1:A:113:VAL:HG13	20	0.01
(1,983)	1:A:100:ILE:HD12	1:A:113:VAL:HG11	20	0.01
(1,983)	1:A:100:ILE:HD12	1:A:113:VAL:HG12	20	0.01
(1,983)	1:A:100:ILE:HD12	1:A:113:VAL:HG13	20	0.01
(1,983)	1:A:100:ILE:HD13	1:A:113:VAL:HG11	20	0.01
(1,983)	1:A:100:ILE:HD13	1:A:113:VAL:HG12	20	0.01
(1,983)	1:A:100:ILE:HD13	1:A:113:VAL:HG13	20	0.01
(1,981)	1:A:68:ILE:HD11	1:A:156:ILE:HD11	2	0.01
(1,981)	1:A:68:ILE:HD11	1:A:156:ILE:HD12	2	0.01
(1,981)	1:A:68:ILE:HD11	1:A:156:ILE:HD13	2	0.01
(1,981)	1:A:68:ILE:HD12	1:A:156:ILE:HD11	2	0.01
(1,981)	1:A:68:ILE:HD12	1:A:156:ILE:HD12	2	0.01
(1,981)	1:A:68:ILE:HD12	1:A:156:ILE:HD13	2	0.01
(1,981)	1:A:68:ILE:HD13	1:A:156:ILE:HD11	2	0.01
(1,981)	1:A:68:ILE:HD13	1:A:156:ILE:HD12	2	0.01
(1,981)	1:A:68:ILE:HD13	1:A:156:ILE:HD13	2	0.01
				oroz



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,977)	1:A:113:VAL:HG11	1:A:100:ILE:HD11	20	0.01
(1,977)	1:A:113:VAL:HG11	1:A:100:ILE:HD12	20	0.01
(1,977)	1:A:113:VAL:HG11	1:A:100:ILE:HD13	20	0.01
(1,977)	1:A:113:VAL:HG12	1:A:100:ILE:HD11	20	0.01
(1,977)	1:A:113:VAL:HG12	1:A:100:ILE:HD12	20	0.01
(1,977)	1:A:113:VAL:HG12	1:A:100:ILE:HD13	20	0.01
(1,977)	1:A:113:VAL:HG13	1:A:100:ILE:HD11	20	0.01
(1,977)	1:A:113:VAL:HG13	1:A:100:ILE:HD12	20	0.01
(1,977)	1:A:113:VAL:HG13	1:A:100:ILE:HD13	20	0.01
(1,945)	1:A:152:GLN:HE21	1:A:172:VAL:H	17	0.01
(1,945)	1:A:152:GLN:HE22	1:A:172:VAL:H	17	0.01
(1,928)	1:A:106:ASN:H	1:A:106:ASN:HD21	20	0.01
(1,924)	1:A:80:ASN:H	1:A:80:ASN:HD21	9	0.01
(1,890)	1:A:44:LEU:HD21	1:A:45:ALA:H	17	0.01
(1,890)	1:A:44:LEU:HD22	1:A:45:ALA:H	17	0.01
(1,890)	1:A:44:LEU:HD23	1:A:45:ALA:H	17	0.01
(1,874)	1:A:64:VAL:HG21	1:A:66:ARG:H	4	0.01
(1,874)	1:A:64:VAL:HG22	1:A:66:ARG:H	4	0.01
(1,874)	1:A:64:VAL:HG23	1:A:66:ARG:H	4	0.01
(1,861)	1:A:139:PHE:H	1:A:156:ILE:HD11	5	0.01
(1,861)	1:A:139:PHE:H	1:A:156:ILE:HD12	5	0.01
(1,861)	1:A:139:PHE:H	1:A:156:ILE:HD13	5	0.01
(1,861)	1:A:139:PHE:H	1:A:156:ILE:HD11	14	0.01
(1,861)	1:A:139:PHE:H	1:A:156:ILE:HD12	14	0.01
(1,861)	1:A:139:PHE:H	1:A:156:ILE:HD13	14	0.01
(1,850)	1:A:112:ASP:H	1:A:113:VAL:HG21	16	0.01
(1,850)	1:A:112:ASP:H	1:A:113:VAL:HG22	16	0.01
(1,850)	1:A:112:ASP:H	1:A:113:VAL:HG23	16	0.01
(1,835)	1:A:140:ILE:HD11	1:A:146:GLU:H	16	0.01
(1,835)	1:A:140:ILE:HD12	1:A:146:GLU:H	16	0.01
(1,835)	1:A:140:ILE:HD13	1:A:146:GLU:H	16	0.01
(1,833)	1:A:75:LYS:H	1:A:76:LEU:HD11	6	0.01
(1,833)	1:A:75:LYS:H	1:A:76:LEU:HD12	6	0.01
(1,833)	1:A:75:LYS:H	1:A:76:LEU:HD13	6	0.01
(1,832)	1:A:120:ILE:HD11	1:A:174:GLU:H	13	0.01
(1,832)	1:A:120:ILE:HD12	1:A:174:GLU:H	13	0.01
(1,832)	1:A:120:ILE:HD13	1:A:174:GLU:H	13	0.01
(1,824)	1:A:42:ILE:HD11	1:A:43:VAL:H	1	0.01
(1,824)	1:A:42:ILE:HD12	1:A:43:VAL:H	1	0.01
(1,824)	1:A:42:ILE:HD13	1:A:43:VAL:H	1	0.01
(1,821)	1:A:32:GLY:H	1:A:70:ILE:HD11	14	0.01
(1,821)	1:A:32:GLY:H	1:A:70:ILE:HD12	14	0.01



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,821)	1:A:32:GLY:H	1:A:70:ILE:HD13	14	0.01
(1,819)	1:A:76:LEU:HD11	1:A:140:ILE:H	15	0.01
(1,819)	1:A:76:LEU:HD12	1:A:140:ILE:H	15	0.01
(1,819)	1:A:76:LEU:HD13	1:A:140:ILE:H	15	0.01
(1,819)	1:A:76:LEU:HD11	1:A:140:ILE:H	17	0.01
(1,819)	1:A:76:LEU:HD12	1:A:140:ILE:H	17	0.01
(1,819)	1:A:76:LEU:HD13	1:A:140:ILE:H	17	0.01
(1,814)	1:A:27:VAL:HG11	1:A:173:LYS:H	14	0.01
(1,814)	1:A:27:VAL:HG12	1:A:173:LYS:H	14	0.01
(1,814)	1:A:27:VAL:HG13	1:A:173:LYS:H	14	0.01
(1,804)	1:A:75:LYS:H	1:A:76:LEU:HD21	4	0.01
(1,804)	1:A:75:LYS:H	1:A:76:LEU:HD22	4	0.01
(1,804)	1:A:75:LYS:H	1:A:76:LEU:HD23	4	0.01
(1,804)	1:A:75:LYS:H	1:A:76:LEU:HD21	16	0.01
(1,804)	1:A:75:LYS:H	1:A:76:LEU:HD22	16	0.01
(1,804)	1:A:75:LYS:H	1:A:76:LEU:HD23	16	0.01
(1,797)	1:A:92:ILE:HD11	1:A:96:MET:H	3	0.01
(1,797)	1:A:92:ILE:HD12	1:A:96:MET:H	3	0.01
(1,797)	1:A:92:ILE:HD13	1:A:96:MET:H	3	0.01
(1,782)	1:A:22:LEU:HD21	1:A:26:LEU:H	4	0.01
(1,782)	1:A:22:LEU:HD22	1:A:26:LEU:H	4	0.01
(1,782)	1:A:22:LEU:HD23	1:A:26:LEU:H	4	0.01
(1,775)	1:A:71:VAL:HG11	1:A:77:VAL:H	4	0.01
(1,775)	1:A:71:VAL:HG12	1:A:77:VAL:H	4	0.01
(1,775)	1:A:71:VAL:HG13	1:A:77:VAL:H	4	0.01
(1,775)	1:A:71:VAL:HG11	1:A:77:VAL:H	6	0.01
(1,775)	1:A:71:VAL:HG12	1:A:77:VAL:H	6	0.01
(1,775)	1:A:71:VAL:HG13	1:A:77:VAL:H	6	0.01
(1,775)	1:A:71:VAL:HG11	1:A:77:VAL:H	13	0.01
(1,775)	1:A:71:VAL:HG12	1:A:77:VAL:H	13	0.01
(1,775)	1:A:71:VAL:HG13	1:A:77:VAL:H	13	0.01
(1,766)	1:A:77:VAL:HG11	1:A:140:ILE:HD11	1	0.01
(1,766)	1:A:77:VAL:HG11	1:A:140:ILE:HD12	1	0.01
(1,766)	1:A:77:VAL:HG11	1:A:140:ILE:HD13	1	0.01
(1,766)	1:A:77:VAL:HG12	1:A:140:ILE:HD11	1	0.01
(1,766)	1:A:77:VAL:HG12	1:A:140:ILE:HD12	1	0.01
(1,766)	1:A:77:VAL:HG12	1:A:140:ILE:HD13	1	0.01
(1,766)	1:A:77:VAL:HG13	1:A:140:ILE:HD11	1	0.01
(1,766)	1:A:77:VAL:HG13	1:A:140:ILE:HD12	1	0.01
(1,766)	1:A:77:VAL:HG13	1:A:140:ILE:HD13	1	0.01
(1,757)	1:A:13:LEU:HD21	1:A:176:ILE:HD11	9	0.01
(1,757)	1:A:13:LEU:HD21	1:A:176:ILE:HD12	9	0.01



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,757)	1:A:13:LEU:HD21	1:A:176:ILE:HD13	9	0.01
(1,757)	1:A:13:LEU:HD22	1:A:176:ILE:HD11	9	0.01
(1,757)	1:A:13:LEU:HD22	1:A:176:ILE:HD12	9	0.01
(1,757)	1:A:13:LEU:HD22	1:A:176:ILE:HD13	9	0.01
(1,757)	1:A:13:LEU:HD23	1:A:176:ILE:HD11	9	0.01
(1,757)	1:A:13:LEU:HD23	1:A:176:ILE:HD12	9	0.01
(1,757)	1:A:13:LEU:HD23	1:A:176:ILE:HD13	9	0.01
(1,751)	1:A:36:VAL:HG11	1:A:44:LEU:HD21	5	0.01
(1,751)	1:A:36:VAL:HG11	1:A:44:LEU:HD22	5	0.01
(1,751)	1:A:36:VAL:HG11	1:A:44:LEU:HD23	5	0.01
(1,751)	1:A:36:VAL:HG12	1:A:44:LEU:HD21	5	0.01
(1,751)	1:A:36:VAL:HG12	1:A:44:LEU:HD22	5	0.01
(1,751)	1:A:36:VAL:HG12	1:A:44:LEU:HD23	5	0.01
(1,751)	1:A:36:VAL:HG13	1:A:44:LEU:HD21	5	0.01
(1,751)	1:A:36:VAL:HG13	1:A:44:LEU:HD22	5	0.01
(1,751)	1:A:36:VAL:HG13	1:A:44:LEU:HD23	5	0.01
(1,742)	1:A:36:VAL:HG11	1:A:44:LEU:HD11	5	0.01
(1,742)	1:A:36:VAL:HG11	1:A:44:LEU:HD12	5	0.01
(1,742)	1:A:36:VAL:HG11	1:A:44:LEU:HD13	5	0.01
(1,742)	1:A:36:VAL:HG12	1:A:44:LEU:HD11	5	0.01
(1,742)	1:A:36:VAL:HG12	1:A:44:LEU:HD12	5	0.01
(1,742)	1:A:36:VAL:HG12	1:A:44:LEU:HD13	5	0.01
(1,742)	1:A:36:VAL:HG13	1:A:44:LEU:HD11	5	0.01
(1,742)	1:A:36:VAL:HG13	1:A:44:LEU:HD12	5	0.01
(1,742)	1:A:36:VAL:HG13	1:A:44:LEU:HD13	5	0.01
(1,730)	1:A:27:VAL:HG11	1:A:120:ILE:HD11	17	0.01
(1,730)	1:A:27:VAL:HG11	1:A:120:ILE:HD12	17	0.01
(1,730)	1:A:27:VAL:HG11	1:A:120:ILE:HD13	17	0.01
(1,730)	1:A:27:VAL:HG12	1:A:120:ILE:HD11	17	0.01
(1,730)	1:A:27:VAL:HG12	1:A:120:ILE:HD12	17	0.01
(1,730)	1:A:27:VAL:HG12	1:A:120:ILE:HD13	17	0.01
(1,730)	1:A:27:VAL:HG13	1:A:120:ILE:HD11	17	0.01
(1,730)	1:A:27:VAL:HG13	1:A:120:ILE:HD12	17	0.01
(1,730)	1:A:27:VAL:HG13	1:A:120:ILE:HD13	17	0.01
(1,728)	1:A:120:ILE:HD11	1:A:172:VAL:HG21	17	0.01
(1,728)	1:A:120:ILE:HD11	1:A:172:VAL:HG22	17	0.01
(1,728)	1:A:120:ILE:HD11	1:A:172:VAL:HG23	17	0.01
(1,728)	1:A:120:ILE:HD12	1:A:172:VAL:HG21	17	0.01
(1,728)	1:A:120:ILE:HD12	1:A:172:VAL:HG22	17	0.01
(1,728)	1:A:120:ILE:HD12	1:A:172:VAL:HG23	17	0.01
(1,728)	1:A:120:ILE:HD13	1:A:172:VAL:HG21	17	0.01
(1,728)	1:A:120:ILE:HD13	1:A:172:VAL:HG22	17	0.01



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,728)	1:A:120:ILE:HD13	1:A:172:VAL:HG23	17	0.01
(1,725)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:172:VAL:HG11	15	0.01
(1,725)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:172:VAL:HG12	15	0.01
(1,725)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:172:VAL:HG13	15	0.01
(1,725)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:172:VAL:HG11	15	0.01
(1,725)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:172:VAL:HG12	15	0.01
(1,725)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:172:VAL:HG13	15	0.01
(1,725)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:172:VAL:HG11	15	0.01
(1,725)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:172:VAL:HG12	15	0.01
(1,725)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:172:VAL:HG13	15	0.01
(1,684)	1:A:132:ARG:H	1:A:135:ASN:H	5	0.01
(1,66)	1:A:137:ALA:H	1:A:156:ILE:H	3	0.01
(1,648)	1:A:56:GLU:H	1:A:57:ASP:H	20	0.01
(1,610)	1:A:127:LEU:H	1:A:129:ALA:H	8	0.01
(1,61)	1:A:123:TRP:HE1	1:A:127:LEU:HD11	17	0.01
(1,61)	1:A:123:TRP:HE1	1:A:127:LEU:HD12	17	0.01
(1,61)	1:A:123:TRP:HE1	1:A:127:LEU:HD13	17	0.01
(1,602)	1:A:80:ASN:H	1:A:80:ASN:HD21	9	0.01
(1,60)	1:A:27:VAL:HG21	1:A:123:TRP:HE1	3	0.01
(1,60)	1:A:27:VAL:HG22	1:A:123:TRP:HE1	3	0.01
(1,60)	1:A:27:VAL:HG23	1:A:123:TRP:HE1	3	0.01
(1,592)	1:A:128:LEU:HD21	1:A:136:LEU:HD21	15	0.01
(1,592)	1:A:128:LEU:HD21	1:A:136:LEU:HD22	15	0.01
(1,592)	1:A:128:LEU:HD21	1:A:136:LEU:HD23	15	0.01
(1,592)	1:A:128:LEU:HD22	1:A:136:LEU:HD21	15	0.01
(1,592)	1:A:128:LEU:HD22	1:A:136:LEU:HD22	15	0.01
(1,592)	1:A:128:LEU:HD22	1:A:136:LEU:HD23	15	0.01
(1,592)	1:A:128:LEU:HD23	1:A:136:LEU:HD21	15	0.01
(1,592)	1:A:128:LEU:HD23	1:A:136:LEU:HD22	15	0.01
(1,592)	1:A:128:LEU:HD23	1:A:136:LEU:HD23	15	0.01
(1,576)	1:A:128:LEU:HD11	1:A:155:ILE:HD11	11	0.01
(1,576)	1:A:128:LEU:HD11	1:A:155:ILE:HD12	11	0.01
(1,576)	1:A:128:LEU:HD11	1:A:155:ILE:HD13	11	0.01
(1,576)	1:A:128:LEU:HD12	1:A:155:ILE:HD11	11	0.01
(1,576)	1:A:128:LEU:HD12	1:A:155:ILE:HD12	11	0.01
(1,576)	1:A:128:LEU:HD12	1:A:155:ILE:HD13	11	0.01
(1,576)	1:A:128:LEU:HD13	1:A:155:ILE:HD11	11	0.01
(1,576)	1:A:128:LEU:HD13	1:A:155:ILE:HD12	11	0.01
(1,576)	1:A:128:LEU:HD13	1:A:155:ILE:HD13	11	0.01
(1,574)	1:A:30:PHE:HD1	1:A:70:ILE:HD11	20	0.01
(1,574)	1:A:30:PHE:HD1	1:A:70:ILE:HD12	20	0.01
(1,574)	1:A:30:PHE:HD1	1:A:70:ILE:HD13	20	0.01



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,574)	1:A:30:PHE:HD2	1:A:70:ILE:HD11	20	0.01
(1,574)	1:A:30:PHE:HD2	1:A:70:ILE:HD12	20	0.01
(1,574)	1:A:30:PHE:HD2	1:A:70:ILE:HD13	20	0.01
(1,562)	1:A:4:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD11	11	0.01
(1,562)	1:A:4:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD12	11	0.01
(1,562)	1:A:4:TYR:HD1	1:A:176:ILE:HD13	11	0.01
(1,560)	1:A:171:LEU:HD11	1:A:176:ILE:HD11	16	0.01
(1,560)	1:A:171:LEU:HD11	1:A:176:ILE:HD12	16	0.01
(1,560)	1:A:171:LEU:HD11	1:A:176:ILE:HD13	16	0.01
(1,560)	1:A:171:LEU:HD12	1:A:176:ILE:HD11	16	0.01
(1,560)	1:A:171:LEU:HD12	1:A:176:ILE:HD12	16	0.01
(1,560)	1:A:171:LEU:HD12	1:A:176:ILE:HD13	16	0.01
(1,560)	1:A:171:LEU:HD13	1:A:176:ILE:HD11	16	0.01
(1,560)	1:A:171:LEU:HD13	1:A:176:ILE:HD12	16	0.01
(1,560)	1:A:171:LEU:HD13	1:A:176:ILE:HD13	16	0.01
(1,557)	1:A:92:ILE:HD11	1:A:124:VAL:HG21	2	0.01
(1,557)	1:A:92:ILE:HD11	1:A:124:VAL:HG22	2	0.01
(1,557)	1:A:92:ILE:HD11	1:A:124:VAL:HG23	2	0.01
(1,557)	1:A:92:ILE:HD12	1:A:124:VAL:HG21	2	0.01
(1,557)	1:A:92:ILE:HD12	1:A:124:VAL:HG22	2	0.01
(1,557)	1:A:92:ILE:HD12	1:A:124:VAL:HG23	2	0.01
(1,557)	1:A:92:ILE:HD13	1:A:124:VAL:HG21	2	0.01
(1,557)	1:A:92:ILE:HD13	1:A:124:VAL:HG22	2	0.01
(1,557)	1:A:92:ILE:HD13	1:A:124:VAL:HG23	2	0.01
(1,553)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:128:LEU:HD21	2	0.01
(1,553)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:128:LEU:HD22	2	0.01
(1,553)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:128:LEU:HD23	2	0.01
(1,553)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:128:LEU:HD21	2	0.01
(1,553)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:128:LEU:HD22	2	0.01
(1,553)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:128:LEU:HD23	2	0.01
(1,553)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:128:LEU:HD21	2	0.01
(1,553)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:128:LEU:HD22	2	0.01
(1,553)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:128:LEU:HD23	2	0.01
(1,553)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:128:LEU:HD21	15	0.01
(1,553)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:128:LEU:HD22	15	0.01
(1,553)	1:A:124:VAL:HG11	1:A:128:LEU:HD23	15	0.01
(1,553)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:128:LEU:HD21	15	0.01
(1,553)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:128:LEU:HD22	15	0.01
(1,553)	1:A:124:VAL:HG12	1:A:128:LEU:HD23	15	0.01
(1,553)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:128:LEU:HD21	15	0.01
(1,553)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:128:LEU:HD22	15	0.01
(1,553)	1:A:124:VAL:HG13	1:A:128:LEU:HD23	15	0.01



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,54)	1:A:30:PHE:H	1:A:169:LEU:HD21	19	0.01
(1,54)	1:A:30:PHE:H	1:A:30:PHE:H 1:A:169:LEU:HD22		0.01
(1,54)	1:A:30:PHE:H	1:A:169:LEU:HD23	19	0.01
(1,537)	1:A:99:VAL:HG21	1:A:116:PHE:HE1	2	0.01
(1,537)	1:A:99:VAL:HG22	1:A:116:PHE:HE1	2	0.01
(1,537)	1:A:99:VAL:HG23	1:A:116:PHE:HE1	2	0.01
(1,532)	1:A:99:VAL:HG11	1:A:172:VAL:HG11	20	0.01
(1,532)	1:A:99:VAL:HG11	1:A:172:VAL:HG12	20	0.01
(1,532)	1:A:99:VAL:HG11	1:A:172:VAL:HG13	20	0.01
(1,532)	1:A:99:VAL:HG12	1:A:172:VAL:HG11	20	0.01
(1,532)	1:A:99:VAL:HG12	1:A:172:VAL:HG12	20	0.01
(1,532)	1:A:99:VAL:HG12	1:A:172:VAL:HG13	20	0.01
(1,532)	1:A:99:VAL:HG13	1:A:172:VAL:HG11	20	0.01
(1,532)	1:A:99:VAL:HG13	1:A:172:VAL:HG12	20	0.01
(1,532)	1:A:99:VAL:HG13	1:A:172:VAL:HG13	20	0.01
(1,512)	1:A:127:LEU:HD21	1:A:136:LEU:HD21	16	0.01
(1,512)	1:A:127:LEU:HD21	1:A:136:LEU:HD22	16	0.01
(1,512)	1:A:127:LEU:HD21	1:A:136:LEU:HD23	16	0.01
(1,512)	1:A:127:LEU:HD22	1:A:136:LEU:HD21	16	0.01
(1,512)	1:A:127:LEU:HD22	1:A:136:LEU:HD22	16	0.01
(1,512)	1:A:127:LEU:HD22	1:A:136:LEU:HD23	16	0.01
(1,512)	1:A:127:LEU:HD23	1:A:136:LEU:HD21	16	0.01
(1,512)	1:A:127:LEU:HD23	1:A:136:LEU:HD22	16	0.01
(1,512)	1:A:127:LEU:HD23	1:A:136:LEU:HD23	16	0.01
(1,488)	1:A:68:ILE:HD11	1:A:156:ILE:HD11	2	0.01
(1,488)	1:A:68:ILE:HD11	1:A:156:ILE:HD12	2	0.01
(1,488)	1:A:68:ILE:HD11	68:ILE:HD11 1:A:156:ILE:HD13		0.01
(1,488)	1:A:68:ILE:HD12	1:A:156:ILE:HD11	2	0.01
(1,488)	1:A:68:ILE:HD12	1:A:156:ILE:HD12	2	0.01
(1,488)	1:A:68:ILE:HD12	1:A:156:ILE:HD13	2	0.01
(1,488)	1:A:68:ILE:HD13	1:A:156:ILE:HD11	2	0.01
(1,488)	1:A:68:ILE:HD13	1:A:156:ILE:HD12	2	0.01
(1,488)	1:A:68:ILE:HD13	1:A:156:ILE:HD13	2	0.01
(1,481)	1:A:152:GLN:HE21	1:A:171:LEU:HD21	3	0.01
(1,481)	1:A:152:GLN:HE21	1:A:171:LEU:HD22	3	0.01
(1,481)	1:A:152:GLN:HE21	1:A:171:LEU:HD23	3	0.01
(1,481)	1:A:152:GLN:HE21	1:A:171:LEU:HD21	9	0.01
(1,481)	1:A:152:GLN:HE21	1:A:171:LEU:HD22	9	0.01
(1,481)	1:A:152:GLN:HE21	1:A:171:LEU:HD23	9	0.01
(1,458)	1:A:164:THR:H	1:A:166:VAL:H	13	0.01
(1,443)	1:A:91:TYR:H	1:A:91:TYR:HE1	3	0.01
(1,415)	1:A:131:ASP:H	1:A:134:LYS:H	1	0.01



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,409)	1:A:22:LEU:HD21	1:A:25:ASP:H	8	0.01
(1,409)	1:A:22:LEU:HD22	1:A:25:ASP:H	8	0.01
(1,409)	1:A:22:LEU:HD23	1:A:25:ASP:H	8	0.01
(1,391)	1:A:23:VAL:HG11	1:A:26:LEU:H	1	0.01
(1,391)	1:A:23:VAL:HG12	1:A:26:LEU:H	1	0.01
(1,391)	1:A:23:VAL:HG13	1:A:26:LEU:H	1	0.01
(1,391)	1:A:23:VAL:HG11	1:A:26:LEU:H	4	0.01
(1,391)	1:A:23:VAL:HG12	1:A:26:LEU:H	4	0.01
(1,391)	1:A:23:VAL:HG13	1:A:26:LEU:H	4	0.01
(1,389)	1:A:172:VAL:HG21	1:A:174:GLU:H	14	0.01
(1,389)	1:A:172:VAL:HG22	1:A:174:GLU:H	14	0.01
(1,389)	1:A:172:VAL:HG23	1:A:174:GLU:H	14	0.01
(1,385)	1:A:108:ARG:H	1:A:113:VAL:HG21	10	0.01
(1,385)	1:A:108:ARG:H	1:A:113:VAL:HG22	10	0.01
(1,385)	1:A:108:ARG:H	1:A:113:VAL:HG23	10	0.01
(1,384)	1:A:104:GLU:H	1:A:108:ARG:H	20	0.01
(1,379)	1:A:33:LYS:H	1:A:35:VAL:HG21	8	0.01
(1,379)	1:A:33:LYS:H	1:A:35:VAL:HG22	8	0.01
(1,379)	1:A:33:LYS:H	1:A:35:VAL:HG23	8	0.01
(1,376)	1:A:33:LYS:H	1:A:35:VAL:H	15	0.01
(1,361)	1:A:161:VAL:HG11	1:A:164:THR:H	17	0.01
(1,361)	1:A:161:VAL:HG12	1:A:164:THR:H	17	0.01
(1,361)	1:A:161:VAL:HG13	1:A:164:THR:H	17	0.01
(1,360)	1:A:161:VAL:H	1:A:164:THR:H	7	0.01
(1,345)	1:A:98:ASN:H	1:A:99:VAL:HG21	8	0.01
(1,345)	1:A:98:ASN:H 1:A:99:VAL:HG22		8	0.01
(1,345)	1:A:98:ASN:H	1:A:99:VAL:HG23	8	0.01
(1,293)	1:A:21:LYS:H	1:A:29:GLU:H	2	0.01
(1,288)	1:A:2:LEU:HD11	1:A:3:ILE:H	5	0.01
(1,288)	1:A:2:LEU:HD12	1:A:3:ILE:H	5	0.01
(1,288)	1:A:2:LEU:HD13	1:A:3:ILE:H	5	0.01
(1,276)	1:A:62:GLU:H	1:A:64:VAL:H	19	0.01
(1,275)	1:A:61:ASP:H	1:A:62:GLU:H	4	0.01
(1,265)	1:A:70:ILE:H	1:A:72:LEU:HD11	9	0.01
(1,265)	1:A:70:ILE:H	1:A:72:LEU:HD12	9	0.01
(1,265)	1:A:70:ILE:H	1:A:72:LEU:HD13	9	0.01
(1,265)	1:A:70:ILE:H	1:A:72:LEU:HD11	17	0.01
(1,265)	1:A:70:ILE:H	1:A:72:LEU:HD12	17	0.01
(1,265)	1:A:70:ILE:H	1:A:72:LEU:HD13	17	0.01
(1,253)	1:A:68:ILE:H	1:A:72:LEU:HD11	15	0.01
(1,253)	1:A:68:ILE:H	1:A:72:LEU:HD12	15	0.01
(1,253)	1:A:68:ILE:H	1:A:72:LEU:HD13	15	0.01



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,251)	1:A:68:ILE:H	1:A:71:VAL:H	8	0.01
(1,248)	1:A:76:LEU:HD11	1:A:77:VAL:H	8	0.01
(1,248)	1:A:76:LEU:HD12	1:A:77:VAL:H	8	0.01
(1,248)	1:A:76:LEU:HD13	1:A:77:VAL:H	8	0.01
(1,241)	1:A:37:ARG:H	1:A:66:ARG:H	14	0.01
(1,225)	1:A:95:PHE:HD1	1:A:99:VAL:H	6	0.01
(1,225)	1:A:95:PHE:HD2	1:A:99:VAL:H	6	0.01
(1,223)	1:A:6:ASP:H	1:A:13:LEU:HD11	6	0.01
(1,223)	1:A:6:ASP:H	1:A:13:LEU:HD12	6	0.01
(1,223)	1:A:6:ASP:H	1:A:13:LEU:HD13	6	0.01
(1,222)	1:A:109:ASP:H	1:A:113:VAL:HG21	5	0.01
(1,222)	1:A:109:ASP:H	1:A:113:VAL:HG22	5	0.01
(1,222)	1:A:109:ASP:H	1:A:113:VAL:HG23	5	0.01
(1,209)	1:A:181:CYS:H	1:A:182:LEU:HD21	6	0.01
(1,209)	1:A:181:CYS:H	1:A:182:LEU:HD22	6	0.01
(1,209)	1:A:181:CYS:H	1:A:182:LEU:HD23	6	0.01
(1,207)	1:A:130:LYS:H	1:A:132:ARG:H	1	0.01
(1,201)	1:A:127:LEU:HD21	1:A:129:ALA:H	9	0.01
(1,201)	1:A:127:LEU:HD22	1:A:129:ALA:H	9	0.01
(1,201)	1:A:127:LEU:HD23	1:A:129:ALA:H	9	0.01
(1,201)	1:A:127:LEU:HD21	1:A:129:ALA:H	15	0.01
(1,201)	1:A:127:LEU:HD22	1:A:129:ALA:H	15	0.01
(1,201)	1:A:127:LEU:HD23	1:A:129:ALA:H	15	0.01
(1,187)	1:A:159:ARG:H	1:A:166:VAL:H	2	0.01
(1,184)	1:A:27:VAL:HG21 1:A:172:VAL:H		4	0.01
(1,184)	1:A:27:VAL:HG22	1:A:172:VAL:H	4	0.01
(1,184)	1:A:27:VAL:HG23	1:A:172:VAL:H	4	0.01
(1,160)	1:A:44:LEU:H	:LEU:H 1:A:44:LEU:HD11		0.01
(1,160)	1:A:44:LEU:H	1:A:44:LEU:HD12	4	0.01
(1,160)	1:A:44:LEU:H	1:A:44:LEU:HD13	4	0.01
(1,160)	1:A:44:LEU:H	1:A:44:LEU:HD11	5	0.01
(1,160)	1:A:44:LEU:H	1:A:44:LEU:HD12	5	0.01
(1,160)	1:A:44:LEU:H	1:A:44:LEU:HD13	5	0.01
(1,148)	1:A:71:VAL:HG11	1:A:78:GLU:H	6	0.01
(1,148)	1:A:71:VAL:HG12	1:A:78:GLU:H	6	0.01
(1,148)	1:A:71:VAL:HG13	1:A:78:GLU:H	6	0.01
(1,146)	1:A:78:GLU:H	1:A:139:PHE:HZ	3	0.01
(1,135)	1:A:23:VAL:H	1:A:26:LEU:H	6	0.01
(1,135)	1:A:23:VAL:H	1:A:26:LEU:H	7	0.01
(1,135)	1:A:23:VAL:H	1:A:26:LEU:H	12	0.01
(1,122)	1:A:17:SER:H	1:A:18:PHE:H	2	0.01
(1,1129)	1:A:122:GLY:O	1:A:126:SER:H	16	0.01



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1129)	1:A:122:GLY:O	1:A:126:SER:H	17	0.01
(1,1121)	1:A:118:LYS:O	1:A:122:GLY:H	9	0.01
(1,1115)	1:A:115:ALA:O	1:A:119:LYS:H	18	0.01
(1,1107)	1:A:100:ILE:O	1:A:104:GLU:H	17	0.01
(1,1105)	1:A:99:VAL:O	1:A:103:MET:H	6	0.01
(1,1105)	1:A:99:VAL:O	1:A:103:MET:H	20	0.01
(1,1101)	1:A:97:LYS:O	1:A:101:ASP:H	6	0.01
(1,1100)	1:A:96:MET:O	1:A:100:ILE:N	2	0.01
(1,1099)	1:A:96:MET:O	1:A:100:ILE:H	4	0.01
(1,1099)	1:A:96:MET:O	1:A:100:ILE:H	12	0.01
(1,1099)	1:A:96:MET:O	1:A:100:ILE:H	14	0.01
(1,1099)	1:A:96:MET:O	1:A:100:ILE:H	19	0.01
(1,1094)	1:A:93:LYS:O	1:A:97:LYS:N	11	0.01
(1,1094)	1:A:93:LYS:O	1:A:97:LYS:N	18	0.01
(1,1093)	1:A:93:LYS:O	1:A:97:LYS:H	1	0.01
(1,1093)	1:A:93:LYS:O	1:A:97:LYS:H	3	0.01
(1,1093)	1:A:93:LYS:O	1:A:97:LYS:H	6	0.01
(1,1093)	1:A:93:LYS:O	1:A:97:LYS:H	9	0.01
(1,1093)	1:A:93:LYS:O	1:A:97:LYS:H	12	0.01
(1,1093)	1:A:93:LYS:O	1:A:97:LYS:H	20	0.01
(1,1087)	1:A:90:ALA:O	1:A:94:LYS:H	6	0.01
(1,1087)	1:A:90:ALA:O	1:A:94:LYS:H	12	0.01
(1,1087)	1:A:90:ALA:O	1:A:94:LYS:H	16	0.01
(1,1087)	1:A:90:ALA:O	1:A:94:LYS:H	19	0.01
(1,1079)	1:A:86:SER:O	1:A:90:ALA:H	4	0.01
(1,1079)	1:A:86:SER:O	1:A:90:ALA:H	10	0.01
(1,1079)	1:A:86:SER:O	1:A:90:ALA:H	20	0.01
(1,1077)	1:A:85:ALA:O	1:A:89:LYS:H	19	0.01
(1,1074)	1:A:37:ARG:O	1:A:65:GLU:N	5	0.01
(1,1073)	1:A:37:ARG:O	1:A:65:GLU:H	19	0.01
(1,1071)	1:A:35:VAL:H	1:A:67:GLY:O	18	0.01
(1,1062)	1:A:28:TYR:N	1:A:171:LEU:O	8	0.01
(1,1060)	1:A:28:TYR:O	1:A:171:LEU:N	9	0.01
(1,1059)	1:A:28:TYR:O	1:A:171:LEU:H	11	0.01
(1,1059)	1:A:28:TYR:O	1:A:171:LEU:H	17	0.01
(1,105)	1:A:127:LEU:HD21	1:A:128:LEU:H	6	0.01
(1,105)	1:A:127:LEU:HD22	1:A:128:LEU:H	6	0.01
(1,105)	1:A:127:LEU:HD23	1:A:128:LEU:H	6	0.01
(1,105)	1:A:127:LEU:HD21	1:A:128:LEU:H	7	0.01
(1,105)	1:A:127:LEU:HD22	1:A:128:LEU:H	7	0.01
(1,105)	1:A:127:LEU:HD23	1:A:128:LEU:H	7	0.01
(1,105)	1:A:127:LEU:HD21	1:A:128:LEU:H	10	0.01



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,105)	1:A:127:LEU:HD22	1:A:128:LEU:H	10	0.01
(1,105)	1:A:127:LEU:HD23	1:A:128:LEU:H	10	0.01
(1,105)	1:A:127:LEU:HD21	1:A:128:LEU:H	13	0.01
(1,105)	1:A:127:LEU:HD22	1:A:128:LEU:H	13	0.01
(1,105)	1:A:127:LEU:HD23	1:A:128:LEU:H	13	0.01
(1,1046)	1:A:155:ILE:N	1:A:170:MET:O	9	0.01
(1,1046)	1:A:155:ILE:N	1:A:170:MET:O	17	0.01
(1,1040)	1:A:139:PHE:O	1:A:154:ALA:N	1	0.01
(1,1040)	1:A:139:PHE:O	1:A:154:ALA:N	9	0.01
(1,1040)	1:A:139:PHE:O	1:A:154:ALA:N	10	0.01
(1,1040)	1:A:139:PHE:O	1:A:154:ALA:N	20	0.01
(1,1038)	1:A:137:ALA:N	1:A:156:ILE:O	15	0.01
(1,1035)	1:A:137:ALA:O	1:A:156:ILE:H	10	0.01
(1,1035)	1:A:137:ALA:O	1:A:156:ILE:H	12	0.01
(1,1034)	1:A:79:MET:N	1:A:138:PHE:O	5	0.01
(1,1031)	1:A:79:MET:O	1:A:138:PHE:H	14	0.01
(1,1029)	1:A:77:VAL:H	A:77:VAL:H 1:A:140:ILE:O		0.01
(1,1028)	1:A:77:VAL:O	1:A:140:ILE:N	15	0.01
(1,1027)	1:A:77:VAL:O	1:A:140:ILE:H	1	0.01
(1,1019)	1:A:3:ILE:O	1:A:179:GLU:H	15	0.01
(1,1016)	1:A:4:TYR:O	1:A:14:SER:N	5	0.01
(1,1016)	1:A:4:TYR:O	1:A:14:SER:N	14	0.01
(1,1016)	1:A:4:TYR:O	1:A:14:SER:N	18	0.01
(1,1016)	1:A:4:TYR:O	1:A:14:SER:N	20	0.01
(1,1015)	1:A:4:TYR:O	1:A:14:SER:H	9	0.01
(1,1013)	1:A:2:LEU:H	1:A:16:ASP:O	1	0.01
(1,1)	1:A:3:ILE:H	1:A:179:GLU:H	6	0.01



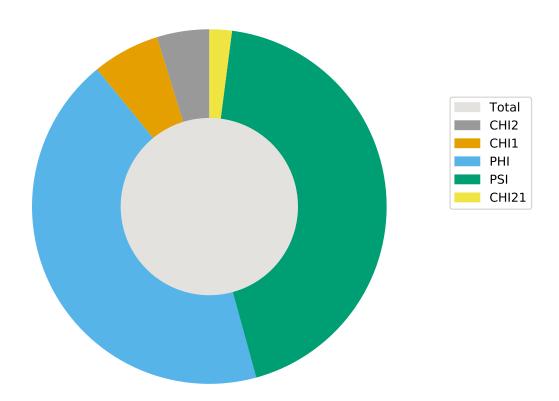
9 Dihedral angle restraints analysis

9.1 Dihedral angle restraints summary

Angle name	Count	%
CHI2	14	4.8
CHI1	18	6.1
PHI	127	43.3
PSI	128	43.7
CHI21	6	2.0
Total	293	100.0

9.1.1 Pie chart : Dihedral angle restraints

There are 0 unmapped restraints



9.2 Dihedral angle violations

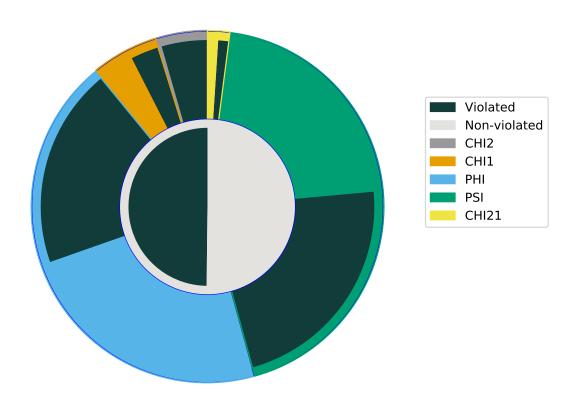
The following table provides the summary of violated restraints. Restraints that are violated at least in one model are counted as violated.



Angle name	Count	$\%^1$	$\%^2$
CHI2	13	92.9	8.9
CHI1	8	44.4	5.5
PHI	57	44.9	39.0
PSI	65	50.8	44.5
CHI21	3	50.0	2.1
Total	146	49.8	100.0

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

9.2.1 Pie chart: Dihedral angle violations



9.3 Consistent dihedral angle violations

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

Angle name	Count	$\%^1$	$\%^2$
CHI2	5	35.7	35.7

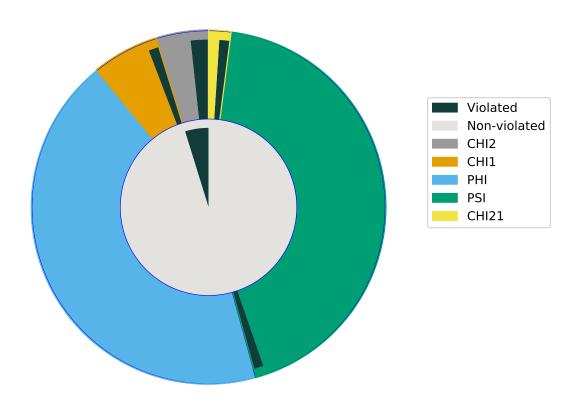


Continued from previous page...

Angle name	Count	$\%^1$	$\%^2$
CHI1	3	16.7	21.4
PHI	0	0.0	0.0
PSI	3	2.3	21.4
CHI21	3	50.0	21.4
Total	14	4.8	100.0

¹percentage of violated restraints in that particular agnle type, ²percentage 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	29.1	4.94
5.0-10.0	3.9	9.96



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

Range (\circ)	No. of violated restraints per model	$\mathbf{Max\ violation}\ (\ \circ\)$
10.0-20.0	13.8	20.0
20.0-40.0	2.7	29.88
40.0-80.0	None	None
80.0<	0.9	150.48

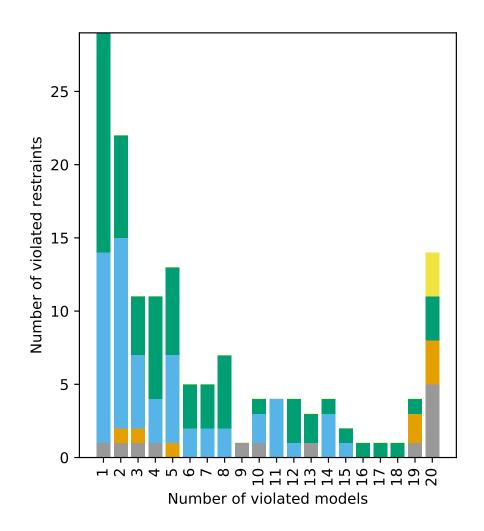
9.5 Dihedral angle violations in the ensemble

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

	No. of violated restraints				No of violated models	
CHI2	CHI1	PHI	PSI	CHI21	Total	No. of violated models
1	0	13	15	0	29	1
1	1	13	7	0	22	2
1	1	5	4	0	11	3
1	0	3	7	0	11	4
0	1	6	6	0	13	5
0	0	2	3	0	5	6
0	0	2	3	0	5	7
0	0	2	5	0	7	8
1	0	0	0	0	1	9
1	0	2	1	0	4	10
0	0	4	0	0	4	11
0	0	1	3	0	4	12
1	0	0	2	0	3	13
0	0	3	1	0	4	14
0	0	1	1	0	2	15
0	0	0	1	0	1	16
0	0	0	1	0	1	17
0	0	0	1	0	1	18
1	2	0	1	0	4	19
5	3	0	3	3	14	20



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





9.6 Violations in each model

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

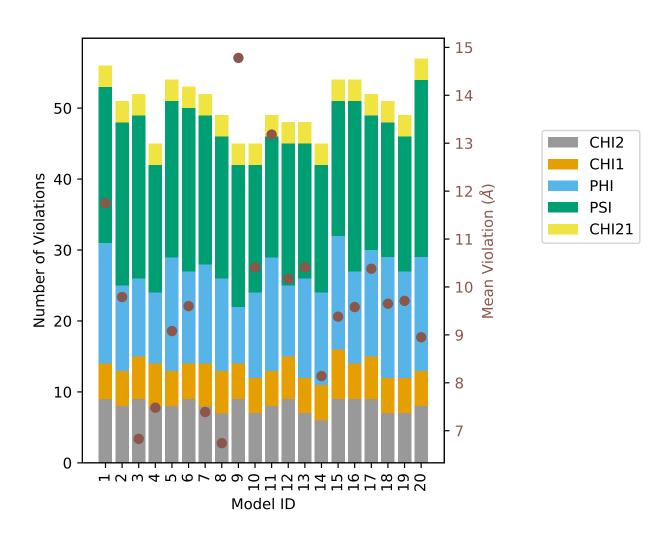
Model ID	No. of violations						Mean (Å)	Max (Å)	
	CHI2	CHI1	PHI	PSI	CHI21	Total	Mean (A)	Max (A)	
1	9	5	17	22	3	56	11.75	141.37	
2	8	5	12	23	3	51	9.79	136.67	
3	9	6	11	23	3	52	6.83	28.92	
4	8	6	10	18	3	45	7.48	27.84	
5	8	5	16	22	3	54	9.08	148.57	
6	9	5	13	23	3	53	9.6	145.98	
7	8	6	14	21	3	52	7.39	28.05	
8	7	6	13	20	3	49	6.74	24.68	
9	9	5	8	20	3	45	14.78	141.58	



Continued from previous page...

Model ID	No. of violations						Mean (Å)	Max (Å)	
	CHI2	CHI1	PHI	PSI	CHI21	Total	Mean (A)	wax (A)	
10	7	5	12	18	3	45	10.41	143.61	
11	8	5	16	17	3	49	13.18	146.58	
12	9	6	10	20	3	48	10.17	142.11	
13	7	5	14	19	3	48	10.41	145.62	
14	6	5	13	18	3	45	8.14	28.14	
15	9	7	16	19	3	54	9.38	144.79	
16	9	5	13	24	3	54	9.58	137.15	
17	9	6	15	19	3	52	10.38	147.76	
18	7	5	17	19	3	51	9.65	139.38	
19	7	5	15	19	3	49	9.71	138.39	
20	8	5	16	25	3	57	8.95	150.48	

9.6.1 Bar graph: Violations in each model

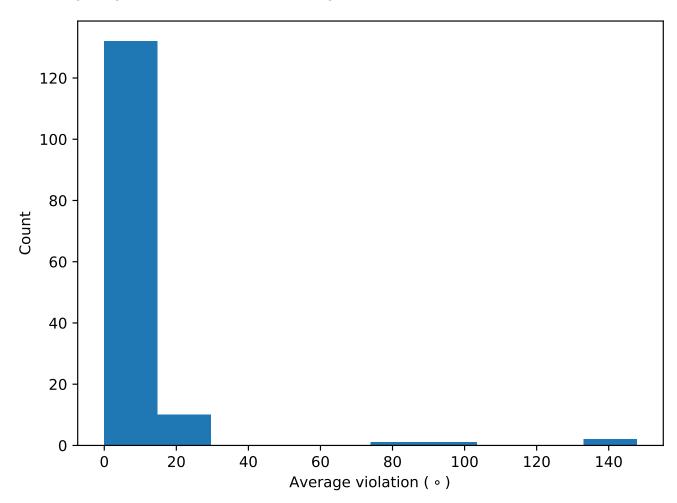




9.7 Most violated dihedral angle restraints

9.7.1 Histogram: Distribution of mean dihedral angle violations

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



9.7.2 Table: Most violated dihedral angle restraints

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

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models	Mean (o)	Max (o
(1,232)	1:A:171:LEU:N	1:A:171:LEU:CA	1:A:171:LEU:C	1:A:172:VAL:N	20	21.36	29.88
(1,48)	1:A:35:VAL:N	1:A:35:VAL:CA	1:A:35:VAL:C	1:A:36:VAL:N	19	22.96	29.8
(1,24)	1:A:14:SER:N	1:A:14:SER:CA	1:A:14:SER:C	1:A:15:SER:N	16	14.73	29.39
(1,187)	1:A:139:PHE:N	1:A:139:PHE:CA	1:A:139:PHE:C	1:A:140:ILE:N	20	21.6	29.3
(1,189)	1:A:140:ILE:N	1:A:140:ILE:CA	1:A:140:ILE:C	1:A:141:GLY:N	20	17.99	28.84
(1,255)	1:A:19:PRO:N	1:A:19:PRO:CA	1:A:19:PRO:C	1:A:20:MET:N	5	10.02	14.07
(1,230)	1:A:170:MET:N	1:A:170:MET:CA	1:A:170:MET:C	1:A:171:LEU:N	4	9.46	13.8
(1,4)	1:A:3:ILE:N	1:A:3:ILE:CA	1:A:3:ILE:C	1:A:4:TYR:N	7	5.45	11.73
(1,18)	1:A:10:ASP:N	1:A:10:ASP:CA	1:A:10:ASP:C	1:A:11:ASP:N	8	8.96	11.56
(1,14)	1:A:8:PHE:N	1:A:8:PHE:CA	1:A:8:PHE:C	1:A:9:THR:N	10	5.21	10.65



Key	ed from previous pag Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models	$ \mathbf{Mean} (\circ) $	Max (
(1,175)	1:A:133:PHE:N	1:A:133:PHE:CA	1:A:133:PHE:C	1:A:134:LYS:N	15	6.63	8.83
(1,16) $(1,16)$	1:A:9:THR:N	1:A:9:THR:CA	1:A:9:THR:C	1:A:10:ASP:N	13	3.24	5.73
(1,10) $(1,52)$	1:A:37:ARG:N	1:A:37:ARG:CA	1:A:37:ARG:C	1:A:38:LYS:N	12	2.31	5.12
(1,32) $(1,22)$	1:A:12:GLU:N	1:A:12:GLU:CA	1:A:12:GLU:C	1:A:13:LEU:N	14	2.72	4.94
(1,22) $(1,10)$	1:A:6:ASP:N	1:A:6:ASP:CA	1:A:6:ASP:C	1:A:7:ILE:N	4	1.82	4.84
(1,10) $(1,86)$	1:A:84:ASP:N	1:A:84:ASP:CA	1:A:84:ASP:C	1:A:85:ALA:N	17	1.93	4.74
(1,54)	1:A:38:LYS:N	1:A:38:LYS:CA	1:A:38:LYS:C	1:A:39:GLU:N	8	2.7	4.73
(1,34) $(1,251)$	1:A:38:L13:N 1:A:181:CYS:N	1:A:38:L13:CA 1:A:181:CYS:CA	1:A:181:CYS:C	1:A:39:GLU:N 1:A:182:LEU:N	12	1.58	3.8
(1,231) $(1,243)$	1:A:177:ILE:N	1:A:177:ILE:CA	1:A:177:ILE:C	1:A:182:LEU:N 1:A:178:GLU:N	12	2.31	3.79
(1,243) $(1,183)$	1:A:137:ALA:N	1:A:177:ILE:CA 1:A:137:ALA:CA	1:A:177:ILE:C 1:A:137:ALA:C	1:A:178:GLU:N 1:A:138:PHE:N	5	1.64	3.6
(1,183) $(1,223)$	1:A:166:VAL:N	1:A:166:VAL:CA	1:A:166:VAL:C	1:A:158:PHE:N 1:A:167:PRO:N	5	1.04	3.53
(1,223) $(1,167)$	1:A:166:VAL:N 1:A:128:LEU:N	1:A:166: VAL:CA 1:A:128:LEU:CA	1:A:106:VAL:C 1:A:128:LEU:C	1:A:107:PRO:N 1:A:129:ALA:N	18	1.98	3.53
(1,167) $(1,253)$	1:A:128:LEU:N 1:A:26:LEU:N	1:A:128:LEU:CA 1:A:26:LEU:CA	1:A:128:LEU:C 1:A:26:LEU:C	1:A:129:ALA:N 1:A:27:VAL:N	18	1.96	3.36
· · /	1:A:26:LEU:N 1:A:82:TYR:N	1:A:26:LEU:CA 1:A:82:TYR:CA	1:A:26:LEU:C 1:A:82:TYR:C	1:A:27:VAL:N 1:A:83:GLU:N	13	1.96	
(1,82)			1:A:82:TYR:C 1:A:29:GLU:C		5		3.01
(1,38)	1:A:29:GLU:N	1:A:29:GLU:CA		1:A:30:PHE:N		2.07	2.86
(1,224)	1:A:167:PRO:N	1:A:167:PRO:CA	1:A:167:PRO:C	1:A:168:THR:N	4 5	1.8	2.86
(1,40)	1:A:30:PHE:N	1:A:30:PHE:CA	1:A:30:PHE:C	1:A:31:LYS:N	5	1.53	2.73
(1,171)	1:A:131:ASP:N	1:A:131:ASP:CA	1:A:131:ASP:C	1:A:132:ARG:N	8	1.3	2.62
(1,70)	1:A:74:HIS:N	1:A:74:HIS:CA	1:A:74:HIS:C	1:A:75:LYS:N	3	1.53	2.59
(1,245)	1:A:178:GLU:N	1:A:178:GLU:CA	1:A:178:GLU:C	1:A:179:GLU:N	2	2.1	2.49
(1,249)	1:A:180:LYS:N	1:A:180:LYS:CA	1:A:180:LYS:C	1:A:181:CYS:N	6	1.11	2.49
(1,36)	1:A:28:TYR:N	1:A:28:TYR:CA	1:A:28:TYR:C	1:A:29:GLU:N	7	1.46	2.39
(1,84)	1:A:83:GLU:N	1:A:83:GLU:CA	1:A:83:GLU:C	1:A:84:ASP:N	1	2.38	2.38
(1,6)	1:A:4:TYR:N	1:A:4:TYR:CA	1:A:4:TYR:C	1:A:5:LYS:N	3	1.74	2.29
(1,50)	1:A:36:VAL:N	1:A:36:VAL:CA	1:A:36:VAL:C	1:A:37:ARG:N	2	1.6	2.26
(1,2)	1:A:2:LEU:N	1:A:2:LEU:CA	1:A:2:LEU:C	1:A:3:ILE:N	6	1.61	2.23
(1,207)	1:A:155:ILE:N	1:A:155:ILE:CA	1:A:155:ILE:C	1:A:156:ILE:N	4	1.52	2.17
(1,8)	1:A:5:LYS:N	1:A:5:LYS:CA	1:A:5:LYS:C	1:A:6:ASP:N	1	2.05	2.05
(1,199)	1:A:146:GLU:N	1:A:146:GLU:CA	1:A:146:GLU:C	1:A:147:GLY:N	8	1.18	1.96
(1,72)	1:A:75:LYS:N	1:A:75:LYS:CA	1:A:75:LYS:C	1:A:76:LEU:N	7	1.03	1.96
(1,213)	1:A:158:TYR:N	1:A:158:TYR:CA	1:A:158:TYR:C	1:A:159:ARG:N	4	1.0	1.94
(1,247)	1:A:179:GLU:N	1:A:179:GLU:CA	1:A:179:GLU:C	1:A:180:LYS:N	2	1.57	1.9
(1,201)	1:A:152:GLN:N	1:A:152:GLN:CA	1:A:152:GLN:C	1:A:153:VAL:N	1	1.84	1.84
(1,78)	1:A:79:MET:N	1:A:79:MET:CA	1:A:79:MET:C	1:A:80:ASN:N	8	1.09	1.75
· · /	1:A:145:ALA:N	1:A:145:ALA:CA	1:A:145:ALA:C	1:A:146:GLU:N	1	1.71	1.71
(1,211)	1:A:157:GLU:N	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:C	1:A:158:TYR:N	3	0.8	1.68
(1,131)	1:A:108:ARG:N	1:A:108:ARG:CA	1:A:108:ARG:C	1:A:109:ASP:N	2	0.93	1.57
(1,169)	1:A:130:LYS:N	1:A:130:LYS:CA	1:A:130:LYS:C	1:A:131:ASP:N	6	0.72	1.4
(1,28)	1:A:21:LYS:N	1:A:21:LYS:CA	1:A:21:LYS:C	1:A:22:LEU:N	4	0.68	1.4
(1,46)	1:A:34:HIS:N	1:A:34:HIS:CA	1:A:34:HIS:C	1:A:35:VAL:N	2	0.95	1.35
(1,80)	1:A:81:CYS:N	1:A:81:CYS:CA	1:A:81:CYS:C	1:A:82:TYR:N	1	1.35	1.35
(1,58)	1:A:68:ILE:N	1:A:68:ILE:CA	1:A:68:ILE:C	1:A:69:ASP:N	1	1.34	1.34
(1,241)	1:A:176:ILE:N	1:A:176:ILE:CA	1:A:176:ILE:C	1:A:177:ILE:N	1	1.04	1.04
(1,211) $(1,20)$	1:A:11:ASP:N	1:A:11:ASP:CA	1:A:11:ASP:C	1:A:12:GLU:N	2	0.76	1.01
(1,226) $(1,226)$	1:A:168:THR:N	1:A:168:THR:CA	1:A:168:THR:C	1:A:169:LEU:N	2	0.53	0.97
(1,220) $(1,42)$	1:A:31:LYS:N	1:A:31:LYS:CA	1:A:31:LYS:C	1:A:32:GLY:N	4	0.61	0.96
(1,42) $(1,76)$	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	1:A:79:MET:N	1	0.8	0.30
(1,130)	1:A:106:ASN:N	1:A:106:ASN:CA	1:A:106:ASN:C	1:A:107:ASN:N	3	0.55	0.72
(1,195) $(1,195)$	1:A:144:ALA:N	1:A:144:ALA:CA	1:A:144:ALA:C	1:A:107.A5N.N 1:A:145:ALA:N	1	0.59	0.72
(1,193) $(1,219)$	1:A:144:ALA:N 1:A:164:THR:N	1:A:144:ALA:CA 1:A:164:THR:CA	1:A:144:ALA:C 1:A:164:THR:C	1:A:145:ALA:N 1:A:165:GLU:N	1 1	0.56	0.56
(1,219) $(1,217)$	1:A:164:1 HK:N 1:A:161:VAL:N	1:A:164:THK:CA 1:A:161:VAL:CA	1:A:161:VAL:C	1:A:163:GLU:N 1:A:162:ASP:N	1 1	0.46	0.36
(1,411)	1.11.101. VAL:IN	1.11.101. VAL:UA	1.11.101. VAL.O		1 1	ı 0.40 ₁	0.40



Key	$egin{array}{c} ext{cd from previous pag} \ ext{ } ext{Atom-1} \end{array}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models	Mean (o)	Max (o
(1,30)	1:A:22:LEU:N	1:A:22:LEU:CA	1:A:22:LEU:C	1:A:23:VAL:N	1	0.43	0.43
(1,238)	1:A:174:GLU:N	1:A:174:GLU:CA	1:A:174:GLU:C	1:A:175:ALA:N	1	0.12	0.12
(1,221)	1:A:165:GLU:N	1:A:165:GLU:CA	1:A:165:GLU:C	1:A:166:VAL:N	1	0.01	0.01
(1,56)	1:A:66:ARG:N	1:A:66:ARG:CA	1:A:66:ARG:C	1:A:67:GLY:N	1	0.01	0.01
(1,15)	1:A:8:PHE:C	1:A:9:THR:N	1:A:9:THR:CA	1:A:9:THR:C	8	4.64	7.82
(1,13)	1:A:7:ILE:C	1:A:8:PHE:N	1:A:8:PHE:CA	1:A:8:PHE:C	12	3.55	6.48
(1,172)	1:A:131:ASP:C	1:A:132:ARG:N	1:A:132:ARG:CA	1:A:132:ARG:C	11	2.35	4.61
(1,23)	1:A:13:LEU:C	1:A:14:SER:N	1:A:14:SER:CA	1:A:14:SER:C	7	1.81	4.49
(1,21)	1:A:11:ASP:C	1:A:12:GLU:N	1:A:12:GLU:CA	1:A:12:GLU:C	8	2.4	4.47
(1,19)	1:A:10:ASP:C	1:A:11:ASP:N	1:A:11:ASP:CA	1:A:11:ASP:C	11	2.52	4.42
(1,57)	1:A:67:GLY:C	1:A:68:ILE:N	1:A:68:ILE:CA	1:A:68:ILE:C	11	1.68	3.86
(1,180)	1:A:135:ASN:C	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:C	15	1.56	3.78
(1,17)	1:A:9:THR:C	1:A:10:ASP:N	1:A:10:ASP:CA	1:A:10:ASP:C	5	2.3	3.73
(1,35)	1:A:27:VAL:C	1:A:28:TYR:N	1:A:28:TYR:CA	1:A:28:TYR:C	14	1.9	3.58
(1,77)	1:A:78:GLU:C	1:A:79:MET:N	1:A:79:MET:CA	1:A:79:MET:C	10	1.48	3.39
(1,5)	1:A:3:ILE:C	1:A:4:TYR:N	1:A:4:TYR:CA	1:A:4:TYR:C	5	1.57	3.26
(1,246)	1:A:178:GLU:C	1:A:179:GLU:N	1:A:179:GLU:CA	1:A:179:GLU:C	3	2.09	3.18
(1,1)	1:A:1:MET:C	1:A:2:LEU:N	1:A:2:LEU:CA	1:A:2:LEU:C	2	1.73	3.17
(1,168)	1:A:129:ALA:C	1:A:130:LYS:N	1:A:130:LYS:CA	1:A:130:LYS:C	1	3.11	3.11
(1,214)	1:A:159:ARG:C	1:A:160:ASP:N	1:A:160:ASP:CA	1:A:160:ASP:C	7	1.93	3.09
(1,7)	1:A:4:TYR:C	1:A:5:LYS:N	1:A:5:LYS:CA	1:A:5:LYS:C	2	2.07	3.09
(1,25)	1:A:19:PRO:C	1:A:20:MET:N	1:A:20:MET:CA	1:A:20:MET:C	5	2.01	2.98
(1,3)	1:A:2:LEU:C	1:A:3:ILE:N	1:A:3:ILE:CA	1:A:3:ILE:C	6	1.67	2.97
(1,227)	1:A:168:THR:C	1:A:169:LEU:N	1:A:169:LEU:CA	1:A:169:LEU:C	14	1.22	2.91
(1,53)	1:A:37:ARG:C	1:A:38:LYS:N	1:A:38:LYS:CA	1:A:38:LYS:C	10	1.5	2.89
(1,55)	1:A:65:GLU:C	1:A:66:ARG:N	1:A:66:ARG:CA	1:A:66:ARG:C	6	1.31	2.79
(1,83)	1:A:82:TYR:C	1:A:83:GLU:N	1:A:83:GLU:CA	1:A:83:GLU:C	14	1.28	2.58
(1,222)	1:A:165:GLU:C	1:A:166:VAL:N	1:A:166:VAL:CA	1:A:166:VAL:C	4	1.24	2.57
(1,216)	1:A:160:ASP:C	1:A:161:VAL:N	1:A:161:VAL:CA	1:A:161:VAL:C	2	1.83	2.55
(1,220)	1:A:164:THR:C	1:A:165:GLU:N	1:A:165:GLU:CA	1:A:165:GLU:C	11	1.18	2.54
(1,43)	1:A:32:GLY:C	1:A:33:LYS:N	1:A:33:LYS:CA	1:A:33:LYS:C	1	2.41	2.41
(1,202)	1:A:152:GLN:C	1:A:153:VAL:N	1:A:153:VAL:CA	1:A:153:VAL:C	3	1.21	2.37
(1,9)	1:A:5:LYS:C	1:A:6:ASP:N	1:A:6:ASP:CA	1:A:6:ASP:C	3	1.15	2.27
(1,129)	1:A:105:LYS:C	1:A:106:ASN:N	1:A:106:ASN:CA	1:A:106:ASN:C	5	1.04	2.26
(1,200)	1:A:151:GLY:C	1:A:152:GLN:N	1:A:152:GLN:CA	1:A:152:GLN:C	2	1.86	2.13
(1,242)	1:A:176:ILE:C	1:A:177:ILE:N	1:A:177:ILE:CA	1:A:177:ILE:C	2	1.01	1.92
(1,51)	1:A:36:VAL:C	1:A:37:ARG:N	1:A:37:ARG:CA	1:A:37:ARG:C	4	1.0	1.9
(1,198)	1:A:145:ALA:C	1:A:146:GLU:N	1:A:146:GLU:CA	1:A:146:GLU:C	1	1.86	1.86
(1,248)	1:A:179:GLU:C	1:A:180:LYS:N	1:A:180:LYS:CA	1:A:180:LYS:C	2	1.14	1.8
(1,39)	1:A:29:GLU:C	1:A:30:PHE:N	1:A:30:PHE:CA	1:A:30:PHE:C	2	1.02	1.68
(1,239)	1:A:174:GLU:C	1:A:175:ALA:N	1:A:175:ALA:CA	1:A:175:ALA:C	5	0.81	1.42
(1,218)	1:A:163:GLY:C	1:A:164:THR:N	1:A:164:THR:CA	1:A:164:THR:C	2	0.93	1.41
(1,252)	1:A:25:ASP:C	1:A:26:LEU:N	1:A:26:LEU:CA	1:A:26:LEU:C	5	1.07	1.33
(1,206)	1:A:154:ALA:C	1:A:155:ILE:N	1:A:155:ILE:CA	1:A:155:ILE:C	4	0.71	1.21
(1,182)	1:A:136:LEU:C	1:A:137:ALA:N	1:A:137:ALA:CA	1:A:137:ALA:C	2	0.9	1.18
(1,244)	1:A:177:ILE:C	1:A:178:GLU:N	1:A:178:GLU:CA	1:A:178:GLU:C	1	1.13	1.13
(1,11)	1:A:6:ASP:C	1:A:7:ILE:N	1:A:7:ILE:CA	1:A:7:ILE:C	1	1.13	1.13
(1,178)	1:A:134:LYS:C	1:A:135:ASN:N	1:A:135:ASN:CA	1:A:135:ASN:C	1	1.09	1.09
(1,250)	1:A:180:LYS:C	1:A:181:CYS:N	1:A:181:CYS:CA	1:A:181:CYS:C	2	0.77	1.04
(1,81)	1:A:81:CYS:C	1:A:82:TYR:N	1:A:82:TYR:CA	1:A:82:TYR:C	1	1.03	1.03
(1,87)	1:A:84:ASP:C	1:A:85:ALA:N	1:A:85:ALA:CA	1:A:85:ALA:C	1	0.7	0.7
\ ,~.,					_		1 ~



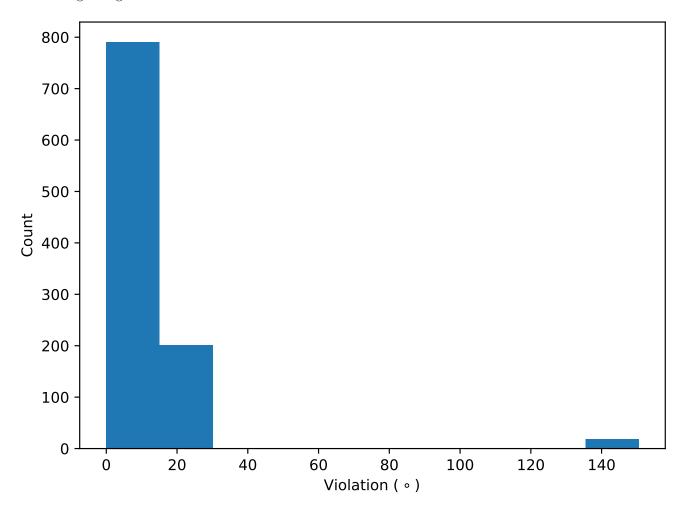
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models	Mean (o)	Max (o
(1,188)	1:A:139:PHE:C	1:A:140:ILE:N	1:A:140:ILE:CA	1:A:140:ILE:C	3	0.59	0.7
(1,134)	1:A:111:ALA:C	1:A:112:ASP:N	1:A:112:ASP:CA	1:A:112:ASP:C	1	0.68	0.68
(1,184)	1:A:137:ALA:C	1:A:138:PHE:N	1:A:138:PHE:CA	1:A:138:PHE:C	2	0.43	0.64
(1,225)	1:A:167:PRO:C	1:A:168:THR:N	1:A:168:THR:CA	1:A:168:THR:C	1	0.64	0.64
(1,210)	1:A:156:ILE:C	1:A:157:GLU:N	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:C	2	0.37	0.52
(1,85)	1:A:83:GLU:C	1:A:84:ASP:N	1:A:84:ASP:CA	1:A:84:ASP:C	2	0.21	0.42
(1,176)	1:A:133:PHE:C	1:A:134:LYS:N	1:A:134:LYS:CA	1:A:134:LYS:C	3	0.21	0.36
(1,75)	1:A:77:VAL:C	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	1	0.07	0.07
(1,229)	1:A:169:LEU:C	1:A:170:MET:N	1:A:170:MET:CA	1:A:170:MET:C	1	0.04	0.04
(1,37)	1:A:28:TYR:C	1:A:29:GLU:N	1:A:29:GLU:CA	1:A:29:GLU:C	1	0.01	0.01
(1,289)	1:A:100:ILE:CA	1:A:100:ILE:CB	1:A:100:ILE:CG1	1:A:100:ILE:CD1	20	14.16	20.0
(1,261)	1:A:3:ILE:CA	1:A:3:ILE:CB	1:A:3:ILE:CG1	1:A:3:ILE:CD1	20	16.36	19.89
(1,260)	1:A:68:ILE:CA	1:A:68:ILE:CB	1:A:68:ILE:CG1	1:A:68:ILE:CD1	20	13.18	18.07
(1,265)	1:A:95:PHE:CA	1:A:95:PHE:CB	1:A:95:PHE:CG	1:A:95:PHE:CD1	3	147.05	150.48
(1,281)	1:A:116:PHE:CA	1:A:116:PHE:CB	1:A:116:PHE:CG	1:A:116:PHE:CD1	1	147.76	147.76
(1,271)	1:A:133:PHE:CA	1:A:133:PHE:CB	1:A:133:PHE:CG	1:A:133:PHE:CD1	13	88.85	146.58
(1,293)	1:A:30:PHE:CA	1:A:30:PHE:CB	1:A:30:PHE:CG	1:A:30:PHE:CD1	10	85.86	145.98
(1,267)	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CG	1:A:136:LEU:CD1	20	15.78	19.99
(1,257)	1:A:128:LEU:CA	1:A:128:LEU:CB	1:A:128:LEU:CG	1:A:128:LEU:CD1	20	16.25	19.94
(1,263)	1:A:72:LEU:CA	1:A:72:LEU:CB	1:A:72:LEU:CG	1:A:72:LEU:CD1	20	15.82	19.81
(1,283)	1:A:171:LEU:CA	1:A:171:LEU:CB	1:A:171:LEU:CG	1:A:171:LEU:CD1	20	14.12	19.67
(1,269)	1:A:2:LEU:CA	1:A:2:LEU:CB	1:A:2:LEU:CG	1:A:2:LEU:CD1	19	15.55	19.52
(1,290)	1:A:130:LYS:CA	1:A:130:LYS:CB	1:A:130:LYS:CG	1:A:130:LYS:CD	20	15.06	19.49
(1,275)	1:A:91:TYR:CA	1:A:91:TYR:CB	1:A:91:TYR:CG	1:A:91:TYR:CD1	4	1.32	2.49
(1,279)	1:A:82:TYR:CA	1:A:82:TYR:CB	1:A:82:TYR:CG	1:A:82:TYR:CD1	9	1.43	2.05
(1,287)	1:A:88:PHE:CA	1:A:88:PHE:CB	1:A:88:PHE:CG	1:A:88:PHE:CD1	2	0.04	0.06
(1,292)	1:A:30:PHE:N	1:A:30:PHE:CA	1:A:30:PHE:CB	1:A:30:PHE:CG	20	13.25	19.87
(1,286)	1:A:88:PHE:N	1:A:88:PHE:CA	1:A:88:PHE:CB	1:A:88:PHE:CG	19	14.21	19.63
(1,280)	1:A:116:PHE:N	1:A:116:PHE:CA	1:A:116:PHE:CB	1:A:116:PHE:CG	20	12.24	19.35
(1,264)	1:A:95:PHE:N	1:A:95:PHE:CA	1:A:95:PHE:CB	1:A:95:PHE:CG	19	11.0	19.28
(1,258)	1:A:127:LEU:N	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CG	20	12.12	18.37
(1,270)	1:A:133:PHE:N	1:A:133:PHE:CA	1:A:133:PHE:CB	1:A:133:PHE:CG	5	3.31	4.82
(1,274)	1:A:91:TYR:N	1:A:91:TYR:CA	1:A:91:TYR:CB	1:A:91:TYR:CG	2	1.94	2.59
(1,266)	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CG	3	1.19	1.75



9.8 All violated dihedral angleeee restraints

9.8.1 Histogram : Distribution of violations

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



9.8.2 Table: All violated dihedral angle restraints

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

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,265)	1:A:95:PHE:CA	1:A:95:PHE:CB	1:A:95:PHE:CG	1:A:95:PHE:CD1	20	150.48
(1,265)	1:A:95:PHE:CA	1:A:95:PHE:CB	1:A:95:PHE:CG	1:A:95:PHE:CD1	5	148.57
(1,281)	1:A:116:PHE:CA	1:A:116:PHE:CB	1:A:116:PHE:CG	1:A:116:PHE:CD1	17	147.76
(1,271)	1:A:133:PHE:CA	1:A:133:PHE:CB	1:A:133:PHE:CG	1:A:133:PHE:CD1	11	146.58
(1,293)	1:A:30:PHE:CA	1:A:30:PHE:CB	1:A:30:PHE:CG	1:A:30:PHE:CD1	6	145.98
(1,271)	1:A:133:PHE:CA	1:A:133:PHE:CB	1:A:133:PHE:CG	1:A:133:PHE:CD1	13	145.62
(1,271)	1:A:133:PHE:CA	1:A:133:PHE:CB	1:A:133:PHE:CG	1:A:133:PHE:CD1	15	144.79
(1,293)	1:A:30:PHE:CA	1:A:30:PHE:CB	1:A:30:PHE:CG	1:A:30:PHE:CD1	11	144.72
(1,293)	1:A:30:PHE:CA	1:A:30:PHE:CB	1:A:30:PHE:CG	1:A:30:PHE:CD1	10	143.61
(1,265)	1:A:95:PHE:CA	1:A:95:PHE:CB	1:A:95:PHE:CG	1:A:95:PHE:CD1	12	142.11



Key	$rac{ed\ from\ previous\ pag}{\mathbf{Atom-1}}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,271)	1:A:133:PHE:CA	1:A:133:PHE:CB	1:A:133:PHE:CG	1:A:133:PHE:CD1	9	141.58
(1,271)	1:A:133:PHE:CA	1:A:133:PHE:CB	1:A:133:PHE:CG	1:A:133:PHE:CD1	1	141.37
(1,293)	1:A:30:PHE:CA	1:A:30:PHE:CB	1:A:30:PHE:CG	1:A:30:PHE:CD1	1	140.97
(1,293)	1:A:30:PHE:CA	1:A:30:PHE:CB	1:A:30:PHE:CG	1:A:30:PHE:CD1	9	140.39
(1,271)	1:A:133:PHE:CA	1:A:133:PHE:CB	1:A:133:PHE:CG	1:A:133:PHE:CD1	18	139.38
(1,271)	1:A:133:PHE:CA	1:A:133:PHE:CB	1:A:133:PHE:CG	1:A:133:PHE:CD1	19	138.39
(1,271)	1:A:133:PHE:CA	1:A:133:PHE:CB	1:A:133:PHE:CG	1:A:133:PHE:CD1	16	137.15
(1,293)	1:A:30:PHE:CA	1:A:30:PHE:CB	1:A:30:PHE:CG	1:A:30:PHE:CD1	2	136.67
(1,232)	1:A:171:LEU:N	1:A:171:LEU:CA	1:A:171:LEU:C	1:A:172:VAL:N	16	29.88
(1,48)	1:A:35:VAL:N	1:A:35:VAL:CA	1:A:35:VAL:C	1:A:36:VAL:N	6	29.8
(1,48)	1:A:35:VAL:N	1:A:35:VAL:CA	1:A:35:VAL:C	1:A:36:VAL:N	2	29.42
(1,24)	1:A:14:SER:N	1:A:14:SER:CA	1:A:14:SER:C	1:A:15:SER:N	16	29.39
(1,187)	1:A:139:PHE:N	1:A:139:PHE:CA	1:A:139:PHE:C	1:A:140:ILE:N	18	29.3
(1,48)	1:A:35:VAL:N	1:A:35:VAL:CA	1:A:35:VAL:C	1:A:36:VAL:N	3	28.92
(1,232)	1:A:171:LEU:N	1:A:171:LEU:CA	1:A:171:LEU:C	1:A:172:VAL:N	17	28.86
(1,189)	1:A:140:ILE:N	1:A:140:ILE:CA	1:A:140:ILE:C	1:A:141:GLY:N	3	28.84
(1,48)	1:A:35:VAL:N	1:A:35:VAL:CA	1:A:35:VAL:C	1:A:36:VAL:N	18	28.77
(1,48)	1:A:35:VAL:N	1:A:35:VAL:CA	1:A:35:VAL:C	1:A:36:VAL:N	5	28.73
(1,187)	1:A:139:PHE:N	1:A:139:PHE:CA	1:A:139:PHE:C	1:A:140:ILE:N	16	28.72
(1,187)	1:A:139:PHE:N	1:A:139:PHE:CA	1:A:139:PHE:C	1:A:140:ILE:N	1	28.19
(1,48)	1:A:35:VAL:N	1:A:35:VAL:CA	1:A:35:VAL:C	1:A:36:VAL:N	14	28.14
(1,48)	1:A:35:VAL:N	1:A:35:VAL:CA	1:A:35:VAL:C	1:A:36:VAL:N	7	28.05
(1,232)	1:A:171:LEU:N	1:A:171:LEU:CA	1:A:171:LEU:C	1:A:172:VAL:N	14	27.86
(1,187)	1:A:139:PHE:N	1:A:139:PHE:CA	1:A:139:PHE:C	1:A:140:ILE:N	4	27.84
(1,24)	1:A:14:SER:N	1:A:14:SER:CA	1:A:14:SER:C	1:A:15:SER:N	18	27.18
(1,24)	1:A:14:SER:N	1:A:14:SER:CA	1:A:14:SER:C	1:A:15:SER:N	9	27.16
(1,189)	1:A:140:ILE:N	1:A:140:ILE:CA	1:A:140:ILE:C	1:A:141:GLY:N	13	27.13
(1,48)	1:A:35:VAL:N	1:A:35:VAL:CA	1:A:35:VAL:C	1:A:36:VAL:N	11	27.08
(1,232)	1:A:171:LEU:N	1:A:171:LEU:CA	1:A:171:LEU:C	1:A:172:VAL:N	1	26.88
(1,24)	1:A:14:SER:N	1:A:14:SER:CA	1:A:14:SER:C	1:A:15:SER:N	3	26.84
(1,187)	1:A:139:PHE:N	1:A:139:PHE:CA	1:A:139:PHE:C	1:A:140:ILE:N	11	26.82
(1,187)	1:A:139:PHE:N	1:A:139:PHE:CA	1:A:139:PHE:C	1:A:140:ILE:N	17	26.77
(1,232)	1:A:171:LEU:N	1:A:171:LEU:CA	1:A:171:LEU:C	1:A:172:VAL:N	2	26.15
(1,48)	1:A:35:VAL:N	1:A:35:VAL:CA	1:A:35:VAL:C	1:A:36:VAL:N	1	25.0
(1,24)	1:A:14:SER:N	1:A:14:SER:CA	1:A:14:SER:C	1:A:15:SER:N	20	24.96
(1,187)	1:A:139:PHE:N	1:A:139:PHE:CA	1:A:139:PHE:C	1:A:140:ILE:N	15	24.95
(1,232)	1:A:171:LEU:N	1:A:171:LEU:CA	1:A:171:LEU:C	1:A:172:VAL:N	8	24.68
(1,187)	1:A:139:PHE:N	1:A:139:PHE:CA	1:A:139:PHE:C	1:A:140:ILE:N	6	24.67
(1,232)	1:A:171:LEU:N	1:A:171:LEU:CA	1:A:171:LEU:C	1:A:172:VAL:N	3	24.54
(1,232)	1:A:171:LEU:N	1:A:171:LEU:CA	1:A:171:LEU:C	1:A:172:VAL:N	7	24.52
(1,48)	1:A:35:VAL:N	1:A:35:VAL:CA	1:A:35:VAL:C	1:A:36:VAL:N	15	24.33
(1,48)	1:A:35:VAL:N	1:A:35:VAL:CA	1:A:35:VAL:C	1:A:36:VAL:N	20	24.14
(1,232)	1:A:171:LEU:N	1:A:171:LEU:CA	1:A:171:LEU:C	1:A:172:VAL:N	5	24.07
(1,24)	1:A:14:SER:N	1:A:14:SER:CA	1:A:14:SER:C	1:A:15:SER:N	2	23.83
(1,189)	1:A:140:ILE:N	1:A:140:ILE:CA	1:A:140:ILE:C	1:A:141:GLY:N	20	23.83
(1,48)	1:A:35:VAL:N	1:A:35:VAL:CA	1:A:35:VAL:C	1:A:36:VAL:N	8	23.55
(1,187)	1:A:139:PHE:N	1:A:139:PHE:CA	1:A:139:PHE:C	1:A:140:ILE:N	7	23.47
(1,232)	1:A:171:LEU:N	1:A:171:LEU:CA	1:A:171:LEU:C	1:A:172:VAL:N	19	23.39
(1,48)	1:A:35:VAL:N	1:A:35:VAL:CA	1:A:35:VAL:C	1:A:36:VAL:N	9	22.99
(1,232)	1:A:171:LEU:N	1:A:171:LEU:CA	1:A:171:LEU:C	1:A:172:VAL:N	11	22.9
(1,187)	1:A:139:PHE:N	1:A:139:PHE:CA	1:A:139:PHE:C	1:A:140:ILE:N	19	22.89



Key	$rac{ed\ from\ previous\ pag}{\mathbf{Atom-1}}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,232)	1:A:171:LEU:N	1:A:171:LEU:CA	1:A:171:LEU:C	1:A:172:VAL:N	6	22.64
(1,187)	1:A:139:PHE:N	1:A:139:PHE:CA	1:A:139:PHE:C	1:A:140:ILE:N	20	22.6
(1,232)	1:A:171:LEU:N	1:A:171:LEU:CA	1:A:171:LEU:C	1:A:172:VAL:N	13	22.46
(1,189)	1:A:140:ILE:N	1:A:140:ILE:CA	1:A:140:ILE:C	1:A:141:GLY:N	17	22.37
(1,48)	1:A:35:VAL:N	1:A:35:VAL:CA	1:A:35:VAL:C	1:A:36:VAL:N	12	21.93
(1,189)	1:A:140:ILE:N	1:A:140:ILE:CA	1:A:140:ILE:C	1:A:141:GLY:N	6	21.36
(1,187)	1:A:139:PHE:N	1:A:139:PHE:CA	1:A:139:PHE:C	1:A:140:ILE:N	13	21.27
(1,187)	1:A:139:PHE:N	1:A:139:PHE:CA	1:A:139:PHE:C	1:A:140:ILE:N	14	21.03
(1,24)	1:A:14:SER:N	1:A:14:SER:CA	1:A:14:SER:C	1:A:15:SER:N	19	20.9
(1,232)	1:A:171:LEU:N	1:A:171:LEU:CA	1:A:171:LEU:C	1:A:172:VAL:N	15	20.29
(1,189)	1:A:140:ILE:N	1:A:140:ILE:CA	1:A:140:ILE:C	1:A:141:GLY:N	14	20.05
(1,289)	1:A:100:ILE:CA	1:A:100:ILE:CB	1:A:100:ILE:CG1	1:A:100:ILE:CD1	17	20.0
(1,267)	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CG	1:A:136:LEU:CD1	14	19.99
(1,257)	1:A:128:LEU:CA	1:A:128:LEU:CB	1:A:128:LEU:CG	1:A:128:LEU:CD1	13	19.94
(1,261)	1:A:3:ILE:CA	1:A:3:ILE:CB	1:A:3:ILE:CG1	1:A:3:ILE:CD1	14	19.89
(1,292)	1:A:30:PHE:N	1:A:30:PHE:CA	1:A:30:PHE:CB	1:A:30:PHE:CG	12	19.87
(1,263)	1:A:72:LEU:CA	1:A:72:LEU:CB	1:A:72:LEU:CG	1:A:72:LEU:CD1	18	19.81
(1,292)	1:A:30:PHE:N	1:A:30:PHE:CA	1:A:30:PHE:CB	1:A:30:PHE:CG	18	19.79
(1,261)	1:A:3:ILE:CA	1:A:3:ILE:CB	1:A:3:ILE:CG1	1:A:3:ILE:CD1	19	19.77
(1,267)	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CG	1:A:136:LEU:CD1	12	19.68
(1,283)	1:A:171:LEU:CA	1:A:171:LEU:CB	1:A:171:LEU:CG	1:A:171:LEU:CD1	5	19.67
(1,289)	1:A:100:ILE:CA	1:A:100:ILE:CB	1:A:100:ILE:CG1	1:A:100:ILE:CD1	4	19.66
(1,286)	1:A:88:PHE:N	1:A:88:PHE:CA	1:A:88:PHE:CB	1:A:88:PHE:CG	11	19.63
(1,189)	1:A:140:ILE:N	1:A:140:ILE:CA	1:A:140:ILE:C	1:A:141:GLY:N	11	19.61
(1,261)	1:A:3:ILE:CA	1:A:3:ILE:CB	1:A:3:ILE:CG1	1:A:3:ILE:CD1	17	19.53
(1,269)	1:A:2:LEU:CA	1:A:2:LEU:CB	1:A:2:LEU:CG	1:A:2:LEU:CD1	16	19.52
(1,290)	1:A:130:LYS:CA	1:A:130:LYS:CB	1:A:130:LYS:CG	1:A:130:LYS:CD	6	19.49
(1,263)	1:A:72:LEU:CA	1:A:72:LEU:CB	1:A:72:LEU:CG	1:A:72:LEU:CD1	16	19.48
(1,290)	1:A:130:LYS:CA	1:A:130:LYS:CB	1:A:130:LYS:CG	1:A:130:LYS:CD	17	19.47
(1,267)	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CG	1:A:136:LEU:CD1	7	19.46
(1,292)	1:A:30:PHE:N	1:A:30:PHE:CA	1:A:30:PHE:CB	1:A:30:PHE:CG	3	19.37
(1,269)	1:A:2:LEU:CA	1:A:2:LEU:CB	1:A:2:LEU:CG	1:A:2:LEU:CD1	20	19.37
(1,280)	1:A:116:PHE:N	1:A:116:PHE:CA	1:A:116:PHE:CB	1:A:116:PHE:CG	10	19.35
(1,189)	1:A:140:ILE:N	1:A:140:ILE:CA	1:A:140:ILE:C	1:A:141:GLY:N	16	19.32
(1,261)	1:A:3:ILE:CA	1:A:3:ILE:CB	1:A:3:ILE:CG1	1:A:3:ILE:CD1	7	19.31
(1,267)	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CG	1:A:136:LEU:CD1	19	19.3
(1,267)	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CG	1:A:136:LEU:CD1	17	19.29
(1,264)	1:A:95:PHE:N	1:A:95:PHE:CA	1:A:95:PHE:CB	1:A:95:PHE:CG	12	19.28
(1,263)	1:A:72:LEU:CA	1:A:72:LEU:CB	1:A:72:LEU:CG	1:A:72:LEU:CD1	12	19.27
(1,232)	1:A:171:LEU:N	1:A:171:LEU:CA	1:A:171:LEU:C	1:A:172:VAL:N	9	19.19
(1,263)	1:A:72:LEU:CA	1:A:72:LEU:CB	1:A:72:LEU:CG	1:A:72:LEU:CD1	13	19.13
(1,257)	1:A:128:LEU:CA	1:A:128:LEU:CB	1:A:128:LEU:CG	1:A:128:LEU:CD1	8	19.07
(1,289)	1:A:100:ILE:CA	1:A:100:ILE:CB	1:A:100:ILE:CG1	1:A:100:ILE:CD1	9	18.98
(1,289)	1:A:100:ILE:CA	1:A:100:ILE:CB	1:A:100:ILE:CG1	1:A:100:ILE:CD1	20	18.96
(1,257)	1:A:128:LEU:CA	1:A:128:LEU:CB	1:A:128:LEU:CG	1:A:128:LEU:CD1	7	18.96
(1,269)	1:A:2:LEU:CA	1:A:2:LEU:CB	1:A:2:LEU:CG	1:A:2:LEU:CD1	5	18.92
(1,257)	1:A:128:LEU:CA	1:A:128:LEU:CB	1:A:128:LEU:CG	1:A:128:LEU:CD1	10	18.9
(1,257)	1:A:128:LEU:CA	1:A:128:LEU:CB	1:A:128:LEU:CG	1:A:128:LEU:CD1	15	18.9
(1,267)	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CG	1:A:136:LEU:CD1	1	18.87
(1,189)	1:A:140:ILE:N	1:A:140:ILE:CA	1:A:140:ILE:C	1:A:141:GLY:N	2	18.81
(1,264)	1:A:95:PHE:N	1:A:95:PHE:CA	1:A:95:PHE:CB	1:A:95:PHE:CG	5	18.74



Key	ed from previous pag Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,267)	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CG	1:A:136:LEU:CD1	13	18.73
(1,263)	1:A:72:LEU:CA	1:A:72:LEU:CB	1:A:72:LEU:CG	1:A:72:LEU:CD1	17	18.72
(1,261)	1:A:3:ILE:CA	1:A:3:ILE:CB	1:A:3:ILE:CG1	1:A:3:ILE:CD1	18	18.71
(1,187)	1:A:139:PHE:N	1:A:139:PHE:CA	1:A:139:PHE:C	1:A:140:ILE:N	5	18.7
(1,283)	1:A:171:LEU:CA	1:A:171:LEU:CB	1:A:171:LEU:CG	1:A:171:LEU:CD1	12	18.68
(1,286)	1:A:88:PHE:N	1:A:88:PHE:CA	1:A:88:PHE:CB	1:A:88:PHE:CG	13	18.67
(1,267)	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CG	1:A:136:LEU:CD1	4	18.65
(1,280)	1:A:116:PHE:N	1:A:116:PHE:CA	1:A:116:PHE:CB	1:A:116:PHE:CG	20	18.63
(1,257)	1:A:128:LEU:CA	1:A:128:LEU:CB	1:A:128:LEU:CG	1:A:128:LEU:CD1	19	18.59
(1,189)	1:A:140:ILE:N	1:A:140:ILE:CA	1:A:140:ILE:C	1:A:141:GLY:N	8	18.58
(1,290)	1:A:130:LYS:CA	1:A:130:LYS:CB	1:A:130:LYS:CG	1:A:130:LYS:CD	19	18.55
(1,286)	1:A:88:PHE:N	1:A:88:PHE:CA	1:A:88:PHE:CB	1:A:88:PHE:CG	8	18.43
(1,257)	1:A:128:LEU:CA	1:A:128:LEU:CB	1:A:128:LEU:CG	1:A:128:LEU:CD1	16	18.4
(1,258)	1:A:127:LEU:N	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CG	1	18.37
(1,269)	1:A:2:LEU:CA	1:A:2:LEU:CB	1:A:2:LEU:CG	1:A:2:LEU:CD1	9	18.34
(1,261)	1:A:3:ILE:CA	1:A:3:ILE:CB	1:A:3:ILE:CG1	1:A:3:ILE:CD1	11	18.34
(1,261) $(1,263)$	1:A:72:LEU:CA	1:A:72:LEU:CB	1:A:72:LEU:CG	1:A:72:LEU:CD1	4	18.28
(1,263) $(1,261)$	1:A:3:ILE:CA	1:A:3:ILE:CB	1:A:3:ILE:CG1	1:A:3:ILE:CD1	13	18.28
(1,261) $(1,267)$	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CG	1:A:136:LEU:CD1	16	18.21
(1,286)	1:A:88:PHE:N	1:A:88:PHE:CA	1:A:88:PHE:CB	1:A:88:PHE:CG	1	18.1
(1,260) $(1,263)$	1:A:72:LEU:CA	1:A:72:LEU:CB	1:A:72:LEU:CG	1:A:72:LEU:CD1	1	18.09
(1,263) $(1,261)$	1:A:3:ILE:CA	1:A:3:ILE:CB	1:A:3:ILE:CG1	1:A:3:ILE:CD1	4	18.08
(1,261) $(1,269)$	1:A:2:LEU:CA	1:A:2:LEU:CB	1:A:2:LEU:CG	1:A:2:LEU:CD1	17	18.07
(1,269) $(1,260)$	1:A:68:ILE:CA	1:A:68:ILE:CB	1:A:68:ILE:CG1	1:A:68:ILE:CD1	17	18.07
(1,200) $(1,187)$	1:A:139:PHE:N	1:A:139:PHE:CA	1:A:139:PHE:C	1:A:140:ILE:N	10	18.06
(1,187) $(1,283)$	1:A:171:LEU:CA	1:A:171:LEU:CB	1:A:171:LEU:CG	1:A:171:LEU:CD1	7	18.04
(1,263) $(1,263)$	1:A:72:LEU:CA	1:A:72:LEU:CB	1:A:72:LEU:CG	1:A:72:LEU:CD1	9	18.04
(1,286)	1:A:88:PHE:N	1:A:88:PHE:CA	1:A:88:PHE:CB	1:A:88:PHE:CG	5	17.99
(1,280) $(1,290)$	1:A:130:LYS:CA	1:A:130:LYS:CB	1:A:130:LYS:CG	1:A:130:LYS:CD	5	17.95
(1,261)	1:A:3:ILE:CA	1:A:3:ILE:CB	1:A:3:ILE:CG1	1:A:3:ILE:CD1	5	17.91
(1,251) $(1,258)$	1:A:127:LEU:N	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CG	3	17.91
(1,258) $(1,258)$	1:A:127:LEU:N	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CG	9	17.89
(1,288) $(1,189)$	1:A:140:ILE:N	1:A:140:ILE:CA	1:A:140:ILE:C	1:A:141:GLY:N	9	17.84
(1,169) $(1,264)$	1:A:95:PHE:N	1:A:95:PHE:CA	1:A:95:PHE:CB	1:A:95:PHE:CG	3	17.82
(, ,	1:A:30:PHE:N	1:A:30:PHE:CA	1:A:30:PHE:CB	1:A:30:PHE:CG	9	17.77
(1,292)	1:A:116:PHE:N	1:A:116:PHE:CA	1:A:116:PHE:CB	1:A:116:PHE:CG	17	17.77
(1,280) $(1,292)$	1:A:110:PHE:N 1:A:30:PHE:N	1:A:110:PHE:CA 1:A:30:PHE:CA	1:A:30:PHE:CB	1:A:30:PHE:CG	15	17.64
(1,292) $(1,292)$	1:A:30:PHE:N	1:A:30:PHE:CA 1:A:30:PHE:CA	1:A:30:PHE:CB	1:A:30:PHE:CG	8	17.6
· · /	1:A:88:PHE:N	1:A:88:PHE:CA	1:A:30:PHE:CB 1:A:88:PHE:CB	1:A:30:PHE:CG 1:A:88:PHE:CG	2	17.59
(1,286) $(1,257)$	1:A:128:LEU:CA	1:A:08:PHE:CA 1:A:128:LEU:CB	1:A:08:PHE:CB	1:A:128:LEU:CD1	20	17.59
	1:A:128:LEU:CA 1:A:100:ILE:CA	1:A:128:LEU:CB 1:A:100:ILE:CB	1:A:128:LEU:CG 1:A:100:ILE:CG1	1:A:128:LEU:CD1 1:A:100:ILE:CD1	15	17.53
(1,289)	1:A:100:1LE:CA 1:A:68:ILE:CA	1:A:68:ILE:CB	1:A:100:ILE:CG1	1:A:100:ILE:CD1 1:A:68:ILE:CD1	2	17.55
(1,260) $(1,189)$	1:A:140:ILE:N	1:A:140:ILE:CA	1:A:08:ILE:CG1 1:A:140:ILE:C	1:A:08:ILE:CD1 1:A:141:GLY:N	19	17.49
(1,189) $(1,289)$	1:A:140:ILE:N 1:A:100:ILE:CA	1:A:140:ILE:CA 1:A:100:ILE:CB	1:A:140:ILE:C 1:A:100:ILE:CG1	1:A:141:GLY:N 1:A:100:ILE:CD1	5	17.46
(1,289) $(1,48)$	1:A:100:1LE:CA 1:A:35:VAL:N	1:A:35:VAL:CA	1:A:100:ILE:CG1 1:A:35:VAL:C	1:A:36:VAL:N	19	17.40
	1:A:88:PHE:N	1:A:88:PHE:CA	1:A:88:PHE:CB	1:A:88:PHE:CG	20	17.4
(1,286)	1:A:35:VAL:N	1:A:35:VAL:CA	1:A:88:PHE:CB 1:A:35:VAL:C	1:A:88:PHE:CG 1:A:36:VAL:N	10	17.36
(1,48)	1:A:35:VAL:N 1:A:128:LEU:CA	1:A:35: VAL:CA 1:A:128:LEU:CB	1:A:35:VAL:C 1:A:128:LEU:CG	1:A:30:VAL:N 1:A:128:LEU:CD1		17.35
(1,257)					4	
(1,189)	1:A:140:ILE:N	1:A:140:ILE:CA	1:A:140:ILE:C	1:A:141:GLY:N	4	17.35
(1,263)	1:A:72:LEU:CA	1:A:72:LEU:CB	1:A:72:LEU:CG 1:A:100:ILE:CG1	1:A:72:LEU:CD1	3	17.26
(1,289)	1:A:100:ILE:CA	1:A:100:ILE:CB	1:A:100:1LE:UG1	1:A:100:ILE:CD1	14	17.25



Key	ed from previous pag Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,269)	1:A:2:LEU:CA	1:A:2:LEU:CB	1:A:2:LEU:CG	1:A:2:LEU:CD1	11	17.25
(1,289)	1:A:100:ILE:CA	1:A:100:ILE:CB	1:A:100:ILE:CG1	1:A:100:ILE:CD1	10	17.19
(1,260)	1:A:68:ILE:CA	1:A:68:ILE:CB	1:A:68:ILE:CG1	1:A:68:ILE:CD1	10	17.17
(1,260)	1:A:68:ILE:CA	1:A:68:ILE:CB	1:A:68:ILE:CG1	1:A:68:ILE:CD1	16	17.16
(1,290)	1:A:130:LYS:CA	1:A:130:LYS:CB	1:A:130:LYS:CG	1:A:130:LYS:CD	2	17.14
(1,267)	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CG	1:A:136:LEU:CD1	11	17.12
(1,264)	1:A:95:PHE:N	1:A:95:PHE:CA	1:A:95:PHE:CB	1:A:95:PHE:CG	14	17.11
(1,290)	1:A:130:LYS:CA	1:A:130:LYS:CB	1:A:130:LYS:CG	1:A:130:LYS:CD	15	17.04
(1,269)	1:A:2:LEU:CA	1:A:2:LEU:CB	1:A:2:LEU:CG	1:A:2:LEU:CD1	19	17.01
(1,286)	1:A:88:PHE:N	1:A:88:PHE:CA	1:A:88:PHE:CB	1:A:88:PHE:CG	12	17.0
(1,269)	1:A:2:LEU:CA	1:A:2:LEU:CB	1:A:2:LEU:CG	1:A:2:LEU:CD1	14	16.99
(1,269)	1:A:2:LEU:CA	1:A:2:LEU:CB	1:A:2:LEU:CG	1:A:2:LEU:CD1	12	16.94
(1,280)	1:A:116:PHE:N	1:A:116:PHE:CA	1:A:116:PHE:CB	1:A:116:PHE:CG	14	16.88
(1,292)	1:A:30:PHE:N	1:A:30:PHE:CA	1:A:30:PHE:CB	1:A:30:PHE:CG	5	16.86
(1,267)	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CG	1:A:136:LEU:CD1	9	16.86
(1,290)	1:A:130:LYS:CA	1:A:130:LYS:CB	1:A:130:LYS:CG	1:A:130:LYS:CD	8	16.85
(1,257)	1:A:128:LEU:CA	1:A:128:LEU:CB	1:A:128:LEU:CG	1:A:128:LEU:CD1	11	16.78
(1,258)	1:A:127:LEU:N	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CG	14	16.77
(1,261)	1:A:3:ILE:CA	1:A:3:ILE:CB	1:A:3:ILE:CG1	1:A:3:ILE:CD1	1	16.67
(1,289)	1:A:100:ILE:CA	1:A:100:ILE:CB	1:A:100:ILE:CG1	1:A:100:ILE:CD1	11	16.63
(1,261)	1:A:3:ILE:CA	1:A:3:ILE:CB	1:A:3:ILE:CG1	1:A:3:ILE:CD1	2	16.56
(1,232)	1:A:171:LEU:N	1:A:171:LEU:CA	1:A:171:LEU:C	1:A:172:VAL:N	4	16.47
(1,263)	1:A:72:LEU:CA	1:A:72:LEU:CB	1:A:72:LEU:CG	1:A:72:LEU:CD1	6	16.39
(1,257)	1:A:128:LEU:CA	1:A:128:LEU:CB	1:A:128:LEU:CG	1:A:128:LEU:CD1	12	16.33
(1,290)	1:A:130:LYS:CA	1:A:130:LYS:CB	1:A:130:LYS:CG	1:A:130:LYS:CD	9	16.32
(1,260)	1:A:68:ILE:CA	1:A:68:ILE:CB	1:A:68:ILE:CG1	1:A:68:ILE:CD1	7	16.24
(1,269)	1:A:2:LEU:CA	1:A:2:LEU:CB	1:A:2:LEU:CG	1:A:2:LEU:CD1	15	16.16
(1,286)	1:A:88:PHE:N	1:A:88:PHE:CA	1:A:88:PHE:CB	1:A:88:PHE:CG	4	16.08
(1,290)	1:A:130:LYS:CA	1:A:130:LYS:CB	1:A:130:LYS:CG	1:A:130:LYS:CD	20	16.01
(1,283)	1:A:171:LEU:CA	1:A:171:LEU:CB	1:A:171:LEU:CG	1:A:171:LEU:CD1	16	15.94
(1,283)	1:A:171:LEU:CA	1:A:171:LEU:CB	1:A:171:LEU:CG	1:A:171:LEU:CD1	20	15.91
(1,264)	1:A:95:PHE:N	1:A:95:PHE:CA	1:A:95:PHE:CB	1:A:95:PHE:CG	7	15.91
(1,261)	1:A:3:ILE:CA	1:A:3:ILE:CB	1:A:3:ILE:CG1	1:A:3:ILE:CD1	12	15.89
(1,187)	1:A:139:PHE:N	1:A:139:PHE:CA	1:A:139:PHE:C	1:A:140:ILE:N	3	15.87
(1,280)	1:A:116:PHE:N	1:A:116:PHE:CA	1:A:116:PHE:CB	1:A:116:PHE:CG	4	15.84
(1,290)	1:A:130:LYS:CA	1:A:130:LYS:CB	1:A:130:LYS:CG	1:A:130:LYS:CD	12	15.77
(1,261)	1:A:3:ILE:CA	1:A:3:ILE:CB	1:A:3:ILE:CG1	1:A:3:ILE:CD1	10	15.77
(1,267)	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CG	1:A:136:LEU:CD1	2	15.75
(1,257)	1:A:128:LEU:CA	1:A:128:LEU:CB	1:A:128:LEU:CG	1:A:128:LEU:CD1	5	15.75
(1,269)	1:A:2:LEU:CA	1:A:2:LEU:CB	1:A:2:LEU:CG	1:A:2:LEU:CD1	10	15.74
(1,263)	1:A:72:LEU:CA	1:A:72:LEU:CB	1:A:72:LEU:CG	1:A:72:LEU:CD1	10	15.71
(1,290)	1:A:130:LYS:CA	1:A:130:LYS:CB	1:A:130:LYS:CG	1:A:130:LYS:CD	14	15.7
(1,260)	1:A:68:ILE:CA	1:A:68:ILE:CB	1:A:68:ILE:CG1	1:A:68:ILE:CD1	12	15.69
(1,261)	1:A:3:ILE:CA	1:A:3:ILE:CB	1:A:3:ILE:CG1	1:A:3:ILE:CD1	9	15.64
(1,292)	1:A:30:PHE:N	1:A:30:PHE:CA	1:A:30:PHE:CB	1:A:30:PHE:CG	17	15.61
(1,283)	1:A:171:LEU:CA	1:A:171:LEU:CB	1:A:171:LEU:CG	1:A:171:LEU:CD1	17	15.51
(1,263)	1:A:72:LEU:CA	1:A:72:LEU:CB	1:A:72:LEU:CG	1:A:72:LEU:CD1	7	15.44
(1,257)	1:A:128:LEU:CA	1:A:128:LEU:CB	1:A:128:LEU:CG	1:A:128:LEU:CD1	1	15.44
(1,264)	1:A:95:PHE:N	1:A:95:PHE:CA	1:A:95:PHE:CB	1:A:95:PHE:CG	10	15.41
(1,260)	1:A:68:ILE:CA	1:A:68:ILE:CB	1:A:68:ILE:CG1	1:A:68:ILE:CD1	6	15.29
(1,260)	1:A:68:ILE:CA	1:A:68:ILE:CB	1:A:68:ILE:CG1	1:A:68:ILE:CD1	4	15.23



	ed from previous pag					
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	$\textbf{Violation} \ (\ \circ \)$
(1,283)	1:A:171:LEU:CA	1:A:171:LEU:CB	1:A:171:LEU:CG	1:A:171:LEU:CD1	14	15.13
(1,269)	1:A:2:LEU:CA	1:A:2:LEU:CB	1:A:2:LEU:CG	1:A:2:LEU:CD1	7	15.11
(1,257)	1:A:128:LEU:CA	1:A:128:LEU:CB	1:A:128:LEU:CG	1:A:128:LEU:CD1	17	15.11
(1,257)	1:A:128:LEU:CA	1:A:128:LEU:CB	1:A:128:LEU:CG	1:A:128:LEU:CD1	6	15.1
(1,269)	1:A:2:LEU:CA	1:A:2:LEU:CB	1:A:2:LEU:CG	1:A:2:LEU:CD1	6	15.08
(1,290)	1:A:130:LYS:CA	1:A:130:LYS:CB	1:A:130:LYS:CG	1:A:130:LYS:CD	1	15.05
(1,189)	1:A:140:ILE:N	1:A:140:ILE:CA	1:A:140:ILE:C	1:A:141:GLY:N	1	15.04
(1,286)	1:A:88:PHE:N	1:A:88:PHE:CA	1:A:88:PHE:CB	1:A:88:PHE:CG	18	15.03
(1,280)	1:A:116:PHE:N	1:A:116:PHE:CA	1:A:116:PHE:CB	1:A:116:PHE:CG	15	14.94
(1,286)	1:A:88:PHE:N	1:A:88:PHE:CA	1:A:88:PHE:CB	1:A:88:PHE:CG	17	14.91
(1,292)	1:A:30:PHE:N	1:A:30:PHE:CA	1:A:30:PHE:CB	1:A:30:PHE:CG	1	14.72
(1,280)	1:A:116:PHE:N	1:A:116:PHE:CA	1:A:116:PHE:CB	1:A:116:PHE:CG	2	14.7
(1,269)	1:A:2:LEU:CA	1:A:2:LEU:CB	1:A:2:LEU:CG	1:A:2:LEU:CD1	13	14.7
(1,290)	1:A:130:LYS:CA	1:A:130:LYS:CB	1:A:130:LYS:CG	1:A:130:LYS:CD	11	14.67
(1,263)	1:A:72:LEU:CA	1:A:72:LEU:CB	1:A:72:LEU:CG	1:A:72:LEU:CD1	5	14.67
(1,189)	1:A:140:ILE:N	1:A:140:ILE:CA	1:A:140:ILE:C	1:A:141:GLY:N	12	14.65
(1,267)	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CG	1:A:136:LEU:CD1	8	14.59
(1,290)	1:A:130:LYS:CA	1:A:130:LYS:CB	1:A:130:LYS:CG	1:A:130:LYS:CD	7	14.56
(1,290)	1:A:130:LYS:CA	1:A:130:LYS:CB	1:A:130:LYS:CG	1:A:130:LYS:CD	16	14.52
(1,260)	1:A:68:ILE:CA	1:A:68:ILE:CB	1:A:68:ILE:CG1	1:A:68:ILE:CD1	9	14.49
(1,269)	1:A:2:LEU:CA	1:A:2:LEU:CB	1:A:2:LEU:CG	1:A:2:LEU:CD1	3	14.43
(1,283)	1:A:171:LEU:CA	1:A:171:LEU:CB	1:A:171:LEU:CG	1:A:171:LEU:CD1	19	14.41
(1,261)	1:A:3:ILE:CA	1:A:3:ILE:CB	1:A:3:ILE:CG1	1:A:3:ILE:CD1	6	14.35
(1,258)	1:A:127:LEU:N	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CG	12	14.32
(1,257)	1:A:128:LEU:CA	1:A:128:LEU:CB	1:A:128:LEU:CG	1:A:128:LEU:CD1	2	14.26
(1,283)	1:A:171:LEU:CA	1:A:171:LEU:CB	1:A:171:LEU:CG	1:A:171:LEU:CD1	2	14.22
(1,263)	1:A:72:LEU:CA	1:A:72:LEU:CB	1:A:72:LEU:CG	1:A:72:LEU:CD1	11	14.22
(1,261)	1:A:3:ILE:CA	1:A:3:ILE:CB	1:A:3:ILE:CG1	1:A:3:ILE:CD1	15	14.2
(1,286)	1:A:88:PHE:N	1:A:88:PHE:CA	1:A:88:PHE:CB	1:A:88:PHE:CG	10	14.14
(1,289)	1:A:100:ILE:CA	1:A:100:ILE:CB	1:A:100:ILE:CG1	1:A:100:ILE:CD1	3	14.13
(1,258)	1:A:127:LEU:N	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CG	18	14.12
(1,255)	1:A:19:PRO:N	1:A:19:PRO:CA	1:A:19:PRO:C	1:A:20:MET:N	10	14.07
(1,255)	1:A:19:PRO:N	1:A:19:PRO:CA	1:A:19:PRO:C	1:A:20:MET:N	6	14.0
(1,286)	1:A:88:PHE:N	1:A:88:PHE:CA	1:A:88:PHE:CB	1:A:88:PHE:CG	19	13.98
(1,260)	1:A:68:ILE:CA	1:A:68:ILE:CB	1:A:68:ILE:CG1	1:A:68:ILE:CD1	18	13.98
(1,264)	1:A:95:PHE:N	1:A:95:PHE:CA	1:A:95:PHE:CB	1:A:95:PHE:CG	1	13.97
(1,289)	1:A:100:ILE:CA	1:A:100:ILE:CB	1:A:100:ILE:CG1	1:A:100:ILE:CD1	7	13.95
(1,289)	1:A:100:ILE:CA	1:A:100:ILE:CB	1:A:100:ILE:CG1	1:A:100:ILE:CD1	13	13.95
(1,263)	1:A:72:LEU:CA	1:A:72:LEU:CB	1:A:72:LEU:CG	1:A:72:LEU:CD1	2	13.95
(1,263)	1:A:72:LEU:CA	1:A:72:LEU:CB	1:A:72:LEU:CG	1:A:72:LEU:CD1	8	13.94
(1,187)	1:A:139:PHE:N	1:A:139:PHE:CA	1:A:139:PHE:C	1:A:140:ILE:N	2	13.94
(1,267)	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CG	1:A:136:LEU:CD1	20	13.85
(1,280)	1:A:116:PHE:N	1:A:116:PHE:CA	1:A:116:PHE:CB	1:A:116:PHE:CG	7	13.82
(1,230)	1:A:170:MET:N	1:A:170:MET:CA	1:A:170:MET:C	1:A:171:LEU:N	16	13.8
(1,283)	1:A:171:LEU:CA	1:A:171:LEU:CB	1:A:171:LEU:CG	1:A:171:LEU:CD1	9	13.7
(1,283)	1:A:171:LEU:CA	1:A:171:LEU:CB	1:A:171:LEU:CG	1:A:171:LEU:CD1	11	13.7
(1,264)	1:A:95:PHE:N	1:A:95:PHE:CA	1:A:95:PHE:CB	1:A:95:PHE:CG	9	13.63
(1,292)	1:A:30:PHE:N	1:A:30:PHE:CA	1:A:30:PHE:CB	1:A:30:PHE:CG	20	13.61
(1,267)	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CG	1:A:136:LEU:CD1	10	13.56
(1,260)	1:A:68:ILE:CA	1:A:68:ILE:CB	1:A:68:ILE:CG1	1:A:68:ILE:CD1	20	13.56
(1,264)	1:A:95:PHE:N	1:A:95:PHE:CA	1:A:95:PHE:CB	1:A:95:PHE:CG	17	13.54
(-,-01)			1	1		ed on nert nage



	ed from previous pag					
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	$\textbf{Violation} \ (\ \circ \)$
(1,260)	1:A:68:ILE:CA	1:A:68:ILE:CB	1:A:68:ILE:CG1	1:A:68:ILE:CD1	1	13.52
(1,263)	1:A:72:LEU:CA	1:A:72:LEU:CB	1:A:72:LEU:CG	1:A:72:LEU:CD1	15	13.5
(1,258)	1:A:127:LEU:N	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CG	10	13.43
(1,258)	1:A:127:LEU:N	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CG	13	13.41
(1,261)	1:A:3:ILE:CA	1:A:3:ILE:CB	1:A:3:ILE:CG1	1:A:3:ILE:CD1	16	13.39
(1,264)	1:A:95:PHE:N	1:A:95:PHE:CA	1:A:95:PHE:CB	1:A:95:PHE:CG	15	13.38
(1,187)	1:A:139:PHE:N	1:A:139:PHE:CA	1:A:139:PHE:C	1:A:140:ILE:N	12	13.35
(1,290)	1:A:130:LYS:CA	1:A:130:LYS:CB	1:A:130:LYS:CG	1:A:130:LYS:CD	10	13.31
(1,189)	1:A:140:ILE:N	1:A:140:ILE:CA	1:A:140:ILE:C	1:A:141:GLY:N	5	13.3
(1,257)	1:A:128:LEU:CA	1:A:128:LEU:CB	1:A:128:LEU:CG	1:A:128:LEU:CD1	18	13.19
(1,48)	1:A:35:VAL:N	1:A:35:VAL:CA	1:A:35:VAL:C	1:A:36:VAL:N	13	13.09
(1,290)	1:A:130:LYS:CA	1:A:130:LYS:CB	1:A:130:LYS:CG	1:A:130:LYS:CD	18	13.08
(1,260)	1:A:68:ILE:CA	1:A:68:ILE:CB	1:A:68:ILE:CG1	1:A:68:ILE:CD1	15	13.08
(1,283)	1:A:171:LEU:CA	1:A:171:LEU:CB	1:A:171:LEU:CG	1:A:171:LEU:CD1	8	13.07
(1,255)	1:A:19:PRO:N	1:A:19:PRO:CA	1:A:19:PRO:C	1:A:20:MET:N	11	13.07
(1,232)	1:A:171:LEU:N	1:A:171:LEU:CA	1:A:171:LEU:C	1:A:172:VAL:N	18	13.07
(1,280)	1:A:116:PHE:N	1:A:116:PHE:CA	1:A:116:PHE:CB	1:A:116:PHE:CG	12	13.06
(1,292)	1:A:30:PHE:N	1:A:30:PHE:CA	1:A:30:PHE:CB	1:A:30:PHE:CG	13	12.98
(1,189)	1:A:140:ILE:N	1:A:140:ILE:CA	1:A:140:ILE:C	1:A:141:GLY:N	7	12.98
(1,280)	1:A:116:PHE:N	1:A:116:PHE:CA	1:A:116:PHE:CB	1:A:116:PHE:CG	11	12.96
(1,260)	1:A:68:ILE:CA	1:A:68:ILE:CB	1:A:68:ILE:CG1	1:A:68:ILE:CD1	8	12.95
(1,258)	1:A:127:LEU:N	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CG	8	12.91
(1,189)	1:A:140:ILE:N	1:A:140:ILE:CA	1:A:140:ILE:C	1:A:141:GLY:N	18	12.89
(1,283)	1:A:171:LEU:CA	1:A:171:LEU:CB	1:A:171:LEU:CG	1:A:171:LEU:CD1	15	12.76
(1,280)	1:A:116:PHE:N	1:A:116:PHE:CA	1:A:116:PHE:CB	1:A:116:PHE:CG	6	12.74
(1,261)	1:A:3:ILE:CA	1:A:3:ILE:CB	1:A:3:ILE:CG1	1:A:3:ILE:CD1	8	12.73
(1,257)	1:A:128:LEU:CA	1:A:128:LEU:CB	1:A:128:LEU:CG	1:A:128:LEU:CD1	3	12.72
(1,280)	1:A:116:PHE:N	1:A:116:PHE:CA	1:A:116:PHE:CB	1:A:116:PHE:CG	16	12.71
(1,290)	1:A:130:LYS:CA	1:A:130:LYS:CB	1:A:130:LYS:CG	1:A:130:LYS:CD	13	12.67
(1,283)	1:A:171:LEU:CA	1:A:171:LEU:CB	1:A:171:LEU:CG	1:A:171:LEU:CD1	18	12.64
(1,258)	1:A:127:LEU:N	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CG	17	12.49
(1,289)	1:A:100:ILE:CA	1:A:100:ILE:CB	1:A:100:ILE:CG1	1:A:100:ILE:CD1	8	12.34
(1,258)	1:A:127:LEU:N	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CG	19	12.31
(1,187)	1:A:139:PHE:N	1:A:139:PHE:CA	1:A:139:PHE:C	1:A:140:ILE:N	9	12.29
(1,283)	1:A:171:LEU:CA	1:A:171:LEU:CB	1:A:171:LEU:CG	1:A:171:LEU:CD1	4	12.27
(1,258)	1:A:127:LEU:N	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CG	7	12.26
(1,258)	1:A:127:LEU:N	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CG	16	12.18
(1,280)	1:A:116:PHE:N	1:A:116:PHE:CA	1:A:116:PHE:CB	1:A:116:PHE:CG	9	12.05
(1,261)	1:A:3:ILE:CA	1:A:3:ILE:CB	1:A:3:ILE:CG1	1:A:3:ILE:CD1	3	11.98
(1,283)	1:A:171:LEU:CA	1:A:171:LEU:CB	1:A:171:LEU:CG	1:A:171:LEU:CD1	1	11.96
(1,258)	1:A:127:LEU:N	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CG	4	11.95
(1,267)	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CG	1:A:136:LEU:CD1	15	11.83
(1,283)	1:A:171:LEU:CA	1:A:171:LEU:CB	1:A:171:LEU:CG	1:A:171:LEU:CD1	10	11.75
(1,269)	1:A:2:LEU:CA	1:A:2:LEU:CB	1:A:2:LEU:CG	1:A:2:LEU:CD1	4	11.75
(1,4)	1:A:3:ILE:N	1:A:3:ILE:CA	1:A:3:ILE:C	1:A:4:TYR:N	2	11.73
(1,283)	1:A:171:LEU:CA	1:A:171:LEU:CB	1:A:171:LEU:CG	1:A:171:LEU:CD1	3	11.73
(1,257)	1:A:128:LEU:CA	1:A:128:LEU:CB	1:A:128:LEU:CG	1:A:128:LEU:CD1	9	11.71
(1,292)	1:A:30:PHE:N	1:A:30:PHE:CA	1:A:30:PHE:CB	1:A:30:PHE:CG	11	11.7
(1,24)	1:A:14:SER:N	1:A:14:SER:CA	1:A:14:SER:C	1:A:15:SER:N	1	11.64
(1,264)	1:A:95:PHE:N	1:A:95:PHE:CA	1:A:95:PHE:CB	1:A:95:PHE:CG	13	11.59
(1,18)	1:A:10:ASP:N	1:A:10:ASP:CA	1:A:10:ASP:C	1:A:11:ASP:N	13	11.56
(,)			1	1		ad an nant naga



Key	ed from previous pag Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,230)	1:A:170:MET:N	1:A:170:MET:CA	1:A:170:MET:C	1:A:171:LEU:N	6	11.47
(1,264)	1:A:95:PHE:N	1:A:95:PHE:CA	1:A:95:PHE:CB	1:A:95:PHE:CG	6	11.39
(1,260)	1:A:68:ILE:CA	1:A:68:ILE:CB	1:A:68:ILE:CG1	1:A:68:ILE:CD1	19	11.39
(1,187)	1:A:139:PHE:N	1:A:139:PHE:CA	1:A:139:PHE:C	1:A:140:ILE:N	8	11.31
(1,283)	1:A:171:LEU:CA	1:A:171:LEU:CB	1:A:171:LEU:CG	1:A:171:LEU:CD1	13	11.3
(1,260)	1:A:68:ILE:CA	1:A:68:ILE:CB	1:A:68:ILE:CG1	1:A:68:ILE:CD1	11	11.26
(1,267)	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CG	1:A:136:LEU:CD1	18	11.24
(1,286)	1:A:88:PHE:N	1:A:88:PHE:CA	1:A:88:PHE:CB	1:A:88:PHE:CG	16	11.15
(1,286)	1:A:88:PHE:N	1:A:88:PHE:CA	1:A:88:PHE:CB	1:A:88:PHE:CG	6	11.12
(1,258)	1:A:127:LEU:N	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CG	2	11.06
(1,280) $(1,280)$	1:A:116:PHE:N	1:A:116:PHE:CA	1:A:116:PHE:CB	1:A:116:PHE:CG	19	11.05
(1,269)	1:A:2:LEU:CA	1:A:2:LEU:CB	1:A:2:LEU:CG	1:A:2:LEU:CD1	1	11.03
(1,257)	1:A:128:LEU:CA	1:A:128:LEU:CB	1:A:128:LEU:CG	1:A:128:LEU:CD1	14	10.99
(1,297) $(1,292)$	1:A:30:PHE:N	1:A:30:PHE:CA	1:A:30:PHE:CB	1:A:30:PHE:CG	4	10.85
(1,232) $(1,286)$	1:A:88:PHE:N	1:A:88:PHE:CA	1:A:88:PHE:CB	1:A:88:PHE:CG	15	10.84
(1,250) $(1,258)$	1:A:127:LEU:N	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CG	15	10.82
(1,238) $(1,189)$	1:A:140:ILE:N	1:A:140:ILE:CA	1:A:140:ILE:C	1:A:141:GLY:N	15	10.74
(1,169) $(1,14)$	1:A:140:ILE:N 1:A:8:PHE:N	1:A:8:PHE:CA	1:A:140:ILE:C 1:A:8:PHE:C	1:A:141:GL1:N 1:A:9:THR:N	17	10.74
(1,14) $(1,263)$	1:A:72:LEU:CA	1:A:72:LEU:CB	1:A:72:LEU:CG	1:A:9:11K:N 1:A:72:LEU:CD1	20	10.57
(1,263) $(1,260)$	1:A:68:ILE:CA	1:A:68:ILE:CB	1:A:72:LEU:CG 1:A:68:ILE:CG1	1:A:68:ILE:CD1	13	10.55
(1,289)	1:A:100:ILE:CA	1:A:100:ILE:CB	1:A:100:ILE:CG1	1:A:100:ILE:CD1	16	10.52
(1,269) $(1,267)$	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:CB	1:A:100:ILE:CG1 1:A:136:LEU:CG	1:A:136:LEU:CD1	6	10.32
(, ,	1:A:100:ILE:CA	1:A:100:ILE:CB	1:A:100:ILE:CG1	1:A:100:ILE:CD1	1	10.49
(1,289)			1:A:100:ILE:CG1		2	10.48
(1,289)	1:A:100:ILE:CA	1:A:100:ILE:CB		1:A:100:ILE:CD1		
(1,269)	1:A:2:LEU:CA	1:A:2:LEU:CB	1:A:2:LEU:CG	1:A:2:LEU:CD1	2	10.32
(1,263)	1:A:72:LEU:CA	1:A:72:LEU:CB	1:A:72:LEU:CG	1:A:72:LEU:CD1	19	10.29
(1,48)	1:A:35:VAL:N	1:A:35:VAL:CA	1:A:35:VAL:C	1:A:36:VAL:N	4	10.25
(1,261)	1:A:3:ILE:CA	1:A:3:ILE:CB	1:A:3:ILE:CG1	1:A:3:ILE:CD1	20	10.17
(1,264)	1:A:95:PHE:N	1:A:95:PHE:CA	1:A:95:PHE:CB	1:A:95:PHE:CG	18	10.1
(1,232)	1:A:171:LEU:N	1:A:171:LEU:CA	1:A:171:LEU:C	1:A:172:VAL:N	10	10.08
(1,267)	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CG	1:A:136:LEU:CD1	3	10.03
(1,289)	1:A:100:ILE:CA	1:A:100:ILE:CB	1:A:100:ILE:CG1	1:A:100:ILE:CD1	6	10.01
(1,232)	1:A:171:LEU:N	1:A:171:LEU:CA	1:A:171:LEU:C	1:A:172:VAL:N	12	9.96
(1,292)	1:A:30:PHE:N	1:A:30:PHE:CA	1:A:30:PHE:CB	1:A:30:PHE:CG	2	9.93
(1,283)	1:A:171:LEU:CA	1:A:171:LEU:CB	1:A:171:LEU:CG	1:A:171:LEU:CD1	6	9.92
(1,24)	1:A:14:SER:N	1:A:14:SER:CA	1:A:14:SER:C	1:A:15:SER:N	7	9.77
(1,18)	1:A:10:ASP:N	1:A:10:ASP:CA	1:A:10:ASP:C	1:A:11:ASP:N	4	9.74
(1,18)	1:A:10:ASP:N	1:A:10:ASP:CA	1:A:10:ASP:C	1:A:11:ASP:N	7	9.72
(1,263)	1:A:72:LEU:CA	1:A:72:LEU:CB	1:A:72:LEU:CG	1:A:72:LEU:CD1	14	9.59
(1,258)	1:A:127:LEU:N	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CG	6	9.53
(1,292)	1:A:30:PHE:N	1:A:30:PHE:CA	1:A:30:PHE:CB	1:A:30:PHE:CG	7	9.44
(1,280)	1:A:116:PHE:N	1:A:116:PHE:CA	1:A:116:PHE:CB	1:A:116:PHE:CG	1	9.43
(1,4)	1:A:3:ILE:N	1:A:3:ILE:CA	1:A:3:ILE:C	1:A:4:TYR:N	14	9.41
(1,24)	1:A:14:SER:N	1:A:14:SER:CA	1:A:14:SER:C	1:A:15:SER:N	4	9.38
(1,260)	1:A:68:ILE:CA	1:A:68:ILE:CB	1:A:68:ILE:CG1	1:A:68:ILE:CD1	14	9.28
(1,232)	1:A:171:LEU:N	1:A:171:LEU:CA	1:A:171:LEU:C	1:A:172:VAL:N	20	9.27
(1,18)	1:A:10:ASP:N	1:A:10:ASP:CA	1:A:10:ASP:C	1:A:11:ASP:N	15	9.25
(1,289)	1:A:100:ILE:CA	1:A:100:ILE:CB	1:A:100:ILE:CG1	1:A:100:ILE:CD1	19	9.13
(1,292)	1:A:30:PHE:N	1:A:30:PHE:CA	1:A:30:PHE:CB	1:A:30:PHE:CG	10	9.11
(1,286)	1:A:88:PHE:N	1:A:88:PHE:CA	1:A:88:PHE:CB	1:A:88:PHE:CG	14	8.94
(1,18)	1:A:10:ASP:N	1:A:10:ASP:CA	1:A:10:ASP:C	1:A:11:ASP:N	17	8.84



Key	$rac{ed\ from\ previous\ pag}{\mathbf{Atom-1}}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (°)
(1,175)	1:A:133:PHE:N	1:A:133:PHE:CA	1:A:133:PHE:C	1:A:134:LYS:N	5	8.83
(1,269)	1:A:2:LEU:CA	1:A:2:LEU:CB	1:A:2:LEU:CG	1:A:2:LEU:CD1	8	8.81
(1,280)	1:A:116:PHE:N	1:A:116:PHE:CA	1:A:116:PHE:CB	1:A:116:PHE:CG	18	8.75
(1,255)	1:A:19:PRO:N	1:A:19:PRO:CA	1:A:19:PRO:C	1:A:20:MET:N	3	8.65
(1,175)	1:A:133:PHE:N	1:A:133:PHE:CA	1:A:133:PHE:C	1:A:134:LYS:N	10	8.4
(1,289)	1:A:100:ILE:CA	1:A:100:ILE:CB	1:A:100:ILE:CG1	1:A:100:ILE:CD1	12	8.38
(1,267)	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CG	1:A:136:LEU:CD1	5	8.19
(1,230)	1:A:170:MET:N	1:A:170:MET:CA	1:A:170:MET:C	1:A:171:LEU:N	17	7.86
(1,175)	1:A:133:PHE:N	1:A:133:PHE:CA	1:A:133:PHE:C	1:A:134:LYS:N	1	7.85
(1,4)	1:A:3:ILE:N	1:A:3:ILE:CA	1:A:3:ILE:C	1:A:4:TYR:N	4	7.83
(1,15)	1:A:8:PHE:C	1:A:9:THR:N	1:A:9:THR:CA	1:A:9:THR:C	9	7.82
(1,292)	1:A:30:PHE:N	1:A:30:PHE:CA	1:A:30:PHE:CB	1:A:30:PHE:CG	14	7.71
(1,290)	1:A:130:LYS:CA	1:A:130:LYS:CB	1:A:130:LYS:CG	1:A:130:LYS:CD	4	7.71
(1,189)	1:A:140:ILE:N	1:A:140:ILE:CA	1:A:140:ILE:C	1:A:141:GLY:N	10	7.7
(1,15)	1:A:8:PHE:C	1:A:9:THR:N	1:A:9:THR:CA	1:A:9:THR:C	15	7.6
(1,18)	1:A:10:ASP:N	1:A:10:ASP:CA	1:A:10:ASP:C	1:A:11:ASP:N	5	7.57
(1,18)	1:A:10:ASP:N	1:A:10:ASP:CA	1:A:10:ASP:C	1:A:11:ASP:N	8	7.53
(1,18)	1:A:10:ASP:N	1:A:10:ASP:CA	1:A:10:ASP:C	1:A:11:ASP:N	9	7.48
(1,14)	1:A:8:PHE:N	1:A:8:PHE:CA	1:A:8:PHE:C	1:A:9:THR:N	15	7.48
(1,264)	1:A:95:PHE:N	1:A:95:PHE:CA	1:A:95:PHE:CB	1:A:95:PHE:CG	20	7.33
(1,48)	1:A:35:VAL:N	1:A:35:VAL:CA	1:A:35:VAL:C	1:A:36:VAL:N	16	7.29
(1,292)	1:A:30:PHE:N	1:A:30:PHE:CA	1:A:30:PHE:CB	1:A:30:PHE:CG	16	7.27
(1,4)	1:A:3:ILE:N	1:A:3:ILE:CA	1:A:3:ILE:C	1:A:4:TYR:N	7	7.18
(1,175)	1:A:133:PHE:N	1:A:133:PHE:CA	1:A:133:PHE:C	1:A:134:LYS:N	18	7.04
(1,175)	1:A:133:PHE:N	1:A:133:PHE:CA	1:A:133:PHE:C	1:A:134:LYS:N	11	6.93
(1,15)	1:A:8:PHE:C	1:A:9:THR:N	1:A:9:THR:CA	1:A:9:THR:C	7	6.85
(1,14)	1:A:8:PHE:N	1:A:8:PHE:CA	1:A:8:PHE:C	1:A:9:THR:N	13	6.82
(1,292)	1:A:30:PHE:N	1:A:30:PHE:CA	1:A:30:PHE:CB	1:A:30:PHE:CG	19	6.8
(1,14)	1:A:8:PHE:N	1:A:8:PHE:CA	1:A:8:PHE:C	1:A:9:THR:N	9	6.8
(1,24)	1:A:14:SER:N	1:A:14:SER:CA	1:A:14:SER:C	1:A:15:SER:N	15	6.77
(1,286)	1:A:88:PHE:N	1:A:88:PHE:CA	1:A:88:PHE:CB	1:A:88:PHE:CG	9	6.73
(1,175)	1:A:133:PHE:N	1:A:133:PHE:CA	1:A:133:PHE:C	1:A:134:LYS:N	2	6.73
(1,24)	1:A:14:SER:N	1:A:14:SER:CA	1:A:14:SER:C	1:A:15:SER:N	12	6.66
(1,175)	1:A:133:PHE:N	1:A:133:PHE:CA	1:A:133:PHE:C	1:A:134:LYS:N	14	6.62
(1,13)	1:A:7:ILE:C	1:A:8:PHE:N	1:A:8:PHE:CA	1:A:8:PHE:C	2	6.48
(1,292)	1:A:30:PHE:N	1:A:30:PHE:CA	1:A:30:PHE:CB	1:A:30:PHE:CG	6	6.42
(1,13)	1:A:7:ILE:C	1:A:8:PHE:N	1:A:8:PHE:CA	1:A:8:PHE:C	20	6.41
(1,258)	1:A:127:LEU:N	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CG	11	6.39
(1,175)	1:A:133:PHE:N	1:A:133:PHE:CA	1:A:133:PHE:C	1:A:134:LYS:N	6	6.37
(1,175)	1:A:133:PHE:N	1:A:133:PHE:CA	1:A:133:PHE:C	1:A:134:LYS:N	20	6.32
(1,175)	1:A:133:PHE:N	1:A:133:PHE:CA	1:A:133:PHE:C	1:A:134:LYS:N	16	6.27
(1,289)	1:A:100:ILE:CA	1:A:100:ILE:CB	1:A:100:ILE:CG1	1:A:100:ILE:CD1	18	6.24
(1,175)	1:A:133:PHE:N	1:A:133:PHE:CA	1:A:133:PHE:C	1:A:134:LYS:N	19	6.23
(1,260)	1:A:68:ILE:CA	1:A:68:ILE:CB	1:A:68:ILE:CG1	1:A:68:ILE:CD1	3	6.11
(1,14)	1:A:8:PHE:N	1:A:8:PHE:CA	1:A:8:PHE:C	1:A:9:THR:N	7	6.11
(1,280)	1:A:116:PHE:N	1:A:116:PHE:CA	1:A:116:PHE:CB	1:A:116:PHE:CG	3	5.95
(1,175)	1:A:133:PHE:N	1:A:133:PHE:CA	1:A:133:PHE:C	1:A:134:LYS:N	9	5.94
(1,15)	1:A:8:PHE:C	1:A:9:THR:N	1:A:9:THR:CA	1:A:9:THR:C	17	5.9
(1,13)	1:A:7:ILE:C	1:A:8:PHE:N	1:A:8:PHE:CA	1:A:8:PHE:C	10	5.83
(1,175)	1:A:133:PHE:N	1:A:133:PHE:CA	1:A:133:PHE:C	1:A:134:LYS:N	13	5.8



Key	$rac{ed\ from\ previous\ pag}{\mathbf{Atom-1}}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,15)	1:A:8:PHE:C	1:A:9:THR:N	1:A:9:THR:CA	1:A:9:THR:C	13	5.58
(1,271)	1:A:133:PHE:CA	1:A:133:PHE:CB	1:A:133:PHE:CG	1:A:133:PHE:CD1	12	5.54
(1,280)	1:A:116:PHE:N	1:A:116:PHE:CA	1:A:116:PHE:CB	1:A:116:PHE:CG	8	5.53
(1,175)	1:A:133:PHE:N	1:A:133:PHE:CA	1:A:133:PHE:C	1:A:134:LYS:N	7	5.5
(1,290)	1:A:130:LYS:CA	1:A:130:LYS:CB	1:A:130:LYS:CG	1:A:130:LYS:CD	3	5.28
(1,16)	1:A:9:THR:N	1:A:9:THR:CA	1:A:9:THR:C	1:A:10:ASP:N	18	5.28
(1,13)	1:A:7:ILE:C	1:A:8:PHE:N	1:A:8:PHE:CA	1:A:8:PHE:C	11	5.13
(1,52)	1:A:37:ARG:N	1:A:37:ARG:CA	1:A:37:ARG:C	1:A:38:LYS:N	13	5.12
(1,22)	1:A:12:GLU:N	1:A:12:GLU:CA	1:A:12:GLU:C	1:A:13:LEU:N	5	4.94
(1,24)	1:A:14:SER:N	1:A:14:SER:CA	1:A:14:SER:C	1:A:15:SER:N	8	4.87
(1,10)	1:A:6:ASP:N	1:A:6:ASP:CA	1:A:6:ASP:C	1:A:7:ILE:N	6	4.84
(1,280)	1:A:116:PHE:N	1:A:116:PHE:CA	1:A:116:PHE:CB	1:A:116:PHE:CG	5	4.82
(1,270)	1:A:133:PHE:N	1:A:133:PHE:CA	1:A:133:PHE:CB	1:A:133:PHE:CG	12	4.82
(1,86)	1:A:84:ASP:N	1:A:84:ASP:CA	1:A:84:ASP:C	1:A:85:ALA:N	2	4.74
(1,54)	1:A:38:LYS:N	1:A:38:LYS:CA	1:A:38:LYS:C	1:A:39:GLU:N	18	4.73
(1,230)	1:A:170:MET:N	1:A:170:MET:CA	1:A:170:MET:C	1:A:171:LEU:N	4	4.72
(1,22)	1:A:12:GLU:N	1:A:12:GLU:CA	1:A:12:GLU:C	1:A:13:LEU:N	4	4.69
(1,175)	1:A:133:PHE:N	1:A:133:PHE:CA	1:A:133:PHE:C	1:A:134:LYS:N	15	4.69
(1,172)	1:A:131:ASP:C	1:A:132:ARG:N	1:A:132:ARG:CA	1:A:132:ARG:C	19	4.61
(1,16)	1:A:9:THR:N	1:A:9:THR:CA	1:A:9:THR:C	1:A:10:ASP:N	14	4.53
(1,23)	1:A:13:LEU:C	1:A:14:SER:N	1:A:14:SER:CA	1:A:14:SER:C	7	4.49
(1,21)	1:A:11:ASP:C	1:A:12:GLU:N	1:A:12:GLU:CA	1:A:12:GLU:C	1	4.47
(1,19)	1:A:10:ASP:C	1:A:11:ASP:N	1:A:11:ASP:CA	1:A:11:ASP:C	7	4.42
(1,22)	1:A:12:GLU:N	1:A:12:GLU:CA	1:A:12:GLU:C	1:A:13:LEU:N	15	4.41
(1,271)	1:A:133:PHE:CA	1:A:133:PHE:CB	1:A:133:PHE:CG	1:A:133:PHE:CD1	8	4.35
(1,172)	1:A:131:ASP:C	1:A:132:ARG:N	1:A:132:ARG:CA	1:A:132:ARG:C	1	4.29
(1,19)	1:A:10:ASP:C	1:A:11:ASP:N	1:A:11:ASP:CA	1:A:11:ASP:C	15	4.26
(1,22)	1:A:12:GLU:N	1:A:12:GLU:CA	1:A:12:GLU:C	1:A:13:LEU:N	14	4.18
(1,16)	1:A:9:THR:N	1:A:9:THR:CA	1:A:9:THR:C	1:A:10:ASP:N	12	4.14
(1,13)	1:A:7:ILE:C	1:A:8:PHE:N	1:A:8:PHE:CA	1:A:8:PHE:C	3	4.13
(1,270)	1:A:133:PHE:N	1:A:133:PHE:CA	1:A:133:PHE:CB	1:A:133:PHE:CG	8	4.08
(1,52)	1:A:37:ARG:N	1:A:37:ARG:CA	1:A:37:ARG:C	1:A:38:LYS:N	7	4.04
(1,16)	1:A:9:THR:N	1:A:9:THR:CA	1:A:9:THR:C	1:A:10:ASP:N	8	4.01
(1,270)	1:A:133:PHE:N	1:A:133:PHE:CA	1:A:133:PHE:CB	1:A:133:PHE:CG	4	3.93
(1,16)	1:A:9:THR:N	1:A:9:THR:CA	1:A:9:THR:C	1:A:10:ASP:N	19	3.91
(1,86)	1:A:84:ASP:N	1:A:84:ASP:CA	1:A:84:ASP:C	1:A:85:ALA:N	4	3.9
(1,172)	1:A:131:ASP:C	1:A:132:ARG:N	1:A:132:ARG:CA	1:A:132:ARG:C	9	3.9
(1,57)	1:A:67:GLY:C	1:A:68:ILE:N	1:A:68:ILE:CA	1:A:68:ILE:C	10	3.86
(1,13)	1:A:7:ILE:C	1:A:8:PHE:N	1:A:8:PHE:CA	1:A:8:PHE:C	14	3.85
(1,19)	1:A:10:ASP:C	1:A:11:ASP:N	1:A:11:ASP:CA	1:A:11:ASP:C	9	3.83
(1,251)	1:A:181:CYS:N	1:A:181:CYS:CA	1:A:181:CYS:C	1:A:182:LEU:N	14	3.8
(1,243)	1:A:177:ILE:N	1:A:177:ILE:CA	1:A:177:ILE:C	1:A:178:GLU:N	17	3.79
(1,180)	1:A:135:ASN:C	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:C	6	3.78
(1,180)	1:A:135:ASN:C	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:C	13	3.78
(1,14)	1:A:8:PHE:N	1:A:8:PHE:CA	1:A:8:PHE:C	1:A:9:THR:N	4	3.77
(1,280)	1:A:116:PHE:N	1:A:116:PHE:CA	1:A:116:PHE:CB	1:A:116:PHE:CG	13	3.76
(1,17)	1:A:9:THR:C	1:A:10:ASP:N	1:A:10:ASP:CA	1:A:10:ASP:C	14	3.73
(1,22)	1:A:12:GLU:N	1:A:12:GLU:CA	1:A:12:GLU:C	1:A:13:LEU:N	16	3.71
(1,258)	1:A:127:LEU:N	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CG	20	3.7
(1,86)	1:A:84:ASP:N	1:A:84:ASP:CA	1:A:84:ASP:C	1:A:85:ALA:N	19	3.65
(1,271)	1:A:133:PHE:CA	1:A:133:PHE:CB	1:A:133:PHE:CG	1:A:133:PHE:CD1	3	3.63



	ed from previous pag					
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (\circ)
(1,22)	1:A:12:GLU:N	1:A:12:GLU:CA	1:A:12:GLU:C	1:A:13:LEU:N	17	3.62
(1,183)	1:A:137:ALA:N	1:A:137:ALA:CA	1:A:137:ALA:C	1:A:138:PHE:N	13	3.6
(1,35)	1:A:27:VAL:C	1:A:28:TYR:N	1:A:28:TYR:CA	1:A:28:TYR:C	18	3.58
(1,21)	1:A:11:ASP:C	1:A:12:GLU:N	1:A:12:GLU:CA	1:A:12:GLU:C	14	3.58
(1,54)	1:A:38:LYS:N	1:A:38:LYS:CA	1:A:38:LYS:C	1:A:39:GLU:N	10	3.56
(1,270)	1:A:133:PHE:N	1:A:133:PHE:CA	1:A:133:PHE:CB	1:A:133:PHE:CG	17	3.56
(1,243)	1:A:177:ILE:N	1:A:177:ILE:CA	1:A:177:ILE:C	1:A:178:GLU:N	18	3.56
(1,223)	1:A:166:VAL:N	1:A:166:VAL:CA	1:A:166:VAL:C	1:A:167:PRO:N	15	3.53
(1,271)	1:A:133:PHE:CA	1:A:133:PHE:CB	1:A:133:PHE:CG	1:A:133:PHE:CD1	4	3.5
(1,24)	1:A:14:SER:N	1:A:14:SER:CA	1:A:14:SER:C	1:A:15:SER:N	11	3.45
(1,243)	1:A:177:ILE:N	1:A:177:ILE:CA	1:A:177:ILE:C	1:A:178:GLU:N	13	3.4
(1,77)	1:A:78:GLU:C	1:A:79:MET:N	1:A:79:MET:CA	1:A:79:MET:C	5	3.39
(1,167)	1:A:128:LEU:N	1:A:128:LEU:CA	1:A:128:LEU:C	1:A:129:ALA:N	19	3.36
(1,13)	1:A:7:ILE:C	1:A:8:PHE:N	1:A:8:PHE:CA	1:A:8:PHE:C	16	3.36
(1,180)	1:A:135:ASN:C	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:C	9	3.33
(1,35)	1:A:27:VAL:C	1:A:28:TYR:N	1:A:28:TYR:CA	1:A:28:TYR:C	13	3.29
(1,167)	1:A:128:LEU:N	1:A:128:LEU:CA	1:A:128:LEU:C	1:A:129:ALA:N	9	3.29
(1,5)	1:A:3:ILE:C	1:A:4:TYR:N	1:A:4:TYR:CA	1:A:4:TYR:C	9	3.26
(1,35)	1:A:27:VAL:C	1:A:28:TYR:N	1:A:28:TYR:CA	1:A:28:TYR:C	3	3.25
(1,13)	1:A:7:ILE:C	1:A:8:PHE:N	1:A:8:PHE:CA	1:A:8:PHE:C	1	3.25
(1,253)	1:A:26:LEU:N	1:A:26:LEU:CA	1:A:26:LEU:C	1:A:27:VAL:N	9	3.24
(1,172)	1:A:131:ASP:C	1:A:132:ARG:N	1:A:132:ARG:CA	1:A:132:ARG:C	11	3.2
(1,246)	1:A:178:GLU:C	1:A:179:GLU:N	1:A:179:GLU:CA	1:A:179:GLU:C	20	3.18
(1,1)	1:A:1:MET:C	1:A:2:LEU:N	1:A:2:LEU:CA	1:A:2:LEU:C	3	3.17
(1,54)	1:A:38:LYS:N	1:A:38:LYS:CA	1:A:38:LYS:C	1:A:39:GLU:N	12	3.16
(1,264)	1:A:95:PHE:N	1:A:95:PHE:CA	1:A:95:PHE:CB	1:A:95:PHE:CG	19	3.16
(1,264)	1:A:95:PHE:N	1:A:95:PHE:CA	1:A:95:PHE:CB	1:A:95:PHE:CG	2	3.15
(1,271)	1:A:133:PHE:CA	1:A:133:PHE:CB	1:A:133:PHE:CG	1:A:133:PHE:CD1	17	3.14
(1,16)	1:A:9:THR:N	1:A:9:THR:CA	1:A:9:THR:C	1:A:10:ASP:N	3	3.13
(1,168)	1:A:129:ALA:C	1:A:130:LYS:N	1:A:130:LYS:CA	1:A:130:LYS:C	11	3.11
(1,7)	1:A:4:TYR:C	1:A:5:LYS:N	1:A:5:LYS:CA	1:A:5:LYS:C	8	3.09
(1,22)	1:A:12:GLU:N	1:A:12:GLU:CA	1:A:12:GLU:C	1:A:13:LEU:N	9	3.09
(1,214)	1:A:159:ARG:C	1:A:160:ASP:N	1:A:160:ASP:CA	1:A:160:ASP:C	19	3.09
(1,52)	1:A:37:ARG:N	1:A:37:ARG:CA	1:A:37:ARG:C	1:A:38:LYS:N	10	3.08
(1,52)	1:A:37:ARG:N	1:A:37:ARG:CA	1:A:37:ARG:C	1:A:38:LYS:N	18	3.07
(1,16)	1:A:9:THR:N	1:A:9:THR:CA	1:A:9:THR:C	1:A:10:ASP:N	6	3.04
(1,54)	1:A:38:LYS:N	1:A:38:LYS:CA	1:A:38:LYS:C	1:A:39:GLU:N	16	3.02
(1,82)	1:A:82:TYR:N	1:A:82:TYR:CA	1:A:82:TYR:C	1:A:83:GLU:N	10	3.01
(1,14)	1:A:8:PHE:N	1:A:8:PHE:CA	1:A:8:PHE:C	1:A:9:THR:N	8	3.01
(1,13)	1:A:7:ILE:C	1:A:8:PHE:N	1:A:8:PHE:CA	1:A:8:PHE:C	18	3.01
(1,35)	1:A:27:VAL:C	1:A:28:TYR:N	1:A:28:TYR:CA	1:A:28:TYR:C	6	3.0
(1,21)	1:A:11:ASP:C	1:A:12:GLU:N	1:A:12:GLU:CA	1:A:12:GLU:C	2	3.0
(1,35)	1:A:27:VAL:C	1:A:28:TYR:N	1:A:28:TYR:CA	1:A:28:TYR:C	8	2.98
(1,25)	1:A:19:PRO:C	1:A:20:MET:N	1:A:20:MET:CA	1:A:20:MET:C	20	2.98
(1,3)	1:A:2:LEU:C	1:A:3:ILE:N	1:A:3:ILE:CA	1:A:3:ILE:C	5	2.97
(1,253)	1:A:26:LEU:N	1:A:26:LEU:CA	1:A:26:LEU:C	1:A:27:VAL:N	3	2.97
(1,167)	1:A:128:LEU:N	1:A:128:LEU:CA	1:A:128:LEU:C	1:A:129:ALA:N	4	2.96
(1,16)	1:A:9:THR:N	1:A:9:THR:CA	1:A:9:THR:C	1:A:10:ASP:N	20	2.94
(1,167)	1:A:128:LEU:N	1:A:128:LEU:CA	1:A:128:LEU:C	1:A:129:ALA:N	7	2.93
(1,227)	1:A:168:THR:C	1:A:169:LEU:N	1:A:169:LEU:CA	1:A:169:LEU:C	6	2.91
(1,167)	1:A:128:LEU:N	1:A:128:LEU:CA	1:A:128:LEU:C	1:A:129:ALA:N	8	2.91
(1,101)	1.11.120.1110.11	1.11.120.DD0.OA	1.71.120.1110.0	1.11.120.1111111		2.31



	ed from previous pag		A		36 11	T71 1 14 ()
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	$\textbf{Violation} \ (\ \circ \)$
(1,53)	1:A:37:ARG:C	1:A:38:LYS:N	1:A:38:LYS:CA	1:A:38:LYS:C	16	2.89
(1,253)	1:A:26:LEU:N	1:A:26:LEU:CA	1:A:26:LEU:C	1:A:27:VAL:N	16	2.88
(1,214)	1:A:159:ARG:C	1:A:160:ASP:N	1:A:160:ASP:CA	1:A:160:ASP:C	8	2.87
(1,38)	1:A:29:GLU:N	1:A:29:GLU:CA	1:A:29:GLU:C	1:A:30:PHE:N	11	2.86
(1,224)	1:A:167:PRO:N	1:A:167:PRO:CA	1:A:167:PRO:C	1:A:168:THR:N	16	2.86
(1,251)	1:A:181:CYS:N	1:A:181:CYS:CA	1:A:181:CYS:C	1:A:182:LEU:N	5	2.81
(1,86)	1:A:84:ASP:N	1:A:84:ASP:CA	1:A:84:ASP:C	1:A:85:ALA:N	9	2.8
(1,55)	1:A:65:GLU:C	1:A:66:ARG:N	1:A:66:ARG:CA	1:A:66:ARG:C	20	2.79
(1,21)	1:A:11:ASP:C	1:A:12:GLU:N	1:A:12:GLU:CA	1:A:12:GLU:C	3	2.77
(1,57)	1:A:67:GLY:C	1:A:68:ILE:N	1:A:68:ILE:CA	1:A:68:ILE:C	15	2.76
(1,17)	1:A:9:THR:C	1:A:10:ASP:N	1:A:10:ASP:CA	1:A:10:ASP:C	18	2.75
(1,77)	1:A:78:GLU:C	1:A:79:MET:N	1:A:79:MET:CA	1:A:79:MET:C	6	2.73
(1,53)	1:A:37:ARG:C	1:A:38:LYS:N	1:A:38:LYS:CA	1:A:38:LYS:C	3	2.73
(1,40)	1:A:30:PHE:N	1:A:30:PHE:CA	1:A:30:PHE:C	1:A:31:LYS:N	1	2.73
(1,246)	1:A:178:GLU:C	1:A:179:GLU:N	1:A:179:GLU:CA	1:A:179:GLU:C	6	2.71
(1,14)	1:A:8:PHE:N	1:A:8:PHE:CA	1:A:8:PHE:C	1:A:9:THR:N	18	2.68
(1,17)	1:A:9:THR:C	1:A:10:ASP:N	1:A:10:ASP:CA	1:A:10:ASP:C	1	2.65
(1,171)	1:A:131:ASP:N	1:A:131:ASP:CA	1:A:131:ASP:C	1:A:132:ARG:N	11	2.62
(1,70)	1:A:74:HIS:N	1:A:74:HIS:CA	1:A:74:HIS:C	1:A:75:LYS:N	12	2.59
(1,274)	1:A:91:TYR:N	1:A:91:TYR:CA	1:A:91:TYR:CB	1:A:91:TYR:CG	7	2.59
(1,83)	1:A:82:TYR:C	1:A:83:GLU:N	1:A:83:GLU:CA	1:A:83:GLU:C	18	2.58
(1,52)	1:A:37:ARG:N	1:A:37:ARG:CA	1:A:37:ARG:C	1:A:38:LYS:N	2	2.57
(1,253)	1:A:26:LEU:N	1:A:26:LEU:CA	1:A:26:LEU:C	1:A:27:VAL:N	8	2.57
(1,243)	1:A:177:ILE:N	1:A:177:ILE:CA	1:A:177:ILE:C	1:A:178:GLU:N	10	2.57
(1,222)	1:A:165:GLU:C	1:A:166:VAL:N	1:A:166:VAL:CA	1:A:166:VAL:C	5	2.57
(1,224)	1:A:167:PRO:N	1:A:167:PRO:CA	1:A:167:PRO:C	1:A:168:THR:N	4	2.56
(1,14)	1:A:8:PHE:N	1:A:8:PHE:CA	1:A:8:PHE:C	1:A:9:THR:N	6	2.56
(1,216)	1:A:160:ASP:C	1:A:161:VAL:N	1:A:161:VAL:CA	1:A:161:VAL:C	11	2.55
(1,38)	1:A:29:GLU:N	1:A:29:GLU:CA	1:A:29:GLU:C	1:A:30:PHE:N	1	2.54
(1,251)	1:A:181:CYS:N	1:A:181:CYS:CA	1:A:181:CYS:C	1:A:182:LEU:N	9	2.54
(1,220)	1:A:164:THR:C	1:A:165:GLU:N	1:A:165:GLU:CA	1:A:165:GLU:C	8	2.54
(1,57)	1:A:67:GLY:C	1:A:68:ILE:N	1:A:68:ILE:CA	1:A:68:ILE:C	14	2.53
(1,52)	1:A:37:ARG:N	1:A:37:ARG:CA	1:A:37:ARG:C	1:A:38:LYS:N	5	2.53
(1,167)	1:A:128:LEU:N	1:A:128:LEU:CA	1:A:128:LEU:C	1:A:129:ALA:N	2	2.53
(1,264)	1:A:95:PHE:N	1:A:95:PHE:CA	1:A:95:PHE:CB	1:A:95:PHE:CG	16	2.52
(1,25)	1:A:19:PRO:C	1:A:20:MET:N	1:A:20:MET:CA	1:A:20:MET:C	6	2.52
(1,21)	1:A:11:ASP:C	1:A:12:GLU:N	1:A:12:GLU:CA	1:A:12:GLU:C	16	2.52
(1,172)	1:A:131:ASP:C	1:A:132:ARG:N	1:A:132:ARG:CA	1:A:132:ARG:C	15	2.52
(1,57)	1:A:67:GLY:C	1:A:68:ILE:N	1:A:68:ILE:CA	1:A:68:ILE:C	18	2.5
(1,275)	1:A:91:TYR:CA	1:A:91:TYR:CB	1:A:91:TYR:CG	1:A:91:TYR:CD1	20	2.49
(1,249)	1:A:180:LYS:N	1:A:180:LYS:CA	1:A:180:LYS:C	1:A:181:CYS:N	2	2.49
(1,245)	1:A:178:GLU:N	1:A:178:GLU:CA	1:A:178:GLU:C	1:A:179:GLU:N	2	2.49
(1,293)	1:A:30:PHE:CA	1:A:30:PHE:CB	1:A:30:PHE:CG	1:A:30:PHE:CD1	16	2.46
(1,223)	1:A:166:VAL:N	1:A:166:VAL:CA	1:A:166:VAL:C	1:A:167:PRO:N	3	2.46
(1,5)	1:A:3:ILE:C	1:A:4:TYR:N	1:A:4:TYR:CA	1:A:4:TYR:C	18	2.45
(1,54)	1:A:38:LYS:N	1:A:38:LYS:CA	1:A:38:LYS:C	1:A:39:GLU:N	8	2.43
(1,251)	1:A:181:CYS:N	1:A:181:CYS:CA	1:A:181:CYS:C	1:A:182:LEU:N	6	2.43
(1,167)	1:A:128:LEU:N	1:A:128:LEU:CA	1:A:128:LEU:C	1:A:129:ALA:N	20	2.42
(1,107) $(1,43)$	1:A:32:GLY:C	1:A:33:LYS:N	1:A:33:LYS:CA	1:A:33:LYS:C	8	2.41
(1,13) $(1,243)$	1:A:177:ILE:N	1:A:177:ILE:CA	1:A:177:ILE:C	1:A:178:GLU:N	16	2.4
(1,36)	1:A:28:TYR:N	1:A:28:TYR:CA	1:A:28:TYR:C	1:A:29:GLU:N	3	2.39
(1,00)	1.11.20.1 110.11	1.71.20.1116.071	1.11.20.1116.0	1.11.20.010.11	1	2.33



Key	$rac{ed\ from\ previous\ pag}{\mathbf{Atom-1}}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,183)	1:A:137:ALA:N	1:A:137:ALA:CA	1:A:137:ALA:C	1:A:138:PHE:N	9	2.39
(1,84)	1:A:83:GLU:N	1:A:83:GLU:CA	1:A:83:GLU:C	1:A:84:ASP:N	14	2.38
(1,36)	1:A:28:TYR:N	1:A:28:TYR:CA	1:A:28:TYR:C	1:A:29:GLU:N	16	2.38
(1,202)	1:A:152:GLN:C	1:A:153:VAL:N	1:A:153:VAL:CA	1:A:153:VAL:C	15	2.37
(1,19)	1:A:10:ASP:C	1:A:11:ASP:N	1:A:11:ASP:CA	1:A:11:ASP:C	8	2.37
(1,19)	1:A:10:ASP:C	1:A:11:ASP:N	1:A:11:ASP:CA	1:A:11:ASP:C	17	2.35
(1,3)	1:A:2:LEU:C	1:A:3:ILE:N	1:A:3:ILE:CA	1:A:3:ILE:C	13	2.31
(1,243)	1:A:177:ILE:N	1:A:177:ILE:CA	1:A:177:ILE:C	1:A:178:GLU:N	8	2.3
(1,19)	1:A:10:ASP:C	1:A:11:ASP:N	1:A:11:ASP:CA	1:A:11:ASP:C	19	2.3
(1,6)	1:A:4:TYR:N	1:A:4:TYR:CA	1:A:4:TYR:C	1:A:5:LYS:N	19	2.29
(1,253)	1:A:26:LEU:N	1:A:26:LEU:CA	1:A:26:LEU:C	1:A:27:VAL:N	13	2.29
(1,9)	1:A:5:LYS:C	1:A:6:ASP:N	1:A:6:ASP:CA	1:A:6:ASP:C	16	2.27
(1,83)	1:A:82:TYR:C	1:A:83:GLU:N	1:A:83:GLU:CA	1:A:83:GLU:C	14	2.27
(1,53)	1:A:37:ARG:C	1:A:38:LYS:N	1:A:38:LYS:CA	1:A:38:LYS:C	7	2.27
(1,223)	1:A:166:VAL:N	1:A:166:VAL:CA	1:A:166:VAL:C	1:A:167:PRO:N	6	2.27
(1,50)	1:A:36:VAL:N	1:A:36:VAL:CA	1:A:36:VAL:C	1:A:37:ARG:N	3	2.26
(1,14)	1:A:8:PHE:N	1:A:8:PHE:CA	1:A:8:PHE:C	1:A:9:THR:N	5	2.26
(1,129)	1:A:105:LYS:C	1:A:106:ASN:N	1:A:106:ASN:CA	1:A:106:ASN:C	15	2.26
(1,52)	1:A:37:ARG:N	1:A:37:ARG:CA	1:A:37:ARG:C	1:A:38:LYS:N	1	2.25
(1,286)	1:A:88:PHE:N	1:A:88:PHE:CA	1:A:88:PHE:CB	1:A:88:PHE:CG	7	2.24
(1,2)	1:A:2:LEU:N	1:A:2:LEU:CA	1:A:2:LEU:C	1:A:3:ILE:N	14	2.23
(1,86)	1:A:84:ASP:N	1:A:84:ASP:CA	1:A:84:ASP:C	1:A:85:ALA:N	8	2.21
(1,86)	1:A:84:ASP:N	1:A:84:ASP:CA	1:A:84:ASP:C	1:A:85:ALA:N	14	2.21
(1,55)	1:A:65:GLU:C	1:A:66:ARG:N	1:A:66:ARG:CA	1:A:66:ARG:C	13	2.2
(1,25)	1:A:19:PRO:C	1:A:20:MET:N	1:A:20:MET:CA	1:A:20:MET:C	5	2.18
(1,207)	1:A:155:ILE:N	1:A:155:ILE:CA	1:A:155:ILE:C	1:A:156:ILE:N	11	2.17
(1,36)	1:A:28:TYR:N	1:A:28:TYR:CA	1:A:28:TYR:C	1:A:29:GLU:N	15	2.16
(1,22)	1:A:12:GLU:N	1:A:12:GLU:CA	1:A:12:GLU:C	1:A:13:LEU:N	8	2.16
(1,207)	1:A:155:ILE:N	1:A:155:ILE:CA	1:A:155:ILE:C	1:A:156:ILE:N	12	2.16
(1,19)	1:A:10:ASP:C	1:A:11:ASP:N	1:A:11:ASP:CA	1:A:11:ASP:C	5	2.16
(1,253)	1:A:26:LEU:N	1:A:26:LEU:CA	1:A:26:LEU:C	1:A:27:VAL:N	6	2.15
(1,200)	1:A:151:GLY:C	1:A:152:GLN:N	1:A:152:GLN:CA	1:A:152:GLN:C	11	2.13
(1,167)	1:A:128:LEU:N	1:A:128:LEU:CA	1:A:128:LEU:C	1:A:129:ALA:N	13	2.13
(1,227)	1:A:168:THR:C	1:A:169:LEU:N	1:A:169:LEU:CA	1:A:169:LEU:C	9	2.12
(1,2)	1:A:2:LEU:N	1:A:2:LEU:CA	1:A:2:LEU:C	1:A:3:ILE:N	19	2.12
(1,52)	1:A:37:ARG:N	1:A:37:ARG:CA	1:A:37:ARG:C	1:A:38:LYS:N	12	2.11
(1,25)	1:A:19:PRO:C	1:A:20:MET:N	1:A:20:MET:CA	1:A:20:MET:C	2	2.1
(1,54)	1:A:38:LYS:N	1:A:38:LYS:CA	1:A:38:LYS:C	1:A:39:GLU:N	3	2.08
(1,243)	1:A:177:ILE:N	1:A:177:ILE:CA	1:A:177:ILE:C	1:A:178:GLU:N	9	2.08
(1,21)	1:A:11:ASP:C	1:A:12:GLU:N	1:A:12:GLU:CA	1:A:12:GLU:C	19	2.08
(1,53)	1:A:37:ARG:C	1:A:38:LYS:N	1:A:38:LYS:CA	1:A:38:LYS:C	10	2.06
(1,171)	1:A:131:ASP:N	1:A:131:ASP:CA	1:A:131:ASP:C	1:A:132:ARG:N	1	2.06
(1,8)	1:A:5:LYS:N	1:A:5:LYS:CA	1:A:5:LYS:C	1:A:6:ASP:N	20	2.05
(1,279)	1:A:82:TYR:CA	1:A:82:TYR:CB	1:A:82:TYR:CG	1:A:82:TYR:CD1	15	2.05
(1,2)	1:A:2:LEU:N	1:A:2:LEU:CA	1:A:2:LEU:C	1:A:3:ILE:N	8	2.04
(1,279)	1:A:82:TYR:CA	1:A:82:TYR:CB	1:A:82:TYR:CG	1:A:82:TYR:CD1	18	2.03
(1,243)	1:A:177:ILE:N	1:A:177:ILE:CA	1:A:177:ILE:C	1:A:178:GLU:N	7	2.03
(1,167)	1:A:128:LEU:N	1:A:128:LEU:CA	1:A:128:LEU:C	1:A:129:ALA:N	1	2.01
(1,220)	1:A:164:THR:C	1:A:165:GLU:N	1:A:165:GLU:CA	1:A:165:GLU:C	4	2.0
(1,36)	1:A:28:TYR:N	1:A:28:TYR:CA	1:A:28:TYR:C	1:A:29:GLU:N	17	1.98
(1,19)	1:A:10:ASP:C	1:A:11:ASP:N	1:A:11:ASP:CA	1:A:11:ASP:C	13	1.98
(, -)		<u> </u>		· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·		ed on nert nage



1,35 1-A.27-VALC	Key	$rac{ed\ from\ previous\ pag}{\mathbf{Atom-1}}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
1,282						7	, ,
(1,72)	(' /	1:A:82:TYR:N	1:A:82:TYR:CA	1:A:82:TYR:C	1:A:83:GLU:N	6	1.96
(1.38)	· · /	1:A:75:LYS:N	1:A:75:LYS:CA	1:A:75:LYS:C	1:A:76:LEU:N	5	1.96
1,199	· · /	1:A:29:GLU:N	1:A:29:GLU:CA	1:A:29:GLU:C	1:A:30:PHE:N	17	1.96
	(1,2)	1:A:2:LEU:N	1:A:2:LEU:CA	1:A:2:LEU:C	1:A:3:ILE:N	3	1.96
(1,167) 1:A-128-LEUUN	· · /	1:A:146:GLU:N	1:A:146:GLU:CA	1:A:146:GLU:C	1:A:147:GLY:N	20	1.96
(1,249) I-A:177:ILEN	· · /	1:A:128:LEU:N	1:A:128:LEU:CA	1:A:128:LEU:C	1:A:129:ALA:N	11	1.96
(1,213 1.A:168:TYR:N	(1,243)	1:A:177:ILE:N	1:A:177:ILE:CA	1:A:177:ILE:C	1:A:178:GLU:N	6	1.95
(1,213) 1.A.158.TYR:N 1.A.158.TYR:CA 1.A.158.TYR:CA 1.A.159.ARG:N 16 1.94 (1,57) 1.A.67:GLY:C 1.A.68:ILE:N 1.A.68:ILE:CA 1.A.68:ILE:CA 1.A.159.MET:C 16 1.92 (1,242) 1.A.176:ILE:C 1.A.179.MET:N 1.A.179.MET:CA 1.A.179.MET:CA 1.A.179.MET:CA (1,242) 1.A.176:ILE:C 1.A.177:ILE:N 1.A.177:ILE:CA 1.A.177:ILE:CA (1,54) 1.A.181.CYS:N 1.A.381.XYS:CA 1.A.181.CYS:C 1.A.393.GLU:N 20 1.91 (1,251) 1.A.181.CYS:N 1.A.381.XYS:CA 1.A.181.CYS:C 1.A.393.GLU:N 1 1.91 (1,251) 1.A.181.LU:C 1.A.143.SER:N 1.A.143.SER:CA 1.A.183.GLU:N 1 1.91 (1,23) 1.A.131.LU:C 1.A.383.GLU:N 1.A.833.GLU:CA 1.A.833.GLU:C 5 1.9 (1,54) 1.A.364.VAL:C 1.A.383.GLU:CA 1.A.833.GLU:CA 1.A.833.GLU:C 5 1.9 (1,54) 1.A.179.GLU:N 1.A.179.GLU:CA 1.A.145.CLYS:N 6 1.9 (1,253) 1.A.131.LU:C 1.A.145.SER:N 1.A.145.SER:CA 1.A.145.SER:CA 1.A.145.SER:CA 1.A.135.SER:C 1 1.89 (1,23) 1.A.131.LU:C 1.A.146.GLU:N 1.A.146.GLU:CA 1.A.136.LEU:C 1.A.136.SER:C 1 1.89 (1,180) 1.A.135.ASN:C 1.A.136.GLU:N 1.A.146.GLU:CA 1.A.136.SER:C 1 1.89 (1,180) 1.A.145.ALA:C 1.A.146.GLU:N 1.A.146.GLU:CA 1.A.136.SER:C 1 1.89 (1,180) 1.A.145.ALA:C 1.A.245.TYR:CA 1.A.295.TYR:CA 1.A.295.TYR:C 1.A.295.TYR:CA 1.A.166.GLU:C 2 1.84 (1,227) 1.A.166.THR:C 1.A.166.GLU:N 1.A.166.GLU:CA 1.A.166.GLU:C 7 1.84 (1,227) 1.A.166.THR:C 1.A.166.GLU:N 1.A.166.GLU:CA 1.A.166.GLU:C 2 1.84 (1,231) 1.A.295.TYR:C 1.A.285.TYR:C 1.A.285.TYR:C 1.A.285.TYR:C 1.A.285.TYR:C 1.A.285.TYR:C 1.A.285.TYR:C	· · /	1:A:105:LYS:C	1:A:106:ASN:N	1:A:106:ASN:CA	1:A:106:ASN:C	17	1.95
(1,57)	· · /	1:A:158:TYR:N	1:A:158:TYR:CA	1:A:158:TYR:C	1:A:159:ARG:N	16	1.94
(1,242)	· · /	1:A:67:GLY:C	1:A:68:ILE:N	1:A:68:ILE:CA	1:A:68:ILE:C	12	1.93
(1,242) 1:A:176:ILE:C	(' /	1:A:78:GLU:C	1:A:79:MET:N	1:A:79:MET:CA	1:A:79:MET:C	16	
(1,251) 1:A:181:CYS:N	· · /	1:A:176:ILE:C	1:A:177:ILE:N	1:A:177:ILE:CA	1:A:177:ILE:C	3	1.92
(1,251) 1:A:181:CYS:N	(' /	1:A:38:LYS:N	1:A:38:LYS:CA	1:A:38:LYS:C	1:A:39:GLU:N	20	1.91
(1,23)	(' /	1:A:181:CYS:N			1:A:182:LEU:N	1	
(1,83) 1:A:82:TYR:C 1:A:83:GLU:N 1:A:83:GLU:CA 1:A:83:GLU:C 5 1.9	(, ,	1:A:13:LEU:C	1:A:14:SER:N	1:A:14:SER:CA	1:A:14:SER:C	12	
(1,51)	(' /						
(1,247) 1:A:179:GLU:N 1:A:179:GLU:CA 1:A:179:GLU:C 1:A:180:LYS:N 6 1.9 (1,233) 1:A:26:LEU:N 1:A:26:LEU:CA 1:A:26:LEU:C 1:A:27:VAL:N 11 1.89 (1,23) 1:A:13:LEU:C 1:A:14:SER:N 1:A:14:SER:CA 1:A:14:SER:C 1 1.89 (1,180) 1:A:135:ASSN:C 1:A:136:LEU:N 1:A:136:LEU:CA 1:A:146:GLU:C 12 1.87 (1,180) 1:A:145:ALA:C 1:A:146:GLU:N 1:A:146:GLU:CA 1:A:146:GLU:C 20 1.86 (1,16) 1:A:9:THR:C 1:A:9:THR:C 1:A:167:VAL:C 1:A:28:TYR:N 1:A:28:TYR:C 11 1.84 (1,27) 1:A:168:THR:C 1:A:169:LEU:N 1:A:169:LEU:CA 1:A:169:LEU:C 7 1.84 (1,220) 1:A:164:THR:C 1:A:165:GLU:N 1:A:165:GLU:CA 1:A:152:CLN:C 1 1.84 (1,221) 1:A:162:CLN:N 1:A:163:GLU:N 1:A:163:GLU:CA 1:A:183:AUL:N 14 1.84 (1,290) 1:A:28:TYR:C 1:A:83:GLU:N 1:A:382:GLU:CA <t< td=""><td> /</td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td></t<>	/						
(1,253) 1:A:26:LEU:N 1:A:26:LEU:CA 1:A:26:LEU:C 1:A:27:VAL:N 11 1.89 (1,23) 1:A:13:LEU:C 1:A:14:SER:N 1:A:14:SER:CA 1:A:14:SER:C 1 1.89 (1,180) 1:A:135:ASN:C 1:A:145:EU:N 1:A:146:GLU:CA 1:A:136:LEU:C 12 1.87 (1,180) 1:A:145:ALA:C 1:A:146:GLU:N 1:A:146:GLU:CA 1:A:136:LEU:C 20 1.86 (1,16) 1:A:9:THR:N 1:A:19:THR:CA 1:A:19:THR:C 1:A:10:ASP:N 10 1.85 (1,35) 1:A:27:VAL:C 1:A:28:TYR:N 1:A:28:TYR:CA 1:A:28:TYR:C 11 1.84 (1,227) 1:A:168:THR:C 1:A:169:LEU:N 1:A:169:LEU:CA 1:A:169:LEU:C 7 1.84 (1,220) 1:A:152:GLN:N 1:A:152:GLN:CA 1:A:169:LEU:CA 1:A:169:LEU:C 7 1.84 (1,201) 1:A:152:GLN:N 1:A:152:GLN:CA 1:A:152:GLN:C 1:A:135:GLU:CA 1:A:148:GU:CA 1:A:152:GLU:CA 1:A:148:GU:CA 1:A:148:GU:CA 1:A:148:GU:CA 1:A:148:GU:CA 1:A:148:GU:CA	· · /						
(1,23) 1:A:13:LEU:C 1:A:14:SER:N 1:A:14:SER:CA 1:A:14:SER:C 1 1.89 (1,180) 1:A:135:ASN:C 1:A:136:LEU:N 1:A:136:LEU:CA 1:A:136:LEU:C 12 1.87 (1,198) 1:A:145:ALA:C 1:A:146:GLU:N 1:A:146:GLU:CA 1:A:146:GLU:C 20 1.86 (1,198) 1:A:145:ALA:C 1:A:146:GLU:N 1:A:146:GLU:CA 1:A:146:GLU:C 20 1.86 (1,101) 1:A:29:THR:N 1:A:29:THR:C 1:A:146:GLU:CA 1:A:146:GLU:CA 1:A:148:TYR:C 11 1.84 (1,227) 1:A:168:THR:C 1:A:169:LEU:N 1:A:169:LEU:CA 1:A:169:LEU:CA 1:A:169:LEU:CA 1:A:146:GLU:C 7 1.84 (1,220) 1:A:168:THR:C 1:A:169:LEU:CA 1:A:152:GLN:C 1:A:153:VAL:N 14 1.84 (1,201) 1:A:152:GLN:N 1:A:152:GLN:CA 1:A:153:VAL:N 14 1.84 (1,279) 1:A:28:TYR:CA 1:A:28:GU:CA 1:A:33:GLU:CA 1:A:33:GU:CA 1:A:128:CU:CA 1:A:33:GU:CA 1:A:33:GU:CA 1:A:13:CA:CA 1:A:28:TYR:	· · /						
(1,180) 1:A:145:ALA:C 1:A:136:LEU:N 1:A:136:LEU:CA 1:A:136:LEU:C 12 1.87 (1,198) 1:A:146:ALA:C 1:A:146:GLU:N 1:A:146:GLU:C 20 1.86 (1,16) 1:A:9:THR:N 1:A:9:THR:CA 1:A:146:GLU:CA 1:A:146:GLU:C 20 1.86 (1,16) 1:A:9:THR:N 1:A:9:THR:CA 1:A:9:THR:C 1:A:10:ASP:N 10 1.85 (1,35) 1:A:27:VALC 1:A:28:TYR:N 1:A:28:TYR:C 1:A:16:STYR:C 11 1.84 (1,227) 1:A:168:THR:C 1:A:169:LEU:N 1:A:169:LEU:CA 1:A:28:TYR:C 11 1.84 (1,220) 1:A:164:THR:C 1:A:165:GLU:N 1:A:165:GLU:CA 1:A:165:GLU:C 2 1.84 (1,201) 1:A:152:GLN:N 1:A:152:GLN:N 1:A:152:GLN:C 1:A:153:VAL:N 14 1.84 (1,83) 1:A:82:TYR:C 1:A:83:GLU:N 1:A:83:GLU:CA 1:A:153:VAL:N 14 1.84 (1,83) 1:A:82:TYR:CA 1:A:83:GLU:N 1:A:83:GLU:CA 1:A:83:GLU:C 11 1.82 (1,279) 1:A:82:TYR:CA 1:A:82:TYR:CB 1:A:82:TYR:CG 1:A:82:TYR:CD 1 16 1.82 (1,279) 1:A:84:ASP:N 1:A:84:ASP:CA 1:A:84:ASP:C 1:A:82:TYR:CD 1 16 1.82 (1,248) 1:A:179:GLU:C 1:A:186:LYS:N 1:A:186:LYS:N 1:A:186:LEU:C 1:A:186:LEU:C 1 1.88 (1,19) 1:A:135:ASN:C 1:A:136:LEU:N 1:A:136:LEU:C 1:A:136:LEU:C 1 1.88 (1,19) 1:A:128:LEU:N 1:A:128:LEU:CA 1:A:128:LEU:C 1:A:128:LEU:C 1 1.A:128:LEU:C 1 1.A:136:LEU:C 1 1	,						
(1,198) 1:A:145:ALA:C 1:A:146:GLU:N 1:A:146:GLU:CA 1:A:146:GLU:C 20 1.86 (1,16) 1:A:9:THR:N 1:A:9:THR:CA 1:A:9:THR:C 1:A:10:ASP:N 10 1.85 (1,35) 1:A:27:VAL:C 1:A:28:TYR:N 1:A:28:TYR:CA 1:A:28:TYR:C 11 1.84 (1,227) 1:A:168:THR:C 1:A:169:LEU:N 1:A:169:LEU:CA 1:A:169:LEU:C 7 1.84 (1,220) 1:A:164:THR:C 1:A:165:GLU:N 1:A:169:LEU:CA 1:A:169:LEU:C 7 1.84 (1,201) 1:A:152:GLN:N 1:A:165:GLU:N 1:A:165:GLU:CA 1:A:165:GLU:C 2 1.84 (1,201) 1:A:152:GLN:N 1:A:152:GLN:CA 1:A:152:GLN:C 1:A:153:VAL:N 14 1.84 (1,83) 1:A:82:TYR:C 1:A:83:GLU:N 1:A:83:GLU:CA 1:A:83:GLU:C 11 1.82 (1,279) 1:A:82:TYR:CA 1:A:82:TYR:CB 1:A:82:TYR:CB 1:A:82:TYR:CD 1.6 1.82 (1,286) 1:A:84:ASP:N 1:A:84:ASP:CA 1:A:84:ASP:C 1:A:85:ALA:N 10 1.81 (1,248) 1:A:179:GLU:C 1:A:180:LYS:N 1:A:180:LYS:CA 1:A:180:LYS:C 1 1.88 (1,180) 1:A:135:ASN:C 1:A:136:LEU:N 1:A:136:LEU:CA 1:A:136:LEU:C 18 1.8 (1,191) 1:A:10:ASP:C 1:A:136:LEU:N 1:A:11:ASP:CA 1:A:136:LEU:C 18 1.8 (1,191) 1:A:10:ASP:C 1:A:11:ASP:N 1:A:11:ASP:CA 1:A:11:ASP:CA 1:A:11:ASP:C 16 1.79 (1,167) 1:A:128:LEU:N 1:A:128:LEU:CA 1:A:128:LEU:C 1:A:129:ALA:N 17 1.78 (1,86) 1:A:84:ASP:N 1:A:84:ASP:CA 1:A:180:LYS:C 1.A:129:ALA:N 17 1.78 (1,86) 1:A:84:ASP:N 1:A:84:ASP:CA 1:A:180:LYS:C 1:A:180:LYS:N 20 1.77 (1,83) 1:A:82:TYR:C 1:A:83:GLU:N 1:A:180:LYS:C 1:A:180:LYS:N 20 1.77 (1,249) 1:A:180:LYS:N 1:A:180:LYS:N 1:A:180:LYS:N 1.A:180:LYS:N · · /							
(1,16) 1:A:9:THR:N 1:A:9:THR:CA 1:A:9:THR:C 1:A:10:ASP:N 10 1.85 (1,35) 1:A:27:VAL:C 1:A:28:TYR:N 1:A:28:TYR:CA 1:A:28:TYR:C 11 1.84 (1,227) 1:A:168:THR:C 1:A:169:LEU:N 1:A:169:LEU:CA 1:A:269:LEU:C 7 1.84 (1,220) 1:A:164:THR:C 1:A:165:GLU:N 1:A:165:GLU:CA 1:A:165:GLU:C 2 1.84 (1,201) 1:A:152:GLN:N 1:A:152:GLN:CA 1:A:152:GLN:CA 1:A:153:VAL:N 14 1.84 (1,201) 1:A:82:TYR:CB 1:A:83:GLU:CA 1:A:153:VAL:N 14 1.84 (1,83) 1:A:82:TYR:CA 1:A:83:GLU:CA 1:A:187:CG 1:A:82:TYR:CD1 16 1.82 (1,279) 1:A:84:ASP:N 1:A:84:ASP:CA 1:A:82:TYR:CG 1:A:85:ALA:N 10 1.81 (1,248) 1:A:19:GLU:C 1:A:180:LYS:CA 1:A:180:LYS:C 1 1.8 (1,180) 1:A:135:ASN:C 1:A:136:LEU:N 1:A:136:LEU:CA 1:A:141:ASP:C 16 1.79	· · /						
(1,35) 1:A:27:VAL:C 1:A:28:TYR:N 1:A:28:TYR:CA 1:A:28:TYR:C 11 1.84 (1,227) 1:A:168:THR:C 1:A:169:LEU:N 1:A:169:LEU:CA 1:A:169:LEU:C 7 1.84 (1,220) 1:A:164:THR:C 1:A:165:GLU:N 1:A:165:GLU:CA 1:A:165:GLU:C 2 1.84 (1,201) 1:A:152:GLN:N 1:A:152:GLN:CA 1:A:152:GLN:C 1:A:153:VAL:N 14 1.84 (1,201) 1:A:152:GLN:N 1:A:83:GLU:CA 1:A:83:GLU:C 11 1.82 (1,279) 1:A:82:TYR:CA 1:A:83:GLU:N 1:A:83:GLU:CA 1:A:83:GLU:C 11 1.82 (1,279) 1:A:84:ASP:N 1:A:84:ASP:CB 1:A:82:TYR:CB 1:A:82:TYR:CG 1:A:85:ALA:N 10 1.81 (1,248) 1:A:179:GLU:C 1:A:180:LYS:N 1:A:180:LYS:CA 1:A:180:LYS:C 1 1.8 (1,180) 1:A:13:ASP:C 1:A:11:ASP:CA 1:A:11:ASP:CA 1:A:11:ASP:C 16 1.79 (1,167) 1:A:14:ASP:N 1:A:14:18:LEU:CA 1:A:18:14:ASP:CA 1:A:14:ASP:ALA:N	· · /						
(1,227) 1:A:168:THR:C 1:A:169:LEU:N 1:A:169:LEU:CA 1:A:169:LEU:C 7 1.84 (1,220) 1:A:164:THR:C 1:A:165:GLU:N 1:A:165:GLU:CA 1:A:165:GLU:C 2 1.84 (1,201) 1:A:152:GLN:N 1:A:152:GLN:CA 1:A:152:GLN:C 1:A:153:VAL:N 14 1.84 (1,201) 1:A:152:GLN:N 1:A:152:GLN:CA 1:A:153:VAL:N 14 1.84 (1,33) 1:A:24:S2:TYR:C 1:A:83:GLU:N 1:A:83:GLU:CA 1:A:83:GLU:CA 1:A:82:TYR:CDI 16 1.82 (1,279) 1:A:24:ASP:N 1:A:28:LYR:CB 1:A:82:TYR:CDI 16 1.82 (1,280) 1:A:34:ASP:N 1:A:180:LYS:N 1:A:180:LYS:CA 1:A:180:LYS:C 1 1.8 (1,180) 1:A:13:5:ASN:C 1:A:136:LEU:N 1:A:136:LEU:CA 1:A:136:LEU:C 18 1.8 (1,180) 1:A:13:6:ASP:C 1:A:11:ASP:CA 1:A:11:ASP:C 16 1.79 (1,167) 1:A:14:ASP:N 1:A:13:GLU:CA 1:A:13:GLU:C 1:A:13:GLU:C 1.77 (1,83)	(' /						
(1,220) 1:A:164:THR:C 1:A:165:GLU:N 1:A:165:GLU:CA 1:A:165:GLU:C 2 1.84 (1,201) 1:A:152:GLN:N 1:A:152:GLN:CA 1:A:152:GLN:C 1:A:153:VAL:N 14 1.84 (1,201) 1:A:82:TYR:C 1:A:83:GLU:N 1:A:83:GLU:CA 1:A:83:GLU:C 11 1.82 (1,279) 1:A:82:TYR:CA 1:A:82:TYR:CB 1:A:82:TYR:CG 1:A:83:GLU:CA 1:A:83:GLU:CA 11 1.82 (1,36) 1:A:84:ASP:N 1:A:88:ASP:CA 1:A:88:ASP:CB 1:A:85:ALA:N 10 1.81 (1,248) 1:A:179:GLU:C 1:A:180:LYS:N 1:A:180:LYS:CA 1:A:180:LYS:C 1 1.8 (1,180) 1:A:135:ASN:C 1:A:136:LEU:N 1:A:136:LEU:CA 1:A:136:LEU:C 18 1.8 (1,19) 1:A:10:ASP:C 1:A:11:ASP:N 1:A:11:ASP:CA 1:A:11:ASP:C 16 1.79 (1,167) 1:A:180:LYS:N 1:A:180:LYS:CA 1:A:180:LYS:AA:AN 7 1.77 (1,83) 1:A:484:ASP:N 1:A:484:ASP:CA 1:A:480:LSY:C 1:A:180:LYS:N	· · /						
(1,201) 1:A:152:GLN:N 1:A:152:GLN:CA 1:A:152:GLN:C 1:A:153:VAL:N 14 1.84 (1,83) 1:A:82:TYR:C 1:A:83:GLU:N 1:A:83:GLU:CA 1:A:83:GLU:C 11 1.82 (1,279) 1:A:82:TYR:CA 1:A:82:TYR:CB 1:A:82:TYR:CG 1:A:83:GLU:C 11 1.82 (1,279) 1:A:84:ASP:N 1:A:84:ASP:CA 1:A:84:ASP:C 1:A:85:ALA:N 10 1.81 (1,248) 1:A:179:GLU:C 1:A:180:LYS:N 1:A:180:LYS:CA 1:A:180:LYS:C 1 1.8 (1,180) 1:A:10:ASP:C 1:A:136:LEU:N 1:A:36:LEU:CA 1:A:136:LEU:C 18 1.8 (1,180) 1:A:10:ASP:C 1:A:11:ASP:N 1:A:11:ASP:CA 1:A:136:LEU:C 18 1.8 (1,167) 1:A:128:LEU:N 1:A:128:LEU:CA 1:A:128:LEU:C 1:A:135:AA:N 7 1.77 (1,86) 1:A:84:ASP:N 1:A:83:GLU:N 1:A:83:GLU:CA 1:A:84:ASP:C 1:A:85:ALA:N 7 1.77 (1,249) 1:A:180:LYS:N 1:A:180:LYS:CA 1:A:180:LYS:C 1:A	(' /						
(1,83) 1:A:82:TYR:C 1:A:83:GLU:N 1:A:83:GLU:CA 1:A:83:GLU:C 11 1.82 (1,279) 1:A:82:TYR:CA 1:A:82:TYR:CB 1:A:82:TYR:CG 1:A:82:TYR:CD1 16 1.82 (1,86) 1:A:84:ASP:N 1:A:84:ASP:CA 1:A:84:ASP:C 1:A:85:ALA:N 10 1.81 (1,248) 1:A:179:GLU:C 1:A:180:LYS:N 1:A:180:LYS:CA 1:A:180:LYS:C 1 1.8 (1,180) 1:A:135:ASN:C 1:A:136:LEU:N 1:A:136:LEU:CA 1:A:136:LEU:C 18 1.8 (1,190) 1:A:10:ASP:C 1:A:11:ASP:N 1:A:11:ASP:C 16 1.79 (1,167) 1:A:128:LEU:N 1:A:128:LEU:CA 1:A:11:ASP:C 16 1.79 (1,86) 1:A:84:ASP:N 1:A:84:ASP:CA 1:A:84:ASP:C 1:A:85:ALA:N 7 1.77 (1,83) 1:A:82:TYR:C 1:A:83:GLU:N 1:A:83:GLU:CA 1:A:180:LYS:C 1:A:181:CYS:N 20 1.77 (1,249) 1:A:180:LYS:N 1:A:180:LYS:CA 1:A:180:LYS:C 1:A:181:CYS:N 20 1.77	· · /						
(1,86) 1:A:84:ASP:N 1:A:84:ASP:CA 1:A:84:ASP:C 1:A:85:ALA:N 10 1.81 (1,248) 1:A:179:GLU:C 1:A:180:LYS:N 1:A:180:LYS:CA 1:A:180:LYS:C 1 1.8 (1,180) 1:A:135:ASN:C 1:A:136:LEU:N 1:A:136:LEU:CA 1:A:136:LEU:C 18 1.8 (1,19) 1:A:10:ASP:C 1:A:11:ASP:N 1:A:11:ASP:CA 1:A:11:ASP:C 16 1.79 (1,67) 1:A:128:LEU:N 1:A:128:LEU:CA 1:A:128:LEU:C 1:A:129:ALA:N 17 1.78 (1,86) 1:A:84:ASP:N 1:A:84:ASP:CA 1:A:84:ASP:C 1:A:85:ALA:N 7 1.77 (1,83) 1:A:82:TYR:C 1:A:84:ASP:CA 1:A:84:ASP:C 1:A:85:ALA:N 7 1.77 (1,849) 1:A:180:LYS:N 1:A:180:LYS:CA 1:A:180:LYS:C 1:A:180:LYS:C 20 1.77 (1,86) 1:A:84:ASP:N 1:A:160:ASP:N 1:A:160:ASP:C 1:A:181:CYS:N 20 1.77 (1,86) 1:A:136:LEU:N 1:A:160:ASP:N 1:A:160:ASP:C 1:A:180:LYS:N 20 <td>(' /</td> <td>1:A:82:TYR:C</td> <td></td> <td></td> <td>1:A:83:GLU:C</td> <td>11</td> <td></td>	(' /	1:A:82:TYR:C			1:A:83:GLU:C	11	
(1,248) 1:A:179:GLU:C 1:A:180:LYS:N 1:A:180:LYS:CA 1:A:180:LYS:C 1 1.8 (1,180) 1:A:135:ASN:C 1:A:136:LEU:N 1:A:136:LEU:CA 1:A:136:LEU:C 18 1.8 (1,19) 1:A:10:ASP:C 1:A:11:ASP:N 1:A:11:ASP:CA 1:A:11:ASP:C 16 1.79 (1,167) 1:A:128:LEU:N 1:A:128:LEU:CA 1:A:128:LEU:C 1:A:129:ALA:N 17 1.78 (1,86) 1:A:84:ASP:N 1:A:84:ASP:CA 1:A:84:ASP:C 1:A:85:ALA:N 7 1.77 (1,83) 1:A:82:TYR:C 1:A:83:GLU:N 1:A:83:GLU:CA 1:A:8180:LYS:N 20 1.77 (1,249) 1:A:180:LYS:N 1:A:180:LYS:CA 1:A:180:LYS:C 1:A:181:CYS:N 20 1.77 (1,249) 1:A:180:LYS:N 1:A:180:LYS:CA 1:A:180:LYS:C 1:A:181:CYS:N 20 1.77 (1,249) 1:A:180:LYS:N 1:A:180:LYS:CA 1:A:180:LYS:C 1:A:181:CYS:N 20 1.77 (1,86) 1:A:180:LYS:N 1:A:180:LYS:CA 1:A:180:LYS:C 1:A:181:CYS:N	(1,279)	1:A:82:TYR:CA	1:A:82:TYR:CB	1:A:82:TYR:CG	1:A:82:TYR:CD1	16	1.82
(1,180) 1:A:135:ASN:C 1:A:136:LEU:N 1:A:136:LEU:CA 1:A:136:LEU:C 18 1.8 (1,19) 1:A:10:ASP:C 1:A:11:ASP:N 1:A:11:ASP:CA 1:A:11:ASP:C 16 1.79 (1,167) 1:A:128:LEU:N 1:A:128:LEU:CA 1:A:128:LEU:C 1:A:129:ALA:N 17 1.78 (1,86) 1:A:84:ASP:N 1:A:84:ASP:CA 1:A:84:ASP:C 1:A:85:ALA:N 7 1.77 (1,83) 1:A:82:TYR:C 1:A:83:GLU:N 1:A:83:GLU:CA 1:A:83:GLU:C 6 1.77 (1,249) 1:A:180:LYS:N 1:A:180:LYS:CA 1:A:180:LYS:C 1:A:181:CYS:N 20 1.77 (1,249) 1:A:180:LYS:N 1:A:180:LYS:C 1:A:181:CYS:N 20 1.77 (1,249) 1:A:180:LYS:N 1:A:180:LYS:C 1:A:181:CYS:N 20 1.77 (1,249) 1:A:180:LYS:N 1:A:180:LYS:C 1:A:181:CYS:N 20 1.77 (1,86) 1:A:44:ASP:N 1:A:180:LYS:CA 1:A:180:LYS:C 1:A:180:LYS:C 1:A:181:CYS:N 20 1.76 <t< td=""><td>(1,86)</td><td>1:A:84:ASP:N</td><td>1:A:84:ASP:CA</td><td>1:A:84:ASP:C</td><td>1:A:85:ALA:N</td><td>10</td><td>1.81</td></t<>	(1,86)	1:A:84:ASP:N	1:A:84:ASP:CA	1:A:84:ASP:C	1:A:85:ALA:N	10	1.81
(1,19) 1:A:10:ASP:C 1:A:11:ASP:N 1:A:11:ASP:CA 1:A:11:ASP:C 16 1.79 (1,167) 1:A:128:LEU:N 1:A:128:LEU:CA 1:A:128:LEU:C 1:A:129:ALA:N 17 1.78 (1,86) 1:A:84:ASP:N 1:A:84:ASP:CA 1:A:84:ASP:C 1:A:85:ALA:N 7 1.77 (1,83) 1:A:82:TYR:C 1:A:83:GLU:N 1:A:83:GLU:CA 1:A:83:GLU:C 6 1.77 (1,249) 1:A:180:LYS:N 1:A:180:LYS:CA 1:A:180:LYS:C 1:A:181:CYS:N 20 1.77 (1,249) 1:A:180:LYS:N 1:A:180:LYS:CA 1:A:180:LYS:C 1:A:181:CYS:N 20 1.77 (1,249) 1:A:180:LYS:N 1:A:180:LYS:CA 1:A:180:LYS:C 1:A:181:CYS:N 20 1.77 (1,86) 1:A:84:ASP:N 1:A:180:LYS:CA 1:A:484:ASP:C 1:A:85:ALA:N 5 1.76 (1,241) 1:A:159:ARG:C 1:A:160:ASP:N 1:A:160:ASP:C 1:A:85:ALA:N 5 1.76 (1,214) 1:A:136:LEU:N 1:A:179:MET:C 1:A:80:ASN:N 20 1.75	(1,248)	1:A:179:GLU:C	1:A:180:LYS:N	1:A:180:LYS:CA	1:A:180:LYS:C	1	1.8
(1,167) 1:A:128:LEU:N 1:A:128:LEU:CA 1:A:128:LEU:C 1:A:129:ALA:N 17 1.78 (1,86) 1:A:84:ASP:N 1:A:84:ASP:CA 1:A:84:ASP:C 1:A:85:ALA:N 7 1.77 (1,83) 1:A:82:TYR:C 1:A:83:GLU:N 1:A:83:GLU:CA 1:A:83:GLU:C 6 1.77 (1,249) 1:A:180:LYS:N 1:A:180:LYS:CA 1:A:180:LYS:C 1:A:181:CYS:N 20 1.77 (1,249) 1:A:180:LYS:N 1:A:180:LYS:C 1:A:181:CYS:N 20 1.77 (1,249) 1:A:180:LYS:N 1:A:180:LYS:C 1:A:181:CYS:N 20 1.77 (1,249) 1:A:180:LYS:N 1:A:180:LYS:C 1:A:181:CYS:N 20 1.77 (1,86) 1:A:84:ASP:N 1:A:160:ASP:C 1:A:180:LYS:C 1:A:181:CYS:N 20 1.76 (1,241) 1:A:159:ARG:C 1:A:160:ASP:CA 1:A:160:ASP:CA 1:A:160:ASP:CA 1:A:180:ASP:C 11 1.76 (1,78) 1:A:136:LEU:N 1:A:136:LEU:CA 1:A:136:LEU:CB 1:A:136:LEU:CG 3 1.75	(1,180)	1:A:135:ASN:C	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:C	18	1.8
(1,86) 1:A:84:ASP:N 1:A:84:ASP:CA 1:A:84:ASP:C 1:A:85:ALA:N 7 1.77 (1,83) 1:A:82:TYR:C 1:A:83:GLU:N 1:A:83:GLU:CA 1:A:83:GLU:C 6 1.77 (1,249) 1:A:180:LYS:N 1:A:180:LYS:CA 1:A:180:LYS:C 1:A:181:CYS:N 20 1.77 (1,86) 1:A:84:ASP:N 1:A:84:ASP:CA 1:A:84:ASP:C 1:A:85:ALA:N 5 1.76 (1,214) 1:A:159:ARG:C 1:A:160:ASP:N 1:A:160:ASP:CA 1:A:160:ASP:C 11 1.76 (1,78) 1:A:79:MET:N 1:A:79:MET:CA 1:A:160:ASP:CA 1:A:160:ASP:C 11 1.76 (1,78) 1:A:79:MET:N 1:A:79:MET:CA 1:A:160:ASP:CA 1:A:160:ASP:C 11 1.76 (1,78) 1:A:136:LEU:N 1:A:79:MET:CA 1:A:136:LEU:CB 1:A:136:LEU:CG 3 1.75 (1,266) 1:A:136:LEU:N 1:A:136:LEU:CA 1:A:136:LEU:CB 1:A:136:LEU:CG 3 1.75 (1,253) 1:A:26:LEU:N 1:A:26:LEU:CA 1:A:26:LEU:CA 1:A:330:LEU:CA <	(1,19)	1:A:10:ASP:C	1:A:11:ASP:N	1:A:11:ASP:CA	1:A:11:ASP:C	16	1.79
(1,86) 1:A:84:ASP:N 1:A:84:ASP:CA 1:A:84:ASP:C 1:A:85:ALA:N 7 1.77 (1,83) 1:A:82:TYR:C 1:A:83:GLU:N 1:A:83:GLU:CA 1:A:83:GLU:C 6 1.77 (1,249) 1:A:180:LYS:N 1:A:180:LYS:CA 1:A:180:LYS:C 1:A:181:CYS:N 20 1.77 (1,86) 1:A:84:ASP:N 1:A:84:ASP:CA 1:A:84:ASP:C 1:A:85:ALA:N 5 1.76 (1,214) 1:A:159:ARG:C 1:A:160:ASP:N 1:A:160:ASP:CA 1:A:160:ASP:C 11 1.76 (1,78) 1:A:79:MET:N 1:A:79:MET:CA 1:A:160:ASP:CA 1:A:160:ASP:C 11 1.76 (1,78) 1:A:79:MET:N 1:A:79:MET:CA 1:A:160:ASP:CA 1:A:160:ASP:C 11 1.76 (1,78) 1:A:136:LEU:N 1:A:79:MET:CA 1:A:136:LEU:CB 1:A:136:LEU:CG 3 1.75 (1,266) 1:A:136:LEU:N 1:A:136:LEU:CA 1:A:136:LEU:CB 1:A:136:LEU:CG 3 1.75 (1,253) 1:A:26:LEU:N 1:A:26:LEU:CA 1:A:26:LEU:CA 1:A:330:LEU:CA <	(1,167)	1:A:128:LEU:N	1:A:128:LEU:CA	1:A:128:LEU:C	1:A:129:ALA:N	17	1.78
(1,249) 1:A:180:LYS:N 1:A:180:LYS:CA 1:A:180:LYS:C 1:A:181:CYS:N 20 1.77 (1,86) 1:A:84:ASP:N 1:A:84:ASP:CA 1:A:84:ASP:C 1:A:85:ALA:N 5 1.76 (1,214) 1:A:159:ARG:C 1:A:160:ASP:N 1:A:160:ASP:CA 1:A:160:ASP:C 11 1.76 (1,78) 1:A:79:MET:N 1:A:79:MET:CA 1:A:79:MET:C 1:A:80:ASN:N 20 1.75 (1,266) 1:A:136:LEU:N 1:A:136:LEU:CA 1:A:136:LEU:CB 1:A:136:LEU:CG 3 1.75 (1,253) 1:A:26:LEU:N 1:A:26:LEU:CA 1:A:26:LEU:C 1:A:27:VAL:N 18 1.73 (1,83) 1:A:82:TYR:C 1:A:83:GLU:N 1:A:83:GLU:CA 1:A:83:GLU:C 2 1.72 (1,40) 1:A:30:PHE:N 1:A:30:PHE:CA 1:A:30:PHE:C 1:A:31:LYS:N 20 1.72 (1,180) 1:A:135:ASN:C 1:A:136:LEU:N 1:A:136:LEU:CA 1:A:179:GLU:N 5 1.71 (1,220) 1:A:164:THR:C 1:A:165:GLU:N 1:A:165:GLU:CA 1:A:146:GLU:N		1:A:84:ASP:N	1:A:84:ASP:CA	1:A:84:ASP:C	1:A:85:ALA:N	7	1.77
(1,86) 1:A:84:ASP:N 1:A:84:ASP:CA 1:A:84:ASP:C 1:A:85:ALA:N 5 1.76 (1,214) 1:A:159:ARG:C 1:A:160:ASP:N 1:A:160:ASP:CA 1:A:160:ASP:C 11 1.76 (1,78) 1:A:79:MET:N 1:A:79:MET:CA 1:A:79:MET:C 1:A:80:ASN:N 20 1.75 (1,266) 1:A:136:LEU:N 1:A:136:LEU:CA 1:A:136:LEU:CB 1:A:136:LEU:CG 3 1.75 (1,253) 1:A:26:LEU:N 1:A:26:LEU:CA 1:A:26:LEU:C 1:A:27:VAL:N 18 1.73 (1,83) 1:A:82:TYR:C 1:A:83:GLU:N 1:A:83:GLU:CA 1:A:83:GLU:C 2 1.72 (1,40) 1:A:30:PHE:N 1:A:30:PHE:CA 1:A:30:PHE:C 1:A:31:LYS:N 20 1.72 (1,180) 1:A:135:ASN:C 1:A:136:LEU:N 1:A:136:LEU:CA 1:A:179:GLU:N 5 1.71 (1,220) 1:A:164:THR:C 1:A:165:GLU:N 1:A:165:GLU:CA 1:A:145:ALA:N 1:A:145:ALA:CA 1:A:145:ALA:C 1:A:146:GLU:N 8 1.71 (1,253) 1:A:26:LEU:N 1:	(1,83)	1:A:82:TYR:C	1:A:83:GLU:N	1:A:83:GLU:CA	1:A:83:GLU:C	6	1.77
(1,214) 1:A:159:ARG:C 1:A:160:ASP:N 1:A:160:ASP:CA 1:A:160:ASP:C 11 1.76 (1,78) 1:A:79:MET:N 1:A:79:MET:CA 1:A:79:MET:C 1:A:80:ASN:N 20 1.75 (1,266) 1:A:136:LEU:N 1:A:136:LEU:CA 1:A:136:LEU:CB 1:A:136:LEU:CG 3 1.75 (1,253) 1:A:26:LEU:N 1:A:26:LEU:CA 1:A:26:LEU:C 1:A:27:VAL:N 18 1.73 (1,83) 1:A:82:TYR:C 1:A:83:GLU:N 1:A:83:GLU:CA 1:A:83:GLU:C 2 1.72 (1,40) 1:A:30:PHE:N 1:A:30:PHE:CA 1:A:30:PHE:C 1:A:31:LYS:N 20 1.72 (1,180) 1:A:135:ASN:C 1:A:136:LEU:N 1:A:136:LEU:CA 1:A:136:LEU:C 15 1.72 (1,245) 1:A:178:GLU:N 1:A:178:GLU:C 1:A:179:GLU:N 5 1.71 (1,220) 1:A:145:ALA:N 1:A:145:ALA:CA 1:A:145:ALA:C 1:A:146:GLU:N 8 1.71 (1,253) 1:A:26:LEU:N 1:A:26:LEU:CA 1:A:27:VAL:N 15 1.69	(1,249)	1:A:180:LYS:N	1:A:180:LYS:CA	1:A:180:LYS:C	1:A:181:CYS:N	20	1.77
(1,214) 1:A:159:ARG:C 1:A:160:ASP:N 1:A:160:ASP:CA 1:A:160:ASP:C 11 1.76 (1,78) 1:A:79:MET:N 1:A:79:MET:CA 1:A:79:MET:C 1:A:80:ASN:N 20 1.75 (1,266) 1:A:136:LEU:N 1:A:136:LEU:CA 1:A:136:LEU:CB 1:A:136:LEU:CG 3 1.75 (1,253) 1:A:26:LEU:N 1:A:26:LEU:CA 1:A:26:LEU:C 1:A:27:VAL:N 18 1.73 (1,83) 1:A:82:TYR:C 1:A:83:GLU:N 1:A:83:GLU:CA 1:A:83:GLU:C 2 1.72 (1,40) 1:A:30:PHE:N 1:A:30:PHE:CA 1:A:30:PHE:C 1:A:31:LYS:N 20 1.72 (1,180) 1:A:135:ASN:C 1:A:136:LEU:N 1:A:136:LEU:CA 1:A:136:LEU:C 15 1.72 (1,245) 1:A:178:GLU:N 1:A:178:GLU:C 1:A:179:GLU:N 5 1.71 (1,220) 1:A:164:THR:C 1:A:165:GLU:N 1:A:145:ALA:C 1:A:146:GLU:N 8 1.71 (1,253) 1:A:26:LEU:N 1:A:26:LEU:CA 1:A:27:VAL:N 15 1.69	· · /	1:A:84:ASP:N	1:A:84:ASP:CA	1:A:84:ASP:C	1:A:85:ALA:N	5	1.76
(1,78) 1:A:79:MET:N 1:A:79:MET:CA 1:A:79:MET:C 1:A:80:ASN:N 20 1.75 (1,266) 1:A:136:LEU:N 1:A:136:LEU:CA 1:A:136:LEU:CB 1:A:136:LEU:CG 3 1.75 (1,253) 1:A:26:LEU:N 1:A:26:LEU:CA 1:A:26:LEU:C 1:A:27:VAL:N 18 1.73 (1,83) 1:A:82:TYR:C 1:A:83:GLU:N 1:A:83:GLU:CA 1:A:83:GLU:C 2 1.72 (1,40) 1:A:30:PHE:N 1:A:30:PHE:CA 1:A:30:PHE:C 1:A:31:LYS:N 20 1.72 (1,180) 1:A:135:ASN:C 1:A:136:LEU:N 1:A:136:LEU:CA 1:A:136:LEU:C 15 1.72 (1,245) 1:A:178:GLU:N 1:A:178:GLU:C 1:A:179:GLU:N 5 1.71 (1,220) 1:A:164:THR:C 1:A:165:GLU:N 1:A:165:GLU:CA 1:A:165:GLU:C 1:A:145:ALA:C 1:A:146:GLU:N 8 1.71 (1,253) 1:A:26:LEU:N 1:A:26:LEU:CA 1:A:26:LEU:C 1:A:27:VAL:N 15 1.69	/					11	
(1,266) 1:A:136:LEU:N 1:A:136:LEU:CA 1:A:136:LEU:CB 1:A:136:LEU:CG 3 1.75 (1,253) 1:A:26:LEU:N 1:A:26:LEU:CA 1:A:26:LEU:C 1:A:27:VAL:N 18 1.73 (1,83) 1:A:82:TYR:C 1:A:83:GLU:N 1:A:83:GLU:CA 1:A:83:GLU:C 2 1.72 (1,40) 1:A:30:PHE:N 1:A:30:PHE:CA 1:A:30:PHE:C 1:A:31:LYS:N 20 1.72 (1,180) 1:A:135:ASN:C 1:A:136:LEU:N 1:A:136:LEU:CA 1:A:136:LEU:C 15 1.72 (1,245) 1:A:178:GLU:N 1:A:178:GLU:C 1:A:179:GLU:N 5 1.71 (1,220) 1:A:164:THR:C 1:A:165:GLU:N 1:A:165:GLU:CA 1:A:165:GLU:C 17 1.71 (1,197) 1:A:145:ALA:N 1:A:26:LEU:CA 1:A:26:LEU:C 1:A:27:VAL:N 15 1.69	· · /					20	
(1,253) 1:A:26:LEU:N 1:A:26:LEU:CA 1:A:26:LEU:C 1:A:27:VAL:N 18 1.73 (1,83) 1:A:82:TYR:C 1:A:83:GLU:N 1:A:83:GLU:CA 1:A:83:GLU:C 2 1.72 (1,40) 1:A:30:PHE:N 1:A:30:PHE:CA 1:A:30:PHE:C 1:A:31:LYS:N 20 1.72 (1,180) 1:A:135:ASN:C 1:A:136:LEU:N 1:A:136:LEU:CA 1:A:136:LEU:C 15 1.72 (1,245) 1:A:178:GLU:N 1:A:178:GLU:C 1:A:179:GLU:N 5 1.71 (1,220) 1:A:164:THR:C 1:A:165:GLU:N 1:A:165:GLU:CA 1:A:165:GLU:C 17 1.71 (1,197) 1:A:145:ALA:N 1:A:145:ALA:CA 1:A:145:ALA:C 1:A:146:GLU:N 8 1.71 (1,253) 1:A:26:LEU:N 1:A:26:LEU:CA 1:A:26:LEU:C 1:A:27:VAL:N 15 1.69			1:A:136:LEU:CA				
(1,83) 1:A:82:TYR:C 1:A:83:GLU:N 1:A:83:GLU:CA 1:A:83:GLU:C 2 1.72 (1,40) 1:A:30:PHE:N 1:A:30:PHE:CA 1:A:30:PHE:C 1:A:31:LYS:N 20 1.72 (1,180) 1:A:135:ASN:C 1:A:136:LEU:N 1:A:136:LEU:CA 1:A:136:LEU:C 15 1.72 (1,245) 1:A:178:GLU:N 1:A:178:GLU:C 1:A:179:GLU:N 5 1.71 (1,220) 1:A:164:THR:C 1:A:165:GLU:N 1:A:165:GLU:CA 1:A:165:GLU:C 17 1.71 (1,197) 1:A:145:ALA:N 1:A:145:ALA:CA 1:A:145:ALA:C 1:A:146:GLU:N 8 1.71 (1,253) 1:A:26:LEU:N 1:A:26:LEU:CA 1:A:26:LEU:C 1:A:27:VAL:N 15 1.69							
(1,40) 1:A:30:PHE:N 1:A:30:PHE:CA 1:A:30:PHE:C 1:A:31:LYS:N 20 1.72 (1,180) 1:A:135:ASN:C 1:A:136:LEU:N 1:A:136:LEU:CA 1:A:136:LEU:C 15 1.72 (1,245) 1:A:178:GLU:N 1:A:178:GLU:CA 1:A:178:GLU:C 1:A:179:GLU:N 5 1.71 (1,220) 1:A:164:THR:C 1:A:165:GLU:N 1:A:165:GLU:CA 1:A:165:GLU:C 17 1.71 (1,197) 1:A:145:ALA:N 1:A:145:ALA:CA 1:A:145:ALA:C 1:A:146:GLU:N 8 1.71 (1,253) 1:A:26:LEU:N 1:A:26:LEU:CA 1:A:26:LEU:C 1:A:27:VAL:N 15 1.69	· · /						
(1,180) 1:A:135:ASN:C 1:A:136:LEU:N 1:A:136:LEU:CA 1:A:136:LEU:C 15 1.72 (1,245) 1:A:178:GLU:N 1:A:178:GLU:CA 1:A:178:GLU:C 1:A:179:GLU:N 5 1.71 (1,220) 1:A:164:THR:C 1:A:165:GLU:N 1:A:165:GLU:CA 1:A:165:GLU:C 17 1.71 (1,197) 1:A:145:ALA:N 1:A:145:ALA:CA 1:A:145:ALA:C 1:A:146:GLU:N 8 1.71 (1,253) 1:A:26:LEU:N 1:A:26:LEU:CA 1:A:26:LEU:C 1:A:27:VAL:N 15 1.69	_ , ,						
(1,245) 1:A:178:GLU:N 1:A:178:GLU:CA 1:A:178:GLU:C 1:A:179:GLU:N 5 1.71 (1,220) 1:A:164:THR:C 1:A:165:GLU:N 1:A:165:GLU:CA 1:A:165:GLU:C 17 1.71 (1,197) 1:A:145:ALA:N 1:A:145:ALA:CA 1:A:145:ALA:C 1:A:146:GLU:N 8 1.71 (1,253) 1:A:26:LEU:N 1:A:26:LEU:CA 1:A:26:LEU:C 1:A:27:VAL:N 15 1.69	/						
(1,220) 1:A:164:THR:C 1:A:165:GLU:N 1:A:165:GLU:CA 1:A:165:GLU:C 17 1.71 (1,197) 1:A:145:ALA:N 1:A:145:ALA:CA 1:A:145:ALA:C 1:A:146:GLU:N 8 1.71 (1,253) 1:A:26:LEU:N 1:A:26:LEU:CA 1:A:26:LEU:C 1:A:27:VAL:N 15 1.69	· · /						
(1,197) 1:A:145:ALA:N 1:A:145:ALA:CA 1:A:145:ALA:C 1:A:146:GLU:N 8 1.71 (1,253) 1:A:26:LEU:N 1:A:26:LEU:CA 1:A:26:LEU:C 1:A:27:VAL:N 15 1.69	· · /					17	
(1,253) 1:A:26:LEU:N 1:A:26:LEU:CA 1:A:26:LEU:C 1:A:27:VAL:N 15 1.69	· · /						
	· · /						
$\frac{1}{2}$	(1,39)	1:A:29:GLU:C	1:A:30:PHE:N	1:A:30:PHE:CA	1:A:30:PHE:C	17	1.68



	ed from previous pag					
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (\circ)
(1,211)	1:A:157:GLU:N	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:C	1:A:158:TYR:N	19	1.68
(1,172)	1:A:131:ASP:C	1:A:132:ARG:N	1:A:132:ARG:CA	1:A:132:ARG:C	16	1.68
(1,77)	1:A:78:GLU:C	1:A:79:MET:N	1:A:79:MET:CA	1:A:79:MET:C	10	1.67
(1,227)	1:A:168:THR:C	1:A:169:LEU:N	1:A:169:LEU:CA	1:A:169:LEU:C	18	1.65
(1,199)	1:A:146:GLU:N	1:A:146:GLU:CA	1:A:146:GLU:C	1:A:147:GLY:N	1	1.65
(1,24)	1:A:14:SER:N	1:A:14:SER:CA	1:A:14:SER:C	1:A:15:SER:N	5	1.64
(1,23)	1:A:13:LEU:C	1:A:14:SER:N	1:A:14:SER:CA	1:A:14:SER:C	13	1.64
(1,38)	1:A:29:GLU:N	1:A:29:GLU:CA	1:A:29:GLU:C	1:A:30:PHE:N	9	1.63
(1,78)	1:A:79:MET:N	1:A:79:MET:CA	1:A:79:MET:C	1:A:80:ASN:N	12	1.62
(1,86)	1:A:84:ASP:N	1:A:84:ASP:CA	1:A:84:ASP:C	1:A:85:ALA:N	16	1.61
(1,86)	1:A:84:ASP:N	1:A:84:ASP:CA	1:A:84:ASP:C	1:A:85:ALA:N	13	1.6
(1,6)	1:A:4:TYR:N	1:A:4:TYR:CA	1:A:4:TYR:C	1:A:5:LYS:N	3	1.6
(1,220)	1:A:164:THR:C	1:A:165:GLU:N	1:A:165:GLU:CA	1:A:165:GLU:C	19	1.6
(1,200)	1:A:151:GLY:C	1:A:152:GLN:N	1:A:152:GLN:CA	1:A:152:GLN:C	14	1.6
(1,214)	1:A:159:ARG:C	1:A:160:ASP:N	1:A:160:ASP:CA	1:A:160:ASP:C	3	1.59
(1,253)	1:A:26:LEU:N	1:A:26:LEU:CA	1:A:26:LEU:C	1:A:27:VAL:N	12	1.58
(1,40)	1:A:30:PHE:N	1:A:30:PHE:CA	1:A:30:PHE:C	1:A:31:LYS:N	14	1.57
(1,227)	1:A:168:THR:C	1:A:169:LEU:N	1:A:169:LEU:CA	1:A:169:LEU:C	19	1.57
(1,131)	1:A:108:ARG:N	1:A:108:ARG:CA	1:A:108:ARG:C	1:A:109:ASP:N	8	1.57
(1,199)	1:A:146:GLU:N	1:A:146:GLU:CA	1:A:146:GLU:C	1:A:147:GLY:N	17	1.56
(1,172)	1:A:131:ASP:C	1:A:132:ARG:N	1:A:132:ARG:CA	1:A:132:ARG:C	14	1.56
(1,171)	1:A:131:ASP:N	1:A:131:ASP:CA	1:A:131:ASP:C	1:A:132:ARG:N	6	1.56
(1,279)	1:A:82:TYR:CA	1:A:82:TYR:CB	1:A:82:TYR:CG	1:A:82:TYR:CD1	6	1.55
(1,213) $(1,22)$	1:A:12:GLU:N	1:A:12:GLU:CA	1:A:12:GLU:C	1:A:13:LEU:N	11	1.55
(1,167)	1:A:128:LEU:N	1:A:128:LEU:CA	1:A:128:LEU:C	1:A:129:ALA:N	18	1.54
(1,78)	1:A:79:MET:N	1:A:79:MET:CA	1:A:79:MET:C	1:A:80:ASN:N	4	1.53
(1,75) $(1,57)$	1:A:67:GLY:C	1:A:68:ILE:N	1:A:68:ILE:CA	1:A:68:ILE:C	7	1.53
(1,57) $(1,53)$	1:A:37:ARG:C	1:A:38:LYS:N	1:A:38:LYS:CA	1:A:38:LYS:C	5	1.53
(1,33) $(1,214)$	1:A:159:ARG:C	1:A:160:ASP:N	1:A:160:ASP:CA	1:A:160:ASP:C	4	1.52
(1,214) $(1,22)$	1:A:12:GLU:N	1:A:12:GLU:CA	1:A:12:GLU:C	1:A:13:LEU:N	7	1.51
(1,22) $(1,15)$	1:A:8:PHE:C	1:A:9:THR:N	1:A:9:THR:CA	1:A:9:THR:C	5	1.51
(1,13) $(1,52)$	1:A:37:ARG:N	1:A:37:ARG:CA	1:A:37:ARG:C	1:A:38:LYS:N	8	1.51
(1,32) $(1,4)$	1:A:3:ILE:N	1:A:3:ILE:CA	1:A:3:ILE:C	1:A:4:TYR:N	18	1.48
(1,214)	1:A:159:ARG:C	1:A:160:ASP:N	1:A:160:ASP:CA	1:A:160:ASP:C	2	1.48
(1,214) $(1,199)$		1:A:146:GLU:CA	1:A:146:GLU:C	1:A:147:GLY:N	14	1.48
(1,199) $(1,171)$	1:A:131:ASP:N	1:A:131:ASP:CA	1:A:131:ASP:C	1:A:132:ARG:N	19	1.48
(1,171) $(1,293)$	1:A:30:PHE:CA	1:A:30:PHE:CB	1:A:30:PHE:CG	1:A:30:PHE:CD1	7	1.47
(1,293) $(1,3)$	1:A:2:LEU:C	1:A:3:ILE:N	1:A:3:ILE:CA	1:A:3:ILE:C	3	1.46
. ,	1:A:27:VAL:C	1:A:28:TYR:N	1:A:28:TYR:CA	1:A:28:TYR:C		
(1,35) $(1,172)$	1:A:27:VAL:C 1:A:131:ASP:C	1:A:28:1 Y K:N 1:A:132:ARG:N	1:A:28:1 Y R:CA 1:A:132:ARG:CA	1:A:28:1 YR:C 1:A:132:ARG:C	14	1.45
(1,172) $(1,82)$	1:A:131:ASP:C 1:A:82:TYR:N	1:A:132:ARG:N 1:A:82:TYR:CA	1:A:132:ARG:CA 1:A:82:TYR:C	1:A:132:ARG:C 1:A:83:GLU:N	6	1.45
					7	1.44
(1,293)	1:A:30:PHE:CA	1:A:30:PHE:CB	1:A:30:PHE:CG	1:A:30:PHE:CD1	3	1.44
(1,243)	1:A:177:ILE:N	1:A:177:ILE:CA	1:A:177:ILE:C	1:A:178:GLU:N	12	1.44
(1,55)	1:A:65:GLU:C	1:A:66:ARG:N	1:A:66:ARG:CA	1:A:66:ARG:C	12	1.43
(1,239)	1:A:174:GLU:C	1:A:175:ALA:N	1:A:175:ALA:CA	1:A:175:ALA:C	17	1.42
(1,83)	1:A:82:TYR:C	1:A:83:GLU:N	1:A:83:GLU:CA	1:A:83:GLU:C	12	1.41
(1,279)	1:A:82:TYR:CA	1:A:82:TYR:CB	1:A:82:TYR:CG	1:A:82:TYR:CD1	12	1.41
(1,251)	1:A:181:CYS:N	1:A:181:CYS:CA	1:A:181:CYS:C	1:A:182:LEU:N	7	1.41
(1,218)	1:A:163:GLY:C	1:A:164:THR:N	1:A:164:THR:CA	1:A:164:THR:C	2	1.41
(1,28)	1:A:21:LYS:N	1:A:21:LYS:CA	1:A:21:LYS:C	1:A:22:LEU:N	10	1.4
(1,169)	1:A:130:LYS:N	1:A:130:LYS:CA	1:A:130:LYS:C	1:A:131:ASP:N	6	1.4



Key Atom-1 Atom-2 Atom-3 Atom-4 Model (1,167) 1:A:128:LEU:N 1:A:128:LEU:CA 1:A:128:LEU:C 1:A:129:ALA:N 12 (1,253) 1:A:26:LEU:N 1:A:26:LEU:CA 1:A:26:LEU:C 1:A:27:VAL:N 17 (1,35) 1:A:27:VAL:C 1:A:28:TYR:N 1:A:28:TYR:CA 1:A:28:TYR:C 4 (1,83) 1:A:82:TYR:C 1:A:83:GLU:N 1:A:83:GLU:CA 1:A:83:GLU:C 1 (1,80) 1:A:81:CYS:N 1:A:81:CYS:CA 1:A:34:HIS:C 1:A:35:VAL:N 18 (1,46) 1:A:34:HIS:N 1:A:34:HIS:CA 1:A:34:HIS:C 1:A:35:VAL:N 18	1.4 1.38 1.36
(1,253) 1:A:26:LEU:N 1:A:26:LEU:CA 1:A:26:LEU:C 1:A:27:VAL:N 17 (1,35) 1:A:27:VAL:C 1:A:28:TYR:N 1:A:28:TYR:CA 1:A:28:TYR:C 4 (1,83) 1:A:82:TYR:C 1:A:83:GLU:N 1:A:83:GLU:CA 1:A:83:GLU:C 1 (1,80) 1:A:81:CYS:N 1:A:81:CYS:CA 1:A:81:CYS:C 1:A:82:TYR:N 10	1.36
(1,35) 1:A:27:VAL:C 1:A:28:TYR:N 1:A:28:TYR:CA 1:A:28:TYR:C 4 (1,83) 1:A:82:TYR:C 1:A:83:GLU:N 1:A:83:GLU:CA 1:A:83:GLU:C 1 (1,80) 1:A:81:CYS:N 1:A:81:CYS:CA 1:A:81:CYS:C 1:A:82:TYR:N 10	1.36
(1,83) 1:A:82:TYR:C 1:A:83:GLU:N 1:A:83:GLU:CA 1:A:83:GLU:C 1 (1,80) 1:A:81:CYS:N 1:A:81:CYS:CA 1:A:81:CYS:C 1:A:82:TYR:N 10	1.05
(1,80) 1:A:81:CYS:N 1:A:81:CYS:CA 1:A:81:CYS:C 1:A:82:TYR:N 10	1.35
\ \ \ \ \ \ \ \ \ \ \ \ \ \ \ \ \ \ \	1.35
(=,=0, =:=:0.1111011 10	1.35
(1,223) 1:A:166:VAL:N 1:A:166:VAL:CA 1:A:166:VAL:C 1:A:167:PRO:N 19	1.35
(1,58) 1:A:68:ILE:N 1:A:68:ILE:CA 1:A:68:ILE:C 1:A:69:ASP:N 2	1.34
(1,38) 1:A:29:GLU:N 1:A:29:GLU:CA 1:A:29:GLU:C 1:A:30:PHE:N 18	1.34
(1,22) 1:A:12:GLU:N 1:A:12:GLU:CA 1:A:12:GLU:C 1:A:13:LEU:N 19	1.34
(1,252) 1:A:25:ASP:C 1:A:26:LEU:N 1:A:26:LEU:CA 1:A:26:LEU:C 8	1.33
(1,251) 1:A:181:CYS:N 1:A:181:CYS:CA 1:A:181:CYS:C 1:A:182:LEU:N 20	1.33
(1,86) 1:A:84:ASP:N 1:A:84:ASP:CA 1:A:84:ASP:C 1:A:85:ALA:N 1	1.32
(1,6) 1:A:4:TYR:N 1:A:4:TYR:CA 1:A:4:TYR:C 1:A:5:LYS:N 20	1.32
(1,239) 1:A:174:GLU:C 1:A:175:ALA:N 1:A:175:ALA:CA 1:A:175:ALA:C 13	1.32
(1,227) 1:A:168:THR:C 1:A:169:LEU:N 1:A:169:LEU:CA 1:A:169:LEU:C 5	1.32
(1,222) 1:A:165:GLU:C 1:A:166:VAL:N 1:A:166:VAL:CA 1:A:166:VAL:C 9	1.32
(1,77) 1:A:78:GLU:C 1:A:79:MET:N 1:A:79:MET:CA 1:A:79:MET:C 17	1.29
(1,57) 1:A:67:GLY:C 1:A:68:ILE:N 1:A:68:ILE:CA 1:A:68:ILE:C 5	1.29
(1,51) 1:A:36:VAL:C 1:A:37:ARG:N 1:A:37:ARG:CA 1:A:37:ARG:C 20	1.29
(1,3) 1:A:2:LEU:C 1:A:3:ILE:N 1:A:3:ILE:CA 1:A:3:ILE:C 15	1.29
(1,274) 1:A:91:TYR:N 1:A:91:TYR:CA 1:A:91:TYR:CB 1:A:91:TYR:CG 15	1.29
(1,169) 1:A:130:LYS:N 1:A:130:LYS:CA 1:A:130:LYS:C 1:A:131:ASP:N 7	1.29
(1,16) 1:A:9:THR:N 1:A:9:THR:CA 1:A:9:THR:C 1:A:10:ASP:N 2	1.29
(1,252) 1:A:25:ASP:C 1:A:26:LEU:N 1:A:26:LEU:CA 1:A:26:LEU:C 12	1.28
(1,24) 1:A:14:SER:N 1:A:14:SER:CA 1:A:14:SER:C 1:A:15:SER:N 14	1.27
(1,180) 1:A:135:ASN:C 1:A:136:LEU:N 1:A:136:LEU:CA 1:A:136:LEU:C 20	1.27
(1,77) 1:A:78:GLU:C 1:A:79:MET:N 1:A:79:MET:CA 1:A:79:MET:C 1	1.26
(1,35) 1:A:27:VAL:C 1:A:28:TYR:N 1:A:28:TYR:CA 1:A:28:TYR:C 10	1.26
(1,3) 1:A:2:LEU:C 1:A:3:ILE:N 1:A:3:ILE:CA 1:A:3:ILE:C 6	1.26
(1,251) 1:A:181:CYS:N 1:A:181:CYS:CA 1:A:181:CYS:C 1:A:182:LEU:N 12	1.26
(1,247) 1:A:179:GLU:N 1:A:179:GLU:CA 1:A:179:GLU:C 1:A:180:LYS:N 20	1.25
(1,224) 1:A:167:PRO:N 1:A:167:PRO:CA 1:A:167:PRO:C 1:A:168:THR:N 5	1.25
(1,279) 1:A:82:TYR:CA 1:A:82:TYR:CB 1:A:82:TYR:CG 1:A:82:TYR:CD1 3	1.24
(1,249) 1:A:180:LYS:N 1:A:180:LYS:CA 1:A:180:LYS:C 1:A:181:CYS:N 7	1.23
(1,243) 1:A:177:ILE:N 1:A:177:ILE:CA 1:A:177:ILE:C 1:A:178:GLU:N 5	1.23
(1,183) 1:A:137:ALA:N 1:A:137:ALA:CA 1:A:137:ALA:C 1:A:138:PHE:N 18	1.22
(1,16) 1:A:9:THR:N 1:A:9:THR:CA 1:A:9:THR:C 1:A:10:ASP:N 16	1.22
(1,57) 1:A:67:GLY:C 1:A:68:ILE:N 1:A:68:ILE:CA 1:A:68:ILE:C 1	1.21
(1,206) 1:A:154:ALA:C 1:A:155:ILE:N 1:A:155:ILE:CA 1:A:155:ILE:C 12	1.21
(1,214) 1:A:159:ARG:C 1:A:160:ASP:N 1:A:160:ASP:CA 1:A:160:ASP:C 17	1.2
(1,86) 1:A:84:ASP:N 1:A:84:ASP:CA 1:A:84:ASP:C 1:A:85:ALA:N 6	1.19
(1,72) 1:A:75:LYS:N 1:A:75:LYS:CA 1:A:75:LYS:C 1:A:76:LEU:N 12	1.19
(1,17) 1:A:9:THR:C 1:A:10:ASP:N 1:A:10:ASP:CA 1:A:10:ASP:C 20	1.19
(1,77) 1:A:78:GLU:C 1:A:79:MET:N 1:A:79:MET:CA 1:A:79:MET:C 19	1.18
(1,213) 1:A:158:TYR:N 1:A:158:TYR:CA 1:A:158:TYR:C 1:A:159:ARG:N 7	1.18
(1,182) 1:A:136:LEU:C 1:A:137:ALA:N 1:A:137:ALA:CA 1:A:137:ALA:C 9	1.18
(1,180) 1:A:135:ASN:C 1:A:136:LEU:N 1:A:136:LEU:CA 1:A:136:LEU:C 14	1.18
(1,53) 1:A:37:ARG:C 1:A:38:LYS:N 1:A:38:LYS:CA 1:A:38:LYS:C 17	1.17
(1,40) 1:A:30:PHE:N 1:A:30:PHE:CA 1:A:30:PHE:C 1:A:31:LYS:N 16	1.17
(1,252) 1:A:25:ASP:C 1:A:26:LEU:N 1:A:26:LEU:CA 1:A:26:LEU:C 6	1.17



Key	$rac{ed\ from\ previous\ pag}{\mathbf{Atom-1}}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (\circ)
(1,22)	1:A:12:GLU:N	1:A:12:GLU:CA	1:A:12:GLU:C	1:A:13:LEU:N	2	1.17
(1,17)	1:A:9:THR:C	1:A:10:ASP:N	1:A:10:ASP:CA	1:A:10:ASP:C	12	1.16
(1,72)	1:A:75:LYS:N	1:A:75:LYS:CA	1:A:75:LYS:C	1:A:76:LEU:N	10	1.15
(1,19)	1:A:10:ASP:C	1:A:11:ASP:N	1:A:11:ASP:CA	1:A:11:ASP:C	3	1.15
(1,199)	1:A:146:GLU:N	1:A:146:GLU:CA	1:A:146:GLU:C	1:A:147:GLY:N	19	1.14
(1,70)	1:A:74:HIS:N	1:A:74:HIS:CA	1:A:74:HIS:C	1:A:75:LYS:N	3	1.13
(1,244)	1:A:177:ILE:C	1:A:178:GLU:N	1:A:178:GLU:CA	1:A:178:GLU:C	2	1.13
(1,172)	1:A:131:ASP:C	1:A:132:ARG:N	1:A:132:ARG:CA	1:A:132:ARG:C	18	1.13
(1,167)	1:A:128:LEU:N	1:A:128:LEU:CA	1:A:128:LEU:C	1:A:129:ALA:N	6	1.13
(1,11)	1:A:6:ASP:C	1:A:7:ILE:N	1:A:7:ILE:CA	1:A:7:ILE:C	18	1.13
(1,260)	1:A:68:ILE:CA	1:A:68:ILE:CB	1:A:68:ILE:CG1	1:A:68:ILE:CD1	5	1.12
(1,200) $(1,78)$	1:A:79:MET:N	1:A:79:MET:CA	1:A:79:MET:C	1:A:80:ASN:N	8	1.11
(1,16) $(1,216)$	1:A:160:ASP:C	1:A:161:VAL:N	1:A:161:VAL:CA	1:A:161:VAL:C	16	1.11
(1,167)	1:A:128:LEU:N	1:A:128:LEU:CA	1:A:128:LEU:C	1:A:129:ALA:N	16	1.11
(1,107) $(1,5)$	1:A:3:ILE:C	1:A:4:TYR:N	1:A:4:TYR:CA	1:A:4:TYR:C	4	1.1
(1,3) $(1,23)$	1:A:13:LEU:C	1:A:14:SER:N	1:A:14:SER:CA	1:A:14:SER:C	11	1.1
(1,23) $(1,19)$	1:A:10:ASP:C	1:A:11:ASP:N	1:A:11:ASP:CA	1:A:11:ASP:C	1	1.1
(1,13) $(1,53)$	1:A:37:ARG:C	1:A:38:LYS:N	1:A:38:LYS:CA	1:A:38:LYS:C	14	1.09
(1,33) $(1,275)$	1:A:91:TYR:CA	1:A:91:TYR:CB	1:A:91:TYR:CG	1:A:91:TYR:CD1	17	1.09
(1,273) $(1,227)$	1:A:168:THR:C	1:A:169:LEU:N	1:A:169:LEU:CA	1:A:169:LEU:C	1	1.09
(1,227) $(1,178)$	1:A:134:LYS:C	1:A:135:ASN:N	1:A:135:ASN:CA	1:A:135:ASN:C	17	1.09
(1,178) $(1,7)$	1:A:4:TYR:C	1:A:5:LYS:N	1:A:5:LYS:CA	1:A:5:LYS:C	5	1.05
(1,7) $(1,279)$	1:A:4:11R.C 1:A:82:TYR:CA	1:A:82:TYR:CB	1:A:9:L13:CA 1:A:82:TYR:CG	1:A:82:TYR:CD1	9	1.05
(1,279) $(1,180)$	1:A:02:11 R.CA 1:A:135:ASN:C	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:36:LEU:C	4	1.05
(1,150) $(1,15)$	1:A:135:A5N:C 1:A:8:PHE:C	1:A:130:LEO:N 1:A:9:THR:N	1:A:9:THR:CA	1:A:130:LEU:C 1:A:9:THR:C	4	1.05
(1,13) $(1,250)$	1:A:180:LYS:C	1:A:9:111K.N 1:A:181:CYS:N	1:A:181:CYS:CA	1:A:181:CYS:C	14	1.04
/	1:A:176:ILE:N	1:A:176:ILE:CA	1:A:176:ILE:C	1:A:177:ILE:N	15	1.04
(1,241)	1:A:170:ILE:N 1:A:152:GLN:C	1:A:170:ILE:CA 1:A:153:VAL:N	1:A:170:ILE:C 1:A:153:VAL:CA	1:A:177:ILE:N 1:A:153:VAL:C	11	1.04
(1,202) $(1,2)$	1:A:132:GLN:C 1:A:2:LEU:N	1:A:155: VAL:N 1:A:2:LEU:CA	1:A:155:VAL:CA 1:A:2:LEU:C	1:A:3:ILE:N	20	1.04
(1,2) $(1,81)$	1:A:81:CYS:C	1:A:82:TYR:N	1:A:82:TYR:CA	1:A:82:TYR:C	7	1.04
(1,81) $(1,78)$	1:A:79:MET:N	1:A:79:MET:CA	1:A:79:MET:C	1:A:80:ASN:N	2	1.03
(1,78) $(1,35)$	1:A:79:ME1:N 1:A:27:VAL:C	1:A:79:ME1:CA 1:A:28:TYR:N	1:A:79:ME1:C 1:A:28:TYR:CA	1:A:30:A5N:N 1:A:28:TYR:C	15	1.01
(1,33) $(1,207)$	1:A:155:ILE:N	1:A:25:ILE:CA	1:A:155:ILE:C	1:A:156:ILE:N	15	1.01
\ /	1:A:11:ASP:N	1:A:135:1LE:CA 1:A:11:ASP:CA	1:A:135:ILE:C 1:A:11:ASP:C	1:A:130:ILE:N 1:A:12:GLU:N	3	1.01
(1,20)	1:A:11:ASP:N 1:A:82:TYR:C	1:A:11:ASP:CA 1:A:83:GLU:N	1:A:11:ASP:C 1:A:83:GLU:CA	1:A:12:GLU:N 1:A:83:GLU:C	17	
(1,83) $(1,23)$	1:A:13:LEU:C	1:A:03:GLU:N 1:A:14:SER:N	1:A:33:GLU:CA 1:A:14:SER:CA	1:A:03:GLU:C 1:A:14:SER:C	4	1.0 1.0
· · /	1:A:135:ASN:C		1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:C	1	1.0
(1,180)	1:A:135:ASN:C 1:A:131:ASP:N	1:A:136:LEU:N 1:A:131:ASP:CA	1:A:130:LEU:CA 1:A:131:ASP:C	1:A:130:LEU:C 1:A:132:ARG:N	16	1.0
(1,171)	1:A:131:ASP:N 1:A:9:THR:N					
(1,16)		1:A:9:THR:CA	1:A:9:THR:C	1:A:10:ASP:N	20	1.0
(1,243)	1:A:177:ILE:N	1:A:177:ILE:CA	1:A:177:ILE:C	1:A:178:GLU:N		0.98 0.97
(1,72)	1:A:75:LYS:N	1:A:75:LYS:CA	1:A:75:LYS:C	1:A:76:LEU:N 1:A:175:ALA:C	1	
(1,239)	1:A:174:GLU:C	1:A:175:ALA:N	1:A:175:ALA:CA		18	0.97
(1,226)	1:A:168:THR:N	1:A:168:THR:CA	1:A:168:THR:C	1:A:169:LEU:N	20	0.97
(1,172)	1:A:131:ASP:C	1:A:132:ARG:N	1:A:132:ARG:CA	1:A:132:ARG:C	20	0.97
(1,42)	1:A:31:LYS:N	1:A:31:LYS:CA	1:A:31:LYS:C	1:A:32:GLY:N	9	0.96
(1,206)	1:A:154:ALA:C	1:A:155:ILE:N	1:A:155:ILE:CA	1:A:155:ILE:C	3	0.96
(1,50)	1:A:36:VAL:N	1:A:36:VAL:CA	1:A:36:VAL:C	1:A:37:ARG:N	7	0.95
(1,266)	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CG	8	0.94
(1,10)	1:A:6:ASP:N	1:A:6:ASP:CA	1:A:6:ASP:C	1:A:7:ILE:N	3	0.94
(1,9)	1:A:5:LYS:C	1:A:6:ASP:N	1:A:6:ASP:CA	1:A:6:ASP:C	18	0.92
(1,252)	1:A:25:ASP:C	1:A:26:LEU:N	1:A:26:LEU:CA	1:A:26:LEU:C	1	0.92



Key	$rac{ed\ from\ previous\ pag}{\mathbf{Atom-1}}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,22)	1:A:12:GLU:N	1:A:12:GLU:CA	1:A:12:GLU:C	1:A:13:LEU:N	3	0.91
(1,227)	1:A:168:THR:C	1:A:169:LEU:N	1:A:169:LEU:CA	1:A:169:LEU:C	2	0.9
(1,70)	1:A:74:HIS:N	1:A:74:HIS:CA	1:A:74:HIS:C	1:A:75:LYS:N	5	0.88
(1,75) $(1,275)$	1:A:91:TYR:CA	1:A:91:TYR:CB	1:A:91:TYR:CG	1:A:91:TYR:CD1	2	0.88
(1,279)	1:A:82:TYR:CA	1:A:82:TYR:CB	1:A:82:TYR:CG	1:A:82:TYR:CD1	5	0.87
(1,266)	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:CB	1:A:136:LEU:CG	15	0.87
(1,171)	1:A:131:ASP:N	1:A:131:ASP:CA	1:A:131:ASP:C	1:A:132:ARG:N	15	0.87
(1,227)	1:A:168:THR:C	1:A:169:LEU:N	1:A:169:LEU:CA	1:A:169:LEU:C	8	0.86
(1,293)	1:A:30:PHE:CA	1:A:30:PHE:CB	1:A:30:PHE:CG	1:A:30:PHE:CD1	15	0.85
(1,227)	1:A:168:THR:C	1:A:169:LEU:N	1:A:169:LEU:CA	1:A:169:LEU:C	13	0.85
(1,199)	1:A:146:GLU:N	1:A:146:GLU:CA	1:A:146:GLU:C	1:A:147:GLY:N	11	0.85
(1,279)	1:A:82:TYR:CA	1:A:82:TYR:CB	1:A:82:TYR:CG	1:A:82:TYR:CD1	1	0.84
(1,180)	1:A:135:ASN:C	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:C	19	0.84
(1,150) $(1,15)$	1:A:8:PHE:C	1:A:9:THR:N	1:A:9:THR:CA	1:A:9:THR:C	8	0.84
(1,10)	1:A:6:ASP:N	1:A:6:ASP:CA	1:A:6:ASP:C	1:A:7:ILE:N	16	0.84
(1,167)	1:A:128:LEU:N	1:A:128:LEU:CA	1:A:128:LEU:C	1:A:129:ALA:N	5	0.82
(1,78)	1:A:79:MET:N	1:A:79:MET:CA	1:A:79:MET:C	1:A:80:ASN:N	15	0.81
(1,75) $(1,55)$	1:A:65:GLU:C	1:A:66:ARG:N	1:A:66:ARG:CA	1:A:66:ARG:C	7	0.81
(1,76)	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	1:A:79:MET:N	18	0.8
(1,70) $(1,72)$	1:A:75:LYS:N	1:A:75:LYS:CA	1:A:75:LYS:C	1:A:76:LEU:N	2	0.8
(1,36)	1:A:28:TYR:N	1:A:28:TYR:CA	1:A:28:TYR:C	1:A:29:GLU:N	7	0.8
(1,30) $(1,275)$	1:A:91:TYR:CA	1:A:91:TYR:CB	1:A:91:TYR:CG	1:A:91:TYR:CD1	7	0.8
(1,213) $(1,22)$	1:A:12:GLU:N	1:A:12:GLU:CA	1:A:12:GLU:C	1:A:13:LEU:N	13	0.78
(1,220)	1:A:164:THR:C	1:A:165:GLU:N	1:A:165:GLU:CA	1:A:165:GLU:C	14	0.76
(1,129)	1:A:105:LYS:C	1:A:106:ASN:N	1:A:106:ASN:CA	1:A:106:ASN:C	16	0.76
(1,123) $(1,227)$	1:A:168:THR:C	1:A:169:LEU:N	1:A:169:LEU:CA	1:A:169:LEU:C	4	0.75
(1,227) $(1,207)$	1:A:155:ILE:N	1:A:155:ILE:CA	1:A:155:ILE:C	1:A:156:ILE:N	1	0.75
(1,207) $(1,220)$	1:A:164:THR:C	1:A:165:GLU:N	1:A:165:GLU:CA	1:A:165:GLU:C	11	0.74
(1,220) $(1,86)$	1:A:84:ASP:N	1:A:84:ASP:CA	1:A:84:ASP:C	1:A:85:ALA:N	12	0.73
(1,50) $(1,5)$	1:A:3:ILE:C	1:A:4:TYR:N	1:A:4:TYR:CA	1:A:4:TYR:C	8	0.73
(1,264)	1:A:95:PHE:N	1:A:95:PHE:CA	1:A:95:PHE:CB	1:A:95:PHE:CG	11	0.73
(1,204) $(1,227)$	1:A:168:THR:C	1:A:169:LEU:N	1:A:169:LEU:CA	1:A:169:LEU:C	10	0.73
(1,221) $(1,220)$	1:A:164:THR:C	1:A:165:GLU:N	1:A:165:GLU:CA	1:A:165:GLU:C	13	0.73
(1,35)	1:A:27:VAL:C	1:A:28:TYR:N	1:A:28:TYR:CA	1:A:28:TYR:C	16	0.72
(1,130)	1:A:106:ASN:N	1:A:106:ASN:CA	1:A:106:ASN:C	1:A:107:ASN:N	1	0.72
(1,186) $(1,86)$	1:A:84:ASP:N	1:A:84:ASP:CA	1:A:84:ASP:C	1:A:85:ALA:N	3	0.72
(1,72)	1:A:75:LYS:N	1:A:75:LYS:CA	1:A:75:LYS:C	1:A:76:LEU:N	9	0.71
(1,54)	1:A:38:LYS:N	1:A:38:LYS:CA	1:A:38:LYS:C	1:A:39:GLU:N	2	0.71
(1,34) $(1,3)$	1:A:2:LEU:C	1:A:3:ILE:N	1:A:3:ILE:CA	1:A:3:ILE:C	7	0.71
(1,87)	1:A:84:ASP:C	1:A:85:ALA:N	1:A:85:ALA:CA	1:A:85:ALA:C	18	0.71
(1,83)	1:A:82:TYR:C	1:A:83:GLU:N	1:A:83:GLU:CA	1:A:83:GLU:C	8	0.7
(1,188)	1:A:139:PHE:C	1:A:140:ILE:N	1:A:140:ILE:CA	1:A:140:ILE:C	2	0.7
(1,100) $(1,51)$	1:A:36:VAL:C	1:A:37:ARG:N	1:A:37:ARG:CA	1:A:37:ARG:C	17	0.69
(1,31) $(1,188)$	1:A:139:PHE:C	1:A:140:ILE:N	1:A:140:ILE:CA	1:A:140:ILE:C	19	0.68
(1,169)	1:A:130:LYS:N	1:A:130:LYS:CA	1:A:130:LYS:C	1:A:131:ASP:N	14	0.68
(1,134)	1:A:111:ALA:C	1:A:112:ASP:N	1:A:112:ASP:CA	1:A:112:ASP:C	20	0.68
(1,134) $(1,222)$	1:A:165:GLU:C	1:A:166:VAL:N	1:A:166:VAL:CA	1:A:166:VAL:C	15	0.66
(1,23)	1:A:13:LEU:C	1:A:14:SER:N	1:A:14:SER:CA	1:A:14:SER:C	19	0.65
(1,206)	1:A:154:ALA:C	1:A:155:ILE:N	1:A:155:ILE:CA	1:A:155:ILE:C	11	0.65
(1,200) $(1,10)$	1:A:6:ASP:N	1:A:6:ASP:CA	1:A:6:ASP:C	1:A:7:ILE:N	2	0.65
(1,10) $(1,225)$	1:A:167:PRO:C	1:A:168:THR:N	1:A:168:THR:CA	1:A:168:THR:C	10	0.64
(1,440)	1.A.101.1 NO:U	1.A.100.11IA:N	1.A.100.11IN.UA	1.A.100.11IA.U	10	0.04



Key	$rac{ed\ from\ previous\ pag}{\mathbf{Atom-1}}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (\circ)
(1,184)	1:A:137:ALA:C	1:A:138:PHE:N	1:A:138:PHE:CA	1:A:138:PHE:C	5	0.64
(1,28)	1:A:21:LYS:N	1:A:21:LYS:CA	1:A:21:LYS:C	1:A:22:LEU:N	3	0.63
(1,252)	1:A:25:ASP:C	1:A:26:LEU:N	1:A:26:LEU:CA	1:A:26:LEU:C	18	0.63
(1,42)	1:A:31:LYS:N	1:A:31:LYS:CA	1:A:31:LYS:C	1:A:32:GLY:N	8	0.62
(1,253)	1:A:26:LEU:N	1:A:26:LEU:CA	1:A:26:LEU:C	1:A:27:VAL:N	1	0.62
(1,77)	1:A:78:GLU:C	1:A:79:MET:N	1:A:79:MET:CA	1:A:79:MET:C	18	0.61
(1,53)	1:A:37:ARG:C	1:A:38:LYS:N	1:A:38:LYS:CA	1:A:38:LYS:C	4	0.61
(1,249)	1:A:180:LYS:N	1:A:180:LYS:CA	1:A:180:LYS:C	1:A:181:CYS:N	6	0.61
(1,182)	1:A:136:LEU:C	1:A:137:ALA:N	1:A:137:ALA:CA	1:A:137:ALA:C	6	0.61
(1,180)	1:A:135:ASN:C	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:C	11	0.61
(1,13)	1:A:7:ILE:C	1:A:8:PHE:N	1:A:8:PHE:CA	1:A:8:PHE:C	5	0.6
(1,195)	1:A:144:ALA:N	1:A:144:ALA:CA	1:A:144:ALA:C	1:A:145:ALA:N	12	0.59
(1,180)	1:A:135:ASN:C	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:C	7	0.59
(1,167)	1:A:128:LEU:N	1:A:128:LEU:CA	1:A:128:LEU:C	1:A:129:ALA:N	3	0.59
(1,86)	1:A:84:ASP:N	1:A:84:ASP:CA	1:A:84:ASP:C	1:A:85:ALA:N	15	0.58
(1,52)	1:A:37:ARG:N	1:A:37:ARG:CA	1:A:37:ARG:C	1:A:38:LYS:N	20	0.58
(1,172)	1:A:131:ASP:C	1:A:132:ARG:N	1:A:132:ARG:CA	1:A:132:ARG:C	13	0.58
(1,258)	1:A:127:LEU:N	1:A:127:LEU:CA	1:A:127:LEU:CB	1:A:127:LEU:CG	5	0.57
(1,219)	1:A:164:THR:N	1:A:164:THR:CA	1:A:164:THR:C	1:A:165:GLU:N	16	0.56
(1,199)	1:A:146:GLU:N	1:A:146:GLU:CA	1:A:146:GLU:C	1:A:147:GLY:N	16	0.56
(1,183)	1:A:137:ALA:N	1:A:137:ALA:CA	1:A:137:ALA:C	1:A:138:PHE:N	15	0.56
(1,169)	1:A:130:LYS:N	1:A:130:LYS:CA	1:A:130:LYS:C	1:A:131:ASP:N	5	0.56
(1,46)	1:A:34:HIS:N	1:A:34:HIS:CA	1:A:34:HIS:C	1:A:35:VAL:N	2	0.55
(1,28)	1:A:21:LYS:N	1:A:21:LYS:CA	1:A:21:LYS:C	1:A:22:LEU:N	1	0.55
(1,213)	1:A:158:TYR:N	1:A:158:TYR:CA	1:A:158:TYR:C	1:A:159:ARG:N	9	0.55
(1,42)	1:A:31:LYS:N	1:A:31:LYS:CA	1:A:31:LYS:C	1:A:32:GLY:N	4	0.54
(1,220)	1:A:164:THR:C	1:A:165:GLU:N	1:A:165:GLU:CA	1:A:165:GLU:C	15	0.54
(1,224)	1:A:167:PRO:N	1:A:167:PRO:CA	1:A:167:PRO:C	1:A:168:THR:N	20	0.52
(1,210)	1:A:156:ILE:C	1:A:157:GLU:N	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:C	1	0.52
(1,77)	1:A:78:GLU:C	1:A:79:MET:N	1:A:79:MET:CA	1:A:79:MET:C	13	0.51
(1,171)	1:A:131:ASP:N	1:A:131:ASP:CA	1:A:131:ASP:C	1:A:132:ARG:N	17	0.51
(1,83)	1:A:82:TYR:C	1:A:83:GLU:N	1:A:83:GLU:CA	1:A:83:GLU:C	10	0.5
(1,35)	1:A:27:VAL:C	1:A:28:TYR:N	1:A:28:TYR:CA	1:A:28:TYR:C	1	0.5
(1,20)	1:A:11:ASP:N	1:A:11:ASP:CA	1:A:11:ASP:C	1:A:12:GLU:N	1	0.5
(1,83)	1:A:82:TYR:C	1:A:83:GLU:N	1:A:83:GLU:CA	1:A:83:GLU:C	13	0.49
(1,250)	1:A:180:LYS:C	1:A:181:CYS:N	1:A:181:CYS:CA	1:A:181:CYS:C	15	0.49
(1,227)	1:A:168:THR:C	1:A:169:LEU:N	1:A:169:LEU:CA	1:A:169:LEU:C	20	0.49
(1,130)	1:A:106:ASN:N	1:A:106:ASN:CA	1:A:106:ASN:C	1:A:107:ASN:N	13	0.49
(1,251)	1:A:181:CYS:N	1:A:181:CYS:CA	1:A:181:CYS:C	1:A:182:LEU:N	2	0.48
(1,78)	1:A:79:MET:N	1:A:79:MET:CA	1:A:79:MET:C	1:A:80:ASN:N	19	0.47
(1,248)	1:A:179:GLU:C	1:A:180:LYS:N	1:A:180:LYS:CA	1:A:180:LYS:C	11	0.47
(1,217)	1:A:161:VAL:N	1:A:161:VAL:CA	1:A:161:VAL:C	1:A:162:ASP:N	19	0.46
(1,72)	1:A:75:LYS:N	1:A:75:LYS:CA	1:A:75:LYS:C	1:A:76:LEU:N	16	0.45
(1,218)	1:A:163:GLY:C	1:A:164:THR:N	1:A:164:THR:CA	1:A:164:THR:C	17	0.45
(1,78)	1:A:79:MET:N	1:A:79:MET:CA	1:A:79:MET:C	1:A:80:ASN:N	13	0.44
(1,52)	1:A:37:ARG:N	1:A:37:ARG:CA	1:A:37:ARG:C	1:A:38:LYS:N	15	0.44
(1,40)	1:A:30:PHE:N	1:A:30:PHE:CA	1:A:30:PHE:C	1:A:31:LYS:N	2	0.44
(1,253)	1:A:26:LEU:N	1:A:26:LEU:CA	1:A:26:LEU:C	1:A:27:VAL:N	10	0.44
(1,167)	1:A:128:LEU:N	1:A:128:LEU:CA	1:A:128:LEU:C	1:A:129:ALA:N	10	0.44
(1,57)	1:A:67:GLY:C	1:A:68:ILE:N	1:A:68:ILE:CA	1:A:68:ILE:C	19	0.43
(1,30)	1:A:22:LEU:N	1:A:22:LEU:CA	1:A:22:LEU:C	1:A:23:VAL:N	17	0.43



	ed from previous pag					
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	$\textbf{Violation} \ (\ \circ \)$
(1,222)	1:A:165:GLU:C	1:A:166:VAL:N	1:A:166:VAL:CA	1:A:166:VAL:C	13	0.43
(1,130)	1:A:106:ASN:N	1:A:106:ASN:CA	1:A:106:ASN:C	1:A:107:ASN:N	11	0.43
(1,85)	1:A:83:GLU:C	1:A:84:ASP:N	1:A:84:ASP:CA	1:A:84:ASP:C	2	0.42
(1,35)	1:A:27:VAL:C	1:A:28:TYR:N	1:A:28:TYR:CA	1:A:28:TYR:C	12	0.42
(1,21)	1:A:11:ASP:C	1:A:12:GLU:N	1:A:12:GLU:CA	1:A:12:GLU:C	11	0.42
(1,211)	1:A:157:GLU:N	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:C	1:A:158:TYR:N	6	0.41
(1,183)	1:A:137:ALA:N	1:A:137:ALA:CA	1:A:137:ALA:C	1:A:138:PHE:N	5	0.41
(1,55)	1:A:65:GLU:C	1:A:66:ARG:N	1:A:66:ARG:CA	1:A:66:ARG:C	1	0.4
(1,52)	1:A:37:ARG:N	1:A:37:ARG:CA	1:A:37:ARG:C	1:A:38:LYS:N	17	0.4
(1,188)	1:A:139:PHE:C	1:A:140:ILE:N	1:A:140:ILE:CA	1:A:140:ILE:C	20	0.4
(1,251)	1:A:181:CYS:N	1:A:181:CYS:CA	1:A:181:CYS:C	1:A:182:LEU:N	16	0.39
(1,180)	1:A:135:ASN:C	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:C	10	0.39
(1,246)	1:A:178:GLU:C	1:A:179:GLU:N	1:A:179:GLU:CA	1:A:179:GLU:C	16	0.38
(1,83)	1:A:82:TYR:C	1:A:83:GLU:N	1:A:83:GLU:CA	1:A:83:GLU:C	20	0.37
(1,251)	1:A:181:CYS:N	1:A:181:CYS:CA	1:A:181:CYS:C	1:A:182:LEU:N	13	0.37
(1,220)	1:A:164:THR:C	1:A:165:GLU:N	1:A:165:GLU:CA	1:A:165:GLU:C	10	0.37
(1,13)	1:A:7:ILE:C	1:A:8:PHE:N	1:A:8:PHE:CA	1:A:8:PHE:C	12	0.37
(1,39)	1:A:29:GLU:C	1:A:30:PHE:N	1:A:30:PHE:CA	1:A:30:PHE:C	15	0.36
(1,249)	1:A:180:LYS:N	1:A:180:LYS:CA	1:A:180:LYS:C	1:A:181:CYS:N	12	0.36
(1,176)	1:A:133:PHE:C	1:A:134:LYS:N	1:A:134:LYS:CA	1:A:134:LYS:C	5	0.36
(1,36)	1:A:28:TYR:N	1:A:28:TYR:CA	1:A:28:TYR:C	1:A:29:GLU:N	13	0.35
(1,21)	1:A:11:ASP:C	1:A:12:GLU:N	1:A:12:GLU:CA	1:A:12:GLU:C	18	0.34
(1,4)	1:A:3:ILE:N	1:A:3:ILE:CA	1:A:3:ILE:C	1:A:4:TYR:N	17	0.33
(1,255)	1:A:19:PRO:N	1:A:19:PRO:CA	1:A:19:PRO:C	1:A:20:MET:N	5	0.33
(1,213)	1:A:158:TYR:N	1:A:158:TYR:CA	1:A:158:TYR:C	1:A:159:ARG:N	11	0.32
(1,171)	1:A:131:ASP:N	1:A:131:ASP:CA	1:A:131:ASP:C	1:A:132:ARG:N	20	0.32
(1,169)	1:A:130:LYS:N	1:A:130:LYS:CA	1:A:130:LYS:C	1:A:131:ASP:N	3	0.32
(1,53)	1:A:37:ARG:C	1:A:38:LYS:N	1:A:38:LYS:CA	1:A:38:LYS:C	19	0.31
(1,42)	1:A:31:LYS:N	1:A:31:LYS:CA	1:A:31:LYS:C	1:A:32:GLY:N	19	0.31
(1,264)	1:A:95:PHE:N	1:A:95:PHE:CA	1:A:95:PHE:CB	1:A:95:PHE:CG	4	0.31
(1,223)	1:A:166:VAL:N	1:A:166:VAL:CA	1:A:166:VAL:C	1:A:167:PRO:N	10	0.31
(1,211)	1:A:157:GLU:N	1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:C	1:A:158:TYR:N	17	0.31
(1,53)	1:A:37:ARG:C	1:A:38:LYS:N	1:A:38:LYS:CA	1:A:38:LYS:C	8	0.3
(1,50) $(1,5)$	1:A:3:ILE:C	1:A:4:TYR:N	1:A:4:TYR:CA	1:A:4:TYR:C	17	0.3
(1,0) $(1,1)$	1:A:1:MET:C	1:A:2:LEU:N	1:A:2:LEU:CA	1:A:2:LEU:C	16	0.3
(1,82)	1:A:82:TYR:N	1:A:82:TYR:CA	1:A:82:TYR:C	1:A:83:GLU:N	9	0.29
(1,131)	1:A:108:ARG:N	1:A:108:ARG:CA	1:A:108:ARG:C	1:A:109:ASP:N	3	0.29
(1,25)	1:A:19:PRO:C	1:A:20:MET:N	1:A:20:MET:CA	1:A:20:MET:C	10	0.28
(1,20) $(1,9)$	1:A:5:LYS:C	1:A:6:ASP:N	1:A:6:ASP:CA	1:A:6:ASP:C	19	0.27
(1,3) $(1,2)$	1:A:2:LEU:N	1:A:2:LEU:CA	1:A:2:LEU:C	1:A:3:ILE:N	12	0.27
(1,2) $(1,77)$	1:A:78:GLU:C	1:A:79:MET:N	1:A:79:MET:CA	1:A:79:MET:C	2	0.26
(1,77) $(1,57)$	1:A:67:GLY:C	1:A:68:ILE:N	1:A:68:ILE:CA	1:A:68:ILE:C	6	0.25
(1,57) $(1,55)$	1:A:65:GLU:C	1:A:66:ARG:N	1:A:66:ARG:CA	1:A:66:ARG:C	16	0.25
(1,33) $(1,202)$	1:A:152:GLN:C	1:A:153:VAL:N	1:A:153:VAL:CA	1:A:153:VAL:C	7	0.23
(1,202) $(1,184)$	1:A:137:ALA:C	1:A:138:PHE:N	1:A:138:PHE:CA	1:A:138:PHE:C	20	0.23
(1,164) $(1,249)$	1:A:180:LYS:N	1:A:180:LYS:CA	1:A:180:LYS:C	1:A:181:CYS:N	4	0.23
(1,249) $(1,210)$	1:A:156:ILE:C	1:A:150:L15:CA 1:A:157:GLU:N	1:A:150:L15:C 1:A:157:GLU:CA	1:A:157:GLU:C	17	0.22
(1,210) $(1,176)$	1:A:130:ILE:C 1:A:133:PHE:C	1:A:134:LYS:N	1:A:134:LYS:CA	1:A:134:LYS:C	15	0.22
(1,170) $(1,251)$	1:A:135:PHE:C 1:A:181:CYS:N	1:A:134:L15:N 1:A:181:CYS:CA	1:A:134:LYS:CA 1:A:181:CYS:C	1:A:134:L15:C 1:A:182:LEU:N	17	0.22
(1,231) $(1,199)$	1:A:146:GLU:N	1:A:146:GLU:CA	1:A:146:GLU:C	1:A:147:GLY:N	5	0.21
\ ' /	1:A:146:GLU:N 1:A:174:GLU:C	1:A:146:GLU:CA 1:A:175:ALA:N	1:A:146:GLU:C 1:A:175:ALA:CA	1:A:147:GLY:N 1:A:175:ALA:C	3	0.21
(1,239)	1:A:174:GLU:U	1:A:1(0:ALA:IN	1:A:1(0:ALA:UA	1:A:175:ALA:U	1	0.2



Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	$\begin{array}{ c c c c c c c c c c c c c c c c c c c$
(1,220)	1:A:164:THR:C	1:A:165:GLU:N	1:A:165:GLU:CA	1:A:165:GLU:C	1	0.2
(1,4)	1:A:3:ILE:N	1:A:3:ILE:CA	1:A:3:ILE:C	1:A:4:TYR:N	1	0.19
(1,13)	1:A:7:ILE:C	1:A:8:PHE:N	1:A:8:PHE:CA	1:A:8:PHE:C	8	0.19
(1,129)	1:A:105:LYS:C	1:A:106:ASN:N	1:A:106:ASN:CA	1:A:106:ASN:C	5	0.19
(1,57)	1:A:67:GLY:C	1:A:68:ILE:N	1:A:68:ILE:CA	1:A:68:ILE:C	20	0.17
(1,86)	1:A:84:ASP:N	1:A:84:ASP:CA	1:A:84:ASP:C	1:A:85:ALA:N	11	0.16
(1,270)	1:A:133:PHE:N	1:A:133:PHE:CA	1:A:133:PHE:CB	1:A:133:PHE:CG	3	0.15
(1,239)	1:A:174:GLU:C	1:A:175:ALA:N	1:A:175:ALA:CA	1:A:175:ALA:C	7	0.15
(1,180)	1:A:135:ASN:C	1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CA	1:A:136:LEU:C	5	0.15
(1,36)	1:A:28:TYR:N	1:A:28:TYR:CA	1:A:28:TYR:C	1:A:29:GLU:N	20	0.13
(1,28)	1:A:21:LYS:N	1:A:21:LYS:CA	1:A:21:LYS:C	1:A:22:LEU:N	20	0.12
(1,238)	1:A:174:GLU:N	1:A:174:GLU:CA	1:A:174:GLU:C	1:A:175:ALA:N	6	0.12
(1,51)	1:A:36:VAL:C	1:A:37:ARG:N	1:A:37:ARG:CA	1:A:37:ARG:C	7	0.11
(1,242)	1:A:176:ILE:C	1:A:177:ILE:N	1:A:177:ILE:CA	1:A:177:ILE:C	15	0.1
(1,82)	1:A:82:TYR:N	1:A:82:TYR:CA	1:A:82:TYR:C	1:A:83:GLU:N	4	0.09
(1,226)	1:A:168:THR:N	1:A:168:THR:CA	1:A:168:THR:C	1:A:169:LEU:N	14	0.08
(1,75)	1:A:77:VAL:C	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	19	0.07
(1,227)	1:A:168:THR:C	1:A:169:LEU:N	1:A:169:LEU:CA	1:A:169:LEU:C	14	0.07
(1,287)	1:A:88:PHE:CA	1:A:88:PHE:CB	1:A:88:PHE:CG	1:A:88:PHE:CD1	6	0.06
(1,176)	1:A:133:PHE:C	1:A:134:LYS:N	1:A:134:LYS:CA	1:A:134:LYS:C	10	0.06
(1,169)	1:A:130:LYS:N	1:A:130:LYS:CA	1:A:130:LYS:C	1:A:131:ASP:N	18	0.06
(1,129)	1:A:105:LYS:C	1:A:106:ASN:N	1:A:106:ASN:CA	1:A:106:ASN:C	6	0.06
(1,83)	1:A:82:TYR:C	1:A:83:GLU:N	1:A:83:GLU:CA	1:A:83:GLU:C	4	0.05
(1,229)	1:A:169:LEU:C	1:A:170:MET:N	1:A:170:MET:CA	1:A:170:MET:C	15	0.04
(1,287)	1:A:88:PHE:CA	1:A:88:PHE:CB	1:A:88:PHE:CG	1:A:88:PHE:CD1	4	0.03
(1,206)	1:A:154:ALA:C	1:A:155:ILE:N	1:A:155:ILE:CA	1:A:155:ILE:C	19	0.02
(1,85)	1:A:83:GLU:C	1:A:84:ASP:N	1:A:84:ASP:CA	1:A:84:ASP:C	18	0.01
(1,56)	1:A:66:ARG:N	1:A:66:ARG:CA	1:A:66:ARG:C	1:A:67:GLY:N	2	0.01
(1,37)	1:A:28:TYR:C	1:A:29:GLU:N	1:A:29:GLU:CA	1:A:29:GLU:C	20	0.01
(1,221)	1:A:165:GLU:N	1:A:165:GLU:CA	1:A:165:GLU:C	1:A:166:VAL:N	13	0.01

