

wwPDB NMR Structure Validation Summary Report (i)

Feb 25, 2020 – 04:39 PM CST

PDB ID : 2PNG

Title: Type I rat fatty acid synthase acyl carrier protein (ACP) domain

Authors: Ploskon, E.A.; Arthur, C.J.; Evans, S.E.; Williams, C.; Crosby, J.; Crump,

M.P.

Deposited on : 2007-04-24

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)

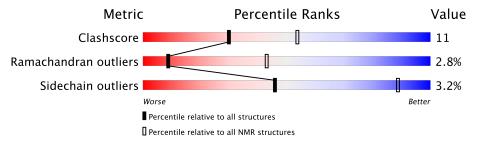
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : 2.6.dev1

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 53%.

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



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

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

Mol	Chain	Length	Quality of chain			
1	٨	0.0				
I	А	89	60%	16%	25%	



2 Ensemble composition and analysis (i)

This entry contains 30 models. Model 1 is the overall representative, medoid model (most similar to other models).

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

Well-defined (core) protein residues						
Well-defined core	Well-defined core Residue range (total) Backbone RMSD (Å) Medoid model					
1	A:8-A:74 (67)	0.52	1			

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

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

The models can be grouped into 3 clusters and 1 single-model cluster was found.

Cluster number	Models
1	1, 2, 3, 4, 5, 6, 8, 9, 10, 12, 17, 19, 20, 21, 22, 25, 26, 27, 28, 29
2	7, 11, 13, 16, 24, 30
3	14, 15, 23
Single-model clusters	18



3 Entry composition (i)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 1386 atoms, of which 708 are hydrogens and 0 are deuteriums.

• Molecule 1 is a protein called Fatty acid synthase (EC 2.3.1.85).

Mol	Chain	Residues		\mathbf{Atoms}				Trace	
1	Λ	90	Total	С	Н	N	О	S	0
1	А	89	1386	416	708	125	135	2	U

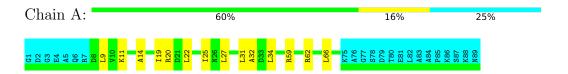


4 Residue-property plots (i)

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: Fatty acid synthase (EC 2.3.1.85)



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

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

• Molecule 1: Fatty acid synthase (EC 2.3.1.85)





5 Refinement protocol and experimental data overview (i)



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

Of the 200 calculated structures, 30 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	1.1
Aria	structure solution	1.2

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)	2png_nmr.cif
Number of chemical shift lists	1
Total number of shifts	980
Number of shifts mapped to atoms	558
Number of unparsed shifts	156
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	266
Assignment completeness (well-defined parts)	53%

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



6 Model quality (i)

6.1 Standard geometry (i)

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

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

Mol	Chain	Chirality	Planarity
1	A	0.0 ± 0.0	0.6 ± 0.7
All	All	0	19

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

All unique planar outliers are listed below. They are sorted by the frequency of occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Group	Models (Total)
1	A	45	ARG	Sidechain	6
1	A	59	ARG	Sidechain	5
1	A	67	ARG	Sidechain	5
1	A	20	ARG	Sidechain	2
1	A	62	ARG	Sidechain	1

6.2 Too-close contacts (i)

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	522	556	554	12±3
All	All	15660	16680	16620	352

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 11.

5 of 122 unique clashes are listed below, sorted by their clash magnitude.



Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	${f Models}$	
Atom-1	Atom-2	Clash(A)	Distance(A)	Worst	Total
1:A:8:ASP:HB2	1:A:11:LYS:HG2	0.89	1.45	13	6
1:A:31:LEU:HD12	1:A:34:LEU:HD12	0.79	1.54	4	9
1:A:32:ALA:HB2	1:A:62:ARG:HG2	0.79	1.53	24	8
1:A:27:LEU:HD22	1:A:67:ARG:HG2	0.72	1.62	10	2
1:A:22:LEU:HG	1:A:27:LEU:HD21	0.72	1.62	14	6

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	67/89 (75%)	56±2 (84±3%)	9±2 (13±3%)	2±1 (3±2%)	9 43
All	All	2010/2670 (75%)	1687 (84%)	266 (13%)	57 (3%)	9 43

5 of 13 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	20	ARG	22
1	A	35	GLY	10
1	A	38	SER	8
1	A	37	ASP	5
1	A	41	GLY	2

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	59/74 (80%)	57±1 (97±2%)	2±1 (3±2%)	46 89		
All	All	1770/2220 (80%)	1713 (97%)	57 (3%)	46 89		



5 of 12 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	59	ARG	18
1	A	11	LYS	10
1	A	63	GLN	9
1	A	66	LEU	8
1	A	34	LEU	3

6.3.3 RNA (i)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

6.5 Carbohydrates (i)

There are no carbohydrates in this entry.

6.6 Ligand geometry (i)

There are no ligands in this entry.

6.7 Other polymers (i)

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues (i)

There are no chain breaks in this entry.



7 Chemical shift validation (i)

The completeness of assignment taking into account all chemical shift lists is 53% for the well-defined parts and 51% for the entire structure.

7.1 Chemical shift list 1

File name: 2png nmr.cif

Chemical shift list name: nef_chemical_shift_list_

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	980
Number of shifts mapped to atoms	558
Number of unparsed shifts	156
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	266
Number of shift outliers (ShiftChecker)	0

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

• Chemical shift has been reported more than once. First 5 (of 156) occurrences are reported below.

Shift ID	Chain	Res	Type Atom		Shift Data			
	Chain	nes	Type	Atom	Value	Uncertainty	Ambiguity	
9	A	4	GLU	HG%	2.208	0.000	1	
17	A	5	ALA	HB%	1.348	0.000	1	
18	A	5	ALA	HB%	1.348	0.000	1	
40	A	7	ARG	HD%	3.121	0.000	1	
42	A	7	ARG	HG%	1.599	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 266) occurrences are reported below.

Chain	Ros	Type	Atom		Shift Dat	a
Chain	rtes	Type	Atom	Value	Shift Dat Uncertainty	Ambiguity
A	9	LEU	HD1%	0.577	0.0	1
A	13	VAL	HG2%	0.986	0.0	1



Continued from previous page...

Chain	Pag	Tuno	Atom		Shift Dat	
Chain	nes	туре	Atom	Value	Uncertainty	Ambiguity
A	60	GLU	HBy	1.915	0.0	2
A	86	LYS	HG%	1.457	0.0	1
A	16	ILE	HG1y	1.224	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
$^{13}\mathrm{C}_{\alpha}$	87	-0.36 ± 0.08	None needed ($< 0.5 \text{ ppm}$)
$^{13}C_{\beta}$	80	-0.10 ± 0.09	None needed ($< 0.5 \text{ ppm}$)
¹³ C′	0		None (insufficient data)
^{15}N	84	-0.18 ± 0.37	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 53%, i.e. 444 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 844. 16 out of 20 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	$^{1}\mathrm{H}$	$^{13}\mathbf{C}$	$^{15}{ m N}$
Backbone	$260/333 \ (78\%)$	128/133 (96%)	67/134 (50%)	65/66 (98%)
Sidechain	184/495 (37%)	29/285 (10%)	152/186 (82%)	3/24 (12%)
Aromatic	0/16 (0%)	0/8 (0%)	0/4 (0%)	0/4 (0%)
Overall	444/844 (53%)	157/426 (37%)	219/324 (68%)	68/94 (72%)

7.1.4 Statistically unusual chemical shifts (i)

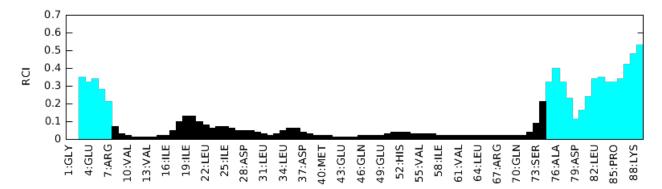
There are no statistically unusual chemical shifts.

7.1.5 Random Coil Index (RCI) plots (i)

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



Random coil index (RCI) for chain A:





8 Distance restraints analysis

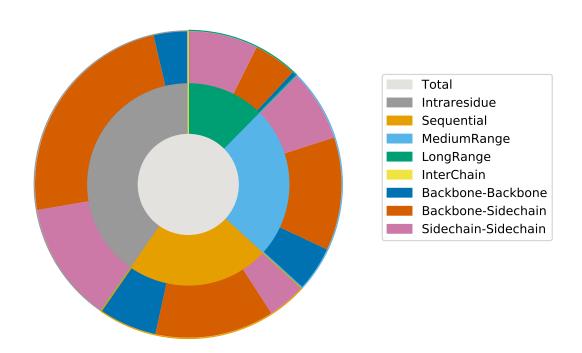
8.1 Distance restraints summary

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

Destusiate tame	D D1/II4)	D C2(II4)	S-S ³ (H ⁴)	Total		
Restraints type	$\mathbf{B}\text{-}\mathbf{B}^1(\mathbf{H}^4)$	$\mathbf{B}\text{-}\mathbf{S}^2(\mathbf{H}^4)$	S-S"(I 1")	$Total(H^4)$	RR^5	$\%^6$
Intraresidue (i-j =0)	63(0)	415(0)	219(0)	697(0)	0.3	40.4
Sequential (i-j =1)	107(0)	217(0)	71(0)	395(0)	0.2	22.9
Medium range ($ i-j >1$ and $ i-j <5$)	83(0)	206(0)	132(0)	421(0)	0.2	24.4
Long range (i-j ≥5)	8(0)	79(0)	127(0)	214(0)	0.1	12.4
Inter chain	0(0)	0(0)	0(0)	0(0)	0.0	0.0
Total	261(0)	917(0)	549(0)	1727(0)	0.8	100.0

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

8.1.1 Pie chart: Distance restraints summary





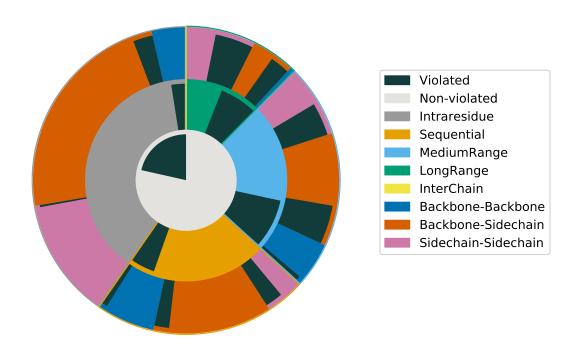
8.2 Distance violations summary

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

Dogtrojeta temo	$B-B^{1}(\%^{4})$	$\mathbf{B} ext{-}\mathbf{S}^2(\%^4)$	$S-S^3(\%^4)$	Total		
Restraints type	D-D (%)	D-3 (%)	S-S'(%)	$Total(\%^4)$	RR^5	$\%^6$
Intraresidue ($ i-j =0$)	2(3.2)	37(8.9)	4(1.8)	43(6.2)	0.0	11.6
Sequential (i-j =1)	12(11.2)	28(12.9)	33(46.5)	73(18.5)	0.0	19.7
Medium range ($ i-j >1$ and $ i-j <5$)	10(12.0)	73(35.4)	62(47.0)	145(34.4)	0.1	39.1
Long range (i-j ≥5)	1(12.5)	37(46.8)	72(56.7)	110(51.4)	0.0	29.6
Inter chain	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0.0	0.0
Total	25(9.6)	175(19.1)	171(31.1)	371(21.5)	0.2	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





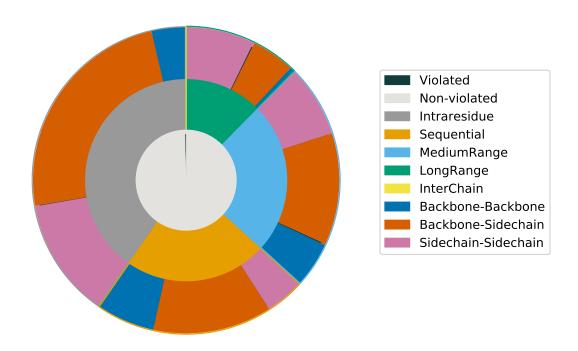
8.3 Consistent distance violations summary

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

Dogtmoints type	$B-B^{1}(\%^{4})$	$\mathbf{B} ext{-}\mathbf{S}^2(\%^4)$	$S-S^3(\%^4)$	Total		
Restraints type	D-D (%)	D-3 (%)	S-S'(%)	$Total(\%^4)$	RR^5	$\%^6$
Intraresidue (i-j =0)	1(1.6)	0(0.0)	1(0.5)	2(0.3)	0.0	33.3
Sequential (i-j =1)	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0.0	0.0
Medium range ($ i-j >1$ and $ i-j <5$)	0(0.0)	2(1.0)	0(0.0)	2(0.5)	0.0	33.3
Long range (i-j ≥5)	0(0.0)	0(0.0)	2(1.6)	2(0.9)	0.0	33.3
Inter chain	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0.0	0.0
Total	1(0.4)	2(0.2)	3(0.5)	6(0.3)	0.0	100.0

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

8.3.1 Pie-chart: Consistent distance violations





8.4 Residual distance violations

Violation are counted in different bin sizes and listed below

Range (Å)	No. of violated restraints per model	Max violation (Å)
0-0.2	64.9	0.2
0.2-0.5	7.3	0.5
0.5-1.0	6.7	1.0
1.0-2.0	5.3	1.99
2.0-5.0	0.1	3.01
5.0<	None	None

8.5 Distance violations in ensemble

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

I	No. of	f violat	ted re	strair	$\overline{ ext{its}}$	NI. Codalata I I la		
IR^1	SQ^2	MR^3	LR^4	IC^5	Total	No. of violated models		
19	25	44	23	0	111	1		
8	8	19	18	0	53	2		
3	7	12	8	0	30	3		
0	2	7	8	0	17	4		
1	2	5	8	0	16	5		
2	2	8	6	0	18	6		
1	2	2	2	0	7	7		
0	1	5	9	0	15	8		
1	2	7	1	0	11	9		
1	0	2	3	0	6	10		
0	0	3	2	0	5	11		
1	3	3	3	0	10	12		
0	1	0	2	0	3	13		
0	2	1	2	0	5	14		
0	2	6	2	0	10	15		
1	0	1	4	0	6	16		
0	2	1	1	0	4	17		
1	2	1	1	0	5	18		
0	1	1	1	0	3	19		
1	1	2	0	0	4	20		
0	0	2	1	0	3	21		
0	1	2	1	0	4	22		
0	1	1	1	0	3	23		
1	2	1	0	0	4	24		
0	1	1	1	0	3	25		
0	0	4	0	0	4	26		

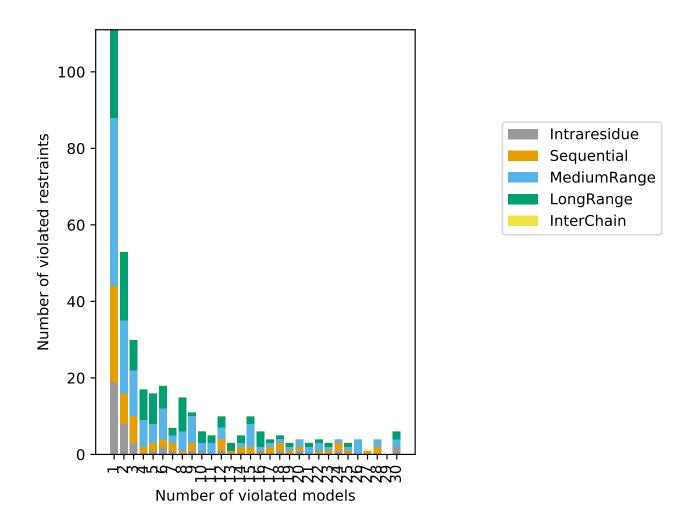


Continued from previous page...

I	No. of	f violat	ted re	strair	nts	No. of violated models
IR^1	SQ^2	MR^3	LR^4	$ IC^5 $	Total	No. of violated models
0	1	0	0	0	1	27
0	2	2	0	0	4	28
0	0	0	0	0	0	29
2	0	2	2	0	6	30

 $^{^1}$ 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



654 intraresidue restraints, 322 sequential restraints, 276 medium range restraints,104 long range restraints and 0 inter chain restraints are not violated. There are totally 1356 restrains not violated in any of the models



8.6 Violations in each model

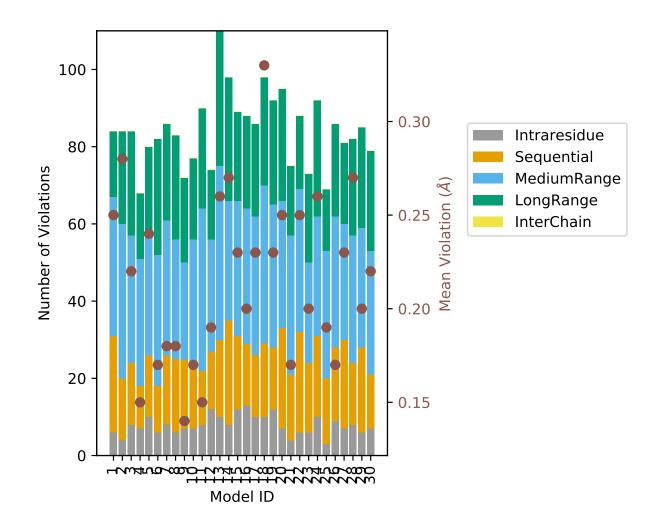
The following table lists the violation count in each model in the ensemble

N/ 1 1 IID		N	o. of v	iolati	ons		3.5	7 (Å)
Model ID	IR^1	SQ^2	MR^3	LR^4	IC^5	Total	Mean (Å)	Max (Å)
1	6	25	36	17	0	84	0.25	1.58
2	4	16	40	24	0	84	0.28	3.01
3	8	16	33	27	0	84	0.22	1.56
4	7	11	33	17	0	68	0.15	1.72
5	10	16	31	23	0	80	0.24	1.62
6	6	12	34	30	0	82	0.17	1.56
7	8	18	35	25	0	86	0.18	1.5
8	6	19	31	27	0	83	0.18	1.62
9	7	18	25	22	0	72	0.14	1.64
10	7	17	32	21	0	77	0.17	1.51
11	8	14	42	26	0	90	0.15	1.62
12	12	15	29	18	0	74	0.19	1.52
13	10	20	45	35	0	110	0.26	1.87
14	8	27	31	32	0	98	0.27	2.01
15	12	19	35	23	0	89	0.23	1.65
16	13	16	35	24	0	88	0.2	1.66
17	10	16	36	24	0	86	0.23	1.89
18	10	19	41	28	0	98	0.33	1.88
19	12	16	37	27	0	92	0.23	1.72
20	7	26	33	29	0	95	0.25	1.51
21	4	17	36	18	0	75	0.17	1.82
22	6	26	37	19	0	88	0.25	1.67
23	6	18	26	23	0	73	0.2	1.71
24	10	21	31	30	0	92	0.26	2.1
25	3	17	33	16	0	69	0.19	1.59
26	9	19	34	24	0	86	0.17	1.96
27	7	23	30	21	0	81	0.23	1.98
28	8	16	33	25	0	82	0.27	1.72
29	6	22	31	26	0	85	0.2	1.72
30	7	14	32	26	0	79	0.22	1.57

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



8.6.1 Bar graph: Violations in each model

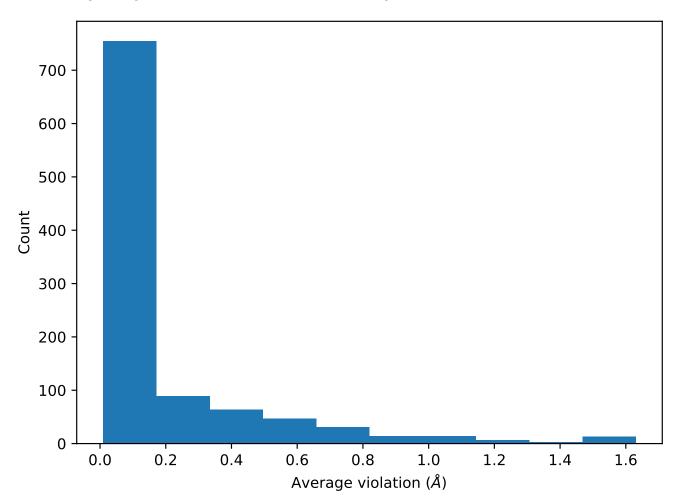




8.7 Most violated distance restraints

8.7.1 Histogram: Distribution of mean distance violation

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



8.7.2 Table: Most violated distance restraints

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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,484)	1:A:24:GLY:HA2	1:A:24:GLY:HA2	30	1.5	1.5
(1,323)	1:A:45:ARG:HB2	1:A:45:ARG:HG2	30	0.2	0.21
(1,177)	1:A:22:LEU:HD11	1:A:24:GLY:HA2	30	0.22	0.7
(1,177)	1:A:22:LEU:HD12	1:A:24:GLY:HA2	30	0.22	0.7
(1,177)	1:A:22:LEU:HD13	1:A:24:GLY:HA2	30	0.22	0.7
(1,1581)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:70:GLN:HG3	30	1.46	1.69



Continued from previous page...

(1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 30 1.46 1.69 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 30 0.08 0.14 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 30 0.08 0.14 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 30 0.08 0.14 (1,1271) 1:A:62:ARG:HA 1:A:59:ILE:HB12 30 0.08 0.14 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 28 0.11 0.17 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 28 0.11 0.17 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 28 0.11 0.17 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 28 0.11 0.17 (1,813) 1:A:66:LEU:HD11 1:A:65:THR:HA 28 0.06 0.13 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD12 1:A:65:THR:HA 28 0.07 0.47 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD12 1:A:65:THR:HA 28 0.07 <td< th=""><th>Key</th><th>Atom-1</th><th>Atom-2</th><th>Models</th><th>Mean (Å)</th><th>Max (Å)</th></td<>	Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 30 0.08 0.14 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:19:ILE:HB 30 0.08 0.14 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 30 0.08 0.14 (1,1271) 1:A:62:ARG:HA 1:A:58:ILE:HG12 30 0.86 1.34 (1,1271) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 28 0.11 0.17 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 28 0.11 0.17 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 28 0.11 0.17 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 28 0.11 0.17 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 28 0.01 0.17 (1,131) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 28 0.06 0.13 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD11 1:A:65:THR:HA 28 0.07 0.47 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD12 1:A:65:THR:HA 28 0.07 0.47 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD13 1:A:65:THR:HA 28 0.07 0.47 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG11 28 0.03 0.06 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG11 28 0.03 0.06 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG11 28 0.03 0.06 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG11 28 0.03 0.06 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG11 28 0.03 0.03 0.06 ((1,1581)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:70:GLN:HG3	30	1.46	1.69
(1,1484) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:19:ILE:HB 30 0.08 0.14 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 30 0.08 0.14 (1,1271) 1:A:62:ARG:HA 1:A:58:ILE:HG12 30 0.86 1.34 (1,1271) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:IEU:H 28 0.11 0.17 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:IEU:H 28 0.11 0.17 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:IEU:H 28 0.11 0.17 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:IEU:H 28 0.11 0.17 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 28 0.06 0.13 (1,1576) 1:A:66:IEU:HD11 1:A:65:THR:HA 28 0.07 0.47 (1,1576) 1:A:66:IEU:HD11 1:A:65:THR:HA 28 0.07 0.47 (1,1576) 1:A:66:IEU:HD12 1:A:65:THR:HA 28 0.07 0.47 (1,1576) 1:A:66:IEU:HD13 1:A:65:THR:HA 28 0.07 0.47 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG11 28 0.03 0.06 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG12 28 0.03 0.06 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG12 28 0.03 0.06 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG11 28 0.03 0.06 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG11 28 0.03 0.00 0.	(1,1581)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:70:GLN:HG3	30	1.46	1.69
(1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 30 0.08 0.14 (1,1271) 1:A:62:ARG:HA 1:A:58:ILE:HG12 30 0.86 1.34 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 28 0.11 0.17 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 28 0.11 0.17 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 28 0.11 0.17 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 28 0.10 0.17 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 28 0.06 0.13 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD11 1:A:65:THR:HA 28 0.07 0.47 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD12 1:A:65:THR:HA 28 0.07 0.47 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD12 1:A:65:THR:HA 28 0.07 0.47 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD13 1:A:65:THR:HA 28 0.07 0.47 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD13 1:A:65:THR:HA 28 0.07 0.47 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG11 28 0.03 0.06 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG11 28 0.03 0.06 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG12 28 0.03 0.06 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 28 0.03 0.06 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 28 0.03 0.06 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG11 28 0.03 0.06 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG11 28 0.03 0.06 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG11 28 0.03 0.06 (1	(1,1484)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:19:ILE:HB	30	0.08	0.14
(1,127)	(1,1484)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:19:ILE:HB	30	0.08	0.14
(1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 28 0.11 0.17 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 28 0.11 0.17 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 28 0.11 0.17 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 28 0.06 0.13 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD11 1:A:65:THR:HA 28 0.07 0.47 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD13 1:A:65:THR:HA 28 0.07 0.47 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD13 1:A:65:THR:HA 28 0.07 0.47 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG11 28 0.03 0.06 (1,1481) 1:A:14:ALA:ALB1 1:A:13:VAL:HG11 28 0.03 0.06 (1,1481) 1:A:14:ALA:ALB2 1:A:13:VAL:HG11 28 0.03 0.06 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG11 28 0.03 0.06 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG12 28 0.03	(1,1484)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:19:ILE:HB	30	0.08	0.14
(1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 28 0.11 0.17 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 28 0.11 0.17 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 28 0.06 0.13 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD11 1:A:65:THR:HA 28 0.07 0.47 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD13 1:A:65:THR:HA 28 0.07 0.47 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD13 1:A:65:THR:HA 28 0.07 0.47 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG11 28 0.03 0.06 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG12 28 0.03 0.06 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 28 0.03 0.06 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG11 28 0.03 0.06 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG13 28 0.03 0.06 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG13 28 0.03	(1,1271)	1:A:62:ARG:HA	1:A:58:ILE:HG12	30	0.86	1.34
(1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 28 0.11 0.17 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 28 0.06 0.13 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD11 1:A:65:THR:HA 28 0.07 0.47 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD12 1:A:65:THR:HA 28 0.07 0.47 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD13 1:A:65:THR:HA 28 0.07 0.47 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG11 28 0.03 0.06 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG12 28 0.03 0.06 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 28 0.03 0.06 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG11 28 0.03 0.06 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG11 28 0.03 0.06 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG11 28 0.03 0.06 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG11 28 0.03 <td>(1,813)</td> <td>1:A:65:THR:HG21</td> <td>1:A:69:LEU:H</td> <td>28</td> <td>0.11</td> <td>0.17</td>	(1,813)	1:A:65:THR:HG21	1:A:69:LEU:H	28	0.11	0.17
(1,213)	(1,813)	1:A:65:THR:HG22	1:A:69:LEU:H	28	0.11	0.17
(1,1576) 1:A:66:LEU:HD11 1:A:65:THR:HA 28 0.07 0.47 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD12 1:A:65:THR:HA 28 0.07 0.47 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD13 1:A:65:THR:HA 28 0.07 0.47 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG11 28 0.03 0.06 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG12 28 0.03 0.06 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG13 28 0.03 0.06 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG11 28 0.03 0.06 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG12 28 0.03 0.06 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG12 28 0.03 0.06 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG11 28 0.03 0.06 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG12 28 0.03 0.06 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG12 28 0	(1,813)	1:A:65:THR:HG23	1:A:69:LEU:H	28	0.11	0.17
(1,1576) 1:A:66:LEU:HD12 1:A:65:THR:HA 28 0.07 0.47 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD13 1:A:65:THR:HA 28 0.07 0.47 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG11 28 0.03 0.06 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG12 28 0.03 0.06 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 28 0.03 0.06 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG11 28 0.03 0.06 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG11 28 0.03 0.06 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG12 28 0.03 0.06 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG11 28 0.03 0.06 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG12 28 0.03 0.06 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG12 28 0.03 0.06 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG12 28	(1,213)	1:A:30:SER:HB3	1:A:33:ASP:HA	28	0.06	0.13
(1,1576) 1:A:66:LEU:HD13 1:A:65:THR:HA 28 0.07 0.47 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG11 28 0.03 0.06 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG12 28 0.03 0.06 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG13 28 0.03 0.06 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG11 28 0.03 0.06 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG12 28 0.03 0.06 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG12 28 0.03 0.06 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG11 28 0.03 0.06 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG11 28 0.03 0.06 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG12 28 0.03 0.06 (1,1481) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 27 0.04 0.08 (1,475) 1:A:63:GLEU:HD21 1:A:20:ARG:HB2 26 0.17	(1,1576)	1:A:66:LEU:HD11	1:A:65:THR:HA	28	0.07	0.47
(1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG11 28 0.03 0.06 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG12 28 0.03 0.06 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG13 28 0.03 0.06 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG11 28 0.03 0.06 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG12 28 0.03 0.06 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 28 0.03 0.06 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG13 28 0.03 0.06 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG12 28 0.03 0.06 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG13 28 0.03 0.06 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG13 28 0.03 0.06 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG13 28 0.03 0.06 (1,1481) 1:A:24:AL:HB3 1:A:13:VAL:HG13 28 <th< td=""><td>(1,1576)</td><td>1:A:66:LEU:HD12</td><td>1:A:65:THR:HA</td><td>28</td><td>0.07</td><td>0.47</td></th<>	(1,1576)	1:A:66:LEU:HD12	1:A:65:THR:HA	28	0.07	0.47
(1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG12 28 0.03 0.06 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG13 28 0.03 0.06 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG11 28 0.03 0.06 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG12 28 0.03 0.06 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 28 0.03 0.06 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG11 28 0.03 0.06 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG12 28 0.03 0.06 (1,14181) 1:A:2:ALE:HB13 1:A:13:VAL:HG12 28 0.03 0.06 (1,1710) 1:A:3:A:LE:HB13 1:A:A:14:VAL:HG13 28	(1,1576)	1:A:66:LEU:HD13	1:A:65:THR:HA	28	0.07	0.47
(1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG13 28 0.03 0.06 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG11 28 0.03 0.06 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG12 28 0.03 0.06 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 28 0.03 0.06 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG11 28 0.03 0.06 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG12 28 0.03 0.06 (1,1475) 1:A:2:ALE:HB13 1:A:13:VAL:HG12 28 0.03 0.06 (1,475) 1:A:32:LEU:HD23 1:A:20:ARG:HB2 26 <th< td=""><td>(1,1481)</td><td>1:A:14:ALA:HB1</td><td>1:A:13:VAL:HG11</td><td>28</td><td>0.03</td><td>0.06</td></th<>	(1,1481)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:13:VAL:HG11	28	0.03	0.06
(1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG11 28 0.03 0.06 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG12 28 0.03 0.06 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 28 0.03 0.06 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG11 28 0.03 0.06 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG12 28 0.03 0.06 (1,1481) 1:A:4:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG13 28 0.03 0.06 (1,1481) 1:A:4:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG13 28 0.03 0.06 (1,1481) 1:A:4:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG13 28 0.03 0.06 (1,1481) 1:A:4:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG12 28 0.03 0.06 (1,1481) 1:A:4:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG11 28 0.03 0.06 (1,1471) 1:A:6:3:GLN:H 1:A:6:13:VAL:HG12 28 0.03 0.06 (1,475) 1:A:2:2:LEU:HD21 1:A:6:2:LEU:HB2 26 0	(1,1481)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:13:VAL:HG12	28	0.03	0.06
(1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG12 28 0.03 0.06 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 28 0.03 0.06 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG11 28 0.03 0.06 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG12 28 0.03 0.06 (1,1481) 1:A:4:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG13 28 0.03 0.06 (1,1710) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 27 0.04 0.08 (1,475) 1:A:22:LEU:HD21 1:A:20:ARG:HB2 26 0.17 0.5 (1,475) 1:A:22:LEU:HD22 1:A:20:ARG:HB2 26 0.17 0.5 (1,475) 1:A:32:ALA:HA 1:A:20:ARG:HB2 26 0.17 0.5 (1,475) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 26 0.18 0.74 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 26 0.18 0.74 (1,1498) 1:A:67:ARG:HD2 1:A:69:LEU:H 26 0.05 <	(1,1481)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:13:VAL:HG13	28	0.03	0.06
(1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 28 0.03 0.06 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG11 28 0.03 0.06 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG12 28 0.03 0.06 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG13 28 0.03 0.06 (1,1710) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 27 0.04 0.08 (1,475) 1:A:22:LEU:HD21 1:A:20:ARG:HB2 26 0.17 0.5 (1,475) 1:A:22:LEU:HD22 1:A:20:ARG:HB2 26 0.17 0.5 (1,475) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 26 0.18 0.74 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 26 0.18 0.74 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 26 0.18 0.74 (1,1498) 1:A:67:ARG:HD2 1:A:69:LEU:H 26 0.05 0.08 (1,1017) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:31:LEU:HA 26 0.09	(1,1481)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:13:VAL:HG11	28	0.03	0.06
(1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG11 28 0.03 0.06 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG12 28 0.03 0.06 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG13 28 0.03 0.06 (1,1710) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 27 0.04 0.08 (1,475) 1:A:62:LEU:HD21 1:A:20:ARG:HB2 26 0.17 0.5 (1,475) 1:A:22:LEU:HD22 1:A:20:ARG:HB2 26 0.17 0.5 (1,475) 1:A:22:LEU:HD23 1:A:20:ARG:HB2 26 0.17 0.5 (1,475) 1:A:32:ALA:HA 1:A:30:ARG:HB2 26 0.17 0.5 (1,475) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 26 0.18 0.74 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 26 0.18 0.74 (1,1498) 1:A:67:ARG:HD2 1:A:69:LEU:H 26 0.05 0.08 (1,1017) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:31:LEU:HA 26 0.09 <td< td=""><td>(1,1481)</td><td>1:A:14:ALA:HB2</td><td>1:A:13:VAL:HG12</td><td>28</td><td>0.03</td><td>0.06</td></td<>	(1,1481)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:13:VAL:HG12	28	0.03	0.06
(1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG12 28 0.03 0.06 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG13 28 0.03 0.06 (1,1710) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 27 0.04 0.08 (1,475) 1:A:22:LEU:HD21 1:A:20:ARG:HB2 26 0.17 0.5 (1,475) 1:A:22:LEU:HD22 1:A:20:ARG:HB2 26 0.17 0.5 (1,475) 1:A:22:LEU:HD23 1:A:20:ARG:HB2 26 0.17 0.5 (1,475) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 26 0.18 0.74 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 26 0.18 0.74 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 26 0.18 0.74 (1,1498) 1:A:67:ARG:HD2 1:A:69:LEU:H 26 0.05 0.08 (1,1017) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:31:LEU:HA 26 0.09 0.13 (1,1017) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:31:LEU:HA 26 0.09 <t< td=""><td>(1,1481)</td><td>1:A:14:ALA:HB2</td><td>1:A:13:VAL:HG13</td><td>28</td><td>0.03</td><td>0.06</td></t<>	(1,1481)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:13:VAL:HG13	28	0.03	0.06
(1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG13 28 0.03 0.06 (1,1710) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 27 0.04 0.08 (1,475) 1:A:22:LEU:HD21 1:A:20:ARG:HB2 26 0.17 0.5 (1,475) 1:A:22:LEU:HD22 1:A:20:ARG:HB2 26 0.17 0.5 (1,475) 1:A:22:LEU:HD23 1:A:20:ARG:HB2 26 0.17 0.5 (1,475) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 26 0.18 0.74 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 26 0.18 0.74 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 26 0.18 0.74 (1,1498) 1:A:67:ARG:HD2 1:A:69:LEU:H 26 0.05 0.08 (1,1017) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:31:LEU:HA 26 0.09 0.13 (1,1017) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:31:LEU:HA 26 0.09 0.13 (1,972) 1:A:27:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 25 0.37 <t< td=""><td>(1,1481)</td><td>1:A:14:ALA:HB3</td><td>1:A:13:VAL:HG11</td><td>28</td><td>0.03</td><td>0.06</td></t<>	(1,1481)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:13:VAL:HG11	28	0.03	0.06
(1,1710) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 27 0.04 0.08 (1,475) 1:A:22:LEU:HD21 1:A:20:ARG:HB2 26 0.17 0.5 (1,475) 1:A:22:LEU:HD22 1:A:20:ARG:HB2 26 0.17 0.5 (1,475) 1:A:22:LEU:HD23 1:A:20:ARG:HB2 26 0.17 0.5 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 26 0.18 0.74 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 26 0.18 0.74 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 26 0.18 0.74 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:69:LEU:H 26 0.05 0.08 (1,1498) 1:A:67:ARG:HD2 1:A:69:LEU:H 26 0.05 0.08 (1,1017) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:31:LEU:HA 26 0.09 0.13 (1,1017) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:31:LEU:HA 26 0.09 0.13 (1,972) 1:A:27:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 25 0.37 1.3	(1,1481)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:13:VAL:HG12	28	0.03	0.06
(1,475) 1:A:22:LEU:HD21 1:A:20:ARG:HB2 26 0.17 0.5 (1,475) 1:A:22:LEU:HD22 1:A:20:ARG:HB2 26 0.17 0.5 (1,475) 1:A:22:LEU:HD23 1:A:20:ARG:HB2 26 0.17 0.5 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 26 0.18 0.74 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 26 0.18 0.74 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 26 0.18 0.74 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:69:LEU:H 26 0.05 0.08 (1,10498) 1:A:67:ARG:HD2 1:A:69:LEU:H 26 0.05 0.08 (1,1017) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:31:LEU:HA 26 0.09 0.13 (1,1017) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:31:LEU:HA 26 0.09 0.13 (1,972) 1:A:27:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 25 0.37 1.36 (1,972) 1:A:27:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 25 0.37 <	(1,1481)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:13:VAL:HG13	28	0.03	0.06
(1,475) 1:A:22:LEU:HD22 1:A:20:ARG:HB2 26 0.17 0.5 (1,475) 1:A:22:LEU:HD23 1:A:20:ARG:HB2 26 0.17 0.5 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 26 0.18 0.74 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 26 0.18 0.74 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 26 0.18 0.74 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:69:LEU:HD13 26 0.18 0.74 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:69:LEU:HD13 26 0.18 0.74 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:69:LEU:HD13 26 0.18 0.74 (1,1498) 1:A:67:ARG:HD2 1:A:69:LEU:H 26 0.05 0.08 (1,017) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:31:LEU:HA 26 0.09 0.13 (1,1017) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:31:LEU:HA 26 0.09 0.13 (1,972) 1:A:27:LEU:HD21 1:A:70:GLN:HE21 25 0.37 <t< td=""><td>(1,1710)</td><td>1:A:63:GLN:H</td><td>1:A:64:LEU:H</td><td>27</td><td>0.04</td><td>0.08</td></t<>	(1,1710)	1:A:63:GLN:H	1:A:64:LEU:H	27	0.04	0.08
(1,475) 1:A:22:LEU:HD23 1:A:20:ARG:HB2 26 0.17 0.5 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 26 0.18 0.74 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 26 0.18 0.74 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 26 0.18 0.74 (1,1498) 1:A:67:ARG:HD2 1:A:69:LEU:H 26 0.05 0.08 (1,1017) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:31:LEU:HA 26 0.09 0.13 (1,1017) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:31:LEU:HA 26 0.09 0.13 (1,1017) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 25 0.37 1.36 (1,972) 1:A:27:LEU:HD21 1:A:70:GLN:HE21 25 0.37 1.36 (1,972) 1:A:27:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 25 0.37 1.36 (1,972) 1:A:24:VAL:HG11 1:A:42:VAL:HA 25 0.04 0.11 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG12 1:A:42:VAL:HA 25 0.04	(1,475)	1:A:22:LEU:HD21	1:A:20:ARG:HB2	26	0.17	0.5
(1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 26 0.18 0.74 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 26 0.18 0.74 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 26 0.18 0.74 (1,1498) 1:A:67:ARG:HD2 1:A:69:LEU:H 26 0.05 0.08 (1,1017) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:31:LEU:HA 26 0.09 0.13 (1,1017) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:31:LEU:HA 26 0.09 0.13 (1,1017) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:31:LEU:HA 26 0.09 0.13 (1,972) 1:A:27:LEU:HD21 1:A:70:GLN:HE21 25 0.37 1.36 (1,972) 1:A:27:LEU:HD22 1:A:70:GLN:HE21 25 0.37 1.36 (1,972) 1:A:42:VAL:HD23 1:A:70:GLN:HE21 25 0.37 1.36 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG11 1:A:42:VAL:HA 25 0.04 0.11 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG13 1:A:42:VAL:HA 25 0.04	(1,475)	1:A:22:LEU:HD22	1:A:20:ARG:HB2	26	0.17	0.5
(1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 26 0.18 0.74 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 26 0.18 0.74 (1,1498) 1:A:67:ARG:HD2 1:A:69:LEU:H 26 0.05 0.08 (1,1017) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:31:LEU:HA 26 0.09 0.13 (1,1017) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:31:LEU:HA 26 0.09 0.13 (1,972) 1:A:27:LEU:HD23 1:A:31:LEU:HA 26 0.09 0.13 (1,972) 1:A:27:LEU:HD21 1:A:70:GLN:HE21 25 0.37 1.36 (1,972) 1:A:27:LEU:HD22 1:A:70:GLN:HE21 25 0.37 1.36 (1,972) 1:A:27:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 25 0.37 1.36 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG11 1:A:42:VAL:HA 25 0.04 0.11 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG12 1:A:42:VAL:HA 25 0.04 0.11 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HB2 25 0.05	(1,475)	1:A:22:LEU:HD23	1:A:20:ARG:HB2	26	0.17	0.5
(1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 26 0.18 0.74 (1,1498) 1:A:67:ARG:HD2 1:A:69:LEU:H 26 0.05 0.08 (1,1017) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:31:LEU:HA 26 0.09 0.13 (1,1017) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:31:LEU:HA 26 0.09 0.13 (1,1017) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:31:LEU:HA 26 0.09 0.13 (1,972) 1:A:27:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 25 0.37 1.36 (1,972) 1:A:27:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 25 0.37 1.36 (1,972) 1:A:27:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 25 0.37 1.36 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG11 1:A:42:VAL:HA 25 0.04 0.11 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG12 1:A:42:VAL:HA 25 0.04 0.11 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG13 1:A:42:VAL:HA 25 0.04 0.11 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HB2 25 0.05	(1,264)	1:A:32:ALA:HA	1:A:34:LEU:HD11	26	0.18	0.74
(1,1498) 1:A:67:ARG:HD2 1:A:69:LEU:H 26 0.05 0.08 (1,1017) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:31:LEU:HA 26 0.09 0.13 (1,1017) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:31:LEU:HA 26 0.09 0.13 (1,1017) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:31:LEU:HA 26 0.09 0.13 (1,972) 1:A:27:LEU:HD21 1:A:70:GLN:HE21 25 0.37 1.36 (1,972) 1:A:27:LEU:HD22 1:A:70:GLN:HE21 25 0.37 1.36 (1,972) 1:A:27:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 25 0.37 1.36 (1,972) 1:A:44:VAL:HG13 1:A:42:VAL:HA 25 0.04 0.11 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG12 1:A:42:VAL:HA 25 0.04 0.11 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG13 1:A:42:VAL:HA 25 0.04 0.11 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HB2 25 0.05 0.35 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HG2 25 0.05	(1,264)	1:A:32:ALA:HA	1:A:34:LEU:HD12	26	0.18	0.74
(1,1017) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:31:LEU:HA 26 0.09 0.13 (1,1017) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:31:LEU:HA 26 0.09 0.13 (1,1017) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:31:LEU:HA 26 0.09 0.13 (1,972) 1:A:27:LEU:HD21 1:A:70:GLN:HE21 25 0.37 1.36 (1,972) 1:A:27:LEU:HD22 1:A:70:GLN:HE21 25 0.37 1.36 (1,972) 1:A:27:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 25 0.37 1.36 (1,972) 1:A:42:VAL:HG13 1:A:42:VAL:HA 25 0.04 0.11 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG11 1:A:42:VAL:HA 25 0.04 0.11 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG13 1:A:42:VAL:HA 25 0.04 0.11 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HB2 25 0.05 0.35 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HG2 25 0.05 0.35	(1,264)	1:A:32:ALA:HA	1:A:34:LEU:HD13	26	0.18	0.74
(1,1017) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:31:LEU:HA 26 0.09 0.13 (1,1017) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:31:LEU:HA 26 0.09 0.13 (1,972) 1:A:27:LEU:HD21 1:A:70:GLN:HE21 25 0.37 1.36 (1,972) 1:A:27:LEU:HD22 1:A:70:GLN:HE21 25 0.37 1.36 (1,972) 1:A:27:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 25 0.37 1.36 (1,972) 1:A:42:VAL:HG11 1:A:42:VAL:HA 25 0.04 0.11 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG11 1:A:42:VAL:HA 25 0.04 0.11 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG12 1:A:42:VAL:HA 25 0.04 0.11 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG13 1:A:42:VAL:HA 25 0.04 0.11 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HB2 25 0.05 0.35 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HG2 25 0.05 0.35	(1,1498)	1:A:67:ARG:HD2	1:A:69:LEU:H	26	0.05	0.08
(1,1017) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:31:LEU:HA 26 0.09 0.13 (1,972) 1:A:27:LEU:HD21 1:A:70:GLN:HE21 25 0.37 1.36 (1,972) 1:A:27:LEU:HD22 1:A:70:GLN:HE21 25 0.37 1.36 (1,972) 1:A:27:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 25 0.37 1.36 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG11 1:A:42:VAL:HA 25 0.04 0.11 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG12 1:A:42:VAL:HA 25 0.04 0.11 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG13 1:A:42:VAL:HA 25 0.04 0.11 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HB2 25 0.05 0.35 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HG2 25 0.05 0.35	(1,1017)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:31:LEU:HA	26	0.09	0.13
(1,972) 1:A:27:LEU:HD21 1:A:70:GLN:HE21 25 0.37 1.36 (1,972) 1:A:27:LEU:HD22 1:A:70:GLN:HE21 25 0.37 1.36 (1,972) 1:A:27:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 25 0.37 1.36 (1,972) 1:A:42:VAL:HG11 1:A:42:VAL:HA 25 0.04 0.11 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG11 1:A:42:VAL:HA 25 0.04 0.11 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG13 1:A:42:VAL:HA 25 0.04 0.11 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HB2 25 0.05 0.35 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HG2 25 0.05 0.35	(1,1017)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:31:LEU:HA	26	0.09	0.13
(1,972) 1:A:27:LEU:HD22 1:A:70:GLN:HE21 25 0.37 1.36 (1,972) 1:A:27:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 25 0.37 1.36 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG11 1:A:42:VAL:HA 25 0.04 0.11 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG12 1:A:42:VAL:HA 25 0.04 0.11 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG13 1:A:42:VAL:HA 25 0.04 0.11 (1,1546) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HB2 25 0.05 0.35 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HG2 25 0.05 0.35	(1,1017)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:31:LEU:HA	26	0.09	0.13
(1,972) 1:A:27:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 25 0.37 1.36 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG11 1:A:42:VAL:HA 25 0.04 0.11 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG12 1:A:42:VAL:HA 25 0.04 0.11 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG13 1:A:42:VAL:HA 25 0.04 0.11 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HB2 25 0.05 0.35 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HG2 25 0.05 0.35	(1,972)	1:A:27:LEU:HD21	1:A:70:GLN:HE21	25	0.37	1.36
(1,1546) 1:A:44:VAL:HG11 1:A:42:VAL:HA 25 0.04 0.11 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG12 1:A:42:VAL:HA 25 0.04 0.11 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG13 1:A:42:VAL:HA 25 0.04 0.11 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HB2 25 0.05 0.35 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HG2 25 0.05 0.35	(1,972)	1:A:27:LEU:HD22	1:A:70:GLN:HE21	25	0.37	1.36
(1,1546) 1:A:44:VAL:HG11 1:A:42:VAL:HA 25 0.04 0.11 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG12 1:A:42:VAL:HA 25 0.04 0.11 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG13 1:A:42:VAL:HA 25 0.04 0.11 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HB2 25 0.05 0.35 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HG2 25 0.05 0.35	(1,972)	1:A:27:LEU:HD23	1:A:70:GLN:HE21	25	0.37	1.36
(1,1546) 1:A:44:VAL:HG13 1:A:42:VAL:HA 25 0.04 0.11 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HB2 25 0.05 0.35 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HG2 25 0.05 0.35		1:A:44:VAL:HG11	1:A:42:VAL:HA	25	0.04	0.11
(1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HB2 25 0.05 0.35 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HG2 25 0.05 0.35	(1,1546)	1:A:44:VAL:HG12	1:A:42:VAL:HA	25	0.04	0.11
(1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HG2 25 0.05 0.35	(1,1546)	1:A:44:VAL:HG13	1:A:42:VAL:HA	25	0.04	0.11
	(1,1183)	1:A:56:LEU:HB2	1:A:57:PRO:HB2	25	0.05	0.35
(1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD11 24 0.17 1.25	(1,1183)	1:A:56:LEU:HB2	1:A:57:PRO:HG2	25	0.05	0.35
	(1,461)	1:A:47:ILE:HG12	1:A:48:LEU:HD11	24	0.17	1.25



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,461)	1:A:47:ILE:HG12	1:A:48:LEU:HD12	24	0.17	1.25
(1,461)	1:A:47:ILE:HG12	1:A:48:LEU:HD13	24	0.17	1.25
(1,373)	1:A:19:ILE:HB	1:A:19:ILE:H	24	0.02	0.05
(1,1402)	1:A:42:VAL:HA	1:A:45:ARG:HB3	24	0.05	0.11
(1,1020)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:33:ASP:HB2	24	1.01	2.1
(1,1020)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:33:ASP:HB2	24	1.01	2.1
(1,1020)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:33:ASP:HB2	24	1.01	2.1
(1,315)	1:A:40:MET:HB3	1:A:39:LEU:HD21	23	0.16	1.05
(1,315)	1:A:40:MET:HB3	1:A:39:LEU:HD22	23	0.16	1.05
(1,315)	1:A:40:MET:HB3	1:A:39:LEU:HD23	23	0.16	1.05
(1,1589)	1:A:20:ARG:HG3	1:A:67:ARG:HE	23	0.83	1.88
(1,1523)	1:A:73:SER:HA	1:A:70:GLN:H	23	0.06	0.11
(1,391)	1:A:19:ILE:HG21	1:A:21:ASP:HA	22	0.06	0.12
(1,391)	1:A:19:ILE:HG22	1:A:21:ASP:HA	22	0.06	0.12
(1,391)	1:A:19:ILE:HG23	1:A:21:ASP:HA	22	0.06	0.12
(1,239)	1:A:31:LEU:HD11	1:A:62:ARG:HG3	22	0.41	1.03
(1,239)	1:A:31:LEU:HD12	1:A:62:ARG:HG3	22	0.41	1.03
(1,239)	1:A:31:LEU:HD13	1:A:62:ARG:HG3	22	0.41	1.03
(1,171)	1:A:22:LEU:HG	1:A:21:ASP:HA	22	0.06	0.17
(1,1252)	1:A:61:VAL:HA	1:A:63:GLN:HE22	22	0.03	0.04
(1,536)	1:A:25:ILE:HD11	1:A:14:ALA:HB1	21	0.05	0.1
(1,536)	1:A:25:ILE:HD11	1:A:14:ALA:HB2	21	0.05	0.1
(1,536)	1:A:25:ILE:HD11	1:A:14:ALA:HB3	21	0.05	0.1
(1,536)	1:A:25:ILE:HD12	1:A:14:ALA:HB1	21	0.05	0.1
(1,536)	1:A:25:ILE:HD12	1:A:14:ALA:HB2	21	0.05	0.1
(1,536)	1:A:25:ILE:HD12	1:A:14:ALA:HB3	21	0.05	0.1
(1,536)	1:A:25:ILE:HD13	1:A:14:ALA:HB1	21	0.05	0.1
(1,536)	1:A:25:ILE:HD13	1:A:14:ALA:HB2	21	0.05	0.1
(1,536)	1:A:25:ILE:HD13	1:A:14:ALA:HB3	21	0.05	0.1
(1,479)	1:A:23:ALA:HA	1:A:21:ASP:HA	21	0.06	0.13
(1,1037)	1:A:36:LEU:HB3	1:A:40:MET:HA	21	0.1	0.2
(1,85)	1:A:24:GLY:H	1:A:23:ALA:HA	20	0.11	0.2
(1,85)	1:A:24:GLY:H	1:A:25:ILE:HA	20	0.11	0.2
(1,706)	1:A:59:ARG:HD2	1:A:59:ARG:H	20	0.03	0.06
(1,706)	1:A:59:ARG:HD3	1:A:59:ARG:H	20	0.03	0.06
(1,1491)	1:A:42:VAL:HG21	1:A:46:GLN:HG2	20	0.2	0.62
(1,1491)	1:A:42:VAL:HG22	1:A:46:GLN:HG2	20	0.2	0.62
(1,1491)	1:A:42:VAL:HG23	1:A:46:GLN:HG2	20	0.2	0.62
(1,1407)	1:A:42:VAL:HA	1:A:44:VAL:H	20	0.03	0.08
(1,778)	1:A:52:HIS:HB3	1:A:6:GLN:HE21	19	0.8	1.56
(1,662)	1:A:49:GLU:HA	1:A:46:GLN:HA	19	0.07	0.17
(1,460)	1:A:47:ILE:HG13	1:A:48:LEU:HD11	19	0.06	0.4



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

(1,460) 1:A:47:ILE:HG13 1:A:48:LEU:HD13 19 0.06 0.4 (1,460) 1:A:47:ILE:HG13 1:A:48:LEU:HD13 19 0.06 0.4 (1,593) 1:A:66:LEU:HD11 1:A:66:LEU:HA 18 0.09 0.44 (1,593) 1:A:66:LEU:HD12 1:A:66:LEU:HA 18 0.09 0.44 (1,593) 1:A:66:LEU:HD13 1:A:66:LEU:HA 18 0.09 0.44 (1,593) 1:A:66:LEU:HD13 1:A:66:LEU:HA 18 0.09 0.44 (1,363) 1:A:17:LEU:HG 1:A:19:ILE:HG21 18 0.03 0.07 (1,363) 1:A:17:LEU:HG 1:A:19:ILE:HG22 18 0.03 0.07 (1,363) 1:A:17:LEU:HG 1:A:19:ILE:HG23 18 0.03 0.07 (1,363) 1:A:17:LEU:HG 1:A:19:ILE:HG23 18 0.03 0.07 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG21 18 0.04 0.11 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG21 18 0.04 0.11 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG22 18 0.04 0.11 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG22 18 0.04 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:45:ARG:HE 18 0.07 0.12 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:45:ARG:HE 18 0.07 0.12 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:45:ARG:HE 18 0.07 0.12 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:45:ARG:HE 18 0.07 0.12 (1,1248) 1:A:61:VAL:HA 1:A:62:ARG:HE 18 0.07 0.12 (1,1248) 1:A:61:VAL:HA 1:A:62:ARG:HE 18 0.07 0.12 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:45:ARG:HE 18 0.07 0.12 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:45:ARG:HE 18 0.07 0.12 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:45:ARG:HE 18 0.07 0.12 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:45:ARG:HE 18 0.07 0.12 (1,1545) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:26:ASN:H 17 0.08 0.19 (1,1533) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:26:ASN:H 17 0.08 0.19 (1,1653) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:26:ASN:H 17 0.08 0.19 (1,1553) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:26:ASN:H 17 0.05 0.11 (1,1465) 1:A:14:ALA:HA 1:A:13:VAL:HG11 17 0.01 0.03 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:H 17 0.12 0.41 (1,1028) 1:A:33:AEB:HB2 1:A:73:RB:HB2 1:A:73:RB:HB2 1:A:73:BE:HB2 1:A:73:AB:HB3 16 0.05 0.1 (1,82) 1:A:33:AEB:HB2 1:A:33:ABP:H 17 0.12 0.41 (1,1028) 1:A:33:AEB:HB2 1:A:33:ABP:H 17 0.12 0.41 (1,1028) 1:A:33:AEB:HB2 1:A:53:AEB:HB3 16 0.05 0.1 (1,83)	Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,593) 1:A:66:LEU:HD11 1:A:66:LEU:HA 18 0.09 0.44 (1,593) 1:A:66:LEU:HD12 1:A:66:LEU:HA 18 0.09 0.44 (1,593) 1:A:66:LEU:HD13 1:A:66:LEU:HA 18 0.09 0.44 (1,363) 1:A:17:LEU:HG 1:A:19:ILE:HG21 18 0.03 0.07 (1,363) 1:A:17:LEU:HG 1:A:19:ILE:HG22 18 0.03 0.07 (1,363) 1:A:17:LEU:HG 1:A:19:ILE:HG22 18 0.03 0.07 (1,363) 1:A:17:LEU:HG 1:A:19:ILE:HG22 18 0.03 0.07 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG21 18 0.04 0.11 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG21 18 0.04 0.11 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG22 18 0.04 0.11 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG22 18 0.04 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:45:ARG:HE 18 0.07 0.12 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:45:ARG:HE 18 0.07 0.12 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:45:ARG:HE 18 0.07 0.12 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:45:ARG:HE 18 0.07 0.12 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:45:ARG:HE 18 0.07 0.12 (1,1545) 1:A:41:VAL:HG23 1:A:45:ARG:HE 18 0.07 0.12 (1,1545) 1:A:41:VAL:HG23 1:A:45:ARG:HE 18 0.07 0.12 (1,1545) 1:A:41:VAL:HG23 1:A:45:ARG:HE 18 0.07 0.12 (1,1545) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:45:ARG:HB 18 0.05 0.65 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:62:ARG:HB3 18 0.5 0.65 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:62:ARG:HB3 18 0.5 0.65 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:62:ARG:HB3 18 0.5 0.65 (1,18) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:26:ASN:H 17 0.08 0.19 (1,1553) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:26:ASN:H 17 0.08 0.19 (1,1553) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:26:ASN:H 17 0.05 0.11 (1,1553) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:26:ASN:H 17 0.05 0.11 (1,165) 1:A:14:ALA:HA 1:A:13:VAL:HG11 17 0.01 0.03 (1,1465) 1:A:14:ALA:HA 1:A:13:VAL:HG11 17 0.01 0.03 (1,1465) 1:A:14:ALA:HA 1:A:13:VAL:HG11 17 0.01 0.03 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:H 17 0.12 0.41 (1,1028) 1:A:33:AEEU:HD23 1:A:33:ASP:H 17 0.12 0.41 (1,1028) 1:A:33:AEEU:HD33 16 0.05 0.1 (1,394) 1:A	(1,460)	1:A:47:ILE:HG13	1:A:48:LEU:HD12	19	0.06	0.4
(1,593) 1:A:66:LEU:HD12 1:A:66:LEU:HA 18 0.09 0.44 (1,593) 1:A:66:LEU:HD13 1:A:66:LEU:HA 18 0.09 0.44 (1,363) 1:A:17:LEU:HG 1:A:19:ILE:HG21 18 0.03 0.07 (1,363) 1:A:17:LEU:HG 1:A:19:ILE:HG22 18 0.03 0.07 (1,363) 1:A:17:LEU:HG 1:A:19:ILE:HG22 18 0.03 0.07 (1,373) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG21 18 0.04 0.11 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG21 18 0.04 0.11 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG22 18 0.04 0.11 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG22 18 0.04 0.11 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG23 18 0.04 0.11 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG23 18 0.04 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:45:ARG:HE 18 0.07 0.12 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:45:ARG:HE 18 0.07 0.12 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:45:ARG:HE 18 0.07 0.12 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:45:ARG:HE 18 0.07 0.12 (1,1248) 1:A:61:VAL:HA 1:A:62:ARG:HB 18 0.07 0.12 (1,188) 1:A:71:GLU:HA 1:A:62:ARG:HB 18 0.5 0.65 (1,18) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:45:ARG:HB 17 0.08 0.19 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 17 0.08 0.19 (1,1553) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:26:ASN:H 17 0.05 0.11 (1,1553) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:26:ASN:H 17 0.05 0.11 (1,1553) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:26:ASN:H 17 0.05 0.11 (1,1553) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:26:ASN:H 17 0.05 0.11 (1,165) 1:A:14:ALA:HA 1:A:13:VAL:HG11 17 0.01 0.03 (1,1465) 1:A:14:ALA:HA 1:A:13:VAL:HG11 17 0.01 0.03 (1,1465) 1:A:14:ALA:HA 1:A:13:VAL:HG11 17 0.01 0.03 (1,1465) 1:A:14:ALA:HA 1:A:13:VAL:HG11 17 0.01 0.03 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:H 17 0.12 0.41 (1,028) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:H 17 0.12 0.41 (1,028) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:H 17 0.12 0.41 (1,028) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 16 0.05 0.1 (1,034) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:25:ILE:HG13 16 0.05 0.1 (1,034) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:25:ILE:HG13 16 0.05 0.1 (1,034) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:33:ASP:H 17 0.12 0.41 (1,034) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:25:ILE:HG13 16 0.06 0.73 (1,384) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:25:ILE:HG13 16 0.06 0.73 (1,384) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:25:ILE:HG13 16 0.06 0.73 (1,384) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:35:ILE:HG13 16 0.06 0.73 (1,384) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:35:ILE:HG13 16 0.06 0.73 (1,384) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:35:ILE:HG13 16 0.07 0.18	(1,460)	1:A:47:ILE:HG13	1:A:48:LEU:HD13	19	0.06	0.4
(1,593) 1:A:66:LEU:HD13 1:A:66:LEU:HA 18 0.09 0.44 (1,363) 1:A:17:LEU:HG 1:A:19:ILE:HG21 18 0.03 0.07 (1,363) 1:A:17:LEU:HG 1:A:19:ILE:HG22 18 0.03 0.07 (1,363) 1:A:17:LEU:HG 1:A:19:ILE:HG22 18 0.03 0.07 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG21 18 0.04 0.11 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG21 18 0.04 0.11 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG22 18 0.04 0.11 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG22 18 0.04 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:45:THR:HG23 18 0.04 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:45:ARG:HE 18 0.07 0.12 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:45:ARG:HE 18 0.07 0.12 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:45:ARG:HE 18 0.07 0.12 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:45:ARG:HE 18 0.07 0.12 (1,1248) 1:A:61:VAL:HA 1:A:62:ARG:HB3 18 0.5 0.65 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:74:SER:H 17 0.08 0.19 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:74:SER:H 17 0.08 0.19 (1,1553) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:26:ASN:H 17 0.05 0.11 (1,1553) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:26:ASN:H 17 0.05 0.11 (1,1553) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:26:ASN:H 17 0.05 0.11 (1,1465) 1:A:14:ALA:HA 1:A:13:VAL:HG11 17 0.01 0.03 (1,1465) 1:A:14:ALA:HA 1:A:13:VAL:HG11 17 0.01 0.03 (1,1465) 1:A:14:ALA:HA 1:A:13:VAL:HG11 17 0.01 0.03 (1,1465) 1:A:14:ALA:HA 1:A:13:VAL:HG13 17 0.01 0.03 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:H 17 0.12 0.41 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:H 17 0.12 0.41 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:H 17 0.12 0.41 (1,1028) 1:A:34:ALE:HD22 1:A:33:ASP:H 17 0.12 0.41 (1,1028) 1:A:34:EU:HD22 1:A:33:AA:HA 16 0.05 0.1 (1,394) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:50:ARG:HA 16 0.07 0.18 (1,384) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:50:ARG:HA 16 0.07 0.18 (1,384) 1:A:47:I	(1,593)	1:A:66:LEU:HD11	1:A:66:LEU:HA	18	0.09	0.44
(1,363) 1:A:17:LEU:HG 1:A:19:ILE:HG21 18 0.03 0.07 (1,363) 1:A:17:LEU:HG 1:A:19:ILE:HG22 18 0.03 0.07 (1,363) 1:A:17:LEU:HG 1:A:19:ILE:HG23 18 0.03 0.07 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG21 18 0.04 0.11 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG21 18 0.04 0.11 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG22 18 0.04 0.11 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG23 18 0.04 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:45:ARG:HE 18 0.07 0.12 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:45:ARG:HE 18 0.07 0.12 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:45:ARG:HE 18 0.07 0.12 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:45:ARG:HE 18 0.07 0.12 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:45:ARG:HE 18 0.07 0.12 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:45:ARG:HE 18 0.07 0.12 (1,1545) 1:A:41:VAL:HA 1:A:62:ARG:HB 18 0.07 0.12 (1,1545) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:62:ARG:HB 18 0.07 0.12 (1,1545) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:62:ARG:HB 18 0.5 0.65 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:62:ARG:HB 18 0.5 0.65 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:62:ARG:HB 18 0.5 0.65 (1,18) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:26:ASN:H 17 0.08 0.19 (1,1553) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:26:ASN:H 17 0.05 0.11 (1,1553) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:26:ASN:H 17 0.05 0.11 (1,1553) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:26:ASN:H 17 0.05 0.11 (1,1553) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:26:ASN:H 17 0.05 0.11 (1,165) 1:A:14:ALA:HA 1:A:13:VAL:HG11 17 0.01 0.03 (1,1465) 1:A:14:ALA:HA 1:A:13:VAL:HG11 17 0.01 0.03 (1,1465) 1:A:14:ALA:HA 1:A:13:VAL:HG12 17 0.01 0.03 (1,1465) 1:A:14:ALA:HA 1:A:13:VAL:HG13 17 0.01 0.03 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:H 17 0.12 0.41 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:H 17 0.12 0.41 (1,1028) 1:A:34:EU:HD23 1:A:33:ASP:H 17 0.12 0.41 (1,1028) 1:A:33:EE:HB22 1:A:7:ARG:HG2 16 0.05 0.1 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 16 0.05 0.1 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 16 0.05 0.1 (1,83) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:25:ILE:HG13 16 0.26 0.73 (1,394) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:35:ILE:HG13 16 0.07 0.18 (1	(1,593)	1:A:66:LEU:HD12	1:A:66:LEU:HA	18	0.09	0.44
(1,363) 1:A:17:LEU:HG 1:A:19:ILE:HG22 18 0.03 0.07 (1,363) 1:A:17:LEU:HG 1:A:19:ILE:HG23 18 0.03 0.07 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG21 18 0.04 0.11 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG22 18 0.04 0.11 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG22 18 0.04 0.11 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG22 18 0.04 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:45:ARG:HE 18 0.07 0.12 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:45:ARG:HE 18 0.07 0.12 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:45:ARG:HE 18 0.07 0.12 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:45:ARG:HE 18 0.07 0.12 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:45:ARG:HE 18 0.07 0.12 (1,1248) 1:A:61:VAL:HA 1:A:62:ARG:HB 18 0.07 0.12 (1,1248) 1:A:61:VAL:HA 1:A:69:LEU:H 17 0.08 0.19 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 17 0.08 0.19 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 17 0.08 0.19 (1,1553) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:26:ASN:H 17 0.05 0.11 (1,1553) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:26:ASN:H 17 0.05 0.11 (1,1553) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:26:ASN:H 17 0.05 0.11 (1,1465) 1:A:14:ALA:HA 1:A:13:VAL:HG11 17 0.01 0.03 (1,1465) 1:A:14:ALA:HA 1:A:13:VAL:HG11 17 0.01 0.03 (1,1465) 1:A:14:ALA:HA 1:A:13:VAL:HG12 17 0.01 0.03 (1,1465) 1:A:34:EU:HD21 1:A:33:ASP:H 17 0.12 0.41 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:H 17 0.12 0.41 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:H 17 0.12 0.41 (1,1028) 1:A:34:EU:HD23 1:A:33:ASP:H 17 0.12 0.41 (1,1028) 1:A:34:EU:HD23 1:A:33:ASP:H 17 0.12 0.41 (1,1028) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 16 0.05 0.1 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 16 0.05 0.1 (1,394) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:25:ILE:HG13 16 0.26 0.73 (1,394) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:25:ILE:HG13 16 0.26 0.73 (1,394) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:25:ILE:HG13 16 0.07 0.18 (1,388) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:25:ILE:HG13 16 0.	(1,593)	1:A:66:LEU:HD13	1:A:66:LEU:HA	18	0.09	0.44
(1,363) 1:A:17:LEU:HG 1:A:19:ILE:HG23 18 0.03 0.07 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG21 18 0.04 0.11 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG22 18 0.04 0.11 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG22 18 0.04 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:45:ARG:HE 18 0.07 0.12 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:45:ARG:HE 18 0.07 0.12 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:45:ARG:HE 18 0.07 0.12 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:45:ARG:HE 18 0.07 0.12 (1,1248) 1:A:61:VAL:HA 1:A:62:ARG:HB3 18 0.5 0.65 (1,188) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 17 0.08 0.19 (1,1553) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:26:ASN:H 17 0.08 0.19 (1,1553) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:26:ASN:H 17 0.05 0.11 (1,1553) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:26:ASN:H 17 0.05 0.11 (1,1553) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:26:ASN:H 17 0.05 0.11 (1,1465) 1:A:14:ALA:HA 1:A:13:VAL:HG11 17 0.01 0.03 (1,1465) 1:A:14:ALA:HA 1:A:13:VAL:HG11 17 0.01 0.03 (1,1465) 1:A:14:ALA:HA 1:A:13:VAL:HG13 17 0.01 0.03 (1,1465) 1:A:14:ALA:HA 1:A:13:VAL:HG13 17 0.01 0.03 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:H 17 0.12 0.41 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:H 17 0.12 0.41 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:H 17 0.12 0.41 (1,1028) 1:A:33:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 16 0.05 0.1 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 16 0.05 0.1 (1,394) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:25:ILE:HG13 16 0.26 0.73 (1,394) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:25:ILE:HG13 16 0.26 0.73 (1,394) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:25:ILE:HG13 16 0.05 0.1 (1,394) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:25:ILE:HG13 16 0.26 0.73 (1,394) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:25:ILE:HG13 16 0.05 0.1 (1,394) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:25:ILE:HG13 16 0.06 0.70 0.18 (1,388) 1:A:58:ILE:HG22 1:A:25:ILE:HG13 16 0.07 0.18 (1,388) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:25:ILE:HG13 16 0.07 0.18 (1,388) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:25:ILE:HG13 16 0.07 0.18 (1,388) 1:A:47:ILE:HG2	(1,363)	1:A:17:LEU:HG	1:A:19:ILE:HG21	18	0.03	0.07
(1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG21 18 0.04 0.11 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG22 18 0.04 0.11 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG23 18 0.04 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:45:ARG:HE 18 0.07 0.12 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:45:ARG:HE 18 0.07 0.12 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:45:ARG:HE 18 0.07 0.12 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:45:ARG:HE 18 0.07 0.12 (1,1545) 1:A:46:VAL:HA 1:A:62:ARG:HB3 18 0.5 0.65 (1,181 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 17 0.08 0.19 (1,185) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:26:ASN:H 17 0.08 0.19 (1,1553) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:26:ASN:H 17 0.05 0.11 (1,1553) 1:A:14:ALA:HA 1:A:13:VAL:HG13 17 0.05 0	(1,363)	1:A:17:LEU:HG	1:A:19:ILE:HG22	18	0.03	0.07
(1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG22 18 0.04 0.11 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG23 18 0.04 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:45:ARG:HE 18 0.07 0.12 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:45:ARG:HE 18 0.07 0.12 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:45:ARG:HE 18 0.07 0.12 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:45:ARG:HE 18 0.07 0.12 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:45:ARG:HE 18 0.07 0.12 (1,1545) 1:A:61:VAL:HA 1:A:62:ARG:HB3 18 0.5 0.65 (1,188) 1:A:71:GLU:HA 1:A:74:SER:H 17 0.08 0.19 (1,188) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 17 0.08 0.19 (1,1853) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:26:ASN:H 17 0.05 0.11 (1,1553) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:26:ASN:H 17 0.05 0.11 (1,1553) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:26:ASN:H 17 0.05 0.11 (1,1465) 1:A:14:ALA:HA 1:A:13:VAL:HG11 17 0.01 0.03 (1,1465) 1:A:14:ALA:HA 1:A:13:VAL:HG11 17 0.01 0.03 (1,1465) 1:A:14:ALA:HA 1:A:13:VAL:HG12 17 0.01 0.03 (1,1465) 1:A:14:ALA:HA 1:A:13:VAL:HG13 17 0.01 0.03 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:H 17 0.12 0.41 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:H 17 0.12 0.41 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:H 17 0.12 0.41 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:H 17 0.12 0.41 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 16 0.05 0.1 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 16 0.05 0.1 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 16 0.05 0.1 (1,394) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:25:ILE:HG13 16 0.26 0.73 (1,394) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:25:ILE:HG13 16 0.26 0.73 (1,394) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:25:ILE	(1,363)	1:A:17:LEU:HG	1:A:19:ILE:HG23	18	0.03	0.07
(1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG23 18 0.04 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:45:ARG:HE 18 0.07 0.12 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:45:ARG:HE 18 0.07 0.12 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:45:ARG:HE 18 0.07 0.12 (1,1545) 1:A:61:VAL:HA 1:A:62:ARG:HB3 18 0.5 0.65 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:62:ARG:HB3 18 0.5 0.65 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 17 0.08 0.19 (1,1553) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:26:ASN:H 17 0.05 0.11 (1,1553) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:26:ASN:H 17 0.05 0.11 (1,1553) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:26:ASN:H 17 0.05 0.11 (1,1553) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:26:ASN:H 17 0.05 0.11 (1,1553) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:26:ASN:H 17 0.05 0.11<	(1,1732)	1:A:32:ALA:H	1:A:65:THR:HG21	18	0.04	0.11
(1,1545) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:45:ARG:HE 18 0.07 0.12 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:45:ARG:HE 18 0.07 0.12 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:45:ARG:HE 18 0.07 0.12 (1,1545) 1:A:46:VAL:HA 1:A:62:ARG:HB3 18 0.5 0.65 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:74:SER:H 17 0.08 0.19 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:76:ASN:H 17 0.08 0.19 (1,1553) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:26:ASN:H 17 0.05 0.11 (1,1553) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:26:ASN:H 17 0.05 0.11 (1,1553) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:26:ASN:H 17 0.05 0.11 (1,1553) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:26:ASN:H 17 0.05 0.11 (1,1553) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:26:ASN:H 17 0.05 0.11 (1,1553) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:23:VAL:HG11 17 0.01 0.0	(1,1732)	1:A:32:ALA:H	1:A:65:THR:HG22	18	0.04	0.11
(1,1545) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:45:ARG:HE 18 0.07 0.12 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:45:ARG:HE 18 0.07 0.12 (1,1248) 1:A:61:VAL:HA 1:A:62:ARG:HB3 18 0.5 0.65 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 17 0.08 0.19 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 17 0.08 0.19 (1,1553) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:26:ASN:H 17 0.05 0.11 (1,1553) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:26:ASN:H 17 0.05 0.11 (1,1553) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:26:ASN:H 17 0.05 0.11 (1,1553) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:26:ASN:H 17 0.05 0.11 (1,1553) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:26:ASN:H 17 0.05 0.11 (1,1553) 1:A:14:ALA:HA 1:A:13:VAL:HG11 17 0.01 0.03 (1,1465) 1:A:14:ALA:HA 1:A:13:VAL:HG12 17 0.01 0.03<	(1,1732)	1:A:32:ALA:H	1:A:65:THR:HG23	18	0.04	0.11
(1,1545) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:45:ARG:HE 18 0.07 0.12 (1,1248) 1:A:61:VAL:HA 1:A:62:ARG:HB3 18 0.5 0.65 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:62:ARG:HB3 18 0.5 0.65 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 17 0.08 0.19 (1,1853) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:26:ASN:H 17 0.05 0.11 (1,1553) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:26:ASN:H 17 0.05 0.11 (1,1553) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:26:ASN:H 17 0.05 0.11 (1,1553) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:26:ASN:H 17 0.05 0.11 (1,1553) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:26:ASN:H 17 0.05 0.11 (1,1465) 1:A:14:ALA:HA 1:A:13:VAL:HG11 17 0.01 0.03 (1,1465) 1:A:14:ALA:HA 1:A:13:VAL:HG13 17 0.01 0.03 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:H 17 0.12 0.41<	(1,1545)	1:A:44:VAL:HG21	1:A:45:ARG:HE	18	0.07	0.12
(1,1248) 1:A:61:VAL:HA 1:A:62:ARG:HB3 18 0.5 0.65 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:74:SER:H 17 0.08 0.19 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 17 0.08 0.19 (1,185) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 17 0.08 0.19 (1,1553) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:26:ASN:H 17 0.05 0.11 (1,1553) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:26:ASN:H 17 0.05 0.11 (1,1553) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:26:ASN:H 17 0.05 0.11 (1,1553) 1:A:14:ALA:HA 1:A:13:VAL:HG11 17 0.01 0.03 (1,1465) 1:A:14:ALA:HA 1:A:13:VAL:HG12 17 0.01 0.03 (1,1465) 1:A:34:ALEU:HD21 1:A:33:ASP:H 17 0.12 0.41 (1,1028) 1:A:34:AEU:HD22 1:A:33:ASP:H 17 0.12 0.41 (1,1028) 1:A:33:ASP:HB2 1:A:34:A:BEU:HB3 16 0.05 0.1 <td>(1,1545)</td> <td>1:A:44:VAL:HG22</td> <td>1:A:45:ARG:HE</td> <td>18</td> <td>0.07</td> <td>0.12</td>	(1,1545)	1:A:44:VAL:HG22	1:A:45:ARG:HE	18	0.07	0.12
(1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:74:SER:H 17 0.08 0.19 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 17 0.08 0.19 (1,185) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 17 0.08 0.19 (1,1553) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:26:ASN:H 17 0.05 0.11 (1,1553) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:26:ASN:H 17 0.05 0.11 (1,1465) 1:A:14:ALA:HA 1:A:13:VAL:HG11 17 0.01 0.03 (1,1465) 1:A:14:ALA:HA 1:A:13:VAL:HG12 17 0.01 0.03 (1,1465) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:H 17 0.01 0.03 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:H 17 0.12 0.41 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:H 17 0.12 0.41 (1,1028) 1:A:34:EU:HD23 1:A:33:ASP:H 17 0.12 0.41 (1,1028) 1:A:73:SER:HB2 1:A:39:LEU:HB3 16 0.05 0.1	(1,1545)	1:A:44:VAL:HG23	1:A:45:ARG:HE	18	0.07	0.12
(1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 17 0.08 0.19 (1,1553) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:26:ASN:H 17 0.05 0.11 (1,1553) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:26:ASN:H 17 0.05 0.11 (1,1553) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:26:ASN:H 17 0.05 0.11 (1,1465) 1:A:14:ALA:HA 1:A:13:VAL:HG11 17 0.01 0.03 (1,1465) 1:A:14:ALA:HA 1:A:13:VAL:HG12 17 0.01 0.03 (1,1465) 1:A:14:ALA:HA 1:A:13:VAL:HG13 17 0.01 0.03 (1,1465) 1:A:14:ALA:HA 1:A:13:VAL:HG13 17 0.01 0.03 (1,1465) 1:A:14:ALA:HA 1:A:13:VAL:HG13 17 0.01 0.03 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:H 17 0.12 0.41 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:H 17 0.12 0.41 (1,1028) 1:A:73:SER:HB2 1:A:79:LEU:HB3 16 0.05 <t< td=""><td>(1,1248)</td><td>1:A:61:VAL:HA</td><td>1:A:62:ARG:HB3</td><td>18</td><td>0.5</td><td>0.65</td></t<>	(1,1248)	1:A:61:VAL:HA	1:A:62:ARG:HB3	18	0.5	0.65
(1,1553) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:26:ASN:H 17 0.05 0.11 (1,1553) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:26:ASN:H 17 0.05 0.11 (1,1553) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:26:ASN:H 17 0.05 0.11 (1,1465) 1:A:14:ALA:HA 1:A:13:VAL:HG11 17 0.01 0.03 (1,1465) 1:A:14:ALA:HA 1:A:13:VAL:HG12 17 0.01 0.03 (1,1465) 1:A:14:ALA:HA 1:A:13:VAL:HG13 17 0.01 0.03 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:H 17 0.12 0.41 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:H 17 0.12 0.41 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:H 17 0.12 0.41 (1,1028) 1:A:73:SER:HB2 1:A:73:RE:HB3 16 0.05 0.1 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 16 0.05 0.1 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:75:ARG:HG3 16 0.05 0.	(1,18)	1:A:71:GLU:HA	1:A:74:SER:H	17	0.08	0.19
(1,1553) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:26:ASN:H 17 0.05 0.11 (1,1553) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:26:ASN:H 17 0.05 0.11 (1,1465) 1:A:14:ALA:HA 1:A:13:VAL:HG11 17 0.01 0.03 (1,1465) 1:A:14:ALA:HA 1:A:13:VAL:HG12 17 0.01 0.03 (1,1465) 1:A:14:ALA:HA 1:A:13:VAL:HG13 17 0.01 0.03 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:H 17 0.12 0.41 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:H 17 0.12 0.41 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:H 17 0.12 0.41 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:H 17 0.12 0.41 (1,1028) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 16 0.05 0.1 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 16 0.05 0.1 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:59:ARG:HG3 16 0.05 0.	(1,18)	1:A:71:GLU:HA	1:A:69:LEU:H	17	0.08	0.19
(1,1553) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:26:ASN:H 17 0.05 0.11 (1,1465) 1:A:14:ALA:HA 1:A:13:VAL:HG11 17 0.01 0.03 (1,1465) 1:A:14:ALA:HA 1:A:13:VAL:HG12 17 0.01 0.03 (1,1465) 1:A:14:ALA:HA 1:A:33:VAL:HG13 17 0.01 0.03 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:H 17 0.12 0.41 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:H 17 0.12 0.41 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:H 17 0.12 0.41 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:H 17 0.12 0.41 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:H 17 0.12 0.41 (1,1028) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 16 0.05 0.1 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 16 0.05 0.1 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 16 0.05 0.1	(1,1553)	1:A:19:ILE:HG21	1:A:26:ASN:H	17	0.05	0.11
(1,1465) 1:A:14:ALA:HA 1:A:13:VAL:HG11 17 0.01 0.03 (1,1465) 1:A:14:ALA:HA 1:A:13:VAL:HG12 17 0.01 0.03 (1,1465) 1:A:14:ALA:HA 1:A:33:VAL:HG13 17 0.01 0.03 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:H 17 0.12 0.41 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:H 17 0.12 0.41 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:H 17 0.12 0.41 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:H 17 0.12 0.41 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:H 17 0.12 0.41 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 16 0.05 0.1 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 16 0.05 0.1 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 16 0.05 0.1 (1,32) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:59:ARG:HB 16 0.05 0.1 <td>(1,1553)</td> <td>1:A:19:ILE:HG22</td> <td>1:A:26:ASN:H</td> <td>17</td> <td>0.05</td> <td>0.11</td>	(1,1553)	1:A:19:ILE:HG22	1:A:26:ASN:H	17	0.05	0.11
(1,1465) 1:A:14:ALA:HA 1:A:13:VAL:HG12 17 0.01 0.03 (1,1465) 1:A:14:ALA:HA 1:A:13:VAL:HG13 17 0.01 0.03 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:H 17 0.12 0.41 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:H 17 0.12 0.41 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:H 17 0.12 0.41 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 16 0.05 0.1 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 16 0.05 0.1 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 16 0.05 0.1 (1,32) 1:A:459:ARG:HB2 1:A:7:ARG:HG3 16 0.05 0.1	(1,1553)	1:A:19:ILE:HG23	1:A:26:ASN:H	17	0.05	0.11
(1,1465) 1:A:14:ALA:HA 1:A:13:VAL:HG13 17 0.01 0.03 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:H 17 0.12 0.41 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:H 17 0.12 0.41 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:H 17 0.12 0.41 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 16 0.05 0.1 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 16 0.05 0.1 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 16 0.05 0.1 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 16 0.05 0.1 (1,32) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 16 0.05 0.1 (1,34) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 16 0.05 0.1 (1,394) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:59:ARG:H 16 0.11 0.15 (1,394) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:25:ILE:HG13 16 0.26 0.73 </td <td>(1,1465)</td> <td>1:A:14:ALA:HA</td> <td>1:A:13:VAL:HG11</td> <td>17</td> <td>0.01</td> <td>0.03</td>	(1,1465)	1:A:14:ALA:HA	1:A:13:VAL:HG11	17	0.01	0.03
(1,1028) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:H 17 0.12 0.41 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:H 17 0.12 0.41 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:H 17 0.12 0.41 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 16 0.05 0.1 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 16 0.05 0.1 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 16 0.05 0.1 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 16 0.05 0.1 (1,704) 1:A:59:ARG:HB2 1:A:7:ARG:HG3 16 0.05 0.1 (1,394) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:25:ILE:HG13 16 0.26 0.73 (1,394) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:25:ILE:HG13 16 0.26 0.73 (1,38) 1:A:58:ILE:HG23 1:A:32:ALA:HA 16 0.07 0.18 (1,38) 1:A:58:ILE:HG23 1:A:32:ALA:HA 16 0.07 0.18	(1,1465)	1:A:14:ALA:HA	1:A:13:VAL:HG12	17	0.01	0.03
(1,1028) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:H 17 0.12 0.41 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:H 17 0.12 0.41 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 16 0.05 0.1 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 16 0.05 0.1 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7-ARG:HG3 16 0.05 0.1 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7-ARG:HG3 16 0.05 0.1 (1,704) 1:A:59:ARG:HB2 1:A:59:ARG:H 16 0.11 0.15 (1,394) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:25:ILE:HG13 16 0.26 0.73 (1,394) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:25:ILE:HG13 16 0.26 0.73 (1,38) 1:A:58:ILE:HG21 1:A:32:ALA:HA 16 0.07 0.18 (1,38) 1:A:58:ILE:HG23 1:A:32:ALA:HA 16 0.07 0.18 (1,38) 1:A:47:ILE:HG21 1:A:50:ARG:HA 16 0.07 0.18	(1,1465)	1:A:14:ALA:HA	1:A:13:VAL:HG13	17	0.01	0.03
(1,1028) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:H 17 0.12 0.41 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 16 0.05 0.1 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 16 0.05 0.1 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 16 0.05 0.1 (1,704) 1:A:59:ARG:HB2 1:A:7:ARG:HG3 16 0.05 0.1 (1,704) 1:A:59:ARG:HB2 1:A:59:ARG:H 16 0.11 0.15 (1,394) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:25:ILE:HG13 16 0.26 0.73 (1,394) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:25:ILE:HG13 16 0.26 0.73 (1,394) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:25:ILE:HG13 16 0.26 0.73 (1,38) 1:A:58:ILE:HG23 1:A:32:ALA:HA 16 0.07 0.18 (1,38) 1:A:58:ILE:HG23 1:A:32:ALA:HA 16 0.07 0.18 (1,38) 1:A:47:ILE:HG21 1:A:50:ARG:HA 16 0.07 0.18	(1,1028)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:33:ASP:H	17	0.12	0.41
(1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 16 0.05 0.1 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 16 0.05 0.1 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 16 0.05 0.1 (1,704) 1:A:59:ARG:HB2 1:A:59:ARG:H 16 0.11 0.15 (1,394) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:25:ILE:HG13 16 0.26 0.73 (1,394) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:25:ILE:HG13 16 0.26 0.73 (1,394) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:25:ILE:HG13 16 0.26 0.73 (1,384) 1:A:58:ILE:HG23 1:A:32:ALA:HA 16 0.07 0.18 (1,38) 1:A:58:ILE:HG22 1:A:32:ALA:HA 16 0.07 0.18 (1,38) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:50:ARG:HA 16 0.07 0.18 (1,38) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:50:ARG:HA 16 0.07 0.18 (1,38) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:50:ARG:HA 16 0.07 0.18	(1,1028)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:33:ASP:H	17	0.12	0.41
(1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 16 0.05 0.1 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 16 0.05 0.1 (1,704) 1:A:59:ARG:HB2 1:A:59:ARG:H 16 0.11 0.15 (1,394) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:25:ILE:HG13 16 0.26 0.73 (1,394) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:25:ILE:HG13 16 0.26 0.73 (1,394) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:25:ILE:HG13 16 0.26 0.73 (1,384) 1:A:58:ILE:HG23 1:A:32:ALA:HA 16 0.07 0.18 (1,38) 1:A:58:ILE:HG22 1:A:32:ALA:HA 16 0.07 0.18 (1,38) 1:A:58:ILE:HG23 1:A:32:ALA:HA 16 0.07 0.18 (1,38) 1:A:47:ILE:HG21 1:A:50:ARG:HA 16 0.07 0.18 (1,38) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:50:ARG:HA 16 0.07 0.18 (1,38) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:50:ARG:HA 16 0.05 0.09 <td>(1,1028)</td> <td>1:A:34:LEU:HD23</td> <td>1:A:33:ASP:H</td> <td>17</td> <td>0.12</td> <td>0.41</td>	(1,1028)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:33:ASP:H	17	0.12	0.41
(1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 16 0.05 0.1 (1,704) 1:A:59:ARG:HB2 1:A:59:ARG:H 16 0.11 0.15 (1,394) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:25:ILE:HG13 16 0.26 0.73 (1,394) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:25:ILE:HG13 16 0.26 0.73 (1,394) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:25:ILE:HG13 16 0.26 0.73 (1,38) 1:A:58:ILE:HG21 1:A:32:ALA:HA 16 0.07 0.18 (1,38) 1:A:58:ILE:HG22 1:A:32:ALA:HA 16 0.07 0.18 (1,38) 1:A:58:ILE:HG23 1:A:32:ALA:HA 16 0.07 0.18 (1,38) 1:A:47:ILE:HG21 1:A:50:ARG:HA 16 0.07 0.18 (1,38) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:50:ARG:HA 16 0.07 0.18 (1,38) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:50:ARG:HA 16 0.07 0.18 (1,38) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:64:LEU:HG 16 0.05 0.09 </td <td>(1,82)</td> <td>1:A:73:SER:HB2</td> <td>1:A:9:LEU:HB3</td> <td>16</td> <td>0.05</td> <td>0.1</td>	(1,82)	1:A:73:SER:HB2	1:A:9:LEU:HB3	16	0.05	0.1
(1,704) 1:A:59:ARG:HB2 1:A:59:ARG:H 16 0.11 0.15 (1,394) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:25:ILE:HG13 16 0.26 0.73 (1,394) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:25:ILE:HG13 16 0.26 0.73 (1,394) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:25:ILE:HG13 16 0.26 0.73 (1,38) 1:A:58:ILE:HG21 1:A:32:ALA:HA 16 0.07 0.18 (1,38) 1:A:58:ILE:HG22 1:A:32:ALA:HA 16 0.07 0.18 (1,38) 1:A:58:ILE:HG23 1:A:32:ALA:HA 16 0.07 0.18 (1,38) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:50:ARG:HA 16 0.07 0.18 (1,38) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:50:ARG:HA 16 0.07 0.18 (1,38) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:50:ARG:HA 16 0.07 0.18 (1,38) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:64:LEU:HG 16 0.05 0.09 (1,241) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:64:LEU:HG 16 0.05 0.0	(1,82)	1:A:73:SER:HB2	1:A:7:ARG:HG2	16	0.05	0.1
(1,394) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:25:ILE:HG13 16 0.26 0.73 (1,394) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:25:ILE:HG13 16 0.26 0.73 (1,394) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:25:ILE:HG13 16 0.26 0.73 (1,38) 1:A:58:ILE:HG21 1:A:32:ALA:HA 16 0.07 0.18 (1,38) 1:A:58:ILE:HG22 1:A:32:ALA:HA 16 0.07 0.18 (1,38) 1:A:58:ILE:HG23 1:A:32:ALA:HA 16 0.07 0.18 (1,38) 1:A:47:ILE:HG21 1:A:50:ARG:HA 16 0.07 0.18 (1,38) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:50:ARG:HA 16 0.07 0.18 (1,38) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:50:ARG:HA 16 0.07 0.18 (1,38) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:64:LEU:HG 16 0.05 0.09 (1,241) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:64:LEU:HG 16 0.05 0.09	(1,82)	1:A:73:SER:HB2	1:A:7:ARG:HG3	16	0.05	0.1
(1,394) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:25:ILE:HG13 16 0.26 0.73 (1,394) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:25:ILE:HG13 16 0.26 0.73 (1,394) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:25:ILE:HG13 16 0.26 0.73 (1,38) 1:A:58:ILE:HG21 1:A:32:ALA:HA 16 0.07 0.18 (1,38) 1:A:58:ILE:HG22 1:A:32:ALA:HA 16 0.07 0.18 (1,38) 1:A:58:ILE:HG23 1:A:32:ALA:HA 16 0.07 0.18 (1,38) 1:A:47:ILE:HG21 1:A:50:ARG:HA 16 0.07 0.18 (1,38) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:50:ARG:HA 16 0.07 0.18 (1,38) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:50:ARG:HA 16 0.07 0.18 (1,38) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:64:LEU:HG 16 0.05 0.09 (1,241) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:64:LEU:HG 16 0.05 0.09	(1,704)	1:A:59:ARG:HB2	1:A:59:ARG:H	16	0.11	0.15
(1,394) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:25:ILE:HG13 16 0.26 0.73 (1,38) 1:A:58:ILE:HG21 1:A:32:ALA:HA 16 0.07 0.18 (1,38) 1:A:58:ILE:HG22 1:A:32:ALA:HA 16 0.07 0.18 (1,38) 1:A:58:ILE:HG23 1:A:32:ALA:HA 16 0.07 0.18 (1,38) 1:A:47:ILE:HG21 1:A:50:ARG:HA 16 0.07 0.18 (1,38) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:50:ARG:HA 16 0.07 0.18 (1,38) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:50:ARG:HA 16 0.07 0.18 (1,38) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:50:ARG:HA 16 0.07 0.18 (1,241) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:64:LEU:HG 16 0.05 0.09 (1,241) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:64:LEU:HG 16 0.05 0.09	. ,	1:A:19:ILE:HG21	1:A:25:ILE:HG13	16	0.26	0.73
(1,38) 1:A:58:ILE:HG21 1:A:32:ALA:HA 16 0.07 0.18 (1,38) 1:A:58:ILE:HG22 1:A:32:ALA:HA 16 0.07 0.18 (1,38) 1:A:58:ILE:HG23 1:A:32:ALA:HA 16 0.07 0.18 (1,38) 1:A:47:ILE:HG21 1:A:50:ARG:HA 16 0.07 0.18 (1,38) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:50:ARG:HA 16 0.07 0.18 (1,38) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:50:ARG:HA 16 0.07 0.18 (1,241) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:64:LEU:HG 16 0.05 0.09 (1,241) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:64:LEU:HG 16 0.05 0.09	(1,394)	1:A:19:ILE:HG22	1:A:25:ILE:HG13	16	0.26	0.73
(1,38) 1:A:58:ILE:HG21 1:A:32:ALA:HA 16 0.07 0.18 (1,38) 1:A:58:ILE:HG22 1:A:32:ALA:HA 16 0.07 0.18 (1,38) 1:A:58:ILE:HG23 1:A:32:ALA:HA 16 0.07 0.18 (1,38) 1:A:47:ILE:HG21 1:A:50:ARG:HA 16 0.07 0.18 (1,38) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:50:ARG:HA 16 0.07 0.18 (1,38) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:50:ARG:HA 16 0.07 0.18 (1,38) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:64:LEU:HG 16 0.05 0.09 (1,241) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:64:LEU:HG 16 0.05 0.09	(1,394)	1:A:19:ILE:HG23	1:A:25:ILE:HG13	16	0.26	0.73
(1,38) 1:A:58:ILE:HG22 1:A:32:ALA:HA 16 0.07 0.18 (1,38) 1:A:58:ILE:HG23 1:A:32:ALA:HA 16 0.07 0.18 (1,38) 1:A:47:ILE:HG21 1:A:50:ARG:HA 16 0.07 0.18 (1,38) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:50:ARG:HA 16 0.07 0.18 (1,38) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:50:ARG:HA 16 0.07 0.18 (1,241) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:64:LEU:HG 16 0.05 0.09 (1,241) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:64:LEU:HG 16 0.05 0.09		1:A:58:ILE:HG21	1:A:32:ALA:HA	16	0.07	0.18
(1,38) 1:A:58:ILE:HG23 1:A:32:ALA:HA 16 0.07 0.18 (1,38) 1:A:47:ILE:HG21 1:A:50:ARG:HA 16 0.07 0.18 (1,38) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:50:ARG:HA 16 0.07 0.18 (1,38) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:50:ARG:HA 16 0.07 0.18 (1,241) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:64:LEU:HG 16 0.05 0.09 (1,241) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:64:LEU:HG 16 0.05 0.09	` '	1:A:58:ILE:HG22	1:A:32:ALA:HA	16	0.07	0.18
(1,38) 1:A:47:ILE:HG21 1:A:50:ARG:HA 16 0.07 0.18 (1,38) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:50:ARG:HA 16 0.07 0.18 (1,38) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:50:ARG:HA 16 0.07 0.18 (1,241) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:64:LEU:HG 16 0.05 0.09 (1,241) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:64:LEU:HG 16 0.05 0.09	, ,	1:A:58:ILE:HG23	1:A:32:ALA:HA	16	0.07	0.18
(1,38) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:50:ARG:HA 16 0.07 0.18 (1,38) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:50:ARG:HA 16 0.07 0.18 (1,241) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:64:LEU:HG 16 0.05 0.09 (1,241) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:64:LEU:HG 16 0.05 0.09		1:A:47:ILE:HG21	1:A:50:ARG:HA	16	0.07	0.18
(1,38) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:50:ARG:HA 16 0.07 0.18 (1,241) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:64:LEU:HG 16 0.05 0.09 (1,241) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:64:LEU:HG 16 0.05 0.09		1:A:47:ILE:HG22	1:A:50:ARG:HA	16	0.07	0.18
(1,241) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:64:LEU:HG 16 0.05 0.09 (1,241) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:64:LEU:HG 16 0.05 0.09	· · /	1:A:47:ILE:HG23	1:A:50:ARG:HA	16	0.07	0.18
	` '	1:A:31:LEU:HD11	1:A:64:LEU:HG	16	0.05	0.09
	(1,241)	1:A:31:LEU:HD12	1:A:64:LEU:HG	16	0.05	0.09
	(1,241)	1:A:31:LEU:HD13	1:A:64:LEU:HG	16	0.05	0.09



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,1505)	1:A:55:VAL:HG11	1:A:59:ARG:HD2	16	0.11	1.11
(1,1505)	1:A:55:VAL:HG11	1:A:59:ARG:HD3	16	0.11	1.11
(1,1505)	1:A:55:VAL:HG12	1:A:59:ARG:HD2	16	0.11	1.11
(1,1505)	1:A:55:VAL:HG12	1:A:59:ARG:HD3	16	0.11	1.11
(1,1505)	1:A:55:VAL:HG13	1:A:59:ARG:HD2	16	0.11	1.11
(1,1505)	1:A:55:VAL:HG13	1:A:59:ARG:HD3	16	0.11	1.11
(1,801)	1:A:65:THR:HA	1:A:31:LEU:HD11	15	0.37	1.05
(1,801)	1:A:65:THR:HA	1:A:31:LEU:HD12	15	0.37	1.05
(1,801)	1:A:65:THR:HA	1:A:31:LEU:HD13	15	0.37	1.05
(1,732)	1:A:63:GLN:HG3	1:A:60:GLU:HA	15	0.04	0.07
(1,1638)	1:A:57:PRO:HB3	1:A:59:ARG:HB2	15	0.76	1.3
(1,1618)	1:A:58:ILE:HG12	1:A:59:ARG:HD2	15	0.27	0.51
(1,1618)	1:A:58:ILE:HG12	1:A:59:ARG:HD3	15	0.27	0.51
(1,1593)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:29:SER:HA	15	0.73	1.32
(1,1593)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:29:SER:HA	15	0.73	1.32
(1,1593)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:29:SER:HA	15	0.73	1.32
(1,1332)	1:A:68:LYS:HE2	1:A:69:LEU:H	15	0.06	0.11
(1,1332)	1:A:68:LYS:HE3	1:A:69:LEU:H	15	0.06	0.11
(1,1168)	1:A:54:LEU:HG	1:A:56:LEU:HD21	15	0.1	1.09
(1,1168)	1:A:54:LEU:HG	1:A:56:LEU:HD22	15	0.1	1.09
(1,1168)	1:A:54:LEU:HG	1:A:56:LEU:HD23	15	0.1	1.09
(1,1163)	1:A:54:LEU:HD11	1:A:51:GLU:HB2	15	0.73	1.99
(1,1163)	1:A:54:LEU:HD12	1:A:51:GLU:HB2	15	0.73	1.99
(1,1163)	1:A:54:LEU:HD13	1:A:51:GLU:HB2	15	0.73	1.99
(1,1095)	1:A:39:LEU:HD21	1:A:42:VAL:H	15	0.04	0.08
(1,1095)	1:A:39:LEU:HD22	1:A:42:VAL:H	15	0.04	0.08
(1,1095)	1:A:39:LEU:HD23	1:A:42:VAL:H	15	0.04	0.08
(1,1008)	1:A:34:LEU:HD11	1:A:31:LEU:HA	15	0.09	0.44
(1,1008)	1:A:34:LEU:HD12	1:A:31:LEU:HA	15	0.09	0.44
(1,1008)	1:A:34:LEU:HD13	1:A:31:LEU:HA	15	0.09	0.44
(1,506)	1:A:19:ILE:HD11	1:A:18:GLY:HA2	14	0.09	0.24
(1,506)	1:A:19:ILE:HD12	1:A:18:GLY:HA2	14	0.09	0.24
(1,506)	1:A:19:ILE:HD13	1:A:18:GLY:HA2	14	0.09	0.24
(1,1547)	1:A:44:VAL:HG11	1:A:40:MET:HA	14	0.06	0.1
(1,1547)	1:A:44:VAL:HG12	1:A:40:MET:HA	14	0.06	0.1
(1,1547)	1:A:44:VAL:HG13	1:A:40:MET:HA	14	0.06	0.1
(1,1369)	1:A:71:GLU:HG2	1:A:72:MET:H	14	0.35	0.9
(1,1302)	1:A:64:LEU:HB3	1:A:31:LEU:HB3	14	0.59	1.17
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD11	1:A:44:VAL:HG21	14	0.05	0.13
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD11	1:A:44:VAL:HG22	14	0.05	0.13
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD11	1:A:44:VAL:HG23	14	0.05	0.13
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD12	1:A:44:VAL:HG21	14	0.05	0.13



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD12	1:A:44:VAL:HG22	14	0.05	0.13
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD12	1:A:44:VAL:HG23	14	0.05	0.13
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD13	1:A:44:VAL:HG21	14	0.05	0.13
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD13	1:A:44:VAL:HG22	14	0.05	0.13
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD13	1:A:44:VAL:HG23	14	0.05	0.13
(1,1584)	1:A:59:ARG:HG3	1:A:58:ILE:H	13	0.16	0.4
(1,1554)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:26:ASN:HB3	13	0.99	1.72
(1,1554)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:26:ASN:HB3	13	0.99	1.72
(1,1554)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:26:ASN:HB3	13	0.99	1.72
(1,1276)	1:A:62:ARG:HB3	1:A:32:ALA:HB1	13	0.15	0.21
(1,1276)	1:A:62:ARG:HB3	1:A:32:ALA:HB2	13	0.15	0.21
(1,1276)	1:A:62:ARG:HB3	1:A:32:ALA:HB3	13	0.15	0.21
(1,862)	1:A:10:VAL:HA	1:A:9:LEU:HD21	12	0.05	0.16
(1,862)	1:A:10:VAL:HA	1:A:9:LEU:HD22	12	0.05	0.16
(1,862)	1:A:10:VAL:HA	1:A:9:LEU:HD23	12	0.05	0.16
(1,499)	1:A:47:ILE:HD11	1:A:43:GLU:HG2	12	0.28	0.82
(1,499)	1:A:47:ILE:HD12	1:A:43:GLU:HG2	12	0.28	0.82
(1,499)	1:A:47:ILE:HD13	1:A:43:GLU:HG2	12	0.28	0.82
(1,491)	1:A:27:LEU:HA	1:A:66:LEU:H	12	0.04	0.1
(1,444)	1:A:47:ILE:HA	1:A:50:ARG:HB3	12	1.05	1.72
(1,1587)	1:A:9:LEU:HG	1:A:75:LYS:HE2	12	0.03	0.07
(1,1587)	1:A:9:LEU:HG	1:A:75:LYS:HE3	12	0.03	0.07
(1,1393)	1:A:44:VAL:HA	1:A:48:LEU:HG	12	0.03	0.07
(1,1308)	1:A:64:LEU:HA	1:A:63:GLN:HE21	12	0.03	0.14
(1,1221)	1:A:58:ILE:HG21	1:A:57:PRO:HB3	12	0.07	0.44
(1,1221)	1:A:58:ILE:HG22	1:A:57:PRO:HB3	12	0.07	0.44
(1,1221)	1:A:58:ILE:HG23	1:A:57:PRO:HB3	12	0.07	0.44
(1,1147)	1:A:54:LEU:HB2	1:A:48:LEU:HB3	12	0.03	0.08
(1,1019)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:34:LEU:HA	12	0.45	0.5
(1,1019)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:34:LEU:HA	12	0.45	0.5
(1,1019)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:34:LEU:HA	12	0.45	0.5
(1,673)	1:A:43:GLU:HA	1:A:39:LEU:HD21	11	0.05	0.09
(1,673)	1:A:43:GLU:HA	1:A:39:LEU:HD22	11	0.05	0.09
(1,673)	1:A:43:GLU:HA	1:A:39:LEU:HD23	11	0.05	0.09
(1,45)	1:A:22:LEU:HD21	1:A:11:LYS:HE2	11	0.05	0.11
(1,45)	1:A:22:LEU:HD21	1:A:11:LYS:HE3	11	0.05	0.11
(1,45)	1:A:22:LEU:HD22	1:A:11:LYS:HE2	11	0.05	0.11
(1,45)	1:A:22:LEU:HD22	1:A:11:LYS:HE3	11	0.05	0.11
(1,45)	1:A:22:LEU:HD23	1:A:11:LYS:HE2	11	0.05	0.11
(1,45)	1:A:22:LEU:HD23	1:A:11:LYS:HE3	11	0.05	0.11
(1,244)	1:A:31:LEU:HD21	1:A:64:LEU:HG	11	0.54	0.86
(1,244)	1:A:31:LEU:HD22	1:A:64:LEU:HG	11	0.54	0.86



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,244)	1:A:31:LEU:HD23	1:A:64:LEU:HG	11	0.54	0.86
(1,1445)	1:A:44:VAL:HG11	1:A:47:ILE:HG13	11	0.08	0.65
(1,1445)	1:A:44:VAL:HG12	1:A:47:ILE:HG13	11	0.08	0.65
(1,1445)	1:A:44:VAL:HG13	1:A:47:ILE:HG13	11	0.08	0.65
(1,1172)	1:A:55:VAL:HA	1:A:57:PRO:HG3	11	0.03	0.05
(1,845)	1:A:8:ASP:HB2	1:A:11:LYS:HB2	10	0.32	0.97
(1,845)	1:A:8:ASP:HB2	1:A:11:LYS:HB3	10	0.32	0.97
(1,1642)	1:A:9:LEU:HD11	1:A:6:GLN:HE21	10	0.52	1.2
(1,1642)	1:A:9:LEU:HD12	1:A:6:GLN:HE21	10	0.52	1.2
(1,1642)	1:A:9:LEU:HD13	1:A:6:GLN:HE21	10	0.52	1.2
(1,1631)	1:A:73:SER:HB2	1:A:10:VAL:HG21	10	0.03	0.05
(1,1631)	1:A:73:SER:HB2	1:A:10:VAL:HG22	10	0.03	0.05
(1,1631)	1:A:73:SER:HB2	1:A:10:VAL:HG23	10	0.03	0.05
(1,1575)	1:A:66:LEU:HD11	1:A:13:VAL:H	10	0.23	1.3
(1,1575)	1:A:66:LEU:HD12	1:A:13:VAL:H	10	0.23	1.3
(1,1575)	1:A:66:LEU:HD13	1:A:13:VAL:H	10	0.23	1.3
(1,1334)	1:A:68:LYS:HE2	1:A:68:LYS:HB2	10	0.02	0.03
(1,1334)	1:A:68:LYS:HE2	1:A:68:LYS:HB3	10	0.02	0.03
(1,1334)	1:A:68:LYS:HE3	1:A:68:LYS:HB2	10	0.02	0.03
(1,1334)	1:A:68:LYS:HE3	1:A:68:LYS:HB3	10	0.02	0.03
(1,1018)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:29:SER:HB2	10	0.25	0.32
(1,1018)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:29:SER:HB2	10	0.25	0.32
(1,1018)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:29:SER:HB2	10	0.25	0.32
(1,994)	1:A:33:ASP:HA	1:A:34:LEU:HD21	9	0.27	0.34
(1,994)	1:A:33:ASP:HA	1:A:34:LEU:HD22	9	0.27	0.34
(1,994)	1:A:33:ASP:HA	1:A:34:LEU:HD23	9	0.27	0.34
(1,783)	1:A:52:HIS:HB3	1:A:54:LEU:HD11	9	0.03	0.08
(1,783)	1:A:52:HIS:HB3	1:A:54:LEU:HD12	9	0.03	0.08
(1,783)	1:A:52:HIS:HB3	1:A:54:LEU:HD13	9	0.03	0.08
(1,783)	1:A:52:HIS:HB3	1:A:54:LEU:HD21	9	0.03	0.08
(1,783)	1:A:52:HIS:HB3	1:A:54:LEU:HD22	9	0.03	0.08
(1,783)	1:A:52:HIS:HB3	1:A:54:LEU:HD23	9	0.03	0.08
(1,607)	1:A:67:ARG:HA	1:A:67:ARG:HD3	9	0.02	0.04
(1,60)	1:A:47:ILE:HG21	1:A:74:SER:HB2	9	0.58	0.93
(1,60)	1:A:47:ILE:HG22	1:A:74:SER:HB2	9	0.58	0.93
(1,60)	1:A:47:ILE:HG23	1:A:74:SER:HB2	9	0.58	0.93
(1,60)	1:A:58:ILE:HG21	1:A:31:LEU:HA	9	0.58	0.93
(1,60)	1:A:58:ILE:HG22	1:A:31:LEU:HA	9	0.58	0.93
(1,60)	1:A:58:ILE:HG23	1:A:31:LEU:HA	9	0.58	0.93
(1,513)	1:A:25:ILE:HB	1:A:22:LEU:HD11	9	0.03	0.05
(1,513)	1:A:25:ILE:HB	1:A:22:LEU:HD12	9	0.03	0.05
(1,513)	1:A:25:ILE:HB	1:A:22:LEU:HD13	9	0.03	0.05



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,1701)	1:A:47:ILE:H	1:A:48:LEU:H	9	0.05	0.1
(1,1592)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:30:SER:H	9	0.55	0.89
(1,1592)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:30:SER:H	9	0.55	0.89
(1,1592)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:30:SER:H	9	0.55	0.89
(1,1497)	1:A:65:THR:HG21	1:A:63:GLN:HB2	9	0.05	0.14
(1,1497)	1:A:65:THR:HG22	1:A:63:GLN:HB2	9	0.05	0.14
(1,1497)	1:A:65:THR:HG23	1:A:63:GLN:HB2	9	0.05	0.14
(1,1327)	1:A:68:LYS:HD2	1:A:71:GLU:HB2	9	0.25	0.8
(1,1327)	1:A:68:LYS:HD3	1:A:71:GLU:HB2	9	0.25	0.8
(1,1239)	1:A:60:GLU:HB3	1:A:56:LEU:HB2	9	0.15	0.67
(1,1161)	1:A:54:LEU:HD11	1:A:52:HIS:HB3	9	0.02	0.05
(1,1161)	1:A:54:LEU:HD12	1:A:52:HIS:HB3	9	0.02	0.05
(1,1161)	1:A:54:LEU:HD13	1:A:52:HIS:HB3	9	0.02	0.05
(1,808)	1:A:65:THR:HG21	1:A:30:SER:HA	8	0.02	0.03
(1,808)	1:A:65:THR:HG22	1:A:30:SER:HA	8	0.02	0.03
(1,808)	1:A:65:THR:HG23	1:A:30:SER:HA	8	0.02	0.03
(1,743)	1:A:70:GLN:HB2	1:A:72:MET:H	8	0.02	0.03
(1,743)	1:A:70:GLN:HB3	1:A:72:MET:H	8	0.02	0.03
(1,740)	1:A:70:GLN:HA	1:A:10:VAL:HG21	8	0.03	0.07
(1,740)	1:A:70:GLN:HA	1:A:10:VAL:HG22	8	0.03	0.07
(1,740)	1:A:70:GLN:HA	1:A:10:VAL:HG23	8	0.03	0.07
(1,43)	1:A:13:VAL:HG21	1:A:17:LEU:H	8	0.03	0.06
(1,43)	1:A:13:VAL:HG22	1:A:17:LEU:H	8	0.03	0.06
(1,43)	1:A:13:VAL:HG23	1:A:17:LEU:H	8	0.03	0.06
(1,43)	1:A:13:VAL:HG21	1:A:73:SER:H	8	0.03	0.06
(1,43)	1:A:13:VAL:HG22	1:A:73:SER:H	8	0.03	0.06
(1,43)	1:A:13:VAL:HG23	1:A:73:SER:H	8	0.03	0.06
(1,43)	1:A:13:VAL:HG21	1:A:18:GLY:H	8	0.03	0.06
(1,43)	1:A:13:VAL:HG22	1:A:18:GLY:H	8	0.03	0.06
(1,43)	1:A:13:VAL:HG23	1:A:18:GLY:H	8	0.03	0.06
(1,306)	1:A:40:MET:HB3	1:A:38:SER:H	8	0.03	0.05
(1,229)	1:A:31:LEU:HA	1:A:36:LEU:HD21	8	0.13	0.86
(1,229)	1:A:31:LEU:HA	1:A:36:LEU:HD22	8	0.13	0.86
(1,229)	1:A:31:LEU:HA	1:A:36:LEU:HD23	8	0.13	0.86
(1,221)	1:A:31:LEU:HB2	1:A:36:LEU:HB2	8	0.04	0.08
(1,17)	1:A:72:MET:HB3	1:A:9:LEU:HD21	8	0.67	1.52
(1,17)	1:A:72:MET:HB3	1:A:9:LEU:HD22	8	0.67	1.52
(1,17)	1:A:72:MET:HB3	1:A:9:LEU:HD23	8	0.67	1.52
(1,17)	1:A:72:MET:HB3	1:A:48:LEU:HD11	8	0.67	1.52
(1,17)	1:A:72:MET:HB3	1:A:48:LEU:HD12	8	0.67	1.52
(1,17)	1:A:72:MET:HB3	1:A:48:LEU:HD13	8	0.67	1.52
(1,1598)	1:A:70:GLN:HB2	1:A:9:LEU:HD21	8	0.04	0.09



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,1598)	1:A:70:GLN:HB2	1:A:9:LEU:HD22	8	0.04	0.09
(1,1598)	1:A:70:GLN:HB2	1:A:9:LEU:HD23	8	0.04	0.09
(1,1598)	1:A:70:GLN:HB3	1:A:9:LEU:HD21	8	0.04	0.09
(1,1598)	1:A:70:GLN:HB3	1:A:9:LEU:HD22	8	0.04	0.09
(1,1598)	1:A:70:GLN:HB3	1:A:9:LEU:HD23	8	0.04	0.09
(1,1586)	1:A:7:ARG:HG2	1:A:75:LYS:HE2	8	0.04	0.07
(1,1586)	1:A:7:ARG:HG2	1:A:75:LYS:HE3	8	0.04	0.07
(1,1586)	1:A:7:ARG:HG3	1:A:75:LYS:HE2	8	0.04	0.07
(1,1586)	1:A:7:ARG:HG3	1:A:75:LYS:HE3	8	0.04	0.07
(1,1552)	1:A:19:ILE:HG21	1:A:24:GLY:H	8	0.06	0.09
(1,1552)	1:A:19:ILE:HG22	1:A:24:GLY:H	8	0.06	0.09
(1,1552)	1:A:19:ILE:HG23	1:A:24:GLY:H	8	0.06	0.09
(1,1423)	1:A:42:VAL:HG21	1:A:39:LEU:HG	8	0.02	0.04
(1,1423)	1:A:42:VAL:HG22	1:A:39:LEU:HG	8	0.02	0.04
(1,1423)	1:A:42:VAL:HG23	1:A:39:LEU:HG	8	0.02	0.04
(1,1303)	1:A:64:LEU:HB2	1:A:31:LEU:HB3	8	0.27	0.56
(1,1263)	1:A:61:VAL:HG11	1:A:62:ARG:HB3	8	0.17	0.3
(1,1263)	1:A:61:VAL:HG12	1:A:62:ARG:HB3	8	0.17	0.3
(1,1263)	1:A:61:VAL:HG13	1:A:62:ARG:HB3	8	0.17	0.3
(1,1061)	1:A:36:LEU:HD21	1:A:38:SER:H	8	0.06	0.15
(1,1061)	1:A:36:LEU:HD22	1:A:38:SER:H	8	0.06	0.15
(1,1061)	1:A:36:LEU:HD23	1:A:38:SER:H	8	0.06	0.15
(1,58)	1:A:66:LEU:HD21	1:A:10:VAL:HB	7	0.02	0.04
(1,58)	1:A:66:LEU:HD22	1:A:10:VAL:HB	7	0.02	0.04
(1,58)	1:A:66:LEU:HD23	1:A:10:VAL:HB	7	0.02	0.04
(1,58)	1:A:36:LEU:HD11	1:A:43:GLU:HB2	7	0.02	0.04
(1,58)	1:A:36:LEU:HD12	1:A:43:GLU:HB2	7	0.02	0.04
(1,58)	1:A:36:LEU:HD13	1:A:43:GLU:HB2	7	0.02	0.04
(1,502)	1:A:19:ILE:HD11	1:A:25:ILE:HG13	7	0.37	1.0
(1,502)	1:A:19:ILE:HD12	1:A:25:ILE:HG13	7	0.37	1.0
(1,502)	1:A:19:ILE:HD13	1:A:25:ILE:HG13	7	0.37	1.0
(1,316)	1:A:40:MET:HB2	1:A:39:LEU:HD21	7	0.26	0.63
(1,316)	1:A:40:MET:HB2	1:A:39:LEU:HD22	7	0.26	0.63
(1,316)	1:A:40:MET:HB2	1:A:39:LEU:HD23	7	0.26	0.63
(1,240)	1:A:31:LEU:HD11	1:A:34:LEU:HB2	7	0.52	0.63
(1,240)	1:A:31:LEU:HD12	1:A:34:LEU:HB2	7	0.52	0.63
(1,240)	1:A:31:LEU:HD13	1:A:34:LEU:HB2	7	0.52	0.63
(1,233)	1:A:31:LEU:HD11	1:A:31:LEU:HA	7	0.75	0.8
(1,233)	1:A:31:LEU:HD12	1:A:31:LEU:HA	7	0.75	0.8
(1,233)	1:A:31:LEU:HD13	1:A:31:LEU:HA	7	0.75	0.8
(1,1411)	1:A:42:VAL:HG11	1:A:43:GLU:HG3	7	0.03	0.06
(1,1411)	1:A:42:VAL:HG12	1:A:43:GLU:HG3	7	0.03	0.06



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

(1,1411)	Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,1311) 1:A:64:LEU:HA	(1,1411)	1:A:42:VAL:HG13	1:A:43:GLU:HG3	7	0.03	0.06
(1,971) 1:A:27:LEU:HD11 1:A:25:ILE:H 6 0.04 0.05 (1,971) 1:A:27:LEU:HD12 1:A:25:ILE:H 6 0.04 0.05 (1,971) 1:A:27:LEU:HD13 1:A:25:ILE:H 6 0.04 0.05 (1,779) 1:A:25:HIS:HB2 1:A:63:GLN:HE21 6 0.67 1.18 (1,700) 1:A:59:ARG:HA 1:A:62:ARG:HD2 6 0.43 0.86 (1,700) 1:A:59:LEU:HD21 1:A:72:MET:H 6 0.02 0.04 (1,70) 1:A:9:LEU:HD22 1:A:72:MET:H 6 0.02 0.04 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:7:GLU:H 6 0.02 0.04 (1,70) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:7:GLU:H 6 0.02 0.04 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:7:GLU:H 6 0.02 0.04 (1,70) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:7:GLU:H 6 0.02 0.04 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:7:GLU:H 6 0.02 0.04 <t< td=""><td>(1,1311)</td><td>1:A:64:LEU:HA</td><td>1:A:68:LYS:HD2</td><td>7</td><td>0.02</td><td>0.03</td></t<>	(1,1311)	1:A:64:LEU:HA	1:A:68:LYS:HD2	7	0.02	0.03
(1,971) 1:A:27:LEU:HD12 1:A:25:ILE:H 6 0.04 0.05 (1,971) 1:A:27:LEU:HD13 1:A:25:ILE:H 6 0.04 0.05 (1,779) 1:A:52:HIS:IB2 1:A:6G.GLN:HE21 6 0.67 1.18 (1,719) 1:A:63:GLN:HB2 1:A:63:GLN:HE21 6 0.67 1.18 (1,719) 1:A:63:GLN:HB2 1:A:63:GLN:HE21 6 0.81 0.85 (1,700) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:63:GLN:HE21 6 0.43 0.86 (1,70) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:72:MET:H 6 0.02 0.04 (1,70) 1:A:9:LEU:HD22 1:A:72:MET:H 6 0.02 0.04 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:72:MET:H 6 0.02 0.04 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:72:MET:H 6 0.02 0.04 (1,70) 1:A:9:LEU:HD22 1:A:71:GLU:H 6 0.02 0.04 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 6 0.02 0.04 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 6 0.02 0.04 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 6 0.02 0.04 (1,50) 1:A:72:MET:HB2 1:A:72:MET:H 6 0.02 0.04 (1,50) 1:A:72:MET:HB2 1:A:72:MET:H 6 0.18 0.27 (1,456) 1:A:47:ILE:HB 1:A:50:ARG:H 6 0.03 0.04 (1,194) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD21 6 0.11 0.2 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD21 6 0.11 0.2 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD22 6 0.11 0.2 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD22 6 0.11 0.2 (1,1726) 1:A:80:THR:H 1:A:81:GLU:H 6 0.04 0.07 (1,1555) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB3 6 0.72 1.64 (1,1531) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB3 6 0.72 1.64 (1,1531) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB3 6 0.72 1.64 (1,1531) 1:A:10:VAL:HG21 1:A:72:MET:H 6 0.03 0.04 (1,1531) 1:A:10:VAL:HG21 1:A:72:MET:H 6 0.03 0.04 (1,1531) 1:A:10:VAL:HG21 1:A:72:MET:H 6 0.03 0.04 (1,1531) 1:A:10:VAL:HG21 1:A:72:MET:H 6 0.03 0.05 (1,1447) 1:A:13:VAL:HG11 1:A:72:MET:H 6 0.03 0.05 (1,1447) 1:A:13:VAL:HG11 1:A:72:MET:H 6 0.03 0.05 (1,1447) 1:A:13:VAL:HG11 1:A:72:MET:H 6 0.03 0.06 (1,1447) 1:A:13:VAL:HG11 1:A:71:LEU:HG 6 0.02 0.05 (1,1447) 1:A:13:VAL:HG11 1:A:71:LEU:HG 6 0.045 0.09 (0,05 (1,1447) 1:A:13:VAL:HG11 1:A:91:LEU:HG 6 0.02 0.05 (1,1447) 1:A:13:VAL:HG11 1:A:91:LEU:HG 6 0.045 0.95 (1,1110) 1:A:55:VAL:HG22 1:A:49:GLU:HG3 6 0.45 0.95 (1,111	(1,1311)	1:A:64:LEU:HA	1:A:68:LYS:HD3	7	0.02	0.03
(1,971) 1:A:27:LEU:HD13 1:A:25:ILE:H 6 0.04 0.05 (1,779) 1:A:52:HIS:HB2 1:A:6:GLN:HE21 6 0.67 1.18 (1,719) 1:A:63:GLN:HB2 1:A:6:GLN:HE21 6 0.81 0.85 (1,700) 1:A:59:ARG:HA 1:A:62:ARG:HD2 6 0.43 0.86 (1,700) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:72:MET:H 6 0.02 0.04 (1,70) 1:A:9:LEU:HD22 1:A:72:MET:H 6 0.02 0.04 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:72:MET:H 6 0.02 0.04 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:72:MET:H 6 0.02 0.04 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 6 0.02 0.04 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 6 0.02 0.04 (1,70) 1:A:9:LEU:HD22 1:A:71:GLU:H 6 0.02 0.04 (1,70) 1:A:9:LEU:HD22 1:A:71:GLU:H 6 0.02 0.04 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 6 0.02 0.04 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 6 0.02 0.04 (1,549) 1:A:72:MET:HB2 1:A:72:MET:H 6 0.18 0.27 (1,456) 1:A:47:ILE:HB 1:A:50:ARG:H 6 0.03 0.04 (1,194) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD2 6 0.11 0.2 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD2 6 0.11 0.2 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD22 6 0.11 0.2 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD23 6 0.11 0.2 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD23 6 0.11 0.2 (1,1726) 1:A:30:THR:H 1:A:31:GLU:H 6 0.04 0.07 (1,1555) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB3 6 0.72 1.64 (1,1555) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB3 6 0.72 1.64 (1,1555) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB3 6 0.72 1.64 (1,1531) 1:A:10:VAL:HG21 1:A:72:MET:H 6 0.03 0.04 (1,1531) 1:A:10:VAL:HG21 1:A:72:MET:H 6 0.03 0.04 (1,1431) 1:A:10:VAL:HG21 1:A:72:MET:H 6 0.03 0.04 (1,1431) 1:A:10:VAL:HG21 1:A:72:MET:H 6 0.03 0.05 (1,1447) 1:A:13:VAL:HG11 1:A:17:LEU:HG 6 0.02 0.05 (1,1447) 1:A:13:VAL:HG11 1:A:17:LEU:HG 6 0.045 0.95 (1,111) 1:A:55:VAL:HG22 1:A:49:GLU:HG3 6 0.45 0.95 (1,111) 1:A:55:VAL:HG22 1:A:49:GLU:HG3 6 0.45 0.95 (1,111) 1:A:36:LEU	(1,971)	1:A:27:LEU:HD11	1:A:25:ILE:H	6	0.04	0.05
(1,779) 1:A:52:HIS:HB2 1:A:6:GLN:HE21 6 0.67 1.18 (1,719) 1:A:63:GLN:HB2 1:A:63:GLN:HE21 6 0.81 0.85 (1,700) 1:A:59:ARG:HA 1:A:63:GLN:HE21 6 0.81 0.85 (1,700) 1:A:59:ARG:HA 1:A:62:ARG:HD2 6 0.43 0.86 (1,70) 1:A:9:LEU:HD22 1:A:72:MET:H 6 0.02 0.04 (1,70) 1:A:9:LEU:HD22 1:A:72:MET:H 6 0.02 0.04 (1,70) 1:A:9:LEU:HD22 1:A:72:MET:H 6 0.02 0.04 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:72:MET:H 6 0.02 0.04 (1,70) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:71:GLU:H 6 0.02 0.04 (1,70) 1:A:9:LEU:HD22 1:A:71:GLU:H 6 0.02 0.04 (1,70) 1:A:9:LEU:HD22 1:A:71:GLU:H 6 0.02 0.04 (1,70) 1:A:9:LEU:HD22 1:A:71:GLU:H 6 0.02 0.04 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 6 0.02 0.04 (1,549) 1:A:72:MET:HB2 1:A:72:MET:H 6 0.18 0.27 (1,456) 1:A:47:ILE:HB 1:A:50:ARG:H 6 0.03 0.04 (1,194) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HG 6 0.02 0.03 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD21 6 0.11 0.2 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD21 6 0.11 0.2 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD22 6 0.11 0.2 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD22 6 0.11 0.2 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD23 6 0.11 0.2 (1,192) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB3 6 0.72 1.64 (1,1555) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB3 6 0.72 1.64 (1,1555) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB3 6 0.72 1.64 (1,1555) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB3 6 0.72 1.64 (1,1531) 1:A:10:VAL:HG21 1:A:72:MET:H 6 0.03 0.04 (1,1531) 1:A:10:VAL:HG23 1:A:32:ABF:HB 6 0.03 0.04 (1,1531) 1:A:10:VAL:HG23 1:A:72:MET:H 6 0.03 0.04 (1,149) 1:A:13:VAL:HG11 1:A:17:LEU:HG 6 0.02 0.05 (1,1447) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:17:LEU:HG 6 0.03 0.06 (1,1435) 1:A:13:VAL:HG11 1:A:19:LEU:HA 6 0.03 0.06 (1,1435) 1:A:13:VAL:HG11 1:A:19:LEU:HA 6 0.03 0.06 (1,1447) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:49:GLU:HG3 6 0.45 0.95 (1,1141) 1:A:55:VAL:HG22 1:A:49:GLU:HG3 6 0.45 0.95 (1,1141) 1:A:55:VAL:HG21 1:A:49:GLU:HG3 6 0.45 0.95 (1,1111) 1:A:55:VAL:HG23 1:A:49:GLU:HG3 6 0.45 0.95 (1,1111) 1:A:55:VAL:HG21 1:A:49:GLU:HG3 6 0.45 0.95 (1,1111) 1:A:55:VAL:HG21 1:A:49:GLU:HG3 6 0.45 0.95 (1,	(1,971)	1:A:27:LEU:HD12	1:A:25:ILE:H	6	0.04	0.05
(1,719) 1:A:63:GLN:HB2 1:A:63:GLN:HE21 6 0.81 0.85 (1,700) 1:A:59:ARG:HA 1:A:62:ARG:HD2 6 0.43 0.86 (1,700) 1:A:59:LEU:HD21 1:A:72:MET:H 6 0.02 0.04 (1,70) 1:A:9:LEU:HD22 1:A:72:MET:H 6 0.02 0.04 (1,70) 1:A:9:LEU:HD22 1:A:72:MET:H 6 0.02 0.04 (1,70) 1:A:9:LEU:HD22 1:A:72:MET:H 6 0.02 0.04 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 6 0.02 0.04 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 6 0.02 0.04 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 6 0.02 0.04 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:72:MET:H 6 0.02 0.04 (1,549) 1:A:72:MET:HB2 1:A:72:MET:H 6 0.18 0.27 (1,456) 1:A:47:ILE:HB 1:A:50:ARG:H 6 0.03 0.04 (1,194) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HG 6 0.02 0.03 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HG 6 0.02 0.03 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD21 6 0.11 0.2 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD22 6 0.11 0.2 (1,1726) 1:A:30:THR:H 1:A:38:LEU:HD23 6 0.11 0.2 (1,1555) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB3 6 0.72 1.64 (1,1555) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB3 6 0.72 1.64 (1,1555) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB3 6 0.72 1.64 (1,1531) 1:A:10:VAL:HG21 1:A:72:MET:H 6 0.03 0.04 (1,1493) 1:A:46:GLN:HG3 1:A:72:MET:H 6 0.03 0.04 (1,1493) 1:A:46:GLN:HG3 1:A:72:MET:H 6 0.03 0.05 (1,1447) 1:A:13:VAL:HG11 1:A:17:LEU:HG 6 0.02 0.05 (1,1447) 1:A:13:VAL:HG11 1:A:17:LEU:HG 6 0.03 0.06 (1,1435) 1:A:13:VAL:HG11 1:A:19:LEU:HA 6 0.03 0.06 (1,1447) 1:A:13:VAL:HG11 1:A:17:LEU:HG 6 0.02 0.05 (1,1447) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:49:LEU:HA 6 0.03 0.06 (1,1447) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:49:LEU:HA 6 0.03 0.06 (1,1435)	(1,971)	1:A:27:LEU:HD13	1:A:25:ILE:H	6	0.04	0.05
(1,700) 1:A:59:ARG:HA 1:A:62:ARG:HD2 6 0.43 0.86 (1,70) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:72:MET:H 6 0.02 0.04 (1,70) 1:A:9:LEU:HD22 1:A:72:MET:H 6 0.02 0.04 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:72:MET:H 6 0.02 0.04 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:72:MET:H 6 0.02 0.04 (1,70) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:71:GLU:H 6 0.02 0.04 (1,70) 1:A:9:LEU:HD22 1:A:71:GLU:H 6 0.02 0.04 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 6 0.02 0.04 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 6 0.02 0.04 (1,549) 1:A:72:MET:HB2 1:A:72:MET:H 6 0.18 0.27 (1,456) 1:A:72:MET:HB2 1:A:72:MET:H 6 0.18 0.27 (1,456) 1:A:47:ILE:HB 1:A:50:ARG:H 6 0.03 0.04 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HG2 6 0.02 0.03 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD21 6 0.11 0.2 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD22 6 0.11 0.2 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD23 6 0.11 0.2 (1,1726) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB3 6 0.72 1.64 (1,1555) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB3 6 0.72 1.64 (1,1555) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB3 6 0.72 1.64 (1,1555) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB3 6 0.72 1.64 (1,1531) 1:A:10:VAL:HG21 1:A:72:MET:H 6 0.03 0.04 (1,1431) 1:A:10:VAL:HG21 1:A:72:MET:H 6 0.03 0.04 (1,1431) 1:A:10:VAL:HG21 1:A:72:MET:H 6 0.03 0.04 (1,1433) 1:A:46:GLN:HG3 1:A:50:ARG:HD3 6 0.03 0.05 (1,1447) 1:A:13:VAL:HG11 1:A:17:LEU:HG 6 0.03 0.05 (1,1447) 1:A:13:VAL:HG11 1:A:17:LEU:HG 6 0.03 0.05 (1,1447) 1:A:13:VAL:HG11 1:A:17:LEU:HG 6 0.03 0.06 (1,1447) 1:A:13:VAL:HG11 1:A:17:LEU:HG 6 0.02 0.05 (1,1447) 1:A:13:VAL:HG11 1:A:17:LEU:HG 6 0.02 0.05 (1,1447) 1:A:13:VAL:HG11 1:A:17:LEU:HG 6 0.02 0.05 (1,1447) 1:A:13:VAL:HG11 1:A:17:LEU:HG 6 0.03 0.06 (1,1445) 1:A:13:VAL:HG11 1:A:17:LEU:HG 6 0.02 0.05 (1,1447) 1:A:13:VAL:HG11 1:A:17:LEU:HG 6 0.03 0.06 (1,1445) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:49:LEU:HA 6 0.03 0.06 (1,1447) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:19:LEU:HA 6 0.03 0.06 (1,1447) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:19:LEU:HA 6 0.03 0.06 (1,1447) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:19:LEU:HA 6 0.03 0.06 (1,1445) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:19:LEU:HA 6 0.03 0.06 (1,1445) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:19:LEU:HA 6 0.03 0.06 (1,1447) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:19:LEU:HA 6 0.03 0.06 (1,1447) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:19:LEU:HA 6 0.03 0.006 ((1,779)	1:A:52:HIS:HB2	1:A:6:GLN:HE21	6	0.67	1.18
(1,70) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:72:MET:H 6 0.02 0.04 (1,70) 1:A:9:LEU:HD22 1:A:72:MET:H 6 0.02 0.04 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:72:MET:H 6 0.02 0.04 (1,70) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:71:GLU:H 6 0.02 0.04 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 6 0.02 0.04 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 6 0.02 0.04 (1,549) 1:A:72:MET:HB2 1:A:72:MET:H 6 0.18 0.27 (1,456) 1:A:47:ILE:HB 1:A:50:ARG:H 6 0.02 0.03 (1,194) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HG 6 0.02 0.03 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD21 6 0.11 0.2 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD23 6 0.11 0.2 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD23 6 0.11 0.2	(1,719)	1:A:63:GLN:HB2	1:A:63:GLN:HE21	6	0.81	0.85
(1,70)	(1,700)	1:A:59:ARG:HA	1:A:62:ARG:HD2	6	0.43	0.86
(1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:72:MET:H 6 0.02 0.04 (1,70) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:71:GLU:H 6 0.02 0.04 (1,70) 1:A:9:LEU:HD22 1:A:71:GLU:H 6 0.02 0.04 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 6 0.02 0.04 (1,549) 1:A:72:MET:HB2 1:A:72:MET:H 6 0.18 0.27 (1,456) 1:A:47:ILE:HB 1:A:50:ARG:H 6 0.03 0.04 (1,194) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD21 6 0.11 0.2 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD22 6 0.11 0.2 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD23 6 0.11 0.2 (1,192) 1:A:36:GTR:H 1:A:33:ASP:HB3 6 0.72 1.64 (1,192) 1:A:36:CTR:H 1:A:33:ASP:HB3 6 0.72 1.64 (1,192) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB3 6 0.72 1.64	(1,70)	1:A:9:LEU:HD21	1:A:72:MET:H	6	0.02	0.04
(1,70) 1:A:9:LEU:HD21 1:A:71:GLU:H 6 0.02 0.04 (1,70) 1:A:9:LEU:HD22 1:A:71:GLU:H 6 0.02 0.04 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 6 0.02 0.04 (1,549) 1:A:72:MET:HB2 1:A:72:MET:H 6 0.18 0.27 (1,456) 1:A:72:MET:HB2 1:A:72:MET:H 6 0.03 0.04 (1,194) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HG 6 0.02 0.03 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD21 6 0.11 0.2 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD22 6 0.11 0.2 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD23 6 0.11 0.2 (1,192) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB3 6 0.72 1.64 (1,1555) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB3 6 0.72 1.64 (1,1555) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:72:MET:H 6 0.03 0.04	(1,70)	1:A:9:LEU:HD22	1:A:72:MET:H	6	0.02	0.04
(1,70) 1:A:9:LEU:HD22 1:A:71:GLU:H 6 0.02 0.04 (1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 6 0.02 0.04 (1,549) 1:A:72:MET:HB2 1:A:72:MET:H 6 0.18 0.27 (1,456) 1:A:47:ILE:HB 1:A:50:ARG:H 6 0.03 0.04 (1,194) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HG 6 0.02 0.03 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD21 6 0.11 0.2 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD22 6 0.11 0.2 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD22 6 0.11 0.2 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD23 6 0.11 0.2 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD23 6 0.11 0.2 (1,192) 1:A:39:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD23 6 0.11 0.2 (1,155) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB3 6 0.72 1.64 (1,1555) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB3 6 0.72 1.64 (1,1555) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB3 6 0.72 1.64 (1,1555) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB3 6 0.72 1.64 (1,1551) 1:A:10:VAL:HG21 1:A:72:MET:H 6 0.03 0.04 (1,1531) 1:A:10:VAL:HG21 1:A:72:MET:H 6 0.03 0.04 (1,1531) 1:A:10:VAL:HG22 1:A:72:MET:H 6 0.03 0.04 (1,1493) 1:A:46:GLN:HG3 1:A:50:ARG:HD2 6 0.03 0.05 (1,1447) 1:A:13:VAL:HG11 1:A:17:LEU:HG 6 0.02 0.05 (1,1447) 1:A:13:VAL:HG11 1:A:17:LEU:HG 6 0.02 0.05 (1,1447) 1:A:13:VAL:HG11 1:A:17:LEU:HG 6 0.02 0.05 (1,1447) 1:A:13:VAL:HG11 1:A:17:LEU:HG 6 0.03 0.06 (1,1435) 1:A:13:VAL:HG11 1:A:17:LEU:HG 6 0.03 0.06 (1,1445) 1:A:13:VAL:HG11 1:A:17:LEU:HG 6 0.03 0.06 (1,1445) 1:A:13:VAL:HG11 1:A:17:LEU:HG 6 0.02 0.05 (1,1447) 1:A:13:VAL:HG11 1:A:17:LEU:HG 6 0.02 0.05 (1,1447) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:17:LEU:HG 6 0.03 0.06 (1,1445) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:17:LEU:HG 6 0.03 0.06 (1,1445) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:17:LEU:HG 6 0.03 0.06 (1,1445) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:17:LEU:HG 6 0.03 0.06 (1,1447) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:17:LEU:HG 6 0.02 0.05 (1,1447) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:17:LEU:HG 6 0.03 0.06 (1,1445) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:17:LEU:HG 6 0.09 0.09 0.05 (1,1447) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:19:LEU:HA 6 0.09 0.09 0.09 0.09 0.09 0.09 0.09 0.	(1,70)	1:A:9:LEU:HD23	1:A:72:MET:H	6	0.02	0.04
(1,70) 1:A:9:LEU:HD23 1:A:71:GLU:H 6 0.02 0.04 (1,549) 1:A:72:MET:HB2 1:A:72:MET:H 6 0.18 0.27 (1,456) 1:A:47:ILE:HB 1:A:50:ARG:H 6 0.03 0.04 (1,194) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HG 6 0.02 0.03 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD21 6 0.11 0.2 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD22 6 0.11 0.2 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD23 6 0.11 0.2 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD23 6 0.11 0.2 (1,1726) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:38:GLU:H 6 0.04 0.07 (1,1555) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB3 6 0.72 1.64 (1,1555) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB3 6 0.72 1.64 (1,1531) 1:A:10:VAL:HG21 1:A:72:MET:H 6 0.03 0.04 <td>(1,70)</td> <td>1:A:9:LEU:HD21</td> <td>1:A:71:GLU:H</td> <td>6</td> <td>0.02</td> <td>0.04</td>	(1,70)	1:A:9:LEU:HD21	1:A:71:GLU:H	6	0.02	0.04
(1,549) 1:A:72:MET:HB2 1:A:72:MET:H 6 0.18 0.27 (1,456) 1:A:47:ILE:HB 1:A:50:ARG:H 6 0.03 0.04 (1,194) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HG 6 0.02 0.03 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD21 6 0.11 0.2 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD22 6 0.11 0.2 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD23 6 0.11 0.2 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD23 6 0.11 0.2 (1,192) 1:A:30:THR:H 1:A:81:GLU:H 6 0.04 0.07 (1,1555) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB3 6 0.72 1.64 (1,1555) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB3 6 0.72 1.64 (1,1551) 1:A:10:VAL:HG21 1:A:72:MET:H 6 0.03 0.04 (1,1531) 1:A:10:VAL:HG21 1:A:72:MET:H 6 0.03 0.04 <td>(1,70)</td> <td>1:A:9:LEU:HD22</td> <td>1:A:71:GLU:H</td> <td>6</td> <td>0.02</td> <td>0.04</td>	(1,70)	1:A:9:LEU:HD22	1:A:71:GLU:H	6	0.02	0.04
(1,456) 1:A:47:ILE:HB 1:A:50:ARG:H 6 0.03 0.04 (1,194) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HG 6 0.02 0.03 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD21 6 0.11 0.2 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD22 6 0.11 0.2 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD23 6 0.11 0.2 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD23 6 0.11 0.2 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD23 6 0.11 0.2 (1,1726) 1:A:38:CHU:HD21 1:A:33:ASP:HB3 6 0.72 1.64 (1,1555) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB3 6 0.72 1.64 (1,1555) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB3 6 0.72 1.64 (1,1551) 1:A:10:VAL:HG21 1:A:72:MET:H 6 0.03 0.04 (1,1531) 1:A:10:VAL:HG23 1:A:72:MET:H 6 0.03 0.04	(1,70)	1:A:9:LEU:HD23	1:A:71:GLU:H	6	0.02	0.04
(1,194) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HG 6 0.02 0.03 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD21 6 0.11 0.2 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD22 6 0.11 0.2 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD23 6 0.11 0.2 (1,1726) 1:A:80:THR:H 1:A:381:GLU:H 6 0.04 0.07 (1,1555) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB3 6 0.72 1.64 (1,1555) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB3 6 0.72 1.64 (1,1555) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB3 6 0.72 1.64 (1,1555) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB3 6 0.72 1.64 (1,1551) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:72:MET:H 6 0.03 0.04 (1,1531) 1:A:10:VAL:HG21 1:A:72:MET:H 6 0.03 0.04 (1,1433) 1:A:46:GLN:HG3 1:A:75:MET:H 6 0.03 0.05 <td>(1,549)</td> <td>1:A:72:MET:HB2</td> <td>1:A:72:MET:H</td> <td>6</td> <td>0.18</td> <td>0.27</td>	(1,549)	1:A:72:MET:HB2	1:A:72:MET:H	6	0.18	0.27
(1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD21 6 0.11 0.2 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD22 6 0.11 0.2 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD23 6 0.11 0.2 (1,1726) 1:A:80:THR:H 1:A:81:GLU:H 6 0.04 0.07 (1,1555) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB3 6 0.72 1.64 (1,1555) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB3 6 0.72 1.64 (1,1555) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB3 6 0.72 1.64 (1,1555) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB3 6 0.72 1.64 (1,1551) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB3 6 0.72 1.64 (1,1531) 1:A:10:VAL:HG21 1:A:72:MET:H 6 0.03 0.04 (1,1433) 1:A:10:VAL:HG23 1:A:72:MET:H 6 0.03 0.05 (1,1447) 1:A:46:GLN:HG3 1:A:50:ARG:HD3 6 0.03 0.05	(1,456)	1:A:47:ILE:HB	1:A:50:ARG:H	6	0.03	0.04
(1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD22 6 0.11 0.2 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD23 6 0.11 0.2 (1,1726) 1:A:80:THR:H 1:A:381:GLU:H 6 0.04 0.07 (1,1555) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB3 6 0.72 1.64 (1,1555) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB3 6 0.72 1.64 (1,1555) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB3 6 0.72 1.64 (1,1551) 1:A:10:VAL:HG21 1:A:72:MET:H 6 0.03 0.04 (1,1531) 1:A:10:VAL:HG21 1:A:72:MET:H 6 0.03 0.04 (1,1531) 1:A:10:VAL:HG23 1:A:72:MET:H 6 0.03 0.04 (1,1493) 1:A:46:GLN:HG3 1:A:50:ARG:HD2 6 0.03 0.05 (1,1447) 1:A:13:VAL:HG11 1:A:17:LEU:HG 6 0.02 0.05 (1,1447) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:17:LEU:HG 6 0.02 0.05<	(1,194)	1:A:29:SER:HB3	1:A:34:LEU:HG	6	0.02	0.03
(1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD23 6 0.11 0.2 (1,1726) 1:A:80:THR:H 1:A:81:GLU:H 6 0.04 0.07 (1,1555) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB3 6 0.72 1.64 (1,1555) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB3 6 0.72 1.64 (1,1555) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB3 6 0.72 1.64 (1,1551) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB3 6 0.72 1.64 (1,1531) 1:A:10:VAL:HG21 1:A:72:MET:H 6 0.03 0.04 (1,1531) 1:A:10:VAL:HG22 1:A:72:MET:H 6 0.03 0.04 (1,1531) 1:A:10:VAL:HG23 1:A:72:MET:H 6 0.03 0.04 (1,1493) 1:A:46:GLN:HG3 1:A:50:ARG:HD2 6 0.03 0.05 (1,1447) 1:A:13:VAL:HG11 1:A:17:LEU:HG 6 0.02 0.05 (1,1447) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:17:LEU:HG 6 0.02 0.05	(1,192)	1:A:29:SER:HB3	1:A:34:LEU:HD21	6	0.11	0.2
(1,1726) 1:A:80:THR:H 1:A:81:GLU:H 6 0.04 0.07 (1,1555) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB3 6 0.72 1.64 (1,1555) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB3 6 0.72 1.64 (1,1555) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB3 6 0.72 1.64 (1,1551) 1:A:10:VAL:HG21 1:A:72:MET:H 6 0.03 0.04 (1,1531) 1:A:10:VAL:HG22 1:A:72:MET:H 6 0.03 0.04 (1,1531) 1:A:10:VAL:HG23 1:A:72:MET:H 6 0.03 0.04 (1,1531) 1:A:46:GLN:HG33 1:A:72:MET:H 6 0.03 0.04 (1,1493) 1:A:46:GLN:HG3 1:A:50:ARG:HD2 6 0.03 0.05 (1,1447) 1:A:13:VAL:HG11 1:A:17:LEU:HG 6 0.02 0.05 (1,1447) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:17:LEU:HG 6 0.02 0.05 (1,1447) 1:A:13:VAL:HG11 1:A:9:LEU:HA 6 0.03 0.06 </td <td>(1,192)</td> <td>1:A:29:SER:HB3</td> <td>1:A:34:LEU:HD22</td> <td>6</td> <td>0.11</td> <td>0.2</td>	(1,192)	1:A:29:SER:HB3	1:A:34:LEU:HD22	6	0.11	0.2
(1,1555) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB3 6 0.72 1.64 (1,1555) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB3 6 0.72 1.64 (1,1555) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB3 6 0.72 1.64 (1,1531) 1:A:10:VAL:HG21 1:A:72:MET:H 6 0.03 0.04 (1,1531) 1:A:10:VAL:HG22 1:A:72:MET:H 6 0.03 0.04 (1,1531) 1:A:10:VAL:HG23 1:A:72:MET:H 6 0.03 0.04 (1,1493) 1:A:46:GLN:HG3 1:A:50:ARG:HD2 6 0.03 0.05 (1,1493) 1:A:46:GLN:HG3 1:A:50:ARG:HD3 6 0.03 0.05 (1,1447) 1:A:13:VAL:HG11 1:A:17:LEU:HG 6 0.02 0.05 (1,1447) 1:A:13:VAL:HG12 1:A:17:LEU:HG 6 0.02 0.05 (1,1435) 1:A:13:VAL:HG11 1:A:9:LEU:HA 6 0.02 0.05 (1,1435) 1:A:13:VAL:HG12 1:A:9:LEU:HA 6 0.03 0.	(1,192)	1:A:29:SER:HB3	1:A:34:LEU:HD23	6	0.11	0.2
(1,1555) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB3 6 0.72 1.64 (1,1555) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB3 6 0.72 1.64 (1,1531) 1:A:10:VAL:HG21 1:A:72:MET:H 6 0.03 0.04 (1,1531) 1:A:10:VAL:HG22 1:A:72:MET:H 6 0.03 0.04 (1,1531) 1:A:10:VAL:HG23 1:A:72:MET:H 6 0.03 0.04 (1,1433) 1:A:46:GLN:HG3 1:A:50:ARG:HD2 6 0.03 0.05 (1,1493) 1:A:46:GLN:HG3 1:A:50:ARG:HD3 6 0.03 0.05 (1,1447) 1:A:13:VAL:HG11 1:A:17:LEU:HG 6 0.02 0.05 (1,1447) 1:A:13:VAL:HG12 1:A:17:LEU:HG 6 0.02 0.05 (1,1435) 1:A:13:VAL:HG11 1:A:9:LEU:HA 6 0.02 0.05 (1,1435) 1:A:13:VAL:HG12 1:A:9:LEU:HA 6 0.03 0.06 (1,1435) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:9:LEU:HA 6 0.03 0.06	(1,1726)	1:A:80:THR:H	1:A:81:GLU:H	6	0.04	0.07
(1,1555) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB3 6 0.72 1.64 (1,1531) 1:A:10:VAL:HG21 1:A:72:MET:H 6 0.03 0.04 (1,1531) 1:A:10:VAL:HG22 1:A:72:MET:H 6 0.03 0.04 (1,1531) 1:A:10:VAL:HG23 1:A:72:MET:H 6 0.03 0.04 (1,1493) 1:A:46:GLN:HG3 1:A:50:ARG:HD2 6 0.03 0.05 (1,1493) 1:A:46:GLN:HG3 1:A:50:ARG:HD3 6 0.03 0.05 (1,1447) 1:A:13:VAL:HG11 1:A:17:LEU:HG 6 0.02 0.05 (1,1447) 1:A:13:VAL:HG12 1:A:17:LEU:HG 6 0.02 0.05 (1,1447) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:17:LEU:HG 6 0.02 0.05 (1,1435) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:9:LEU:HA 6 0.03 0.06 (1,1435) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:9:LEU:HA 6 0.03 0.06 (1,1435) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:9:LEU:HA 6 0.03 0.06<	(1,1555)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:33:ASP:HB3	6	0.72	1.64
(1,1531) 1:A:10:VAL:HG21 1:A:72:MET:H 6 0.03 0.04 (1,1531) 1:A:10:VAL:HG22 1:A:72:MET:H 6 0.03 0.04 (1,1531) 1:A:10:VAL:HG23 1:A:72:MET:H 6 0.03 0.04 (1,1493) 1:A:46:GLN:HG3 1:A:50:ARG:HD2 6 0.03 0.05 (1,1493) 1:A:46:GLN:HG3 1:A:50:ARG:HD3 6 0.03 0.05 (1,1447) 1:A:13:VAL:HG11 1:A:17:LEU:HG 6 0.02 0.05 (1,1447) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:17:LEU:HG 6 0.02 0.05 (1,1447) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:17:LEU:HG 6 0.02 0.05 (1,1435) 1:A:13:VAL:HG11 1:A:9:LEU:HA 6 0.03 0.06 (1,1435) 1:A:13:VAL:HG12 1:A:9:LEU:HA 6 0.03 0.06 (1,1435) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:9:LEU:HA 6 0.03 0.06 (1,111) 1:A:55:VAL:HG21 1:A:49:GLU:HG3 6 0.45 0.95 </td <td>(1,1555)</td> <td>1:A:34:LEU:HD22</td> <td>1:A:33:ASP:HB3</td> <td>6</td> <td>0.72</td> <td>1.64</td>	(1,1555)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:33:ASP:HB3	6	0.72	1.64
(1,1531) 1:A:10:VAL:HG22 1:A:72:MET:H 6 0.03 0.04 (1,1531) 1:A:10:VAL:HG23 1:A:72:MET:H 6 0.03 0.04 (1,1493) 1:A:46:GLN:HG3 1:A:50:ARG:HD2 6 0.03 0.05 (1,1493) 1:A:46:GLN:HG3 1:A:50:ARG:HD3 6 0.03 0.05 (1,1447) 1:A:13:VAL:HG11 1:A:17:LEU:HG 6 0.02 0.05 (1,1447) 1:A:13:VAL:HG12 1:A:17:LEU:HG 6 0.02 0.05 (1,1447) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:17:LEU:HG 6 0.02 0.05 (1,1435) 1:A:13:VAL:HG11 1:A:9:LEU:HA 6 0.03 0.06 (1,1435) 1:A:13:VAL:HG12 1:A:9:LEU:HA 6 0.03 0.06 (1,1435) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:9:LEU:HA 6 0.03 0.06 (1,111) 1:A:55:VAL:HG21 1:A:49:GLU:HG3 6 0.45 0.95 (1,111) 1:A:55:VAL:HG23 1:A:49:GLU:HG3 6 0.45 0.95<	(1,1555)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:33:ASP:HB3	6	0.72	1.64
(1,1531) 1:A:10:VAL:HG23 1:A:72:MET:H 6 0.03 0.04 (1,1493) 1:A:46:GLN:HG3 1:A:50:ARG:HD2 6 0.03 0.05 (1,1493) 1:A:46:GLN:HG3 1:A:50:ARG:HD3 6 0.03 0.05 (1,1447) 1:A:13:VAL:HG11 1:A:17:LEU:HG 6 0.02 0.05 (1,1447) 1:A:13:VAL:HG12 1:A:17:LEU:HG 6 0.02 0.05 (1,1447) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:17:LEU:HG 6 0.02 0.05 (1,1435) 1:A:13:VAL:HG11 1:A:9:LEU:HA 6 0.03 0.06 (1,1435) 1:A:13:VAL:HG12 1:A:9:LEU:HA 6 0.03 0.06 (1,1435) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:9:LEU:HA 6 0.03 0.06 (1,111) 1:A:55:VAL:HG21 1:A:49:GLU:HG3 6 0.45 0.95 (1,111) 1:A:55:VAL:HG23 1:A:49:GLU:HG3 6 0.45 0.95 (1,1108) 1:A:48:LEU:HA 1:A:38:SER:H 6 0.06 0.18 <td>(1,1531)</td> <td>1:A:10:VAL:HG21</td> <td>1:A:72:MET:H</td> <td>6</td> <td>0.03</td> <td>0.04</td>	(1,1531)	1:A:10:VAL:HG21	1:A:72:MET:H	6	0.03	0.04
(1,1493) 1:A:46:GLN:HG3 1:A:50:ARG:HD2 6 0.03 0.05 (1,1493) 1:A:46:GLN:HG3 1:A:50:ARG:HD3 6 0.03 0.05 (1,1447) 1:A:13:VAL:HG11 1:A:17:LEU:HG 6 0.02 0.05 (1,1447) 1:A:13:VAL:HG12 1:A:17:LEU:HG 6 0.02 0.05 (1,1447) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:17:LEU:HG 6 0.02 0.05 (1,1435) 1:A:13:VAL:HG11 1:A:9:LEU:HA 6 0.03 0.06 (1,1435) 1:A:13:VAL:HG12 1:A:9:LEU:HA 6 0.03 0.06 (1,1435) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:9:LEU:HA 6 0.03 0.06 (1,1435) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:49:LEU:HA 6 0.03 0.06 (1,111) 1:A:55:VAL:HG21 1:A:49:GLU:HG3 6 0.45 0.95 (1,111) 1:A:55:VAL:HG23 1:A:49:GLU:HG3 6 0.45 0.95 (1,1108) 1:A:48:LEU:HA 1:A:38:SER:H 6 0.06 0.18 </td <td>(1,1531)</td> <td>1:A:10:VAL:HG22</td> <td>1:A:72:MET:H</td> <td>6</td> <td>0.03</td> <td>0.04</td>	(1,1531)	1:A:10:VAL:HG22	1:A:72:MET:H	6	0.03	0.04
(1,1493) 1:A:46:GLN:HG3 1:A:50:ARG:HD3 6 0.03 0.05 (1,1447) 1:A:13:VAL:HG11 1:A:17:LEU:HG 6 0.02 0.05 (1,1447) 1:A:13:VAL:HG12 1:A:17:LEU:HG 6 0.02 0.05 (1,1447) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:17:LEU:HG 6 0.02 0.05 (1,1435) 1:A:13:VAL:HG11 1:A:9:LEU:HA 6 0.03 0.06 (1,1435) 1:A:13:VAL:HG12 1:A:9:LEU:HA 6 0.03 0.06 (1,1435) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:9:LEU:HA 6 0.03 0.06 (1,1435) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:9:LEU:HA 6 0.03 0.06 (1,111) 1:A:55:VAL:HG21 1:A:49:GLU:HG3 6 0.45 0.95 (1,111) 1:A:55:VAL:HG22 1:A:49:GLU:HG3 6 0.45 0.95 (1,1108) 1:A:48:LEU:HA 1:A:52:HIS:HB3 6 0.02 0.03 (1,1071) 1:A:36:LEU:HG 1:A:38:SER:H 6 0.06 0.18 <td>(1,1531)</td> <td>1:A:10:VAL:HG23</td> <td>1:A:72:MET:H</td> <td>6</td> <td>0.03</td> <td>0.04</td>	(1,1531)	1:A:10:VAL:HG23	1:A:72:MET:H	6	0.03	0.04
(1,1447) 1:A:13:VAL:HG11 1:A:17:LEU:HG 6 0.02 0.05 (1,1447) 1:A:13:VAL:HG12 1:A:17:LEU:HG 6 0.02 0.05 (1,1447) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:17:LEU:HG 6 0.02 0.05 (1,1435) 1:A:13:VAL:HG11 1:A:9:LEU:HA 6 0.03 0.06 (1,1435) 1:A:13:VAL:HG12 1:A:9:LEU:HA 6 0.03 0.06 (1,1435) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:9:LEU:HA 6 0.03 0.06 (1,1435) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:49:LEU:HA 6 0.03 0.06 (1,111) 1:A:55:VAL:HG21 1:A:49:GLU:HG3 6 0.45 0.95 (1,111) 1:A:55:VAL:HG23 1:A:49:GLU:HG3 6 0.45 0.95 (1,1108) 1:A:48:LEU:HA 1:A:52:HIS:HB3 6 0.02 0.03 (1,1071) 1:A:36:LEU:HG 1:A:38:SER:H 6 0.06 0.18	(1,1493)	1:A:46:GLN:HG3	1:A:50:ARG:HD2	6	0.03	0.05
(1,1447) 1:A:13:VAL:HG12 1:A:17:LEU:HG 6 0.02 0.05 (1,1447) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:17:LEU:HG 6 0.02 0.05 (1,1435) 1:A:13:VAL:HG11 1:A:9:LEU:HA 6 0.03 0.06 (1,1435) 1:A:13:VAL:HG12 1:A:9:LEU:HA 6 0.03 0.06 (1,1435) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:9:LEU:HA 6 0.03 0.06 (1,111) 1:A:55:VAL:HG21 1:A:49:GLU:HG3 6 0.45 0.95 (1,111) 1:A:55:VAL:HG22 1:A:49:GLU:HG3 6 0.45 0.95 (1,111) 1:A:55:VAL:HG23 1:A:49:GLU:HG3 6 0.45 0.95 (1,1108) 1:A:48:LEU:HA 1:A:52:HIS:HB3 6 0.02 0.03 (1,1071) 1:A:36:LEU:HG 1:A:38:SER:H 6 0.06 0.18	(1,1493)	1:A:46:GLN:HG3	1:A:50:ARG:HD3	6	0.03	0.05
(1,1447) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:17:LEU:HG 6 0.02 0.05 (1,1435) 1:A:13:VAL:HG11 1:A:9:LEU:HA 6 0.03 0.06 (1,1435) 1:A:13:VAL:HG12 1:A:9:LEU:HA 6 0.03 0.06 (1,1435) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:9:LEU:HA 6 0.03 0.06 (1,111) 1:A:55:VAL:HG21 1:A:49:GLU:HG3 6 0.45 0.95 (1,111) 1:A:55:VAL:HG22 1:A:49:GLU:HG3 6 0.45 0.95 (1,111) 1:A:55:VAL:HG23 1:A:49:GLU:HG3 6 0.45 0.95 (1,1108) 1:A:48:LEU:HA 1:A:52:HIS:HB3 6 0.02 0.03 (1,1071) 1:A:36:LEU:HG 1:A:38:SER:H 6 0.06 0.18	(1,1447)	1:A:13:VAL:HG11	1:A:17:LEU:HG	6	0.02	0.05
(1,1435) 1:A:13:VAL:HG11 1:A:9:LEU:HA 6 0.03 0.06 (1,1435) 1:A:13:VAL:HG12 1:A:9:LEU:HA 6 0.03 0.06 (1,1435) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:9:LEU:HA 6 0.03 0.06 (1,111) 1:A:55:VAL:HG21 1:A:49:GLU:HG3 6 0.45 0.95 (1,111) 1:A:55:VAL:HG22 1:A:49:GLU:HG3 6 0.45 0.95 (1,111) 1:A:55:VAL:HG23 1:A:49:GLU:HG3 6 0.45 0.95 (1,1108) 1:A:48:LEU:HA 1:A:52:HIS:HB3 6 0.02 0.03 (1,1071) 1:A:36:LEU:HG 1:A:38:SER:H 6 0.06 0.18	(1,1447)	1:A:13:VAL:HG12	1:A:17:LEU:HG	6	0.02	0.05
(1,1435) 1:A:13:VAL:HG12 1:A:9:LEU:HA 6 0.03 0.06 (1,1435) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:9:LEU:HA 6 0.03 0.06 (1,111) 1:A:55:VAL:HG21 1:A:49:GLU:HG3 6 0.45 0.95 (1,111) 1:A:55:VAL:HG22 1:A:49:GLU:HG3 6 0.45 0.95 (1,111) 1:A:55:VAL:HG23 1:A:49:GLU:HG3 6 0.45 0.95 (1,1108) 1:A:48:LEU:HA 1:A:52:HIS:HB3 6 0.02 0.03 (1,1071) 1:A:36:LEU:HG 1:A:38:SER:H 6 0.06 0.18	(1,1447)	1:A:13:VAL:HG13	1:A:17:LEU:HG	6	0.02	0.05
(1,1435) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:9:LEU:HA 6 0.03 0.06 (1,111) 1:A:55:VAL:HG21 1:A:49:GLU:HG3 6 0.45 0.95 (1,111) 1:A:55:VAL:HG22 1:A:49:GLU:HG3 6 0.45 0.95 (1,111) 1:A:55:VAL:HG23 1:A:49:GLU:HG3 6 0.45 0.95 (1,1108) 1:A:48:LEU:HA 1:A:52:HIS:HB3 6 0.02 0.03 (1,1071) 1:A:36:LEU:HG 1:A:38:SER:H 6 0.06 0.18	(1,1435)	1:A:13:VAL:HG11	1:A:9:LEU:HA	6	0.03	0.06
(1,111) 1:A:55:VAL:HG21 1:A:49:GLU:HG3 6 0.45 0.95 (1,111) 1:A:55:VAL:HG22 1:A:49:GLU:HG3 6 0.45 0.95 (1,111) 1:A:55:VAL:HG23 1:A:49:GLU:HG3 6 0.45 0.95 (1,1108) 1:A:48:LEU:HA 1:A:52:HIS:HB3 6 0.02 0.03 (1,1071) 1:A:36:LEU:HG 1:A:38:SER:H 6 0.06 0.18	(1,1435)	1:A:13:VAL:HG12	1:A:9:LEU:HA	6	0.03	0.06
(1,111) 1:A:55:VAL:HG22 1:A:49:GLU:HG3 6 0.45 0.95 (1,111) 1:A:55:VAL:HG23 1:A:49:GLU:HG3 6 0.45 0.95 (1,1108) 1:A:48:LEU:HA 1:A:52:HIS:HB3 6 0.02 0.03 (1,1071) 1:A:36:LEU:HG 1:A:38:SER:H 6 0.06 0.18	(1,1435)	1:A:13:VAL:HG13	1:A:9:LEU:HA	6	0.03	0.06
(1,111) 1:A:55:VAL:HG23 1:A:49:GLU:HG3 6 0.45 0.95 (1,1108) 1:A:48:LEU:HA 1:A:52:HIS:HB3 6 0.02 0.03 (1,1071) 1:A:36:LEU:HG 1:A:38:SER:H 6 0.06 0.18	(1,111)	1:A:55:VAL:HG21	1:A:49:GLU:HG3	6	0.45	0.95
(1,1108) 1:A:48:LEU:HA 1:A:52:HIS:HB3 6 0.02 0.03 (1,1071) 1:A:36:LEU:HG 1:A:38:SER:H 6 0.06 0.18	(1,111)	1:A:55:VAL:HG22	1:A:49:GLU:HG3	6	0.45	0.95
(1,1071) 1:A:36:LEU:HG 1:A:38:SER:H 6 0.06 0.18	(1,111)	1:A:55:VAL:HG23	1:A:49:GLU:HG3	6	0.45	0.95
	(1,1108)	1:A:48:LEU:HA	1:A:52:HIS:HB3	6	0.02	0.03
	(1,1071)	1:A:36:LEU:HG	1:A:38:SER:H	6	0.06	0.18
		1:A:27:LEU:HD11	1:A:67:ARG:HA	5	0.02	0.03



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,968)	1:A:27:LEU:HD12	1:A:67:ARG:HA	5	0.02	0.03
(1,968)	1:A:27:LEU:HD13	1:A:67:ARG:HA	5	0.02	0.03
(1,9)	1:A:16:ILE:HG21	1:A:43:GLU:H	5	0.08	0.13
(1,9)	1:A:16:ILE:HG22	1:A:43:GLU:H	5	0.08	0.13
(1,9)	1:A:16:ILE:HG23	1:A:43:GLU:H	5	0.08	0.13
(1,9)	1:A:16:ILE:HG21	1:A:42:VAL:H	5	0.08	0.13
(1,9)	1:A:16:ILE:HG22	1:A:42:VAL:H	5	0.08	0.13
(1,9)	1:A:16:ILE:HG23	1:A:42:VAL:H	5	0.08	0.13
(1,9)	1:A:47:ILE:HG21	1:A:50:ARG:HE	5	0.08	0.13
(1,9)	1:A:47:ILE:HG22	1:A:50:ARG:HE	5	0.08	0.13
(1,9)	1:A:47:ILE:HG23	1:A:50:ARG:HE	5	0.08	0.13
(1,896)	1:A:47:ILE:HG21	1:A:6:GLN:HE21	5	0.15	0.39
(1,896)	1:A:47:ILE:HG22	1:A:6:GLN:HE21	5	0.15	0.39
(1,896)	1:A:47:ILE:HG23	1:A:6:GLN:HE21	5	0.15	0.39
(1,847)	1:A:8:ASP:HB2	1:A:11:LYS:HD2	5	0.12	0.43
(1,847)	1:A:8:ASP:HB2	1:A:11:LYS:HD3	5	0.12	0.43
(1,846)	1:A:8:ASP:HB3	1:A:11:LYS:HD2	5	0.03	0.06
(1,846)	1:A:8:ASP:HB3	1:A:11:LYS:HD3	5	0.03	0.06
(1,798)	1:A:51:GLU:HG2	1:A:50:ARG:HG2	5	0.34	0.56
(1,798)	1:A:51:GLU:HG3	1:A:50:ARG:HG2	5	0.34	0.56
(1,787)	1:A:51:GLU:HB3	1:A:6:GLN:HE21	5	0.27	0.4
(1,668)	1:A:49:GLU:HG2	1:A:46:GLN:HA	5	0.3	0.7
(1,417)	1:A:45:ARG:HD2	1:A:61:VAL:HG11	5	0.02	0.03
(1,417)	1:A:45:ARG:HD2	1:A:61:VAL:HG12	5	0.02	0.03
(1,417)	1:A:45:ARG:HD2	1:A:61:VAL:HG13	5	0.02	0.03
(1,417)	1:A:45:ARG:HD3	1:A:61:VAL:HG11	5	0.02	0.03
(1,417)	1:A:45:ARG:HD3	1:A:61:VAL:HG12	5	0.02	0.03
(1,417)	1:A:45:ARG:HD3	1:A:61:VAL:HG13	5	0.02	0.03
(1,360)	1:A:17:LEU:HA	1:A:19:ILE:HG21	5	0.02	0.03
(1,360)	1:A:17:LEU:HA	1:A:19:ILE:HG22	5	0.02	0.03
(1,360)	1:A:17:LEU:HA	1:A:19:ILE:HG23	5	0.02	0.03
(1,1692)	1:A:33:ASP:H	1:A:36:LEU:H	5	0.03	0.05
(1,1509)	1:A:72:MET:HG2	1:A:9:LEU:HD11	5	0.36	1.02
(1,1509)	1:A:72:MET:HG2	1:A:9:LEU:HD12	5	0.36	1.02
(1,1509)	1:A:72:MET:HG2	1:A:9:LEU:HD13	5	0.36	1.02
(1,1503)	1:A:55:VAL:HG11	1:A:49:GLU:H	5	0.02	0.04
(1,1503)	1:A:55:VAL:HG12	1:A:49:GLU:H	5	0.02	0.04
(1,1503)	1:A:55:VAL:HG13	1:A:49:GLU:H	5	0.02	0.04
(1,1267)	1:A:61:VAL:HG21	1:A:60:GLU:HB3	5	0.02	0.03
(1,1267)	1:A:61:VAL:HG22	1:A:60:GLU:HB3	5	0.02	0.03
(1,1267)	1:A:61:VAL:HG23	1:A:60:GLU:HB3	5	0.02	0.03
(1,1091)	1:A:39:LEU:HD11	1:A:39:LEU:HA	5	0.12	0.26



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,1091)	1:A:39:LEU:HD12	1:A:39:LEU:HA	5	0.12	0.26
(1,1091)	1:A:39:LEU:HD13	1:A:39:LEU:HA	5	0.12	0.26
(1,1016)	1:A:34:LEU:HD11	1:A:29:SER:H	5	0.04	0.06
(1,1016)	1:A:34:LEU:HD12	1:A:29:SER:H	5	0.04	0.06
(1,1016)	1:A:34:LEU:HD13	1:A:29:SER:H	5	0.04	0.06
(1,899)	1:A:47:ILE:HG21	1:A:9:LEU:HD11	4	0.02	0.03
(1,899)	1:A:47:ILE:HG21	1:A:9:LEU:HD12	4	0.02	0.03
(1,899)	1:A:47:ILE:HG21	1:A:9:LEU:HD13	4	0.02	0.03
(1,899)	1:A:47:ILE:HG22	1:A:9:LEU:HD11	4	0.02	0.03
(1,899)	1:A:47:ILE:HG22	1:A:9:LEU:HD12	4	0.02	0.03
(1,899)	1:A:47:ILE:HG22	1:A:9:LEU:HD13	4	0.02	0.03
(1,899)	1:A:47:ILE:HG23	1:A:9:LEU:HD11	4	0.02	0.03
(1,899)	1:A:47:ILE:HG23	1:A:9:LEU:HD12	4	0.02	0.03
(1,899)	1:A:47:ILE:HG23	1:A:9:LEU:HD13	4	0.02	0.03
(1,876)	1:A:10:VAL:HG21	1:A:68:LYS:HB2	4	0.02	0.03
(1,876)	1:A:10:VAL:HG21	1:A:68:LYS:HB3	4	0.02	0.03
(1,876)	1:A:10:VAL:HG22	1:A:68:LYS:HB2	4	0.02	0.03
(1,876)	1:A:10:VAL:HG22	1:A:68:LYS:HB3	4	0.02	0.03
(1,876)	1:A:10:VAL:HG23	1:A:68:LYS:HB2	4	0.02	0.03
(1,876)	1:A:10:VAL:HG23	1:A:68:LYS:HB3	4	0.02	0.03
(1,844)	1:A:8:ASP:HB3	1:A:11:LYS:HB2	4	0.12	0.21
(1,844)	1:A:8:ASP:HB3	1:A:11:LYS:HB3	4	0.12	0.21
(1,83)	1:A:73:SER:HB3	1:A:69:LEU:HD11	4	0.08	0.14
(1,83)	1:A:73:SER:HB3	1:A:69:LEU:HD12	4	0.08	0.14
(1,83)	1:A:73:SER:HB3	1:A:69:LEU:HD13	4	0.08	0.14
(1,83)	1:A:73:SER:HB3	1:A:69:LEU:HD21	4	0.08	0.14
(1,83)	1:A:73:SER:HB3	1:A:69:LEU:HD22	4	0.08	0.14
(1,83)	1:A:73:SER:HB3	1:A:69:LEU:HD23	4	0.08	0.14
(1,83)	1:A:73:SER:HB3	1:A:54:LEU:HD21	4	0.08	0.14
(1,83)	1:A:73:SER:HB3	1:A:54:LEU:HD22	4	0.08	0.14
(1,83)	1:A:73:SER:HB3	1:A:54:LEU:HD23	4	0.08	0.14
(1,72)	1:A:48:LEU:HD11	1:A:6:GLN:HE21	4	0.42	1.04
(1,72)	1:A:48:LEU:HD12	1:A:6:GLN:HE21	4	0.42	1.04
(1,72)	1:A:48:LEU:HD13	1:A:6:GLN:HE21	4	0.42	1.04
(1,72)	1:A:9:LEU:HD21	1:A:6:GLN:HE21	4	0.42	1.04
(1,72)	1:A:9:LEU:HD22	1:A:6:GLN:HE21	4	0.42	1.04
(1,72)	1:A:9:LEU:HD23	1:A:6:GLN:HE21	4	0.42	1.04
(1,715)	1:A:63:GLN:HB3	1:A:60:GLU:HA	4	0.04	0.05
(1,531)	1:A:25:ILE:HD11	1:A:22:LEU:HA	4	0.01	0.01
(1,531)	1:A:25:ILE:HD12	1:A:22:LEU:HA	4	0.01	0.01
(1,531)	1:A:25:ILE:HD13	1:A:22:LEU:HA	4	0.01	0.01
(1,1574)	1:A:16:ILE:HG21	1:A:40:MET:HG2	4	0.02	0.03



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,1574)	1:A:16:ILE:HG22	1:A:40:MET:HG2	4	0.02	0.03
(1,1574)	1:A:16:ILE:HG23	1:A:40:MET:HG2	4	0.02	0.03
(1,1548)	1:A:19:ILE:HG21	1:A:21:ASP:HB2	4	0.26	0.39
(1,1548)	1:A:19:ILE:HG22	1:A:21:ASP:HB2	4	0.26	0.39
(1,1548)	1:A:19:ILE:HG23	1:A:21:ASP:HB2	4	0.26	0.39
(1,1517)	1:A:8:ASP:HB3	1:A:7:ARG:HA	4	0.02	0.04
(1,1494)	1:A:46:GLN:HG2	1:A:50:ARG:HD2	4	0.05	0.09
(1,1494)	1:A:46:GLN:HG2	1:A:50:ARG:HD3	4	0.05	0.09
(1,1429)	1:A:42:VAL:HG21	1:A:39:LEU:H	4	0.04	0.07
(1,1429)	1:A:42:VAL:HG22	1:A:39:LEU:H	4	0.04	0.07
(1,1429)	1:A:42:VAL:HG23	1:A:39:LEU:H	4	0.04	0.07
(1,1222)	1:A:58:ILE:HG21	1:A:63:GLN:HE22	4	0.03	0.08
(1,1222)	1:A:58:ILE:HG22	1:A:63:GLN:HE22	4	0.03	0.08
(1,1222)	1:A:58:ILE:HG23	1:A:63:GLN:HE22	4	0.03	0.08
(1,1158)	1:A:54:LEU:HB3	1:A:48:LEU:HB3	4	0.03	0.05
(1,1099)	1:A:40:MET:HG3	1:A:39:LEU:HD21	4	0.67	1.07
(1,1099)	1:A:40:MET:HG3	1:A:39:LEU:HD22	4	0.67	1.07
(1,1099)	1:A:40:MET:HG3	1:A:39:LEU:HD23	4	0.67	1.07
(1,1056)	1:A:36:LEU:HD21	1:A:62:ARG:HA	4	0.02	0.04
(1,1056)	1:A:36:LEU:HD22	1:A:62:ARG:HA	4	0.02	0.04
(1,1056)	1:A:36:LEU:HD23	1:A:62:ARG:HA	4	0.02	0.04
(1,1009)	1:A:34:LEU:HD11	1:A:29:SER:HB2	4	0.02	0.06
(1,1009)	1:A:34:LEU:HD12	1:A:29:SER:HB2	4	0.02	0.06
(1,1009)	1:A:34:LEU:HD13	1:A:29:SER:HB2	4	0.02	0.06
(1,996)	1:A:33:ASP:HB2	1:A:29:SER:HB2	3	0.02	0.04
(1,97)	1:A:52:HIS:HB2	1:A:54:LEU:HB3	3	0.03	0.04
(1,900)	1:A:47:ILE:HG21	1:A:48:LEU:HD11	3	1.59	1.74
(1,900)	1:A:47:ILE:HG21	1:A:48:LEU:HD12	3	1.59	1.74
(1,900)	1:A:47:ILE:HG21	1:A:48:LEU:HD13	3	1.59	1.74
(1,900)	1:A:47:ILE:HG22	1:A:48:LEU:HD11	3	1.59	1.74
(1,900)	1:A:47:ILE:HG22	1:A:48:LEU:HD12	3	1.59	1.74
(1,900)	1:A:47:ILE:HG22	1:A:48:LEU:HD13	3	1.59	1.74
(1,900)	1:A:47:ILE:HG23	1:A:48:LEU:HD11	3	1.59	1.74
(1,900)	1:A:47:ILE:HG23	1:A:48:LEU:HD12	3	1.59	1.74
(1,900)	1:A:47:ILE:HG23	1:A:48:LEU:HD13	3	1.59	1.74
(1,880)	1:A:10:VAL:HG21	1:A:10:VAL:H	3	0.02	0.03
(1,880)	1:A:10:VAL:HG22	1:A:10:VAL:H	3	0.02	0.03
(1,880)	1:A:10:VAL:HG23	1:A:10:VAL:H	3	0.02	0.03
(1,785)	1:A:52:HIS:HB3	1:A:54:LEU:HB3	3	0.02	0.02
(1,711)	1:A:63:GLN:HA	1:A:30:SER:HB2	3	0.02	0.05
(1,710)	1:A:63:GLN:HA	1:A:30:SER:HB3	3	0.02	0.03
(1,59)	1:A:36:LEU:HD11	1:A:64:LEU:HB2	3	0.02	0.04



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

(1 50)	Atom-1	Atom-2	\mathbf{Models}	Mean (Å)	Max (Å)
(1,59)	1:A:36:LEU:HD12	1:A:64:LEU:HB2	3	0.02	0.04
(1,59)	1:A:36:LEU:HD13	1:A:64:LEU:HB2	3	0.02	0.04
(1,59)	1:A:66:LEU:HD21	1:A:64:LEU:HB2	3	0.02	0.04
(1,59)	1:A:66:LEU:HD22	1:A:64:LEU:HB2	3	0.02	0.04
(1,59)	1:A:66:LEU:HD23	1:A:64:LEU:HB2	3	0.02	0.04
(1,54)	1:A:20:ARG:HG3	1:A:67:ARG:HD3	3	0.22	0.31
(1,54)	1:A:20:ARG:HG3	1:A:10:VAL:HA	3	0.22	0.31
(1,54)	1:A:7:ARG:HG2	1:A:10:VAL:HA	3	0.22	0.31
(1,54)	1:A:7:ARG:HG3	1:A:10:VAL:HA	3	0.22	0.31
(1,469)	1:A:17:LEU:HD11	1:A:16:ILE:H	3	0.15	0.3
(1,469)	1:A:17:LEU:HD12	1:A:16:ILE:H	3	0.15	0.3
(1,469)	1:A:17:LEU:HD13	1:A:16:ILE:H	3	0.15	0.3
(1,468)	1:A:47:ILE:HA	1:A:48:LEU:HD11	3	0.47	0.61
(1,468)	1:A:47:ILE:HA	1:A:48:LEU:HD12	3	0.47	0.61
(1,468)	1:A:47:ILE:HA	1:A:48:LEU:HD13	3	0.47	0.61
(1,297)	1:A:17:LEU:HD11	1:A:16:ILE:HA	3	0.03	0.04
(1,297)	1:A:17:LEU:HD12	1:A:16:ILE:HA	3	0.03	0.04
(1,297)	1:A:17:LEU:HD13	1:A:16:ILE:HA	3	0.03	0.04
(1,297)	1:A:17:LEU:HD21	1:A:16:ILE:HA	3	0.03	0.04
(1,297)	1:A:17:LEU:HD22	1:A:16:ILE:HA	3	0.03	0.04
(1,297)	1:A:17:LEU:HD23	1:A:16:ILE:HA	3	0.03	0.04
(1,236)	1:A:31:LEU:HD11	1:A:66:LEU:H	3	0.44	0.97
(1,236)	1:A:31:LEU:HD12	1:A:66:LEU:H	3	0.44	0.97
(1,236)	1:A:31:LEU:HD13	1:A:66:LEU:H	3	0.44	0.97
(1,1698)	1:A:38:SER:H	1:A:39:LEU:H	3	0.19	0.24
(1,1646)	1:A:9:LEU:HG	1:A:9:LEU:H	3	0.05	0.11
(1,1624)	1:A:58:ILE:HD11	1:A:57:PRO:HD2	3	0.01	0.02
(1,1624)	1:A:58:ILE:HD12	1:A:57:PRO:HD2	3	0.01	0.02
(1,1624)	1:A:58:ILE:HD13	1:A:57:PRO:HD2	3	0.01	0.02
(1,1588)	1:A:7:ARG:HG2	1:A:12:ALA:H	3	0.03	0.04
(1,1588)	1:A:7:ARG:HG3	1:A:12:ALA:H	3	0.03	0.04
(1,1551)	1:A:19:ILE:HG21	1:A:17:LEU:H	3	0.03	0.05
(1,1551)	1:A:19:ILE:HG22	1:A:17:LEU:H	3	0.03	0.05
(1,1551)	1:A:19:ILE:HG23	1:A:17:LEU:H	3	0.03	0.05
(1,1376)	1:A:12:ALA:HB1	1:A:7:ARG:HD2	3	0.08	0.14
(1,1376)	1:A:12:ALA:HB1	1:A:7:ARG:HD3	3	0.08	0.14
(1,1376)	1:A:12:ALA:HB2	1:A:7:ARG:HD2	3	0.08	0.14
(1,1376)	1:A:12:ALA:HB2	1:A:7:ARG:HD3	3	0.08	0.14
(1,1376)	1:A:12:ALA:HB3	1:A:7:ARG:HD2	3	0.08	0.14
(1,1376)	1:A:12:ALA:HB3	1:A:7:ARG:HD3	3	0.08	0.14
(1,1314)	1:A:64:LEU:HD21	1:A:68:LYS:HD2	3	0.07	0.16
(1,1314)	1:A:64:LEU:HD21	1:A:68:LYS:HD3	3	0.07	0.16



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,1314)	1:A:64:LEU:HD22	1:A:68:LYS:HD2	3	0.07	0.16
(1,1314)	1:A:64:LEU:HD22	1:A:68:LYS:HD3	3	0.07	0.16
(1,1314)	1:A:64:LEU:HD23	1:A:68:LYS:HD2	3	0.07	0.16
(1,1314)	1:A:64:LEU:HD23	1:A:68:LYS:HD3	3	0.07	0.16
(1,1296)	1:A:63:GLN:HA	1:A:32:ALA:HB1	3	0.04	0.05
(1,1296)	1:A:63:GLN:HA	1:A:32:ALA:HB2	3	0.04	0.05
(1,1296)	1:A:63:GLN:HA	1:A:32:ALA:HB3	3	0.04	0.05
(1,1220)	1:A:58:ILE:HG21	1:A:62:ARG:HD2	3	0.13	0.31
(1,1220)	1:A:58:ILE:HG22	1:A:62:ARG:HD2	3	0.13	0.31
(1,1220)	1:A:58:ILE:HG23	1:A:62:ARG:HD2	3	0.13	0.31
(1,1219)	1:A:58:ILE:HG21	1:A:59:ARG:HD2	3	0.02	0.02
(1,1219)	1:A:58:ILE:HG21	1:A:59:ARG:HD3	3	0.02	0.02
(1,1219)	1:A:58:ILE:HG22	1:A:59:ARG:HD2	3	0.02	0.02
(1,1219)	1:A:58:ILE:HG22	1:A:59:ARG:HD3	3	0.02	0.02
(1,1219)	1:A:58:ILE:HG23	1:A:59:ARG:HD2	3	0.02	0.02
(1,1219)	1:A:58:ILE:HG23	1:A:59:ARG:HD3	3	0.02	0.02
(1,1126)	1:A:48:LEU:HD11	1:A:52:HIS:H	3	0.58	0.87
(1,1126)	1:A:48:LEU:HD12	1:A:52:HIS:H	3	0.58	0.87
(1,1126)	1:A:48:LEU:HD13	1:A:52:HIS:H	3	0.58	0.87
(1,1123)	1:A:48:LEU:HD11	1:A:52:HIS:HB2	3	1.63	3.01
(1,1123)	1:A:48:LEU:HD12	1:A:52:HIS:HB2	3	1.63	3.01
(1,1123)	1:A:48:LEU:HD13	1:A:52:HIS:HB2	3	1.63	3.01
(1,1122)	1:A:48:LEU:HD11	1:A:52:HIS:HB3	3	1.18	1.67
(1,1122)	1:A:48:LEU:HD12	1:A:52:HIS:HB3	3	1.18	1.67
(1,1122)	1:A:48:LEU:HD13	1:A:52:HIS:HB3	3	1.18	1.67
(1,1117)	1:A:48:LEU:HA	1:A:48:LEU:HD11	3	0.83	0.84
(1,1117)	1:A:48:LEU:HA	1:A:48:LEU:HD12	3	0.83	0.84
(1,1117)	1:A:48:LEU:HA	1:A:48:LEU:HD13	3	0.83	0.84
(1,1107)	1:A:48:LEU:HA	1:A:52:HIS:HB2	3	0.48	0.9
(1,1012)	1:A:34:LEU:HD11	1:A:31:LEU:H	3	0.54	0.84
(1,1012)	1:A:34:LEU:HD12	1:A:31:LEU:H	3	0.54	0.84
(1,1012)	1:A:34:LEU:HD13	1:A:31:LEU:H	3	0.54	0.84
(1,1005)	1:A:33:ASP:HB3	1:A:30:SER:H	3	0.02	0.03
(1,939)	1:A:57:PRO:HD2	1:A:60:GLU:HG2	2	0.03	0.04
(1,939)	1:A:57:PRO:HD2	1:A:60:GLU:HG3	2	0.03	0.04
(1,933)	1:A:57:PRO:HG3	1:A:60:GLU:H	2	0.03	0.06
(1,931)	1:A:57:PRO:HG3	1:A:60:GLU:HG2	2	0.01	0.02
(1,931)	1:A:57:PRO:HG3	1:A:60:GLU:HG3	2	0.01	0.02
(1,928)	1:A:57:PRO:HG2	1:A:56:LEU:HD21	2	0.96	0.98
(1,928)	1:A:57:PRO:HG2	1:A:56:LEU:HD22	2	0.96	0.98
(1,928)	1:A:57:PRO:HG2	1:A:56:LEU:HD23	2	0.96	0.98
(1,927)	1:A:57:PRO:HG3	1:A:56:LEU:HD21	2	0.49	0.79



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,927)	1:A:57:PRO:HG3	1:A:56:LEU:HD22	2	0.49	0.79
(1,927)	1:A:57:PRO:HG3	1:A:56:LEU:HD23	2	0.49	0.79
(1,874)	1:A:10:VAL:HG21	1:A:70:GLN:HG3	2	0.07	0.08
(1,874)	1:A:10:VAL:HG22	1:A:70:GLN:HG3	2	0.07	0.08
(1,874)	1:A:10:VAL:HG23	1:A:70:GLN:HG3	2	0.07	0.08
(1,851)	1:A:9:LEU:HA	1:A:9:LEU:HD21	2	0.16	0.17
(1,851)	1:A:9:LEU:HA	1:A:9:LEU:HD22	2	0.16	0.17
(1,851)	1:A:9:LEU:HA	1:A:9:LEU:HD23	2	0.16	0.17
(1,811)	1:A:65:THR:HG21	1:A:28:ASP:HA	2	0.05	0.05
(1,811)	1:A:65:THR:HG22	1:A:28:ASP:HA	2	0.05	0.05
(1,811)	1:A:65:THR:HG23	1:A:28:ASP:HA	2	0.05	0.05
(1,806)	1:A:65:THR:HG21	1:A:67:ARG:HB2	2	0.08	0.11
(1,806)	1:A:65:THR:HG21	1:A:67:ARG:HB3	2	0.08	0.11
(1,806)	1:A:65:THR:HG22	1:A:67:ARG:HB2	2	0.08	0.11
(1,806)	1:A:65:THR:HG22	1:A:67:ARG:HB3	2	0.08	0.11
(1,806)	1:A:65:THR:HG23	1:A:67:ARG:HB2	2	0.08	0.11
(1,806)	1:A:65:THR:HG23	1:A:67:ARG:HB3	2	0.08	0.11
(1,769)	1:A:82:LEU:HA	1:A:82:LEU:HD11	2	0.07	0.07
(1,769)	1:A:82:LEU:HA	1:A:82:LEU:HD12	2	0.07	0.07
(1,769)	1:A:82:LEU:HA	1:A:82:LEU:HD13	2	0.07	0.07
(1,755)	1:A:70:GLN:HG2	1:A:10:VAL:HG21	2	0.03	0.04
(1,755)	1:A:70:GLN:HG2	1:A:10:VAL:HG22	2	0.03	0.04
(1,755)	1:A:70:GLN:HG2	1:A:10:VAL:HG23	2	0.03	0.04
(1,691)	1:A:43:GLU:HB2	1:A:47:ILE:HD11	2	0.03	0.04
(1,691)	1:A:43:GLU:HB2	1:A:47:ILE:HD12	2	0.03	0.04
(1,691)	1:A:43:GLU:HB2	1:A:47:ILE:HD13	2	0.03	0.04
(1,684)	1:A:43:GLU:HG3	1:A:39:LEU:HD21	2	0.04	0.05
(1,684)	1:A:43:GLU:HG3	1:A:39:LEU:HD22	2	0.04	0.05
(1,684)	1:A:43:GLU:HG3	1:A:39:LEU:HD23	2	0.04	0.05
(1,664)	1:A:49:GLU:HG2	1:A:55:VAL:HG21	2	0.22	0.24
(1,664)	1:A:49:GLU:HG2	1:A:55:VAL:HG22	2	0.22	0.24
(1,664)	1:A:49:GLU:HG2	1:A:55:VAL:HG23	2	0.22	0.24
(1,638)	1:A:50:ARG:HD2	1:A:50:ARG:HA	2	0.01	0.02
(1,638)	1:A:50:ARG:HD3	1:A:50:ARG:HA	2	0.01	0.02
(1,599)	1:A:66:LEU:HA	1:A:69:LEU:H	2	0.03	0.03
(1,412)	1:A:45:ARG:HD2	1:A:58:ILE:HA	2	0.04	0.05
(1,412)	1:A:45:ARG:HD3	1:A:58:ILE:HA	2	0.04	0.05
(1,412)	1:A:45:ARG:HD2	1:A:58:ILE:HA	2	0.04	0.05
(1,412)	1:A:45:ARG:HD3	1:A:58:ILE:HA	2	0.04	0.05
(1,366)	1:A:17:LEU:HG	1:A:16:ILE:HG21	2	0.03	0.03
(1,366)	1:A:17:LEU:HG	1:A:16:ILE:HG22	2	0.03	0.03
(1,366)	1:A:17:LEU:HG	1:A:16:ILE:HG23	2	0.03	0.03



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,32)	1:A:27:LEU:HD11	1:A:70:GLN:HE21	2	0.2	0.38
(1,32)	1:A:27:LEU:HD12	1:A:70:GLN:HE21	2	0.2	0.38
(1,32)	1:A:27:LEU:HD13	1:A:70:GLN:HE21	2	0.2	0.38
(1,32)	1:A:66:LEU:HD11	1:A:70:GLN:HE21	2	0.2	0.38
(1,32)	1:A:66:LEU:HD12	1:A:70:GLN:HE21	2	0.2	0.38
(1,32)	1:A:66:LEU:HD13	1:A:70:GLN:HE21	2	0.2	0.38
(1,319)	1:A:45:ARG:HB2	1:A:48:LEU:H	2	0.01	0.02
(1,296)	1:A:17:LEU:HD11	1:A:19:ILE:HG13	2	0.5	0.58
(1,296)	1:A:17:LEU:HD12	1:A:19:ILE:HG13	2	0.5	0.58
(1,296)	1:A:17:LEU:HD13	1:A:19:ILE:HG13	2	0.5	0.58
(1,291)	1:A:17:LEU:HG	1:A:17:LEU:H	2	0.12	0.13
(1,193)	1:A:29:SER:HB3	1:A:34:LEU:HD11	2	0.01	0.02
(1,193)	1:A:29:SER:HB3	1:A:34:LEU:HD12	2	0.01	0.02
(1,193)	1:A:29:SER:HB3	1:A:34:LEU:HD13	2	0.01	0.02
(1,1731)	1:A:4:GLU:H	1:A:3:GLY:H	2	0.03	0.03
(1,1727)	1:A:86:LYS:H	1:A:85:PRO:HA	2	0.14	0.15
(1,1725)	1:A:80:THR:H	1:A:79:ASP:H	2	0.01	0.02
(1,1648)	1:A:74:SER:HB3	1:A:54:LEU:HD21	2	0.48	0.94
(1,1648)	1:A:74:SER:HB3	1:A:54:LEU:HD22	2	0.48	0.94
(1,1648)	1:A:74:SER:HB3	1:A:54:LEU:HD23	2	0.48	0.94
(1,1628)	1:A:73:SER:HB2	1:A:9:LEU:HD11	2	0.04	0.05
(1,1628)	1:A:73:SER:HB2	1:A:9:LEU:HD12	2	0.04	0.05
(1,1628)	1:A:73:SER:HB2	1:A:9:LEU:HD13	2	0.04	0.05
(1,1599)	1:A:36:LEU:HD11	1:A:40:MET:HG2	2	0.04	0.05
(1,1599)	1:A:36:LEU:HD12	1:A:40:MET:HG2	2	0.04	0.05
(1,1599)	1:A:36:LEU:HD13	1:A:40:MET:HG2	2	0.04	0.05
(1,1597)	1:A:27:LEU:HB2	1:A:27:LEU:H	2	0.05	0.08
(1,1595)	1:A:68:LYS:HB2	1:A:64:LEU:H	2	0.06	0.09
(1,1595)	1:A:68:LYS:HB3	1:A:64:LEU:H	2	0.06	0.09
(1,1595)	1:A:68:LYS:HB2	1:A:64:LEU:H	2	0.06	0.09
(1,1595)	1:A:68:LYS:HB3	1:A:64:LEU:H	2	0.06	0.09
(1,1578)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:22:LEU:HA	2	0.03	0.03
(1,1578)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:22:LEU:HA	2	0.03	0.03
(1,1578)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:22:LEU:HA	2	0.03	0.03
(1,1569)	1:A:10:VAL:HG21	1:A:70:GLN:HB2	2	0.14	0.15
(1,1569)	1:A:10:VAL:HG21	1:A:70:GLN:HB3	2	0.14	0.15
(1,1569)	1:A:10:VAL:HG22	1:A:70:GLN:HB2	2	0.14	0.15
(1,1569)	1:A:10:VAL:HG22	1:A:70:GLN:HB3	2	0.14	0.15
(1,1569)	1:A:10:VAL:HG23	1:A:70:GLN:HB2	2	0.14	0.15
(1,1569)	1:A:10:VAL:HG23	1:A:70:GLN:HB3	2	0.14	0.15
(1,1521)	1:A:73:SER:HA	1:A:9:LEU:HD11	2	0.05	0.07
(1,1521)	1:A:73:SER:HA	1:A:9:LEU:HD12	2	0.05	0.07



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,1521)	1:A:73:SER:HA	1:A:9:LEU:HD13	2	0.05	0.07
(1,1508)	1:A:72:MET:HG3	1:A:9:LEU:HD11	2	0.24	0.46
(1,1508)	1:A:72:MET:HG3	1:A:9:LEU:HD12	2	0.24	0.46
(1,1508)	1:A:72:MET:HG3	1:A:9:LEU:HD13	2	0.24	0.46
(1,1489)	1:A:42:VAL:HA	1:A:45:ARG:HB2	2	0.08	0.09
(1,1415)	1:A:42:VAL:HG11	1:A:46:GLN:HE21	2	0.18	0.2
(1,1415)	1:A:42:VAL:HG12	1:A:46:GLN:HE21	2	0.18	0.2
(1,1415)	1:A:42:VAL:HG13	1:A:46:GLN:HE21	2	0.18	0.2
(1,1378)	1:A:12:ALA:HB1	1:A:9:LEU:HA	2	0.03	0.04
(1,1378)	1:A:12:ALA:HB2	1:A:9:LEU:HA	2	0.03	0.04
(1,1378)	1:A:12:ALA:HB3	1:A:9:LEU:HA	2	0.03	0.04
(1,1354)	1:A:69:LEU:HD21	1:A:67:ARG:HD3	2	0.13	0.2
(1,1354)	1:A:69:LEU:HD22	1:A:67:ARG:HD3	2	0.13	0.2
(1,1354)	1:A:69:LEU:HD23	1:A:67:ARG:HD3	2	0.13	0.2
(1,1260)	1:A:61:VAL:HG11	1:A:41:GLY:HA2	2	0.01	0.02
(1,1260)	1:A:61:VAL:HG12	1:A:41:GLY:HA2	2	0.01	0.02
(1,1260)	1:A:61:VAL:HG13	1:A:41:GLY:HA2	2	0.01	0.02
(1,1204)	1:A:58:ILE:HA	1:A:61:VAL:HB	2	0.04	0.05
(1,12)	1:A:41:GLY:HA2	1:A:61:VAL:HG11	2	0.03	0.03
(1,12)	1:A:41:GLY:HA2	1:A:61:VAL:HG12	2	0.03	0.03
(1,12)	1:A:41:GLY:HA2	1:A:61:VAL:HG13	2	0.03	0.03
(1,12)	1:A:41:GLY:HA2	1:A:58:ILE:HD11	2	0.03	0.03
(1,12)	1:A:41:GLY:HA2	1:A:58:ILE:HD12	2	0.03	0.03
(1,12)	1:A:41:GLY:HA2	1:A:58:ILE:HD13	2	0.03	0.03
(1,12)	1:A:41:GLY:HA2	1:A:64:LEU:HD11	2	0.03	0.03
(1,12)	1:A:41:GLY:HA2	1:A:64:LEU:HD12	2	0.03	0.03
(1,12)	1:A:41:GLY:HA2	1:A:64:LEU:HD13	2	0.03	0.03
(1,1196)	1:A:56:LEU:HD21	1:A:56:LEU:HA	2	0.72	0.95
(1,1196)	1:A:56:LEU:HD22	1:A:56:LEU:HA	2	0.72	0.95
(1,1196)	1:A:56:LEU:HD23	1:A:56:LEU:HA	2	0.72	0.95
(1,1184)	1:A:56:LEU:HB3	1:A:57:PRO:HG3	2	0.03	0.04
(1,1160)	1:A:54:LEU:HD11	1:A:54:LEU:HA	2	0.06	0.06
(1,1160)	1:A:54:LEU:HD12	1:A:54:LEU:HA	2	0.06	0.06
(1,1160)	1:A:54:LEU:HD13	1:A:54:LEU:HA	2	0.06	0.06
(1,1133)	1:A:53:ASP:HA	1:A:53:ASP:H	2	0.2	0.23
(1,1100)	1:A:40:MET:HG2	1:A:39:LEU:HD21	2	0.49	0.56
(1,1100)	1:A:40:MET:HG2	1:A:39:LEU:HD22	2	0.49	0.56
(1,1100)	1:A:40:MET:HG2	1:A:39:LEU:HD23	2	0.49	0.56
(1,11)	1:A:41:GLY:HA2	1:A:61:VAL:HG11	2	0.03	0.03
(1,11)	1:A:41:GLY:HA2	1:A:61:VAL:HG12	2	0.03	0.03
(1,11)	1:A:41:GLY:HA2	1:A:61:VAL:HG13	2	0.03	0.03
(1,11)	1:A:41:GLY:HA2	1:A:58:ILE:HD11	2	0.03	0.03



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,11)	1:A:41:GLY:HA2	1:A:58:ILE:HD12	2	0.03	0.03
(1,11)	1:A:41:GLY:HA2	1:A:58:ILE:HD13	2	0.03	0.03
(1,11)	1:A:41:GLY:HA2	1:A:64:LEU:HD11	2	0.03	0.03
(1,11)	1:A:41:GLY:HA2	1:A:64:LEU:HD12	2	0.03	0.03
(1,11)	1:A:41:GLY:HA2	1:A:64:LEU:HD13	2	0.03	0.03
(1,1086)	1:A:39:LEU:HB2	1:A:41:GLY:H	2	0.06	0.07
(1,1064)	1:A:36:LEU:HD21	1:A:42:VAL:H	2	0.02	0.03
(1,1064)	1:A:36:LEU:HD22	1:A:42:VAL:H	2	0.02	0.03
(1,1064)	1:A:36:LEU:HD23	1:A:42:VAL:H	2	0.02	0.03
(1,1052)	1:A:36:LEU:HD11	1:A:41:GLY:HA2	2	0.01	0.01
(1,1052)	1:A:36:LEU:HD12	1:A:41:GLY:HA2	2	0.01	0.01
(1,1052)	1:A:36:LEU:HD13	1:A:41:GLY:HA2	2	0.01	0.01
(1,1049)	1:A:36:LEU:HD21	1:A:40:MET:HB3	2	0.14	0.21
(1,1049)	1:A:36:LEU:HD22	1:A:40:MET:HB3	2	0.14	0.21
(1,1049)	1:A:36:LEU:HD23	1:A:40:MET:HB3	2	0.14	0.21
(1,1000)	1:A:33:ASP:HB2	1:A:35:GLY:H	2	0.01	0.02
(1,999)	1:A:33:ASP:HB3	1:A:35:GLY:H	1	0.04	0.04
(1,989)	1:A:31:LEU:HB3	1:A:36:LEU:HB3	1	0.05	0.05
(1,969)	1:A:27:LEU:HD21	1:A:27:LEU:HA	1	0.01	0.01
(1,969)	1:A:27:LEU:HD22	1:A:27:LEU:HA	1	0.01	0.01
(1,969)	1:A:27:LEU:HD23	1:A:27:LEU:HA	1	0.01	0.01
(1,952)	1:A:11:LYS:HG2	1:A:11:LYS:H	1	0.21	0.21
(1,943)	1:A:57:PRO:HD2	1:A:56:LEU:HD21	1	0.05	0.05
(1,943)	1:A:57:PRO:HD2	1:A:56:LEU:HD22	1	0.05	0.05
(1,943)	1:A:57:PRO:HD2	1:A:56:LEU:HD23	1	0.05	0.05
(1,882)	1:A:10:VAL:HG21	1:A:70:GLN:H	1	0.02	0.02
(1,882)	1:A:10:VAL:HG22	1:A:70:GLN:H	1	0.02	0.02
(1,882)	1:A:10:VAL:HG23	1:A:70:GLN:H	1	0.02	0.02
(1,867)	1:A:10:VAL:HB	1:A:11:LYS:H	1	0.01	0.01
(1,842)	1:A:8:ASP:HA	1:A:9:LEU:H	1	0.02	0.02
(1,841)	1:A:8:ASP:HB2	1:A:11:LYS:H	1	0.11	0.11
(1,799)	1:A:51:GLU:HG2	1:A:47:ILE:HG21	1	0.05	0.05
(1,799)	1:A:51:GLU:HG2	1:A:47:ILE:HG22	1	0.05	0.05
(1,799)	1:A:51:GLU:HG2	1:A:47:ILE:HG23	1	0.05	0.05
(1,799)	1:A:51:GLU:HG3	1:A:47:ILE:HG21	1	0.05	0.05
(1,799)	1:A:51:GLU:HG3	1:A:47:ILE:HG22	1	0.05	0.05
(1,799)	1:A:51:GLU:HG3	1:A:47:ILE:HG23	1	0.05	0.05
(1,774)	1:A:6:GLN:HA	1:A:6:GLN:HG3	1	0.22	0.22
(1,76)	1:A:9:LEU:HD11	1:A:70:GLN:HB2	1	0.65	0.65
(1,76)	1:A:9:LEU:HD11	1:A:70:GLN:HB3	1	0.65	0.65
(1,76)	1:A:9:LEU:HD12	1:A:70:GLN:HB2	1	0.65	0.65
(1,76)	1:A:9:LEU:HD12	1:A:70:GLN:HB3	1	0.65	0.65



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,76)	1:A:9:LEU:HD13	1:A:70:GLN:HB2	1	0.65	0.65
(1,76)	1:A:9:LEU:HD13	1:A:70:GLN:HB3	1	0.65	0.65
(1,754)	1:A:70:GLN:HG3	1:A:72:MET:H	1	0.04	0.04
(1,753)	1:A:70:GLN:HG2	1:A:72:MET:H	1	0.03	0.03
(1,746)	1:A:70:GLN:HG2	1:A:67:ARG:HA	1	0.05	0.05
(1,739)	1:A:70:GLN:HA	1:A:71:GLU:HB2	1	0.42	0.42
(1,730)	1:A:63:GLN:HG2	1:A:60:GLU:HA	1	0.01	0.01
(1,720)	1:A:63:GLN:HB3	1:A:63:GLN:HE21	1	0.05	0.05
(1,66)	1:A:58:ILE:HD11	1:A:45:ARG:HE	1	0.02	0.02
(1,66)	1:A:58:ILE:HD12	1:A:45:ARG:HE	1	0.02	0.02
(1,66)	1:A:58:ILE:HD13	1:A:45:ARG:HE	1	0.02	0.02
(1,66)	1:A:58:ILE:HD11	1:A:63:GLN:HE22	1	0.02	0.02
(1,66)	1:A:58:ILE:HD12	1:A:63:GLN:HE22	1	0.02	0.02
(1,66)	1:A:58:ILE:HD13	1:A:63:GLN:HE22	1	0.02	0.02
(1,66)	1:A:25:ILE:HD11	1:A:29:SER:H	1	0.02	0.02
(1,66)	1:A:25:ILE:HD12	1:A:29:SER:H	1	0.02	0.02
(1,66)	1:A:25:ILE:HD13	1:A:29:SER:H	1	0.02	0.02
(1,66)	1:A:58:ILE:HD11	1:A:64:LEU:H	1	0.02	0.02
(1,66)	1:A:58:ILE:HD12	1:A:64:LEU:H	1	0.02	0.02
(1,66)	1:A:58:ILE:HD13	1:A:64:LEU:H	1	0.02	0.02
(1,621)	1:A:67:ARG:HD3	1:A:69:LEU:H	1	0.02	0.02
(1,603)	1:A:66:LEU:HA	1:A:69:LEU:HB3	1	0.02	0.02
(1,577)	1:A:66:LEU:HA	1:A:64:LEU:HB2	1	0.02	0.02
(1,572)	1:A:43:GLU:HB2	1:A:44:VAL:HG21	1	0.76	0.76
(1,572)	1:A:43:GLU:HB2	1:A:44:VAL:HG22	1	0.76	0.76
(1,572)	1:A:43:GLU:HB2	1:A:44:VAL:HG23	1	0.76	0.76
(1,571)	1:A:43:GLU:HB3	1:A:44:VAL:HG21	1	0.19	0.19
(1,571)	1:A:43:GLU:HB3	1:A:44:VAL:HG22	1	0.19	0.19
(1,571)	1:A:43:GLU:HB3	1:A:44:VAL:HG23	1	0.19	0.19
(1,568)	1:A:72:MET:HG2	1:A:69:LEU:HD21	1	0.09	0.09
(1,568)	1:A:72:MET:HG2	1:A:69:LEU:HD22	1	0.09	0.09
(1,568)	1:A:72:MET:HG2	1:A:69:LEU:HD23	1	0.09	0.09
(1,533)	1:A:25:ILE:HD11	1:A:25:ILE:HA	1	0.03	0.03
(1,533)	1:A:25:ILE:HD12	1:A:25:ILE:HA	1	0.03	0.03
(1,533)	1:A:25:ILE:HD13	1:A:25:ILE:HA	1	0.03	0.03
(1,53)	1:A:59:ARG:HG2	1:A:58:ILE:H	1	0.02	0.02
(1,53)	1:A:19:ILE:HG13	1:A:67:ARG:H	1	0.02	0.02
(1,521)	1:A:25:ILE:HB	1:A:27:LEU:HD21	1	0.01	0.01
(1,521)	1:A:25:ILE:HB	1:A:27:LEU:HD22	1	0.01	0.01
(1,521)	1:A:25:ILE:HB	1:A:27:LEU:HD23	1	0.01	0.01
(1,50)	1:A:16:ILE:HG21	1:A:39:LEU:HA	1	0.02	0.02
(1,50)	1:A:16:ILE:HG22	1:A:39:LEU:HA	1	0.02	0.02



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,50)	1:A:16:ILE:HG23	1:A:39:LEU:HA	1	0.02	0.02
(1,50)	1:A:16:ILE:HG21	1:A:36:LEU:HA	1	0.02	0.02
(1,50)	1:A:16:ILE:HG22	1:A:36:LEU:HA	1		
(1,50)	1:A:16:ILE:HG23	1:A:36:LEU:HA	1	0.02	0.02
(1,498)	1:A:47:ILE:HD11	1:A:43:GLU:HG3	1	0.01	0.01
(1,498)	1:A:47:ILE:HD12	1:A:43:GLU:HG3	1	0.01	0.01
(1,498)	1:A:47:ILE:HD13	1:A:43:GLU:HG3	1	0.01	0.01
(1,49)	1:A:47:ILE:HG21	1:A:43:GLU:HG3	1	0.01	0.01
(1,49)	1:A:47:ILE:HG22	1:A:43:GLU:HG3	1	0.01	0.01
(1,49)	1:A:47:ILE:HG23	1:A:43:GLU:HG3	1	0.01	0.01
(1,49)	1:A:16:ILE:HG21	1:A:43:GLU:HG3	1	0.01	0.01
(1,49)	1:A:16:ILE:HG22	1:A:43:GLU:HG3	1	0.01	0.01
(1,49)	1:A:16:ILE:HG23	1:A:43:GLU:HG3	1	0.01	0.01
(1,47)	1:A:22:LEU:HD21	1:A:14:ALA:H	1	0.02	0.02
(1,47)	1:A:22:LEU:HD22	1:A:14:ALA:H	1	0.02	0.02
(1,47)	1:A:22:LEU:HD23	1:A:14:ALA:H	1	0.02	0.02
(1,47)	1:A:22:LEU:HD21	1:A:66:LEU:H	1	0.02	0.02
(1,47)	1:A:22:LEU:HD22	1:A:66:LEU:H	1	0.02	0.02
(1,47)	1:A:22:LEU:HD23	1:A:66:LEU:H	1	0.02	0.02
(1,453)	1:A:47:ILE:HA	1:A:50:ARG:H	1	0.01	0.01
(1,447)	1:A:47:ILE:HA	1:A:51:GLU:HG2	1	0.02	0.02
(1,447)	1:A:47:ILE:HA	1:A:51:GLU:HG3	1	0.02	0.02
(1,374)	1:A:19:ILE:HB	1:A:18:GLY:H	1	0.02	0.02
(1,303)	1:A:40:MET:HB3	1:A:37:ASP:H	1	0.02	0.02
(1,294)	1:A:17:LEU:HD11	1:A:36:LEU:HB2	1	0.03	0.03
(1,294)	1:A:17:LEU:HD12	1:A:36:LEU:HB2	1	0.03	0.03
(1,294)	1:A:17:LEU:HD13	1:A:36:LEU:HB2	1	0.03	0.03
(1,294)	1:A:17:LEU:HD21	1:A:36:LEU:HB2	1	0.03	0.03
(1,294)	1:A:17:LEU:HD22	1:A:36:LEU:HB2	1	0.03	0.03
(1,294)	1:A:17:LEU:HD23	1:A:36:LEU:HB2	1	0.03	0.03
(1,294)	1:A:17:LEU:HD21	1:A:36:LEU:HB2	1	0.03	0.03
(1,294)	1:A:17:LEU:HD22	1:A:36:LEU:HB2	1	0.03	0.03
(1,294)	1:A:17:LEU:HD23	1:A:36:LEU:HB2	1	0.03	0.03
(1,25)	1:A:52:HIS:HB2	1:A:48:LEU:HA	1	0.07	0.07
(1,25)	1:A:52:HIS:HB2	1:A:74:SER:HB3	1	0.07	0.07
(1,228)	1:A:31:LEU:HA	1:A:31:LEU:HD21	1	0.03	0.03
(1,228)	1:A:31:LEU:HA	1:A:31:LEU:HD22	1	0.03	0.03
(1,228)	1:A:31:LEU:HA	1:A:31:LEU:HD23	1	0.03	0.03
(1,224)	1:A:31:LEU:HB2	1:A:36:LEU:HD21	1	0.06	0.06
(1,224)	1:A:31:LEU:HB2	1:A:36:LEU:HD22	1	0.06	0.06
(1,224)	1:A:31:LEU:HB2	1:A:36:LEU:HD23	1	0.06	0.06
(1,222)	1:A:31:LEU:HB3	1:A:36:LEU:HD21	1	0.41	0.41



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,222)	1:A:31:LEU:HB3	1:A:36:LEU:HD22	1	0.41	0.41
(1,222)	1:A:31:LEU:HB3	1:A:36:LEU:HD23	1	0.41	0.41
(1,209)	1:A:30:SER:HB2	1:A:31:LEU:H	1	0.01	0.01
(1,201)	1:A:29:SER:HB2	1:A:30:SER:H	1	0.02	0.02
(1,20)	1:A:66:LEU:HB3	1:A:19:ILE:HD11	1	0.16	0.16
(1,20)	1:A:66:LEU:HB3	1:A:19:ILE:HD12	1	0.16	0.16
(1,20)	1:A:66:LEU:HB3	1:A:19:ILE:HD13	1	0.16	0.16
(1,20)	1:A:66:LEU:HB3	1:A:69:LEU:HD21	1	0.16	0.16
(1,20)	1:A:66:LEU:HB3	1:A:69:LEU:HD22	1	0.16	0.16
(1,20)	1:A:66:LEU:HB3	1:A:69:LEU:HD23	1	0.16	0.16
(1,20)	1:A:66:LEU:HB3	1:A:27:LEU:HD21	1	0.16	0.16
(1,20)	1:A:66:LEU:HB3	1:A:27:LEU:HD22	1	0.16	0.16
(1,20)	1:A:66:LEU:HB3	1:A:27:LEU:HD23	1	0.16	0.16
(1,197)	1:A:29:SER:HB3	1:A:33:ASP:HB3	1	1.08	1.08
(1,196)	1:A:29:SER:HB3	1:A:33:ASP:HB2	1	0.01	0.01
(1,195)	1:A:29:SER:HB2	1:A:34:LEU:HG	1	0.02	0.02
(1,1724)	1:A:78:SER:H	1:A:77:GLY:H	1	0.01	0.01
(1,1715)	1:A:67:ARG:H	1:A:67:ARG:HE	1	0.02	0.02
(1,1679)	1:A:24:GLY:H	1:A:22:LEU:H	1	0.01	0.01
(1,1675)	1:A:21:ASP:H	1:A:20:ARG:H	1	0.02	0.02
(1,1663)	1:A:11:LYS:H	1:A:15:HIS:H	1	0.01	0.01
(1,1654)	1:A:29:SER:H	1:A:28:ASP:H	1	0.02	0.02
(1,1645)	1:A:9:LEU:HD11	1:A:9:LEU:H	1	0.01	0.01
(1,1645)	1:A:9:LEU:HD12	1:A:9:LEU:H	1	0.01	0.01
(1,1645)	1:A:9:LEU:HD13	1:A:9:LEU:H	1	0.01	0.01
(1,1643)	1:A:9:LEU:HD11	1:A:72:MET:H	1	0.26	0.26
(1,1643)	1:A:9:LEU:HD12	1:A:72:MET:H	1	0.26	0.26
(1,1643)	1:A:9:LEU:HD13	1:A:72:MET:H	1	0.26	0.26
(1,1630)	1:A:73:SER:HB3	1:A:10:VAL:HG21	1	0.02	0.02
(1,1630)	1:A:73:SER:HB3	1:A:10:VAL:HG22	1	0.02	0.02
(1,1630)	1:A:73:SER:HB3	1:A:10:VAL:HG23	1	0.02	0.02
(1,1610)	1:A:13:VAL:HG21	1:A:9:LEU:HD11	1	0.59	0.59
(1,1610)	1:A:13:VAL:HG21	1:A:9:LEU:HD12	1	0.59	0.59
(1,1610)	1:A:13:VAL:HG21	1:A:9:LEU:HD13	1	0.59	0.59
(1,1610)	1:A:13:VAL:HG22	1:A:9:LEU:HD11	1	0.59	0.59
(1,1610)	1:A:13:VAL:HG22	1:A:9:LEU:HD12	1	0.59	0.59
(1,1610)	1:A:13:VAL:HG22	1:A:9:LEU:HD13	1	0.59	0.59
(1,1610)	1:A:13:VAL:HG23	1:A:9:LEU:HD11	1	0.59	0.59
(1,1610)	1:A:13:VAL:HG23	1:A:9:LEU:HD12	1	0.59	0.59
(1,1610)	1:A:13:VAL:HG23	1:A:9:LEU:HD13	1	0.59	0.59
(1,1600)	1:A:36:LEU:HD11	1:A:40:MET:HG3	1	0.02	0.02
(1,1600)	1:A:36:LEU:HD12	1:A:40:MET:HG3	1	0.02	0.02



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,1600)	1:A:36:LEU:HD13	1:A:40:MET:HG3	1	0.02	0.02
(1,1596)	1:A:12:ALA:HA	1:A:7:ARG:HD2	1	0.01	0.01
(1,1596)	1:A:12:ALA:HA	1:A:7:ARG:HD3	1	0.01	0.01
(1,1585)	1:A:59:ARG:HG3	1:A:57:PRO:HB3	1	0.03	0.03
(1,1580)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:20:ARG:HD2	1	0.03	0.03
(1,1580)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:20:ARG:HD3	1	0.03	0.03
(1,1580)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:20:ARG:HD2	1	0.03	0.03
(1,1580)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:20:ARG:HD3	1	0.03	0.03
(1,1580)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:20:ARG:HD2	1	0.03	0.03
(1,1580)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:20:ARG:HD3	1	0.03	0.03
(1,1579)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:11:LYS:HE2	1	0.05	0.05
(1,1579)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:11:LYS:HE3	1	0.05	0.05
(1,1579)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:11:LYS:HE2	1	0.05	0.05
(1,1579)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:11:LYS:HE3	1	0.05	0.05
(1,1579)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:11:LYS:HE2	1	0.05	0.05
(1,1579)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:11:LYS:HE3	1	0.05	0.05
(1,1573)	1:A:16:ILE:HG21	1:A:40:MET:HG3	1	0.03	0.03
(1,1573)	1:A:16:ILE:HG22	1:A:40:MET:HG3	1	0.03	0.03
(1,1573)	1:A:16:ILE:HG23	1:A:40:MET:HG3	1	0.03	0.03
(1,1567)	1:A:55:VAL:HG11	1:A:57:PRO:HB3	1	0.02	0.02
(1,1567)	1:A:55:VAL:HG12	1:A:57:PRO:HB3	1	0.02	0.02
(1,1567)	1:A:55:VAL:HG13	1:A:57:PRO:HB3	1	0.02	0.02
(1,1566)	1:A:68:LYS:HD2	1:A:64:LEU:H	1	0.1	0.1
(1,1566)	1:A:68:LYS:HD3	1:A:64:LEU:H	1	0.1	0.1
(1,1566)	1:A:68:LYS:HD2	1:A:64:LEU:H	1	0.1	0.1
(1,1566)	1:A:68:LYS:HD3	1:A:64:LEU:H	1	0.1	0.1
(1,1561)	1:A:22:LEU:HD21	1:A:23:ALA:HA	1	0.01	0.01
(1,1561)	1:A:22:LEU:HD22	1:A:23:ALA:HA	1	0.01	0.01
(1,1561)	1:A:22:LEU:HD23	1:A:23:ALA:HA	1	0.01	0.01
(1,1544)	1:A:44:VAL:HG21	1:A:44:VAL:H	1	1.03	1.03
(1,1544)	1:A:44:VAL:HG22	1:A:44:VAL:H	1	1.03	1.03
(1,1544)	1:A:44:VAL:HG23	1:A:44:VAL:H	1	1.03	1.03
(1,1542)	1:A:44:VAL:HG21	1:A:40:MET:HB2	1	0.3	0.3
(1,1542)	1:A:44:VAL:HG22	1:A:40:MET:HB2	1	0.3	0.3
(1,1542)	1:A:44:VAL:HG23	1:A:40:MET:HB2	1	0.3	0.3
(1,1540)	1:A:44:VAL:HG21	1:A:40:MET:HA	1	0.27	0.27
(1,1540)	1:A:44:VAL:HG22	1:A:40:MET:HA	1	0.27	0.27
(1,1540)	1:A:44:VAL:HG23	1:A:40:MET:HA	1	0.27	0.27
(1,1539)	1:A:44:VAL:HB	1:A:48:LEU:H	1	0.04	0.04
(1,1534)	1:A:10:VAL:HG11	1:A:70:GLN:HE21	1	0.03	0.03
(1,1534)	1:A:10:VAL:HG12	1:A:70:GLN:HE21	1	0.03	0.03
(1,1534)	1:A:10:VAL:HG13	1:A:70:GLN:HE21	1	0.03	0.03



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,1525)	1:A:73:SER:HA	1:A:9:LEU:HD21	1	0.11	0.11
(1,1525)	1:A:73:SER:HA	1:A:9:LEU:HD22	1	0.11	0.11
(1,1525)	1:A:73:SER:HA	1:A:9:LEU:HD23	1	0.11	0.11
(1,1501)	1:A:49:GLU:HA	1:A:53:ASP:HB3	1	0.02	0.02
(1,1476)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:15:HIS:H	1	0.01	0.01
(1,1476)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:15:HIS:H	1	0.01	0.01
(1,1476)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:15:HIS:H	1	0.01	0.01
(1,1427)	1:A:42:VAL:HG21	1:A:42:VAL:H	1	0.01	0.01
(1,1427)	1:A:42:VAL:HG22	1:A:42:VAL:H	1	0.01	0.01
(1,1427)	1:A:42:VAL:HG23	1:A:42:VAL:H	1	0.01	0.01
(1,1404)	1:A:42:VAL:HB	1:A:42:VAL:H	1	0.03	0.03
(1,1400)	1:A:44:VAL:HB	1:A:45:ARG:HE	1	0.12	0.12
(1,1394)	1:A:44:VAL:HA	1:A:44:VAL:HG11	1	0.16	0.16
(1,1394)	1:A:44:VAL:HA	1:A:44:VAL:HG12	1	0.16	0.16
(1,1394)	1:A:44:VAL:HA	1:A:44:VAL:HG13	1	0.16	0.16
(1,1389)	1:A:12:ALA:HB1	1:A:9:LEU:HD21	1	0.33	0.33
(1,1389)	1:A:12:ALA:HB1	1:A:9:LEU:HD22	1	0.33	0.33
(1,1389)	1:A:12:ALA:HB1	1:A:9:LEU:HD23	1	0.33	0.33
(1,1389)	1:A:12:ALA:HB2	1:A:9:LEU:HD21	1	0.33	0.33
(1,1389)	1:A:12:ALA:HB2	1:A:9:LEU:HD22	1	0.33	0.33
(1,1389)	1:A:12:ALA:HB2	1:A:9:LEU:HD23	1	0.33	0.33
(1,1389)	1:A:12:ALA:HB3	1:A:9:LEU:HD21	1	0.33	0.33
(1,1389)	1:A:12:ALA:HB3	1:A:9:LEU:HD22	1	0.33	0.33
(1,1389)	1:A:12:ALA:HB3	1:A:9:LEU:HD23	1	0.33	0.33
(1,1387)	1:A:12:ALA:HB1	1:A:7:ARG:HB2	1	0.01	0.01
(1,1387)	1:A:12:ALA:HB2	1:A:7:ARG:HB2	1	0.01	0.01
(1,1387)	1:A:12:ALA:HB3	1:A:7:ARG:HB2	1	0.01	0.01
(1,1367)	1:A:71:GLU:HA	1:A:68:LYS:HG2	1	0.04	0.04
(1,1367)	1:A:71:GLU:HA	1:A:68:LYS:HG3	1	0.04	0.04
(1,1331)	1:A:68:LYS:HG2	1:A:64:LEU:HD21	1	0.04	0.04
(1,1331)	1:A:68:LYS:HG2	1:A:64:LEU:HD22	1	0.04	0.04
(1,1331)	1:A:68:LYS:HG2	1:A:64:LEU:HD23	1	0.04	0.04
(1,1331)	1:A:68:LYS:HG3	1:A:64:LEU:HD21	1	0.04	0.04
(1,1331)	1:A:68:LYS:HG3	1:A:64:LEU:HD22	1	0.04	0.04
(1,1331)	1:A:68:LYS:HG3	1:A:64:LEU:HD23	1	0.04	0.04
(1,1328)	1:A:68:LYS:HD2	1:A:65:THR:H	1	0.01	0.01
(1,1328)	1:A:68:LYS:HD3	1:A:65:THR:H	1	0.01	0.01
(1,1325)	1:A:67:ARG:HD2	1:A:67:ARG:HA	1	0.02	0.02
(1,1316)	1:A:64:LEU:HD21	1:A:68:LYS:HB2	1	0.09	0.09
(1,1316)	1:A:64:LEU:HD21	1:A:68:LYS:HB3	1	0.09	0.09
(1,1316)	1:A:64:LEU:HD22	1:A:68:LYS:HB2	1	0.09	0.09
(1,1316)	1:A:64:LEU:HD22	1:A:68:LYS:HB3	1	0.09	0.09



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,1316)	1:A:64:LEU:HD23	1:A:68:LYS:HB2	1	0.09	0.09
(1,1316)	1:A:64:LEU:HD23	1:A:68:LYS:HB3	1	0.09	0.09
(1,1285)	1:A:62:ARG:HD2	1:A:32:ALA:HB1	1	0.03	0.03
(1,1285)	1:A:62:ARG:HD2	1:A:32:ALA:HB2	1	0.03	0.03
(1,1285)	1:A:62:ARG:HD2	1:A:32:ALA:HB3	1	0.03	0.03
(1,1274)	1:A:62:ARG:HA	1:A:63:GLN:HE22	1	0.01	0.01
(1,1246)	1:A:61:VAL:HA	1:A:64:LEU:HG	1	0.02	0.02
(1,1241)	1:A:60:GLU:HB2	1:A:61:VAL:HG21	1	0.41	0.41
(1,1241)	1:A:60:GLU:HB2	1:A:61:VAL:HG22	1	0.41	0.41
(1,1241)	1:A:60:GLU:HB2	1:A:61:VAL:HG23	1	0.41	0.41
(1,1203)	1:A:56:LEU:HD21	1:A:54:LEU:HA	1	0.01	0.01
(1,1203)	1:A:56:LEU:HD22	1:A:54:LEU:HA	1	0.01	0.01
(1,1203)	1:A:56:LEU:HD23	1:A:54:LEU:HA	1	0.01	0.01
(1,1202)	1:A:56:LEU:HD21	1:A:55:VAL:HB	1	1.3	1.3
(1,1202)	1:A:56:LEU:HD22	1:A:55:VAL:HB	1	1.3	1.3
(1,1202)	1:A:56:LEU:HD23	1:A:55:VAL:HB	1	1.3	1.3
(1,1200)	1:A:56:LEU:HD21	1:A:55:VAL:H	1	1.14	1.14
(1,1200)	1:A:56:LEU:HD22	1:A:55:VAL:H	1	1.14	1.14
(1,1200)	1:A:56:LEU:HD23	1:A:55:VAL:H	1	1.14	1.14
(1,1195)	1:A:56:LEU:HG	1:A:56:LEU:H	1	0.05	0.05
(1,119)	1:A:4:GLU:HB3	1:A:5:ALA:H	1	0.03	0.03
(1,1182)	1:A:56:LEU:HB3	1:A:57:PRO:HG2	1	0.08	0.08
(1,1182)	1:A:56:LEU:HB3	1:A:57:PRO:HB2	1	0.08	0.08
(1,1180)	1:A:55:VAL:HG21	1:A:53:ASP:HA	1	0.27	0.27
(1,1180)	1:A:55:VAL:HG22	1:A:53:ASP:HA	1	0.27	0.27
(1,1180)	1:A:55:VAL:HG23	1:A:53:ASP:HA	1	0.27	0.27
(1,1179)	1:A:55:VAL:HG11	1:A:56:LEU:HB3	1	0.39	0.39
(1,1179)	1:A:55:VAL:HG12	1:A:56:LEU:HB3	1	0.39	0.39
(1,1179)	1:A:55:VAL:HG13	1:A:56:LEU:HB3	1	0.39	0.39
(1,1162)	1:A:54:LEU:HD11	1:A:52:HIS:HB2	1	0.01	0.01
(1,1162)	1:A:54:LEU:HD12	1:A:52:HIS:HB2	1	0.01	0.01
(1,1162)	1:A:54:LEU:HD13	1:A:52:HIS:HB2	1	0.01	0.01
(1,116)	1:A:55:VAL:HG21	1:A:54:LEU:HB3	1	0.39	0.39
(1,116)	1:A:55:VAL:HG22	1:A:54:LEU:HB3	1	0.39	0.39
(1,116)	1:A:55:VAL:HG23	1:A:54:LEU:HB3	1	0.39	0.39
(1,1149)	1:A:54:LEU:HB3	1:A:48:LEU:HG	1	0.02	0.02
(1,1148)	1:A:54:LEU:HB2	1:A:48:LEU:HG	1	0.08	0.08
(1,1140)	1:A:54:LEU:HB2	1:A:54:LEU:H	1	0.06	0.06
(1,114)	1:A:55:VAL:HG11	1:A:57:PRO:HG3	1	0.37	0.37
(1,114)	1:A:55:VAL:HG12	1:A:57:PRO:HG3	1	0.37	0.37
(1,114)	1:A:55:VAL:HG13	1:A:57:PRO:HG3	1	0.37	0.37
(1,1128)	1:A:36:LEU:HD11	1:A:37:ASP:H	1	0.59	0.59



Continued from previous page...

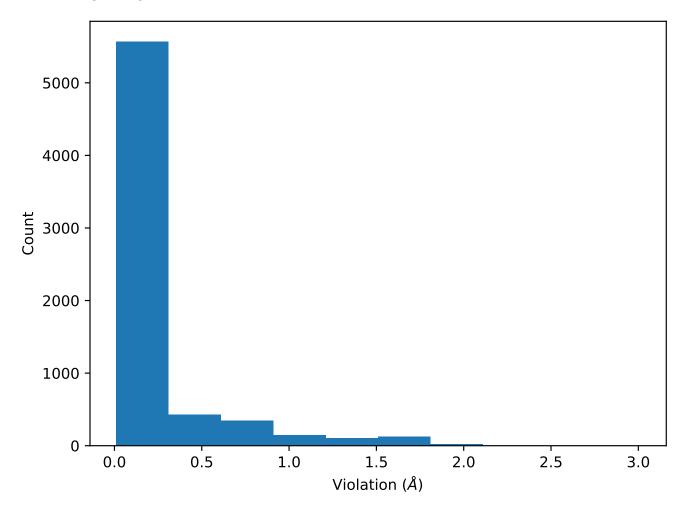
Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,1128)	1:A:36:LEU:HD12	1:A:37:ASP:H	1	0.59	0.59
(1,1128)	1:A:36:LEU:HD13	1:A:37:ASP:H	1	0.59	0.59
(1,1103)	1:A:40:MET:HG3	1:A:40:MET:H	1	0.01	0.01
(1,1082)	1:A:39:LEU:HB3	1:A:39:LEU:H	1	0.23	0.23
(1,1065)	1:A:36:LEU:HD11	1:A:38:SER:H	1	0.95	0.95
(1,1065)	1:A:36:LEU:HD12	1:A:38:SER:H	1	0.95	0.95
(1,1065)	1:A:36:LEU:HD13	1:A:38:SER:H	1	0.95	0.95
(1,1047)	1:A:36:LEU:HD21	1:A:44:VAL:HG21	1	0.01	0.01
(1,1047)	1:A:36:LEU:HD21	1:A:44:VAL:HG22	1	0.01	0.01
(1,1047)	1:A:36:LEU:HD21	1:A:44:VAL:HG23	1	0.01	0.01
(1,1047)	1:A:36:LEU:HD22	1:A:44:VAL:HG21	1	0.01	0.01
(1,1047)	1:A:36:LEU:HD22	1:A:44:VAL:HG22	1	0.01	0.01
(1,1047)	1:A:36:LEU:HD22	1:A:44:VAL:HG23	1	0.01	0.01
(1,1047)	1:A:36:LEU:HD23	1:A:44:VAL:HG21	1	0.01	0.01
(1,1047)	1:A:36:LEU:HD23	1:A:44:VAL:HG22	1	0.01	0.01
(1,1047)	1:A:36:LEU:HD23	1:A:44:VAL:HG23	1	0.01	0.01
(1,102)	1:A:55:VAL:HG21	1:A:55:VAL:H	1	0.85	0.85
(1,102)	1:A:55:VAL:HG22	1:A:55:VAL:H	1	0.85	0.85
(1,102)	1:A:55:VAL:HG23	1:A:55:VAL:H	1	0.85	0.85
(1,1006)	1:A:33:ASP:HB2	1:A:30:SER:H	1	0.44	0.44
(1,1001)	1:A:33:ASP:HB2	1:A:33:ASP:H	1	0.03	0.03



8.8 All distance violations

8.8.1 Histogram : Distribution of distance violations

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



8.8.2 Table: All distance violations

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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1123)	1:A:48:LEU:HD11	1:A:52:HIS:HB2	2	3.01
(1,1123)	1:A:48:LEU:HD12	1:A:52:HIS:HB2	2	3.01
(1,1123)	1:A:48:LEU:HD13	1:A:52:HIS:HB2	2	3.01
(1,1020)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:33:ASP:HB2	24	2.1
(1,1020)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:33:ASP:HB2	24	2.1
(1,1020)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:33:ASP:HB2	24	2.1
(1,1020)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:33:ASP:HB2	14	2.01



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

(1,1020) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB2 14 2.0 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 14 2.0 (1,1163) 1:A:54:LEU:HD11 1:A:51:GLU:HB2 24 1.9 (1,1163) 1:A:54:LEU:HD12 1:A:51:GLU:HB2 24 1.9 (1,1163) 1:A:54:LEU:HD13 1:A:51:GLU:HB2 24 1.9 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 27 1.9 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 27 1.9 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 26 1.9 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB2 26 1.9 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB2 26 1.9	1 9 9 9 9 8
(1,1163) 1:A:54:LEU:HD11 1:A:51:GLU:HB2 24 1.9 (1,1163) 1:A:54:LEU:HD12 1:A:51:GLU:HB2 24 1.9 (1,1163) 1:A:54:LEU:HD13 1:A:51:GLU:HB2 24 1.9 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 27 1.9 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB2 27 1.9 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 27 1.9 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 26 1.9	9 9 9 8
(1,1163) 1:A:54:LEU:HD12 1:A:51:GLU:HB2 24 1.9 (1,1163) 1:A:54:LEU:HD13 1:A:51:GLU:HB2 24 1.9 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 27 1.9 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB2 27 1.9 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 27 1.9 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 26 1.9	9 9 8
(1,1163) 1:A:54:LEU:HD13 1:A:51:GLU:HB2 24 1.9 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 27 1.9 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB2 27 1.9 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 27 1.9 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 26 1.9	9 8
(1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 27 1.9 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB2 27 1.9 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 27 1.9 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 26 1.9	8
(1,1020) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB2 27 1.9 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 27 1.9 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 26 1.9	
(1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 27 1.9 (1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 26 1.9	^
(1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 26 1.9	8
	8
(1.1020) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP·HB2 26 1.9	6
(-,) 1.1.0 1.1.2 1.1.0 0.1.51 1.1.1	6
(1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 26 1.9	6
(1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 17 1.8	9
(1,1020) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB2 17 1.8	9
(1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 17 1.8	9
(1,1589) 1:A:20:ARG:HG3 1:A:67:ARG:HE 18 1.8	8
(1,1020) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB2 13 1.8	7
(1,1020) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB2 13 1.8	7
(1,1020) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB2 13 1.8	7
(1,1163) 1:A:54:LEU:HD11 1:A:51:GLU:HB2 21 1.8	2
(1,1163) 1:A:54:LEU:HD12 1:A:51:GLU:HB2 21 1.8	2
(1,1163) 1:A:54:LEU:HD13 1:A:51:GLU:HB2 21 1.8	2
(1,900) 1:A:47:ILE:HG21 1:A:48:LEU:HD11 18 1.7	4
(1,900) 1:A:47:ILE:HG21 1:A:48:LEU:HD12 18 1.7	4
(1,900) 1:A:47:ILE:HG21 1:A:48:LEU:HD13 18 1.7	4
(1,900) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:48:LEU:HD11 18 1.7	4
(1,900) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:48:LEU:HD12 18 1.7	4
(1,900) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:48:LEU:HD13 18 1.7	4
(1,900) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:48:LEU:HD11 18 1.7	4
(1,900) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:48:LEU:HD12 18 1.7	4
(1,900) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:48:LEU:HD13 18 1.7	4
(1,444) 1:A:47:ILE:HA 1:A:50:ARG:HB3 28 1.7	2
(1,1554) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:26:ASN:HB3 19 1.7	2
(1,1554) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:26:ASN:HB3 19 1.7	2
(1,1554) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:26:ASN:HB3 19 1.7	2
(1,1163) 1:A:54:LEU:HD11 1:A:51:GLU:HB2 4 1.7	2
(1,1163) 1:A:54:LEU:HD12 1:A:51:GLU:HB2 4 1.7	2
(1,1163) 1:A:54:LEU:HD13 1:A:51:GLU:HB2 4 1.7	2
(1,1163) 1:A:54:LEU:HD11 1:A:51:GLU:HB2 29 1.7	2
(1,1163) 1:A:54:LEU:HD12 1:A:51:GLU:HB2 29 1.7	2
(1,1163) 1:A:54:LEU:HD13 1:A:51:GLU:HB2 29 1.7	2
(1,444) 1:A:47:ILE:HA 1:A:50:ARG:HB3 23 1.7	1
(1,900) 1:A:47:ILE:HG21 1:A:48:LEU:HD11 2 1.7	7



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

(1,900) 1:A:47:ILE:HG21 1:A:48:LEU:HD12 2 1.7 (1,900) 1:A:47:ILE:HG21 1:A:48:LEU:HD13 2 1.7 (1,900) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:48:LEU:HD13 2 1.7 (1,900) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:48:LEU:HD11 2 1.7 (1,900) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:48:LEU:HD11 2 1.7 (1,900) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:48:LEU:HD12 2 1.7 (1,900) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:48:LEU:HD12 2 1.7 (1,900) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:48:LEU:HD13 2 1.7 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 28 1.69 (1,1581) 1:A:34:LEU:HD12 1:A:26:ASN:HB3 17 1.68 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:26:ASN:HB3 17 1.68 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:26:ASN:HB3 17 1.68 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:26:ASN:HB3 17 1.68 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:26:ASN:HB3 29 1.67 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:26:ASN:HB3 29 1.67 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD12 1:A:26:ASN:HB3 29 1.67 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD12 1:A:26:ASN:HB3 29 1.67 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD13 1:A:26:ASN:HB3 29 1.67 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD11 1:A:52:HIS:HB3 22 1.67 (1,1512) 1:A:48:LEU:HD13 1:A:52:HIS:HB3 22 1.67 (1,1512) 1:A:48:LEU:HD11 1:A:52:HIS:HB3 22 1.67 (1,1512) 1:A:48:LEU:HD13 1:A:50:ARG:HB 20 1.66 (1,1511) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 16 1.65 (1,1511) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 5 1.62 (1,1511) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 5 1.62 (1,1511) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 16 1.65 (1,1511) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 17 1.64 (1,1511) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 17 1.62 (1,1511) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 19 1.62 (1,1511) 1:A:14:ALA:HB	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,900) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:48:LEU:HD11 2 1.7 (1,900) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:48:LEU:HD12 2 1.7 (1,900) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:48:LEU:HD13 2 1.7 (1,900) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:48:LEU:HD11 2 1.7 (1,900) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:48:LEU:HD11 2 1.7 (1,900) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:48:LEU:HD12 2 1.7 (1,900) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:48:LEU:HD13 2 1.7 (1,900) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:48:LEU:HD13 2 1.7 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 28 1.69 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 28 1.69 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 28 1.69 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 28 1.69 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:26:ASN:HB3 17 1.68 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:26:ASN:HB3 17 1.68 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:26:ASN:HB3 17 1.68 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:26:ASN:HB3 29 1.67 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:26:ASN:HB3 29 1.67 (1,1559) 1:A:34:LEU:HD11 1:A:52:HIS:HB3 22 1.67 (1,1122) 1:A:48:LEU:HD11 1:A:52:HIS:HB3 22 1.67 (1,1559) 1:A:34:LEU:HD11 1:A:52:HIS:HB3 22 1.67 (1,1589) 1:A:20:ARG:HG3 1:A:67:ARG:HE 16 1.66 (1,444) 1:A:47:ILE:HA 1:A:50:ARG:HB3 15 1.65 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 16 1.65 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 16 1.65 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 16 1.65 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 17 1.64 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 17 1.64 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 17 1.64 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 17 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:H	(1,900)	1:A:47:ILE:HG21	1:A:48:LEU:HD12	2	1.7
(1,900) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:48:LEU:HD12 2 1.7 (1,900) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:48:LEU:HD13 2 1.7 (1,900) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:48:LEU:HD11 2 1.7 (1,900) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:48:LEU:HD12 2 1.7 (1,900) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:48:LEU:HD12 2 1.7 (1,900) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:48:LEU:HD12 2 1.7 (1,1900) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:48:LEU:HD13 2 1.7 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 28 1.69 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 28 1.69 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 28 1.69 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 28 1.69 (1,1584) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:26:ASN:HB3 17 1.68 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:26:ASN:HB3 17 1.68 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:26:ASN:HB3 17 1.68 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:26:ASN:HB3 17 1.68 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:26:ASN:HB3 29 1.67 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:26:ASN:HB3 29 1.67 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:26:ASN:HB3 29 1.67 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:26:ASN:HB3 29 1.67 (1,1122) 1:A:48:LEU:HD11 1:A:52:HIS:HB3 22 1.67 (1,1122) 1:A:48:LEU:HD11 1:A:52:HIS:HB3 22 1.67 (1,1122) 1:A:48:LEU:HD13 1:A:52:HIS:HB3 22 1.67 (1,1589) 1:A:20:ARG:HG3 1:A:67:ARG:HE 16 1.66 (1,444) 1:A:47:ILE:HA 1:A:50:ARG:HB3 15 1.65 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 16 1.65 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 5 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 11 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN	(1,900)	1:A:47:ILE:HG21	1:A:48:LEU:HD13	2	1.7
(1,900) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:48:LEU:HD13 2 1.7 (1,900) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:48:LEU:HD11 2 1.7 (1,900) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:48:LEU:HD12 2 1.7 (1,900) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:48:LEU:HD12 2 1.7 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 28 1.69 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 28 1.69 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 28 1.69 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 28 1.69 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 28 1.69 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:26:ASN:HB3 17 1.68 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:26:ASN:HB3 17 1.68 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:26:ASN:HB3 17 1.68 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:26:ASN:HB3 17 1.68 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:26:ASN:HB3 29 1.67 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD12 1:A:26:ASN:HB3 29 1.67 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD13 1:A:52:HIS:HB3 22 1.67 (1,1122) 1:A:48:LEU:HD11 1:A:52:HIS:HB3 22 1.67 (1,1589) 1:A:20:ARG:HG3 1:A:67:ARG:HE 16 1.66 (1,444) 1:A:47:ILE:HA 1:A:50:ARG:HB3 15 1.65 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 16 1.65 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 16 1.65 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 16 1.65 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 16 1.65 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 5 1.64 (1,1555) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB3 27 1.64 (1,1555) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB3 27 1.64 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 5 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 11 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB	(1,900)	1:A:47:ILE:HG22	1:A:48:LEU:HD11	2	1.7
(1,900) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:48:LEU:HD11 2 1.7 (1,900) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:48:LEU:HD12 2 1.7 (1,900) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:48:LEU:HD13 2 1.7 (1,900) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:48:LEU:HD13 2 1.7 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 28 1.69 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 28 1.69 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 28 1.69 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 28 1.69 (1,1584) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:26:ASN:HB3 17 1.68 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:26:ASN:HB3 17 1.68 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:26:ASN:HB3 17 1.68 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:26:ASN:HB3 17 1.68 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:26:ASN:HB3 29 1.67 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:52:HIS:HB3 22 1.67 (1,1122) 1:A:48:LEU:HD11 1:A:52:HIS:HB3 22 1.67 (1,1122) 1:A:48:LEU:HD12 1:A:52:HIS:HB3 22 1.67 (1,1122) 1:A:48:LEU:HD12 1:A:52:HIS:HB3 22 1.67 (1,1589) 1:A:20:ARG:HG3 1:A:67:ARG:HE 16 1.66 (1,444) 1:A:47:ILE:HA 1:A:50:ARG:HE3 15 1.65 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 16 1.65 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 5 1.64 (1,1555) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB3 27 1.64 (1,1555) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB3 27 1.64 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 5 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 11 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB	(1,900)	1:A:47:ILE:HG22	1:A:48:LEU:HD12	2	1.7
(1,900) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:48:LEU:HD12 2 1.7 (1,900) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:48:LEU:HD13 2 1.7 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 28 1.69 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 28 1.69 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 28 1.69 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 28 1.69 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:26:ASN:HB3 17 1.68 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:26:ASN:HB3 17 1.68 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:26:ASN:HB3 17 1.68 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:26:ASN:HB3 29 1.67 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:26:ASN:HB3 29 1.67 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:26:ASN:HB3 29 1.67 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:26:ASN:HB3 29 1.67 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:26:ASN:HB3 29 1.67 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD13 1:A:52:HIS:HB3 22 1.67 (1,1122) 1:A:48:LEU:HD11 1:A:52:HIS:HB3 22 1.67 (1,1122) 1:A:48:LEU:HD12 1:A:52:HIS:HB3 22 1.67 (1,1122) 1:A:48:LEU:HD13 1:A:52:HIS:HB3 22 1.67 (1,1589) 1:A:20:ARG:HG3 1:A:67:ARG:HE 16 1.66 (1,444) 1:A:47:ILE:HA 1:A:50:ARG:HB3 15 1.65 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 16 1.65 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 16 1.65 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 16 1.65 (1,1589) 1:A:20:ARG:HG3 1:A:67:ARG:HE 9 1.64 (1,1555) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB3 27 1.64 (1,1555) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB3 27 1.64 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 5 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 5 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 5 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 5 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 8 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 8 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 11 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:7	(1,900)	1:A:47:ILE:HG22	1:A:48:LEU:HD13	2	1.7
(1,900) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:48:LEU:HD13 2 1.7 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 28 1.69 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 28 1.69 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 28 1.69 (1,1581) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:26:ASN:HB3 17 1.68 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:26:ASN:HB3 17 1.68 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:26:ASN:HB3 17 1.68 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:26:ASN:HB3 17 1.68 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:26:ASN:HB3 29 1.67 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:26:ASN:HB3 29 1.67 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:26:ASN:HB3 29 1.67 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:26:ASN:HB3 29 1.67 (1,1122) 1:A:48:LEU:HD11 1:A:52:HIS:HB3 22 1.67 (1,1122) 1:A:48:LEU:HD11 1:A:52:HIS:HB3 22 1.67 (1,1122) 1:A:48:LEU:HD11 1:A:52:HIS:HB3 22 1.67 (1,1589) 1:A:20:ARG:HG3 1:A:67:ARG:HE 16 1.66 (1,444) 1:A:47:ILE:HA 1:A:50:ARG:HB3 15 1.65 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 16 1.65 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 16 1.65 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 16 1.65 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 16 1.65 (1,1589) 1:A:20:ARG:HG3 1:A:67:ARG:HE 9 1.64 (1,1555) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB3 27 1.64 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 16 1.65 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 5 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 8 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 15 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 15 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 11 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB	(1,900)	1:A:47:ILE:HG23	1:A:48:LEU:HD11	2	1.7
(1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 28 1.69 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 28 1.69 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 28 1.69 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:26:ASN:HB3 17 1.68 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:26:ASN:HB3 17 1.68 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:26:ASN:HB3 17 1.68 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:26:ASN:HB3 29 1.67 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:26:ASN:HB3 29 1.67 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:26:ASN:HB3 29 1.67 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:26:ASN:HB3 29 1.67 (1,152) 1:A:48:LEU:HD11 1:A:25:HIS:HB3 22 1.67 (1,1122) 1:A:48:LEU:HD12 1:A:52:HIS:HB3 22 1.67 (1,1589) 1:A:20:ARG:HG3 1:A:67:ARG:HE 16 1.66 (1,4581) 1:A:14:ALA:HB1	(1,900)	1:A:47:ILE:HG23	1:A:48:LEU:HD12	2	1.7
(1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 28 1.69 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 28 1.69 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:26:ASN:HB3 17 1.68 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:26:ASN:HB3 17 1.68 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:26:ASN:HB3 29 1.67 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:26:ASN:HB3 29 1.67 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:26:ASN:HB3 29 1.67 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:26:ASN:HB3 29 1.67 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:26:ASN:HB3 29 1.67 (1,1122) 1:A:48:LEU:HD11 1:A:52:HIS:HB3 22 1.67 (1,1122) 1:A:48:LEU:HD12 1:A:52:HIS:HB3 22 1.67 (1,1529) 1:A:48:LEU:HD13 1:A:67:ARG:HE 16 1.66 (1,444) 1:A:47:AE:HA 1:A:50:ARG:HB3 15 1.65 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1	(1,900)	1:A:47:ILE:HG23	1:A:48:LEU:HD13	2	1.7
(1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 28 1.69 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:26:ASN:HB3 17 1.68 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:26:ASN:HB3 17 1.68 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:26:ASN:HB3 17 1.68 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:26:ASN:HB3 29 1.67 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:26:ASN:HB3 29 1.67 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:26:ASN:HB3 29 1.67 (1,1521) 1:A:48:LEU:HD12 1:A:26:ASN:HB3 29 1.67 (1,1122) 1:A:48:LEU:HD13 1:A:26:ASN:HB3 29 1.67 (1,1122) 1:A:48:LEU:HD13 1:A:52:HIS:HB3 22 1.67 (1,1122) 1:A:48:LEU:HD13 1:A:52:HIS:HB3 22 1.67 (1,1589) 1:A:20:ARG:HG3 1:A:67:ARG:HE 16 1.66 (1,444) 1:A:44:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 16 1.65 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB2	(1,1581)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:70:GLN:HG3	28	1.69
(1,1554) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:26:ASN:HB3 17 1.68 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:26:ASN:HB3 17 1.68 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:26:ASN:HB3 29 1.67 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:26:ASN:HB3 29 1.67 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:26:ASN:HB3 29 1.67 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:26:ASN:HB3 29 1.67 (1,1122) 1:A:48:LEU:HD11 1:A:52:HIS:HB3 22 1.67 (1,1122) 1:A:48:LEU:HD12 1:A:52:HIS:HB3 22 1.67 (1,1122) 1:A:48:LEU:HD13 1:A:52:HIS:HB3 22 1.67 (1,1122) 1:A:48:LEU:HD13 1:A:52:HIS:HB3 22 1.67 (1,1589) 1:A:20:ARG:HG3 1:A:67:ARG:HE 16 1.66 (1,444) 1:A:44:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 16 1.65 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:67:ARG:HE 9 1.64 (1,1589) 1:A:34:LEU:HD22	(1,1581)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:70:GLN:HG3	28	1.69
(1,1554) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:26:ASN:HB3 17 1.68 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:26:ASN:HB3 17 1.68 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:26:ASN:HB3 29 1.67 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:26:ASN:HB3 29 1.67 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:26:ASN:HB3 29 1.67 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD12 1:A:26:ASN:HB3 29 1.67 (1,1122) 1:A:48:LEU:HD11 1:A:52:HIS:HB3 22 1.67 (1,1122) 1:A:48:LEU:HD13 1:A:52:HIS:HB3 22 1.67 (1,1122) 1:A:48:LEU:HD13 1:A:67:ARG:HE 16 1.66 (1,1122) 1:A:48:LEU:HD13 1:A:67:ARG:HE 16 1.66 (1,1589) 1:A:20:ARG:HG3 1:A:67:ARG:HE 16 1.66 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 16 1.65 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:67:ARG:HE 9 1.64 (1,1585) 1:A:34:LEU:HD22	(1,1581)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:70:GLN:HG3	28	1.69
(1,1554) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:26:ASN:HB3 17 1.68 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:26:ASN:HB3 29 1.67 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:26:ASN:HB3 29 1.67 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:26:ASN:HB3 29 1.67 (1,1554) 1:A:48:LEU:HD11 1:A:52:HIS:HB3 22 1.67 (1,1122) 1:A:48:LEU:HD12 1:A:52:HIS:HB3 22 1.67 (1,1122) 1:A:48:LEU:HD13 1:A:52:HIS:HB3 22 1.67 (1,1589) 1:A:20:ARG:HG3 1:A:67:ARG:HE 16 1.66 (1,444) 1:A:47:ILE:HA 1:A:50:ARG:HB3 15 1.65 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 16 1.65 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 16 1.65 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:67:ARG:HE 9 1.64 (1,1585) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB3 27 1.64 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 <td< td=""><td>(1,1554)</td><td>1:A:34:LEU:HD21</td><td>1:A:26:ASN:HB3</td><td>17</td><td>1.68</td></td<>	(1,1554)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:26:ASN:HB3	17	1.68
(1,1554) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:26:ASN:HB3 29 1.67 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:26:ASN:HB3 29 1.67 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:26:ASN:HB3 29 1.67 (1,1122) 1:A:48:LEU:HD11 1:A:52:HIS:HB3 22 1.67 (1,1122) 1:A:48:LEU:HD12 1:A:52:HIS:HB3 22 1.67 (1,1589) 1:A:48:LEU:HD13 1:A:52:HIS:HB3 22 1.67 (1,1589) 1:A:20:ARG:HG3 1:A:67:ARG:HE 16 1.66 (1,444) 1:A:47:ILE:HA 1:A:50:ARG:HB3 15 1.65 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 16 1.65 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 16 1.65 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:67:ARG:HE 9 1.64 (1,1555) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB3 27 1.64 (1,1555) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB3 27 1.64 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 <td< td=""><td>(1,1554)</td><td>1:A:34:LEU:HD22</td><td>1:A:26:ASN:HB3</td><td>17</td><td>1.68</td></td<>	(1,1554)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:26:ASN:HB3	17	1.68
(1,1554) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:26:ASN:HB3 29 1.67 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:26:ASN:HB3 29 1.67 (1,1122) 1:A:48:LEU:HD11 1:A:52:HIS:HB3 22 1.67 (1,1122) 1:A:48:LEU:HD12 1:A:52:HIS:HB3 22 1.67 (1,1122) 1:A:48:LEU:HD13 1:A:52:HIS:HB3 22 1.67 (1,1589) 1:A:20:ARG:HG3 1:A:67:ARG:HE 16 1.66 (1,444) 1:A:47:ILE:HA 1:A:50:ARG:HB3 15 1.65 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 16 1.65 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 16 1.65 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:67:ARG:HE 9 1.64 (1,1585) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB3 27 1.64 (1,1555) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB3 27 1.64 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 5 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1	(1,1554)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:26:ASN:HB3	17	1.68
(1,1554) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:26:ASN:HB3 29 1.67 (1,1122) 1:A:48:LEU:HD11 1:A:52:HIS:HB3 22 1.67 (1,1122) 1:A:48:LEU:HD12 1:A:52:HIS:HB3 22 1.67 (1,1122) 1:A:48:LEU:HD13 1:A:52:HIS:HB3 22 1.67 (1,1589) 1:A:20:ARG:HG3 1:A:67:ARG:HE 16 1.66 (1,444) 1:A:47:ILE:HA 1:A:50:ARG:HB3 15 1.65 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 16 1.65 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 16 1.65 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:67:ARG:HE 9 1.64 (1,1589) 1:A:20:ARG:HG3 1:A:67:ARG:HE 9 1.64 (1,1585) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB3 27 1.64 (1,1555) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB3 27 1.64 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 5 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:	(1,1554)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:26:ASN:HB3	29	1.67
(1,1122) 1:A:48:LEU:HD11 1:A:52:HIS:HB3 22 1.67 (1,1122) 1:A:48:LEU:HD12 1:A:52:HIS:HB3 22 1.67 (1,1122) 1:A:48:LEU:HD13 1:A:52:HIS:HB3 22 1.67 (1,1589) 1:A:40:ARG:HG3 1:A:67:ARG:HE 16 1.66 (1,1581) 1:A:47:ILE:HA 1:A:50:ARG:HB3 15 1.65 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 16 1.65 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 16 1.65 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 16 1.65 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:67:ARG:HE 9 1.64 (1,1589) 1:A:20:ARG:HG3 1:A:33:ASP:HB3 27 1.64 (1,1585) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB3 27 1.64 (1,1555) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB3 27 1.64 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 5 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:	(1,1554)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:26:ASN:HB3	29	1.67
(1,1122) 1:A:48:LEU:HD12 1:A:52:HIS:HB3 22 1.67 (1,1122) 1:A:48:LEU:HD13 1:A:52:HIS:HB3 22 1.67 (1,1589) 1:A:20:ARG:HG3 1:A:67:ARG:HE 16 1.66 (1,1581) 1:A:47:ILE:HA 1:A:50:ARG:HB3 15 1.65 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 16 1.65 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 16 1.65 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 16 1.65 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 16 1.65 (1,1589) 1:A:20:ARG:HG3 1:A:67:ARG:HE 9 1.64 (1,1555) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB3 27 1.64 (1,1555) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB3 27 1.64 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 5 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 5 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:	(1,1554)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:26:ASN:HB3	29	1.67
(1,1122) 1:A:48:LEU:HD13 1:A:52:HIS:HB3 22 1.67 (1,1589) 1:A:20:ARG:HG3 1:A:67:ARG:HE 16 1.66 (1,444) 1:A:47:ILE:HA 1:A:50:ARG:HB3 15 1.65 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 16 1.65 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 16 1.65 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 16 1.65 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:67:ARG:HE 9 1.64 (1,1589) 1:A:20:ARG:HG3 1:A:67:ARG:HE 9 1.64 (1,1555) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB3 27 1.64 (1,1555) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB3 27 1.64 (1,1555) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB3 27 1.64 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 5 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 5 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:	(1,1122)	1:A:48:LEU:HD11	1:A:52:HIS:HB3	22	1.67
(1,1589) 1:A:20:ARG:HG3 1:A:67:ARG:HE 16 1.66 (1,444) 1:A:47:ILE:HA 1:A:50:ARG:HB3 15 1.65 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 16 1.65 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 16 1.65 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 16 1.65 (1,1589) 1:A:20:ARG:HG3 1:A:67:ARG:HE 9 1.64 (1,1585) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB3 27 1.64 (1,1555) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB3 27 1.64 (1,1555) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB3 27 1.64 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 5 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 5 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 8 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 11 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:	(1,1122)	1:A:48:LEU:HD12	1:A:52:HIS:HB3	22	1.67
(1,444) 1:A:47:ILE:HA 1:A:50:ARG:HB3 15 1.65 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 16 1.65 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 16 1.65 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 16 1.65 (1,1589) 1:A:20:ARG:HG3 1:A:67:ARG:HE 9 1.64 (1,1555) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB3 27 1.64 (1,1555) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB3 27 1.64 (1,1555) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB3 27 1.64 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 5 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 5 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 8 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 8 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 11 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:	(1,1122)	1:A:48:LEU:HD13	1:A:52:HIS:HB3	22	1.67
(1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 16 1.65 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 16 1.65 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 16 1.65 (1,1589) 1:A:20:ARG:HG3 1:A:67:ARG:HE 9 1.64 (1,1555) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB3 27 1.64 (1,1555) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB3 27 1.64 (1,1555) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB3 27 1.64 (1,1555) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB3 27 1.64 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 5 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 5 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 8 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 8 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 11 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:	(1,1589)	1:A:20:ARG:HG3	1:A:67:ARG:HE	16	1.66
(1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 16 1.65 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 16 1.65 (1,1589) 1:A:20:ARG:HG3 1:A:67:ARG:HE 9 1.64 (1,1555) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB3 27 1.64 (1,1555) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB3 27 1.64 (1,1555) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB3 27 1.64 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 5 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 5 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 8 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 8 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 11 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 11 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 11 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 11 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3	(1,444)	1:A:47:ILE:HA	1:A:50:ARG:HB3	15	1.65
(1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 16 1.65 (1,1589) 1:A:20:ARG:HG3 1:A:67:ARG:HE 9 1.64 (1,1555) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB3 27 1.64 (1,1555) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB3 27 1.64 (1,1555) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB3 27 1.64 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 5 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 5 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 8 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 8 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 11 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 11 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 11 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 19 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:7	(1,1581)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:70:GLN:HG3	16	1.65
(1,1589) 1:A:20:ARG:HG3 1:A:67:ARG:HE 9 1.64 (1,1555) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB3 27 1.64 (1,1555) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB3 27 1.64 (1,1555) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB3 27 1.64 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 5 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 5 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 8 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 8 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 8 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 11 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 11 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 11 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 19 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 19 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3	(1,1581)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:70:GLN:HG3	16	1.65
(1,1555) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB3 27 1.64 (1,1555) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB3 27 1.64 (1,1555) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB3 27 1.64 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 5 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 5 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 8 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 8 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 8 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 11 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 11 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 11 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 19 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 19 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:	(1,1581)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:70:GLN:HG3	16	1.65
(1,1555) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB3 27 1.64 (1,1555) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB3 27 1.64 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 5 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 5 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 8 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 8 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 8 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 11 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 11 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 11 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 19 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 19 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 19 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 19 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3	(1,1589)	1:A:20:ARG:HG3	1:A:67:ARG:HE	9	1.64
(1,1555) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB3 27 1.64 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 5 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 5 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 8 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 8 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 8 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 11 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 11 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 11 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 19 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 19 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 19 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 19 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 19 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3	(1,1555)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:33:ASP:HB3	27	1.64
(1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 5 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 5 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 8 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 8 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 8 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 11 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 11 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 11 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 19 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 19 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 19 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 19 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 19 1.62	(1,1555)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:33:ASP:HB3	27	1.64
(1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 5 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 5 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 8 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 8 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 11 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 11 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 11 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 19 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 19 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 19 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 19 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 19 1.62	(1,1555)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:33:ASP:HB3	27	1.64
(1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 5 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 5 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 8 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 8 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 11 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 11 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 11 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 19 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 19 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 19 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 19 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 19 1.62	(1,1581)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:70:GLN:HG3	5	1.62
(1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 8 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 8 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 8 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 11 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 11 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 19 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 19 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 19 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 19 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 19 1.62	(1,1581)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:70:GLN:HG3	5	1.62
(1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 8 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 8 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 8 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 11 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 11 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 19 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 19 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 19 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 19 1.62	(1,1581)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:70:GLN:HG3	5	1.62
(1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 8 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 11 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 11 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 11 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 19 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 19 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 19 1.62		1:A:14:ALA:HB1	1:A:70:GLN:HG3	8	1.62
(1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 11 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 11 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 11 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 19 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 19 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 19 1.62	(1,1581)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:70:GLN:HG3	8	1.62
(1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 11 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 11 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 11 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 19 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 19 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 19 1.62		1:A:14:ALA:HB3	1:A:70:GLN:HG3	8	1.62
(1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 11 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 11 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 19 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 19 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 19 1.62		1:A:14:ALA:HB1	1:A:70:GLN:HG3	11	1.62
(1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 11 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 19 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 19 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 19 1.62	· · /	1:A:14:ALA:HB2	1:A:70:GLN:HG3	11	1.62
(1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 19 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 19 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 19 1.62	(1,1581)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:70:GLN:HG3	11	1.62
(1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 19 1.62 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 19 1.62		1:A:14:ALA:HB1	1:A:70:GLN:HG3	19	1.62
	(1,1581)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:70:GLN:HG3	19	1.62
	(1,1581)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:70:GLN:HG3	19	1.62
	(1,1163)	1:A:54:LEU:HD11		2	



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

(1 1163)		${f Atom-2}$	Model	Violation (Å)
(1,1100)	1:A:54:LEU:HD12	1:A:51:GLU:HB2	2	1.61
(1,1163)	1:A:54:LEU:HD13	1:A:51:GLU:HB2	2	1.61
(1,1581)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:70:GLN:HG3	18	1.6
(1,1581)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:70:GLN:HG3	18	1.6
(1,1581)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:70:GLN:HG3	18	1.6
(1,1581)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:70:GLN:HG3	25	1.59
(1,1581)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:70:GLN:HG3	25	1.59
(1,1581)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:70:GLN:HG3	25	1.59
(1,1581)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:70:GLN:HG3	1	1.58
(1,1581)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:70:GLN:HG3	1	1.58
(1,1581)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:70:GLN:HG3	1	1.58
(1,1581)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:70:GLN:HG3	9	1.57
(1,1581)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:70:GLN:HG3	9	1.57
(1,1581)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:70:GLN:HG3	9	1.57
(1,1581)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:70:GLN:HG3	22	1.57
(1,1581)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:70:GLN:HG3	22	1.57
(1,1581)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:70:GLN:HG3	22	1.57
(1,1581)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:70:GLN:HG3	30	1.57
(1,1581)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:70:GLN:HG3	30	1.57
(1,1581)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:70:GLN:HG3	30	1.57
(1,778)	1:A:52:HIS:HB3	1:A:6:GLN:HE21	3	1.56
(1,1581)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:70:GLN:HG3	6	1.56
(1,1581)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:70:GLN:HG3	6	1.56
(1,1581)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:70:GLN:HG3	6	1.56
(1,1581)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:70:GLN:HG3	27	1.56
(1,1581)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:70:GLN:HG3	27	1.56
(1,1581)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:70:GLN:HG3	27	1.56
(1,1554)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:26:ASN:HB3	14	1.56
(1,1554)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:26:ASN:HB3	14	1.56
(1,1554)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:26:ASN:HB3	14	1.56
(1,1581)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:70:GLN:HG3	23	1.55
(1,1581)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:70:GLN:HG3	23	1.55
(1,1581)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:70:GLN:HG3	23	1.55
(1,1163)	1:A:54:LEU:HD11	1:A:51:GLU:HB2	1	1.55
(1,1163)	1:A:54:LEU:HD12	1:A:51:GLU:HB2	1	1.55
(1,1163)	1:A:54:LEU:HD13	1:A:51:GLU:HB2	1	1.55
(1,1581)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:70:GLN:HG3	17	1.54
(1,1581)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:70:GLN:HG3	17	1.54
(1,1581)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:70:GLN:HG3	17	1.54
(1,17)	1:A:72:MET:HB3	1:A:9:LEU:HD21	18	1.52
(1,17)	1:A:72:MET:HB3	1:A:9:LEU:HD22	18	1.52
(1,17)	1:A:72:MET:HB3	1:A:9:LEU:HD23	18	1.52



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,17)	1:A:72:MET:HB3	1:A:48:LEU:HD11	18	1.52
(1,17)	1:A:72:MET:HB3	1:A:48:LEU:HD12	18	1.52
(1,17)	1:A:72:MET:HB3	1:A:48:LEU:HD13	18	1.52
(1,1581)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:70:GLN:HG3	4	1.52
(1,1581)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:70:GLN:HG3	4	1.52
(1,1581)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:70:GLN:HG3	4	1.52
(1,1581)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:70:GLN:HG3	12	1.52
(1,1581)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:70:GLN:HG3	12	1.52
(1,1581)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:70:GLN:HG3	12	1.52
(1,1581)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:70:GLN:HG3	26	1.52
(1,1581)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:70:GLN:HG3	26	1.52
(1,1581)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:70:GLN:HG3	26	1.52
(1,1581)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:70:GLN:HG3	29	1.52
(1,1581)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:70:GLN:HG3	29	1.52
(1,1581)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:70:GLN:HG3	29	1.52
(1,1581)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:70:GLN:HG3	10	1.51
(1,1581)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:70:GLN:HG3	10	1.51
(1,1581)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:70:GLN:HG3	10	1.51
(1,1581)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:70:GLN:HG3	13	1.51
(1,1581)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:70:GLN:HG3	13	1.51
(1,1581)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:70:GLN:HG3	13	1.51
(1,1581)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:70:GLN:HG3	20	1.51
(1,1581)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:70:GLN:HG3	20	1.51
(1,1581)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:70:GLN:HG3	20	1.51
(1,484)	1:A:24:GLY:HA2	1:A:24:GLY:HA2	1	1.5
(1,484)	1:A:24:GLY:HA2	1:A:24:GLY:HA2	2	1.5
(1,484)	1:A:24:GLY:HA2	1:A:24:GLY:HA2	3	1.5
(1,484)	1:A:24:GLY:HA2	1:A:24:GLY:HA2	4	1.5
(1,484)	1:A:24:GLY:HA2	1:A:24:GLY:HA2	5	1.5
(1,484)	1:A:24:GLY:HA2	1:A:24:GLY:HA2	6	1.5
(1,484)	1:A:24:GLY:HA2	1:A:24:GLY:HA2	7	1.5
(1,484)	1:A:24:GLY:HA2	1:A:24:GLY:HA2	8	1.5
(1,484)	1:A:24:GLY:HA2	1:A:24:GLY:HA2	9	1.5
(1,484)	1:A:24:GLY:HA2	1:A:24:GLY:HA2	10	1.5
(1,484)	1:A:24:GLY:HA2	1:A:24:GLY:HA2	11	1.5
(1,484)	1:A:24:GLY:HA2	1:A:24:GLY:HA2	12	1.5
(1,484)	1:A:24:GLY:HA2	1:A:24:GLY:HA2	13	1.5
(1,484)	1:A:24:GLY:HA2	1:A:24:GLY:HA2	14	1.5
(1,484)	1:A:24:GLY:HA2	1:A:24:GLY:HA2	15	1.5
(1,484)	1:A:24:GLY:HA2	1:A:24:GLY:HA2	16	1.5
(1,484)	1:A:24:GLY:HA2	1:A:24:GLY:HA2	17	1.5
(1,484)	1:A:24:GLY:HA2	1:A:24:GLY:HA2	18	1.5



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,484)	1:A:24:GLY:HA2	1:A:24:GLY:HA2	19	1.5
(1,484)	1:A:24:GLY:HA2	1:A:24:GLY:HA2	20	1.5
(1,484)	1:A:24:GLY:HA2	1:A:24:GLY:HA2	21	1.5
(1,484)	1:A:24:GLY:HA2	1:A:24:GLY:HA2	22	1.5
(1,484)	1:A:24:GLY:HA2	1:A:24:GLY:HA2	23	1.5
(1,484)	1:A:24:GLY:HA2	1:A:24:GLY:HA2	24	1.5
(1,484)	1:A:24:GLY:HA2	1:A:24:GLY:HA2	25	1.5
(1,484)	1:A:24:GLY:HA2	1:A:24:GLY:HA2	26	1.5
(1,484)	1:A:24:GLY:HA2	1:A:24:GLY:HA2	27	1.5
(1,484)	1:A:24:GLY:HA2	1:A:24:GLY:HA2	28	1.5
(1,484)	1:A:24:GLY:HA2	1:A:24:GLY:HA2	29	1.5
(1,484)	1:A:24:GLY:HA2	1:A:24:GLY:HA2	30	1.5
(1,1581)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:70:GLN:HG3	21	1.5
(1,1581)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:70:GLN:HG3	21	1.5
(1,1581)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:70:GLN:HG3	21	1.5
(1,1581)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:70:GLN:HG3	24	1.48
(1,1581)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:70:GLN:HG3	24	1.48
(1,1581)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:70:GLN:HG3	24	1.48
(1,1581)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:70:GLN:HG3	14	1.46
(1,1581)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:70:GLN:HG3	14	1.46
(1,1581)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:70:GLN:HG3	14	1.46
(1,1554)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:26:ASN:HB3	26	1.46
(1,1554)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:26:ASN:HB3	26	1.46
(1,1554)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:26:ASN:HB3	26	1.46
(1,1581)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:70:GLN:HG3	2	1.45
(1,1581)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:70:GLN:HG3	2	1.45
(1,1581)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:70:GLN:HG3	2	1.45
(1,1589)	1:A:20:ARG:HG3	1:A:67:ARG:HE	10	1.43
(1,1581)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:70:GLN:HG3	15	1.43
(1,1581)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:70:GLN:HG3	15	1.43
(1,1581)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:70:GLN:HG3	15	1.43
(1,1123)	1:A:48:LEU:HD11	1:A:52:HIS:HB2	22	1.42
(1,1123)	1:A:48:LEU:HD12	1:A:52:HIS:HB2	22	1.42
(1,1123)	1:A:48:LEU:HD13	1:A:52:HIS:HB2	22	1.42
(1,778)	1:A:52:HIS:HB3	1:A:6:GLN:HE21	7	1.39
(1,1020)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:33:ASP:HB2	19	1.39
(1,1020)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:33:ASP:HB2	19	1.39
(1,1020)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:33:ASP:HB2	19	1.39
(1,972)	1:A:27:LEU:HD21	1:A:70:GLN:HE21	20	1.36
(1,972)	1:A:27:LEU:HD22	1:A:70:GLN:HE21	20	1.36
(1,972)	1:A:27:LEU:HD23	1:A:70:GLN:HE21	20	1.36
(1,1589)	1:A:20:ARG:HG3	1:A:67:ARG:HE	3	1.36



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1271)	1:A:62:ARG:HA	1:A:58:ILE:HG12	18	1.34
(1,900)	1:A:47:ILE:HG21	1:A:48:LEU:HD11	22	1.33
(1,900)	1:A:47:ILE:HG21	1:A:48:LEU:HD12	22	1.33
(1,900)	1:A:47:ILE:HG21	1:A:48:LEU:HD13	22	1.33
(1,900)	1:A:47:ILE:HG22	1:A:48:LEU:HD11	22	1.33
(1,900)	1:A:47:ILE:HG22	1:A:48:LEU:HD12	22	1.33
(1,900)	1:A:47:ILE:HG22	1:A:48:LEU:HD13	22	1.33
(1,900)	1:A:47:ILE:HG23	1:A:48:LEU:HD11	22	1.33
(1,900)	1:A:47:ILE:HG23	1:A:48:LEU:HD12	22	1.33
(1,900)	1:A:47:ILE:HG23	1:A:48:LEU:HD13	22	1.33
(1,1554)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:26:ASN:HB3	20	1.33
(1,1554)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:26:ASN:HB3	20	1.33
(1,1554)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:26:ASN:HB3	20	1.33
(1,444)	1:A:47:ILE:HA	1:A:50:ARG:HB3	20	1.32
(1,1593)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:29:SER:HA	20	1.32
(1,1593)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:29:SER:HA	20	1.32
(1,1593)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:29:SER:HA	20	1.32
(1,1554)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:26:ASN:HB3	28	1.32
(1,1554)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:26:ASN:HB3	28	1.32
(1,1554)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:26:ASN:HB3	28	1.32
(1,444)	1:A:47:ILE:HA	1:A:50:ARG:HB3	14	1.31
(1,1638)	1:A:57:PRO:HB3	1:A:59:ARG:HB2	14	1.3
(1,1575)	1:A:66:LEU:HD11	1:A:13:VAL:H	18	1.3
(1,1575)	1:A:66:LEU:HD12	1:A:13:VAL:H	18	1.3
(1,1575)	1:A:66:LEU:HD13	1:A:13:VAL:H	18	1.3
(1,1202)	1:A:56:LEU:HD21	1:A:55:VAL:HB	14	1.3
(1,1202)	1:A:56:LEU:HD22	1:A:55:VAL:HB	14	1.3
(1,1202)	1:A:56:LEU:HD23	1:A:55:VAL:HB	14	1.3
(1,444)	1:A:47:ILE:HA	1:A:50:ARG:HB3	13	1.29
(1,778)	1:A:52:HIS:HB3	1:A:6:GLN:HE21	13	1.28
(1,444)	1:A:47:ILE:HA	1:A:50:ARG:HB3	12	1.27
(1,1593)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:29:SER:HA	14	1.26
(1,1593)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:29:SER:HA	14	1.26
(1,1593)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:29:SER:HA	14	1.26
(1,1589)	1:A:20:ARG:HG3	1:A:67:ARG:HE	25	1.26
(1,461)	1:A:47:ILE:HG12	1:A:48:LEU:HD11	18	1.25
(1,461)	1:A:47:ILE:HG12	1:A:48:LEU:HD12	18	1.25
(1,461)	1:A:47:ILE:HG12	1:A:48:LEU:HD13	18	1.25
(1,1271)	1:A:62:ARG:HA	1:A:58:ILE:HG12	7	1.25
(1,1593)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:29:SER:HA	3	1.23
(1,1593)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:29:SER:HA	3	1.23
(1,1593)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:29:SER:HA	3	1.23



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

(1,972) 1:A:27:LEU:HD22 1:A:70:GLN:HE21 23 1 (1,972) 1:A:27:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 23 1 (1,778) 1:A:52:HIS:HB3 1:A:6:GLN:HE21 6 1 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD11 1:A:6:GLN:HE21 30 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD12 1:A:6:GLN:HE21 30 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD13 1:A:6:GLN:HE21 30 (1,778) 1:A:52:HIS:HB3 1:A:6:GLN:HE21 20 1	1.22 1.22 1.22 1.21 1.2 1.2 1.2 1.19
(1,972) 1:A:27:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 23 1 (1,778) 1:A:52:HIS:HB3 1:A:6:GLN:HE21 6 1 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD11 1:A:6:GLN:HE21 30 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD12 1:A:6:GLN:HE21 30 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD13 1:A:6:GLN:HE21 30 (1,778) 1:A:52:HIS:HB3 1:A:6:GLN:HE21 20 1	1.22 1.21 1.2 1.2 1.2 1.19
(1,778) 1:A:52:HIS:HB3 1:A:6:GLN:HE21 6 1 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD11 1:A:6:GLN:HE21 30 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD12 1:A:6:GLN:HE21 30 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD13 1:A:6:GLN:HE21 30 (1,778) 1:A:52:HIS:HB3 1:A:6:GLN:HE21 20 1	1.21 1.2 1.2 1.2 1.2 1.19
(1,1642) 1:A:9:LEU:HD11 1:A:6:GLN:HE21 30 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD12 1:A:6:GLN:HE21 30 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD13 1:A:6:GLN:HE21 30 (1,778) 1:A:52:HIS:HB3 1:A:6:GLN:HE21 20 1	1.2 1.2 1.2 1.19
(1,1642) 1:A:9:LEU:HD12 1:A:6:GLN:HE21 30 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD13 1:A:6:GLN:HE21 30 (1,778) 1:A:52:HIS:HB3 1:A:6:GLN:HE21 20 1	1.2 1.2 1.19 1.19
(1,1642) 1:A:9:LEU:HD13 1:A:6:GLN:HE21 30 (1,778) 1:A:52:HIS:HB3 1:A:6:GLN:HE21 20 1	1.2 1.19 1.19
(1,778) 1:A:52:HIS:HB3 1:A:6:GLN:HE21 20 1	1.19
() /	1.19
(1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD11 2 1	
(1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD12 2 1	1.19
(1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 2 1	1.19
(1,1593) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:29:SER:HA 24 1	1.19
(1,1593) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:29:SER:HA 24 1	1.19
(1,1593) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:29:SER:HA 24 1	1.19
(1,779) 1:A:52:HIS:HB2 1:A:6:GLN:HE21 13 1	1.18
(1,1638) 1:A:57:PRO:HB3 1:A:59:ARG:HB2 13 1	1.18
(1,1271) 1:A:62:ARG:HA 1:A:58:ILE:HG12 5 1	1.18
(1,444) 1:A:47:ILE:HA 1:A:50:ARG:HB3 1 1	1.17
(1,1302) 1:A:64:LEU:HB3 1:A:31:LEU:HB3 28 1	1.17
(1,1271) 1:A:62:ARG:HA 1:A:58:ILE:HG12 22 1	1.17
(1,1589) 1:A:20:ARG:HG3 1:A:67:ARG:HE 8 1	1.16
(1,1589) 1:A:20:ARG:HG3 1:A:67:ARG:HE 29 1	1.15
(1,1271) 1:A:62:ARG:HA 1:A:58:ILE:HG12 16 1	1.15
(1,1638) 1:A:57:PRO:HB3 1:A:59:ARG:HB2 1 1	1.14
(1,1200) 1:A:56:LEU:HD21 1:A:55:VAL:H 14 1	1.14
(1,1200) 1:A:56:LEU:HD22 1:A:55:VAL:H 14 1	1.14
(1,1200) 1:A:56:LEU:HD23 1:A:55:VAL:H 14 1	1.14
(1,444) 1:A:47:ILE:HA 1:A:50:ARG:HB3 25 1	1.13
(1,1593) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:29:SER:HA 13 1	1.13
(1,1593) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:29:SER:HA 13 1	1.13
(1,1593) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:29:SER:HA 13 1	1.13
(1,1122) 1:A:48:LEU:HD11 1:A:52:HIS:HB3 2 1	1.13
(1,1122) 1:A:48:LEU:HD12 1:A:52:HIS:HB3 2 1	1.13
	1.13
	1.11
	.11
(1,1505) 1:A:55:VAL:HG12 1:A:59:ARG:HD2 1 1	1.11
(1,1505) 1:A:55:VAL:HG12 1:A:59:ARG:HD3 1 1	1.11
(1,1505) 1:A:55:VAL:HG13 1:A:59:ARG:HD2 1 1	1.11
(1,1505) 1:A:55:VAL:HG13 1:A:59:ARG:HD3 1 1	1.11
(1,1271) 1:A:62:ARG:HA 1:A:58:ILE:HG12 15 1	1.11
	1.11



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1271)	1:A:62:ARG:HA	1:A:58:ILE:HG12	1	1.1
(1,1271)	1:A:62:ARG:HA	1:A:58:ILE:HG12	6	1.1
(1,1638)	1:A:57:PRO:HB3	1:A:59:ARG:HB2	20	1.09
(1,1168)	1:A:54:LEU:HG	1:A:56:LEU:HD21	14	1.09
(1,1168)	1:A:54:LEU:HG	1:A:56:LEU:HD22	14	1.09
(1,1168)	1:A:54:LEU:HG	1:A:56:LEU:HD23	14	1.09
(1,197)	1:A:29:SER:HB3	1:A:33:ASP:HB3	27	1.08
(1,1271)	1:A:62:ARG:HA	1:A:58:ILE:HG12	20	1.08
(1,778)	1:A:52:HIS:HB3	1:A:6:GLN:HE21	10	1.07
(1,1099)	1:A:40:MET:HG3	1:A:39:LEU:HD21	28	1.07
(1,1099)	1:A:40:MET:HG3	1:A:39:LEU:HD22	28	1.07
(1,1099)	1:A:40:MET:HG3	1:A:39:LEU:HD23	28	1.07
(1,1593)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:29:SER:HA	26	1.06
(1,1593)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:29:SER:HA	26	1.06
(1,1593)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:29:SER:HA	26	1.06
(1,1589)	1:A:20:ARG:HG3	1:A:67:ARG:HE	1	1.06
(1,801)	1:A:65:THR:HA	1:A:31:LEU:HD11	30	1.05
(1,801)	1:A:65:THR:HA	1:A:31:LEU:HD12	30	1.05
(1,801)	1:A:65:THR:HA	1:A:31:LEU:HD13	30	1.05
(1,315)	1:A:40:MET:HB3	1:A:39:LEU:HD21	28	1.05
(1,315)	1:A:40:MET:HB3	1:A:39:LEU:HD22	28	1.05
(1,315)	1:A:40:MET:HB3	1:A:39:LEU:HD23	28	1.05
(1,1589)	1:A:20:ARG:HG3	1:A:67:ARG:HE	14	1.05
(1,1555)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:33:ASP:HB3	3	1.05
(1,1555)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:33:ASP:HB3	3	1.05
(1,1555)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:33:ASP:HB3	3	1.05
(1,1271)	1:A:62:ARG:HA	1:A:58:ILE:HG12	3	1.05
(1,1271)	1:A:62:ARG:HA	1:A:58:ILE:HG12	13	1.05
(1,1271)	1:A:62:ARG:HA	1:A:58:ILE:HG12	23	1.05
(1,778)	1:A:52:HIS:HB3	1:A:6:GLN:HE21	11	1.04
(1,72)	1:A:48:LEU:HD11	1:A:6:GLN:HE21	13	1.04
(1,72)	1:A:48:LEU:HD12	1:A:6:GLN:HE21	13	1.04
(1,72)	1:A:48:LEU:HD13	1:A:6:GLN:HE21	13	1.04
(1,72)	1:A:9:LEU:HD21	1:A:6:GLN:HE21	13	1.04
(1,72)	1:A:9:LEU:HD22	1:A:6:GLN:HE21	13	1.04
(1,72)	1:A:9:LEU:HD23	1:A:6:GLN:HE21	13	1.04
(1,1642)	1:A:9:LEU:HD11	1:A:6:GLN:HE21	25	1.04
(1,1642)	1:A:9:LEU:HD12	1:A:6:GLN:HE21	25	1.04
(1,1642)	1:A:9:LEU:HD13	1:A:6:GLN:HE21	25	1.04
(1,778)	1:A:52:HIS:HB3	1:A:6:GLN:HE21	28	1.03
(1,239)	1:A:31:LEU:HD11	1:A:62:ARG:HG3	20	1.03
(1,239)	1:A:31:LEU:HD12	1:A:62:ARG:HG3	20	1.03



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,239)	1:A:31:LEU:HD13	1:A:62:ARG:HG3	20	1.03
(1,1544)	1:A:44:VAL:HG21	1:A:44:VAL:H	18	1.03
(1,1544)	1:A:44:VAL:HG22	1:A:44:VAL:H	18	1.03
(1,1544)	1:A:44:VAL:HG23	1:A:44:VAL:H	18	1.03
(1,1509)	1:A:72:MET:HG2	1:A:9:LEU:HD11	13	1.02
(1,1509)	1:A:72:MET:HG2	1:A:9:LEU:HD12	13	1.02
(1,1509)	1:A:72:MET:HG2	1:A:9:LEU:HD13	13	1.02
(1,1302)	1:A:64:LEU:HB3	1:A:31:LEU:HB3	7	1.02
(1,1271)	1:A:62:ARG:HA	1:A:58:ILE:HG12	8	1.02
(1,1271)	1:A:62:ARG:HA	1:A:58:ILE:HG12	17	1.02
(1,1593)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:29:SER:HA	29	1.01
(1,1593)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:29:SER:HA	29	1.01
(1,1593)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:29:SER:HA	29	1.01
(1,778)	1:A:52:HIS:HB3	1:A:6:GLN:HE21	30	1.0
(1,502)	1:A:19:ILE:HD11	1:A:25:ILE:HG13	22	1.0
(1,502)	1:A:19:ILE:HD12	1:A:25:ILE:HG13	22	1.0
(1,502)	1:A:19:ILE:HD13	1:A:25:ILE:HG13	22	1.0
(1,1271)	1:A:62:ARG:HA	1:A:58:ILE:HG12	4	1.0
(1,928)	1:A:57:PRO:HG2	1:A:56:LEU:HD21	14	0.98
(1,928)	1:A:57:PRO:HG2	1:A:56:LEU:HD22	14	0.98
(1,928)	1:A:57:PRO:HG2	1:A:56:LEU:HD23	14	0.98
(1,845)	1:A:8:ASP:HB2	1:A:11:LYS:HB2	6	0.97
(1,845)	1:A:8:ASP:HB2	1:A:11:LYS:HB3	6	0.97
(1,779)	1:A:52:HIS:HB2	1:A:6:GLN:HE21	18	0.97
(1,236)	1:A:31:LEU:HD11	1:A:66:LEU:H	19	0.97
(1,236)	1:A:31:LEU:HD12	1:A:66:LEU:H	19	0.97
(1,236)	1:A:31:LEU:HD13	1:A:66:LEU:H	19	0.97
(1,1271)	1:A:62:ARG:HA	1:A:58:ILE:HG12	30	0.97
(1,461)	1:A:47:ILE:HG12	1:A:48:LEU:HD11	22	0.96
(1,461)	1:A:47:ILE:HG12	1:A:48:LEU:HD12	22	0.96
(1,461)	1:A:47:ILE:HG12	1:A:48:LEU:HD13	22	0.96
(1,1638)	1:A:57:PRO:HB3	1:A:59:ARG:HB2	22	0.96
(1,801)	1:A:65:THR:HA	1:A:31:LEU:HD11	5	0.95
(1,801)	1:A:65:THR:HA	1:A:31:LEU:HD12	5	0.95
(1,801)	1:A:65:THR:HA	1:A:31:LEU:HD13	5	0.95
(1,1302)	1:A:64:LEU:HB3	1:A:31:LEU:HB3	22	0.95
(1,1196)	1:A:56:LEU:HD21	1:A:56:LEU:HA	14	0.95
(1,1196)	1:A:56:LEU:HD22	1:A:56:LEU:HA	14	0.95
(1,1196)	1:A:56:LEU:HD23	1:A:56:LEU:HA	14	0.95
(1,111)	1:A:55:VAL:HG21	1:A:49:GLU:HG3	18	0.95
(1,111)	1:A:55:VAL:HG22	1:A:49:GLU:HG3	18	0.95
(1,111)	1:A:55:VAL:HG23	1:A:49:GLU:HG3	18	0.95



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1065)	1:A:36:LEU:HD11	1:A:38:SER:H	5	0.95
(1,1065)	1:A:36:LEU:HD12	1:A:38:SER:H	5	0.95
(1,1065)	1:A:36:LEU:HD13	1:A:38:SER:H	5	0.95
(1,928)	1:A:57:PRO:HG2	1:A:56:LEU:HD21	20	0.94
(1,928)	1:A:57:PRO:HG2	1:A:56:LEU:HD22	20	0.94
(1,928)	1:A:57:PRO:HG2	1:A:56:LEU:HD23	20	0.94
(1,778)	1:A:52:HIS:HB3	1:A:6:GLN:HE21	15	0.94
(1,1648)	1:A:74:SER:HB3	1:A:54:LEU:HD21	18	0.94
(1,1648)	1:A:74:SER:HB3	1:A:54:LEU:HD22	18	0.94
(1,1648)	1:A:74:SER:HB3	1:A:54:LEU:HD23	18	0.94
(1,1638)	1:A:57:PRO:HB3	1:A:59:ARG:HB2	15	0.94
(1,60)	1:A:47:ILE:HG21	1:A:74:SER:HB2	19	0.93
(1,60)	1:A:47:ILE:HG22	1:A:74:SER:HB2	19	0.93
(1,60)	1:A:47:ILE:HG23	1:A:74:SER:HB2	19	0.93
(1,60)	1:A:58:ILE:HG21	1:A:31:LEU:HA	19	0.93
(1,60)	1:A:58:ILE:HG22	1:A:31:LEU:HA	19	0.93
(1,60)	1:A:58:ILE:HG23	1:A:31:LEU:HA	19	0.93
(1,1638)	1:A:57:PRO:HB3	1:A:59:ARG:HB2	23	0.93
(1,1020)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:33:ASP:HB2	3	0.93
(1,1020)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:33:ASP:HB2	3	0.93
(1,1020)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:33:ASP:HB2	3	0.93
(1,239)	1:A:31:LEU:HD11	1:A:62:ARG:HG3	8	0.91
(1,239)	1:A:31:LEU:HD12	1:A:62:ARG:HG3	8	0.91
(1,239)	1:A:31:LEU:HD13	1:A:62:ARG:HG3	8	0.91
(1,1593)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:29:SER:HA	27	0.91
(1,1593)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:29:SER:HA	27	0.91
(1,1593)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:29:SER:HA	27	0.91
(1,239)	1:A:31:LEU:HD11	1:A:62:ARG:HG3	18	0.9
(1,239)	1:A:31:LEU:HD12	1:A:62:ARG:HG3	18	0.9
(1,239)	1:A:31:LEU:HD13	1:A:62:ARG:HG3	18	0.9
(1,1369)	1:A:71:GLU:HG2	1:A:72:MET:H	3	0.9
(1,1107)	1:A:48:LEU:HA	1:A:52:HIS:HB2	2	0.9
(1,1020)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:33:ASP:HB2	28	0.9
(1,1020)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:33:ASP:HB2	28	0.9
(1,1020)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:33:ASP:HB2	28	0.9
(1,315)	1:A:40:MET:HB3	1:A:39:LEU:HD21	24	0.89
(1,315)	1:A:40:MET:HB3	1:A:39:LEU:HD22	24	0.89
(1,315)	1:A:40:MET:HB3	1:A:39:LEU:HD23	24	0.89
(1,1592)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:30:SER:H	3	0.89
(1,1592)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:30:SER:H	3	0.89
(1,1592)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:30:SER:H	3	0.89
(1,1589)	1:A:20:ARG:HG3	1:A:67:ARG:HE	11	0.89



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1302)	1:A:64:LEU:HB3	1:A:31:LEU:HB3	19	0.89
(1,1271)	1:A:62:ARG:HA	1:A:58:ILE:HG12	28	0.89
(1,1099)	1:A:40:MET:HG3	1:A:39:LEU:HD21	24	0.89
(1,1099)	1:A:40:MET:HG3	1:A:39:LEU:HD22	24	0.89
(1,1099)	1:A:40:MET:HG3	1:A:39:LEU:HD23	24	0.89
(1,17)	1:A:72:MET:HB3	1:A:9:LEU:HD21	24	0.88
(1,17)	1:A:72:MET:HB3	1:A:9:LEU:HD22	24	0.88
(1,17)	1:A:72:MET:HB3	1:A:9:LEU:HD23	24	0.88
(1,17)	1:A:72:MET:HB3	1:A:48:LEU:HD11	24	0.88
(1,17)	1:A:72:MET:HB3	1:A:48:LEU:HD12	24	0.88
(1,17)	1:A:72:MET:HB3	1:A:48:LEU:HD13	24	0.88
(1,1126)	1:A:48:LEU:HD11	1:A:52:HIS:H	2	0.87
(1,1126)	1:A:48:LEU:HD12	1:A:52:HIS:H	2	0.87
(1,1126)	1:A:48:LEU:HD13	1:A:52:HIS:H	2	0.87
(1,801)	1:A:65:THR:HA	1:A:31:LEU:HD11	16	0.86
(1,801)	1:A:65:THR:HA	1:A:31:LEU:HD12	16	0.86
(1,801)	1:A:65:THR:HA	1:A:31:LEU:HD13	16	0.86
(1,700)	1:A:59:ARG:HA	1:A:62:ARG:HD2	28	0.86
(1,244)	1:A:31:LEU:HD21	1:A:64:LEU:HG	15	0.86
(1,244)	1:A:31:LEU:HD22	1:A:64:LEU:HG	15	0.86
(1,244)	1:A:31:LEU:HD23	1:A:64:LEU:HG	15	0.86
(1,244)	1:A:31:LEU:HD21	1:A:64:LEU:HG	17	0.86
(1,244)	1:A:31:LEU:HD22	1:A:64:LEU:HG	17	0.86
(1,244)	1:A:31:LEU:HD23	1:A:64:LEU:HG	17	0.86
(1,244)	1:A:31:LEU:HD21	1:A:64:LEU:HG	19	0.86
(1,244)	1:A:31:LEU:HD22	1:A:64:LEU:HG	19	0.86
(1,244)	1:A:31:LEU:HD23	1:A:64:LEU:HG	19	0.86
(1,229)	1:A:31:LEU:HA	1:A:36:LEU:HD21	5	0.86
(1,229)	1:A:31:LEU:HA	1:A:36:LEU:HD22	5	0.86
(1,229)	1:A:31:LEU:HA	1:A:36:LEU:HD23	5	0.86
(1,972)	1:A:27:LEU:HD21	1:A:70:GLN:HE21	14	0.85
(1,972)	1:A:27:LEU:HD22	1:A:70:GLN:HE21	14	0.85
(1,972)	1:A:27:LEU:HD23	1:A:70:GLN:HE21	14	0.85
(1,719)	1:A:63:GLN:HB2	1:A:63:GLN:HE21	29	0.85
(1,244)	1:A:31:LEU:HD21	1:A:64:LEU:HG	13	0.85
(1,244)	1:A:31:LEU:HD22	1:A:64:LEU:HG	13	0.85
(1,244)	1:A:31:LEU:HD23	1:A:64:LEU:HG	13	0.85
(1,102)	1:A:55:VAL:HG21	1:A:55:VAL:H	1	0.85
(1,102)	1:A:55:VAL:HG22	1:A:55:VAL:H	1	0.85
(1,102)	1:A:55:VAL:HG23	1:A:55:VAL:H	1	0.85
(1,719)	1:A:63:GLN:HB2	1:A:63:GLN:HE21	24	0.84
(1,1117)	1:A:48:LEU:HA	1:A:48:LEU:HD11	22	0.84



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1117)	1:A:48:LEU:HA	1:A:48:LEU:HD12	22	0.84
(1,1117)	1:A:48:LEU:HA	1:A:48:LEU:HD13	22	0.84
(1,1012)	1:A:34:LEU:HD11	1:A:31:LEU:H	5	0.84
(1,1012)	1:A:34:LEU:HD12	1:A:31:LEU:H	5	0.84
(1,1012)	1:A:34:LEU:HD13	1:A:31:LEU:H	5	0.84
(1,719)	1:A:63:GLN:HB2	1:A:63:GLN:HE21	10	0.83
(1,244)	1:A:31:LEU:HD21	1:A:64:LEU:HG	5	0.83
(1,244)	1:A:31:LEU:HD22	1:A:64:LEU:HG	5	0.83
(1,244)	1:A:31:LEU:HD23	1:A:64:LEU:HG	5	0.83
(1,244)	1:A:31:LEU:HD21	1:A:64:LEU:HG	16	0.83
(1,244)	1:A:31:LEU:HD22	1:A:64:LEU:HG	16	0.83
(1,244)	1:A:31:LEU:HD23	1:A:64:LEU:HG	16	0.83
(1,239)	1:A:31:LEU:HD11	1:A:62:ARG:HG3	6	0.83
(1,239)	1:A:31:LEU:HD12	1:A:62:ARG:HG3	6	0.83
(1,239)	1:A:31:LEU:HD13	1:A:62:ARG:HG3	6	0.83
(1,1638)	1:A:57:PRO:HB3	1:A:59:ARG:HB2	30	0.83
(1,1117)	1:A:48:LEU:HA	1:A:48:LEU:HD11	2	0.83
(1,1117)	1:A:48:LEU:HA	1:A:48:LEU:HD12	2	0.83
(1,1117)	1:A:48:LEU:HA	1:A:48:LEU:HD13	2	0.83
(1,1117)	1:A:48:LEU:HA	1:A:48:LEU:HD11	18	0.83
(1,1117)	1:A:48:LEU:HA	1:A:48:LEU:HD12	18	0.83
(1,1117)	1:A:48:LEU:HA	1:A:48:LEU:HD13	18	0.83
(1,499)	1:A:47:ILE:HD11	1:A:43:GLU:HG2	21	0.82
(1,499)	1:A:47:ILE:HD12	1:A:43:GLU:HG2	21	0.82
(1,499)	1:A:47:ILE:HD13	1:A:43:GLU:HG2	21	0.82
(1,1271)	1:A:62:ARG:HA	1:A:58:ILE:HG12	24	0.82
(1,719)	1:A:63:GLN:HB2	1:A:63:GLN:HE21	5	0.81
(1,244)	1:A:31:LEU:HD21	1:A:64:LEU:HG	30	0.81
(1,244)	1:A:31:LEU:HD22	1:A:64:LEU:HG	30	0.81
(1,244)	1:A:31:LEU:HD23	1:A:64:LEU:HG	30	0.81
(1,1302)	1:A:64:LEU:HB3	1:A:31:LEU:HB3	18	0.81
(1,60)	1:A:47:ILE:HG21	1:A:74:SER:HB2	24	0.8
(1,60)	1:A:47:ILE:HG22	1:A:74:SER:HB2	24	0.8
(1,60)	1:A:47:ILE:HG23	1:A:74:SER:HB2	24	0.8
(1,60)	1:A:58:ILE:HG21	1:A:31:LEU:HA	24	0.8
(1,60)	1:A:58:ILE:HG22	1:A:31:LEU:HA	24	0.8
(1,60)	1:A:58:ILE:HG23	1:A:31:LEU:HA	24	0.8
(1,233)	1:A:31:LEU:HD11	1:A:31:LEU:HA	30	0.8
(1,233)	1:A:31:LEU:HD12	1:A:31:LEU:HA	30	0.8
(1,233)	1:A:31:LEU:HD13	1:A:31:LEU:HA	30	0.8
(1,1593)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:29:SER:HA	17	0.8
(1,1593)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:29:SER:HA	17	0.8



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

(1,1593) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:29:SER:HA 17 0.8 (1,1592) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:30:SER:H 24 0.8 (1,1592) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:30:SER:H 24 0.8 (1,1592) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:30:SER:H 24 0.8 (1,1589) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:36:ARG:HE 13 0.8 (1,1555) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB3 20 0.8 (1,1555) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB3 20 0.8 (1,1555) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:26:ASN:HB3 13 0.8 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:26:ASN:HB3 13 0.8 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:26:ASN:HB3 13 0.8 (1,1327) 1:A:68:LYS:HD3 1:A:71:GLU:HB2 24 0.8 (1,1327) 1:A:68:LYS:HD3 1:A:71:GLU:HB2 24 0.8 (1,1327) 1:A:68:LYS:HD3 1:A:71:GLU:HB2 24 0.8 (1,927) 1:A:67:PRO:HG3 1:A:56:LEU:HD2	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1592) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:30:SER:H 24 0.8 (1,1592) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:30:SER:H 24 0.8 (1,1589) 1:A:20:ARG:HG3 1:A:30:SER:H 13 0.8 (1,1555) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB3 20 0.8 (1,1555) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB3 20 0.8 (1,1555) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB3 20 0.8 (1,1555) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB3 20 0.8 (1,1555) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:26:ASN:HB3 13 0.8 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:26:ASN:HB3 13 0.8 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:26:ASN:HB3 13 0.8 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:26:ASN:HB3 13 0.8 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:26:ASN:HB3 13 0.8 (1,1327) 1:A:68:LYS:HD2 1:A:27:I:GLU:HB2 24 0.8 (1,1327) 1:A:68:LYS:HD2 1:A:27:I:GLU:HB2 24 0.8 (1,1327) 1:A:68:LYS:HD3 1:A:71:GLU:HB2 24 0.8 (1,927) 1:A:57:PRO:HG3 1:A:56:LEU:HD21 14 0.79 (1,927) 1:A:57:PRO:HG3 1:A:56:LEU:HD22 14 0.79 (1,239) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 21 0.79 (1,239) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 21 0.79 (1,239) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:62:ARG:HG3 21 0.79 (1,239) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:62:ARG:HG3 21 0.79 (1,972) 1:A:27:LEU:HD22 1:A:70:GLN:HE21 17 0.78 (1,170) 1:A:59:ARG:HA 1:A:62:ARG:HD2 19 0.78 (1,170) 1:A:59:ARG:HA 1:A:62:ARG:HD2 19 0.78 (1,170) 1:A:59:ARG:HA 1:A:62:ARG:HD2 19 0.78 (1,171) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD12 13 0.78 (1,171) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48:LEU:HD11 15 0.77 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 15 0.77 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 15 0.77 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 19 0.77 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 19 0.77 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11	(1,1593)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:29:SER:HA	17	0.8
(1,1592) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:30:SER:H 24 0.8 (1,1589) 1:A:20:ARG:HG3 1:A:67:ARG:HE 13 0.8 (1,1555) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB3 20 0.8 (1,1555) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB3 20 0.8 (1,1555) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB3 20 0.8 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:26:ASN:HB3 13 0.8 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:26:ASN:HB3 13 0.8 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:26:ASN:HB3 13 0.8 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:26:ASN:HB3 13 0.8 (1,1327) 1:A:68:LYS:HD2 1:A:71:GLU:HB2 24 0.8 (1,327) 1:A:68:LYS:HD2 1:A:71:GLU:HB2 24 0.8 (1,927) 1:A:57:PRO:HG3 1:A:71:GLU:HB2 24 0.8 (1,927) 1:A:57:PRO:HG3 1:A:56:LEU:HD22 14 0.79 (1,927) 1:A:57:PRO:HG3 1:A:56:LEU:HD22 14 0.79 (1,927) 1:A:57:PRO:HG3 1:A:56:LEU:HD22 14 0.79 (1,239) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 21 0.79 (1,239) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 21 0.79 (1,239) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:62:ARG:HG3 21 0.79 (1,239) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:62:ARG:HG3 21 0.79 (1,972) 1:A:27:LEU:HD22 1:A:70:GLN:HE21 17 0.78 (1,972) 1:A:27:LEU:HD22 1:A:70:GLN:HE21 17 0.78 (1,972) 1:A:27:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 17 0.78 (1,972) 1:A:27:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 17 0.78 (1,972) 1:A:27:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 17 0.78 (1,779) 1:A:27:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 17 0.78 (1,770) 1:A:27:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 17 0.78 (1,771) 1:A:72:MET:HB3 1:A:62:ARG:HD2 19 0.78 (1,171) 1:A:72:MET:HB3 1:A:62:LU:HD22 13 0.78 (1,171) 1:A:72:MET:HB3 1:A:62:LU:HD21 13 0.78 (1,171) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48:LEU:HD11 13 0.78 (1,171) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48:LEU:HD11 15 0.77 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 15 0.77 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 15 0.77 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 19 0.77 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD1	(1,1592)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:30:SER:H	24	0.8
(1,1589) 1:A:20:ARG:HG3 1:A:67:ARG:HE 13 0.8 (1,1555) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB3 20 0.8 (1,1555) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB3 20 0.8 (1,1555) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB3 20 0.8 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:26:ASN:HB3 13 0.8 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:26:ASN:HB3 13 0.8 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:26:ASN:HB3 13 0.8 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:26:ASN:HB3 13 0.8 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:26:ASN:HB3 13 0.8 (1,1554) 1:A:68:LYS:HD2 1:A:71:GLU:HB2 24 0.8 (1,1327) 1:A:68:LYS:HD3 1:A:71:GLU:HB2 24 0.8 (1,1327) 1:A:68:LYS:HD3 1:A:71:GLU:HB2 24 0.8 (1,927) 1:A:57:PRO:HG3 1:A:56:LEU:HD21 14 0.79 (1,927) 1:A:57:PRO:HG3 1:A:56:LEU:HD21 14 0.79 (1,927) 1:A:57:PRO:HG3 1:A:56:LEU:HD22 14 0.79 (1,927) 1:A:57:PRO:HG3 1:A:56:LEU:HD23 14 0.79 (1,239) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 21 0.79 (1,239) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 21 0.79 (1,239) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:62:ARG:HG3 21 0.79 (1,972) 1:A:27:LEU:HD12 1:A:70:GLN:HE21 17 0.78 (1,972) 1:A:27:LEU:HD22 1:A:70:GLN:HE21 17 0.78 (1,972) 1:A:27:LEU:HD22 1:A:70:GLN:HE21 17 0.78 (1,972) 1:A:27:LEU:HD22 1:A:70:GLN:HE21 17 0.78 (1,972) 1:A:27:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 17 0.78 (1,779) 1:A:52:HIS:HB2 1:A:6:GLN:HE21 30 0.78 (1,171) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD21 13 0.78 (1,171) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 19 0.77 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 19 0.7	(1,1592)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:30:SER:H	24	0.8
(1,1555) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:HB3 20 0.8 (1,1555) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB3 20 0.8 (1,1555) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB3 20 0.8 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:26:ASN:HB3 13 0.8 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:26:ASN:HB3 13 0.8 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:26:ASN:HB3 13 0.8 (1,1554) 1:A:68:LYS:HD2 1:A:71:GLU:HB2 24 0.8 (1,1327) 1:A:68:LYS:HD3 1:A:71:GLU:HB2 24 0.8 (1,1327) 1:A:68:LYS:HD3 1:A:71:GLU:HB2 24 0.8 (1,927) 1:A:57:PRO:HG3 1:A:56:LEU:HD21 14 0.79 (1,927) 1:A:57:PRO:HG3 1:A:56:LEU:HD21 14 0.79 (1,927) 1:A:57:PRO:HG3 1:A:56:LEU:HD22 14 0.79 (1,927) 1:A:57:PRO:HG3 1:A:56:LEU:HD23 14 0.79 (1,719) 1:A:63:GLN:HB2 1:A:63:GLN:HE21 30 0.79 (1,239) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 21 0.79 (1,239) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:62:ARG:HG3 21 0.79 (1,339) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:62:ARG:HG3 21 0.79 (1,972) 1:A:27:LEU:HD22 1:A:70:GLN:HE21 17 0.78 (1,972) 1:A:27:LEU:HD22 1:A:70:GLN:HE21 17 0.78 (1,972) 1:A:27:LEU:HD22 1:A:70:GLN:HE21 17 0.78 (1,972) 1:A:27:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 17 0.78 (1,779) 1:A:52:HIS:HB2 1:A:6:GLN:HE21 17 0.78 (1,779) 1:A:52:HIS:HB2 1:A:6:GLN:HE21 17 0.78 (1,779) 1:A:52:HIS:HB2 1:A:6:GLN:HE21 13 0.78 (1,171) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD21 13 0.78 (1,171) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD11 13 0.78 (1,171) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 15 0.77 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 15 0.77 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 19 0.	(1,1592)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:30:SER:H	24	0.8
(1,1555) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:HB3 20 0.8 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:26:ASN:HB3 13 0.8 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:26:ASN:HB3 13 0.8 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:26:ASN:HB3 13 0.8 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:26:ASN:HB3 13 0.8 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:26:ASN:HB3 13 0.8 (1,1574) 1:A:68:LYS:HD2 1:A:71:GLU:HB2 24 0.8 (1,1327) 1:A:68:LYS:HD3 1:A:71:GLU:HB2 24 0.8 (1,927) 1:A:57:PRO:HG3 1:A:56:LEU:HD21 14 0.79 (1,927) 1:A:57:PRO:HG3 1:A:56:LEU:HD22 14 0.79 (1,927) 1:A:63:GLN:HB2 1:A:63:GLN:HB21 30 0.79 (1,239) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 21 0.79 (1,239) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:62:ARG:HG3 21 0.79 (1,392) 1:A:27:LEU:HD21 1:A:	(1,1589)	1:A:20:ARG:HG3	1:A:67:ARG:HE	13	0.8
(1,1555) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:HB3 20 0.8 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:26:ASN:HB3 13 0.8 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:26:ASN:HB3 13 0.8 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:26:ASN:HB3 13 0.8 (1,1327) 1:A:68:LYS:HD2 1:A:71:GLU:HB2 24 0.8 (1,1327) 1:A:68:LYS:HD3 1:A:71:GLU:HB2 24 0.8 (1,1327) 1:A:68:LYS:HD3 1:A:71:GLU:HB2 24 0.8 (1,927) 1:A:57:PRO:HG3 1:A:56:LEU:HD21 14 0.79 (1,927) 1:A:57:PRO:HG3 1:A:56:LEU:HD22 14 0.79 (1,927) 1:A:57:PRO:HG3 1:A:56:LEU:HD22 14 0.79 (1,927) 1:A:57:PRO:HG3 1:A:56:LEU:HD23 14 0.79 (1,719) 1:A:63:GLN:HB2 1:A:63:GLN:HE21 30 0.79 (1,239) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 21 0.79 (1,239) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 21 0.79 (1,239) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:62:ARG:HG3 21 0.79 (1,972) 1:A:27:LEU:HD21 1:A:70:GLN:HE21 17 0.78 (1,972) 1:A:27:LEU:HD22 1:A:70:GLN:HE21 17 0.78 (1,972) 1:A:27:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 17 0.78 (1,972) 1:A:59:ARG:HA3 1:A:62:ARG:HG3 21 0.79 (1,700) 1:A:59:ARG:HA 1:A:62:ARG:HD2 19 0.78 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD21 13 0.78 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD21 13 0.78 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD21 13 0.78 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD11 13 0.78 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD11 13 0.78 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD12 13 0.78 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD11 13 0.78 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD12 13 0.78 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD11 13 0.78 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD12 13 0.78 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48:LEU:HD11 15 0.77 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 15 0.77 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 19 0.77 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 19 0.77 (1,801) 1:A:65:THR	(1,1555)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:33:ASP:HB3	20	0.8
(1,1554) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:26:ASN:HB3 13 0.8 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:26:ASN:HB3 13 0.8 (1,1554) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:26:ASN:HB3 13 0.8 (1,1327) 1:A:68:LYS:HD2 1:A:71:GLU:HB2 24 0.8 (1,1327) 1:A:68:LYS:HD3 1:A:71:GLU:HB2 24 0.8 (1,927) 1:A:57:PRO:HG3 1:A:56:LEU:HD21 14 0.79 (1,927) 1:A:57:PRO:HG3 1:A:56:LEU:HD22 14 0.79 (1,927) 1:A:57:PRO:HG3 1:A:56:LEU:HD22 14 0.79 (1,927) 1:A:57:PRO:HG3 1:A:56:LEU:HD23 14 0.79 (1,927) 1:A:57:PRO:HG3 1:A:56:LEU:HD23 14 0.79 (1,927) 1:A:63:GLN:HB2 1:A:66:GLN:HE21 30 0.79 (1,719) 1:A:63:GLN:HB2 1:A:66:ARG:HG3 21 0.79 (1,239) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 21 0.79 (1,239) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:62:ARG:HG3 21 0.79 (1,927) 1:A:27:LEU:HD21 1:A:70:GLN:HE21 17 0.78 (1,972) 1:A:27:LEU:HD22 1:A:70:GLN:HE21 17 0.78 (1,972) 1:A:27:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 17 0.78 (1,170) 1:A:59:ARG:HA 1:A:6G:ARG:HD2 19 0.78 (1,171) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD21 13 0.78 (1,171) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD22 13 0.78 (1,171) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD23 13 0.78 (1,171) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48:LEU:HD12 13 0.78 (1,171) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48:LEU:HD13 13 0.78 (1,171) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48:LEU:HD12 15 0.77 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 15 0.77 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 15 0.77 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 19 0.77 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD14 19 0.77 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD14 19 0.77 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD14 19 0.77	(1,1555)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:33:ASP:HB3	20	0.8
(1,1554)	(1,1555)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:33:ASP:HB3	20	0.8
(1,1554) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:26:ASN:HB3 13 0.8 (1,1327) 1:A:68:LYS:HD2 1:A:71:GLU:HB2 24 0.8 (1,1327) 1:A:68:LYS:HD3 1:A:71:GLU:HB2 24 0.8 (1,927) 1:A:57:PRO:HG3 1:A:56:LEU:HD21 14 0.79 (1,927) 1:A:57:PRO:HG3 1:A:56:LEU:HD22 14 0.79 (1,927) 1:A:57:PRO:HG3 1:A:56:LEU:HD23 14 0.79 (1,927) 1:A:63:GLN:HB21 30 0.79 (1,719) 1:A:63:GLN:HB21 130 0.79 (1,239) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:63:CARG:HG3 21 0.79 (1,239) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:62:ARG:HG3 21 0.79 (1,972) 1:A:27:LEU:HD21 1:A:70:GLN:HE21 17 0.78 (1,972) 1:A:27:LEU:HD22 1:A:70:GLN:HE21 17 0.78 (1,972) 1:A:27:MET:HB2 1:A:6:GLN:HE21 17 0.78 (1,972) 1:A:45:EU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 17 0.78	(1,1554)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:26:ASN:HB3	13	0.8
(1,1327) 1:A:68:LYS:HD2 1:A:71:GLU:HB2 24 0.8 (1,1327) 1:A:68:LYS:HD3 1:A:71:GLU:HB2 24 0.8 (1,927) 1:A:57:PRO:HG3 1:A:56:LEU:HD21 14 0.79 (1,927) 1:A:57:PRO:HG3 1:A:56:LEU:HD22 14 0.79 (1,927) 1:A:57:PRO:HG3 1:A:56:LEU:HD23 14 0.79 (1,927) 1:A:63:GLN:HB2 1:A:63:GLN:HE21 30 0.79 (1,719) 1:A:63:GLN:HB2 1:A:63:GLN:HE21 30 0.79 (1,239) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 21 0.79 (1,239) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:62:ARG:HG3 21 0.79 (1,239) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:62:ARG:HG3 21 0.79 (1,239) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:70:GLN:HE21 17 0.78 (1,972) 1:A:27:LEU:HD21 1:A:70:GLN:HE21 17 0.78 (1,972) 1:A:27:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 17 0.78 (1,770) 1:A:59:ARG:HA 1:A	(1,1554)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:26:ASN:HB3	13	0.8
(1,1327) 1:A:68:LYS:HD3 1:A:71:GLU:HB2 24 0.8 (1,927) 1:A:57:PRO:HG3 1:A:56:LEU:HD21 14 0.79 (1,927) 1:A:57:PRO:HG3 1:A:56:LEU:HD22 14 0.79 (1,927) 1:A:57:PRO:HG3 1:A:56:LEU:HD23 14 0.79 (1,719) 1:A:63:GLN:HB2 1:A:63:GLN:HE21 30 0.79 (1,239) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 21 0.79 (1,239) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:62:ARG:HG3 21 0.79 (1,239) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:62:ARG:HG3 21 0.79 (1,239) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:62:ARG:HG3 21 0.79 (1,239) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:62:ARG:HG3 21 0.79 (1,239) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:62:ARG:HG3 21 0.79 (1,239) 1:A:42:7:LEU:HD21 1:A:70:GLN:HE21 17 0.78 (1,972) 1:A:42:7:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 17 0.78 (1,972) 1:A:42:7:LEU:HD23	(1,1554)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:26:ASN:HB3	13	0.8
(1,927) 1:A:57:PRO:HG3 1:A:56:LEU:HD21 14 0.79 (1,927) 1:A:57:PRO:HG3 1:A:56:LEU:HD22 14 0.79 (1,927) 1:A:57:PRO:HG3 1:A:56:LEU:HD23 14 0.79 (1,719) 1:A:63:GLN:HB2 1:A:63:GLN:HE21 30 0.79 (1,239) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 21 0.79 (1,239) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:62:ARG:HG3 21 0.79 (1,239) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:62:ARG:HG3 21 0.79 (1,239) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:70:GLN:HE21 17 0.78 (1,972) 1:A:27:LEU:HD22 1:A:70:GLN:HE21 17 0.78 (1,972) 1:A:52:HIS:HB2 1:A:6:GLN:HE21 17 0.78 (1,779) 1:A:6:APIHS:HB2 1	(1,1327)	1:A:68:LYS:HD2	1:A:71:GLU:HB2	24	0.8
(1,927) 1:A:57:PRO:HG3 1:A:56:LEU:HD22 14 0.79 (1,927) 1:A:57:PRO:HG3 1:A:56:LEU:HD23 14 0.79 (1,719) 1:A:63:GLN:HB2 1:A:63:GLN:HE21 30 0.79 (1,239) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 21 0.79 (1,239) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:62:ARG:HG3 21 0.79 (1,972) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:62:ARG:HG3 21 0.79 (1,972) 1:A:27:LEU:HD21 1:A:70:GLN:HE21 17 0.78 (1,972) 1:A:27:LEU:HD22 1:A:70:GLN:HE21 17 0.78 (1,972) 1:A:27:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 17 0.78 (1,972) 1:A:27:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 17 0.78 (1,972) 1:A:27:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 17 0.78 (1,779) 1:A:52:HIS:HB2 1:A:6:GLN:HE21 30 0.78 (1,770) 1:A:59:LEU:HD23 1:A 0.78 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD21 <td< td=""><td>(1,1327)</td><td>1:A:68:LYS:HD3</td><td>1:A:71:GLU:HB2</td><td>24</td><td>0.8</td></td<>	(1,1327)	1:A:68:LYS:HD3	1:A:71:GLU:HB2	24	0.8
(1,927) 1:A:57:PRO:HG3 1:A:56:LEU:HD23 14 0.79 (1,719) 1:A:63:GLN:HB2 1:A:63:GLN:HE21 30 0.79 (1,239) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 21 0.79 (1,239) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:62:ARG:HG3 21 0.79 (1,939) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:62:ARG:HG3 21 0.79 (1,972) 1:A:27:LEU:HD21 1:A:70:GLN:HE21 17 0.78 (1,972) 1:A:27:LEU:HD22 1:A:70:GLN:HE21 17 0.78 (1,972) 1:A:27:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 17 0.78 (1,972) 1:A:22:LEU:HD23 1:A:6:GLN:HE21 30 0.78 (1,972) 1:A:52:HIS:HB2 1:A:6:GLN:HE21 30 0.78 (1,972) 1:A:52:HIS:HB2 1:A:6:GLN:HE21 30 0.78 (1,972) 1:A:6:72:MET:HB3 1:A:6:GLN:HE21 30 0.78 (1,779) 1:A:6:2:HIS:HB2 1:A:6:GLN:HE21 30 0.78 (1,17) 1:A:7:HE:HB3 1:A:	(1,927)	1:A:57:PRO:HG3	1:A:56:LEU:HD21	14	0.79
(1,719) 1:A:63:GLN:HB2 1:A:63:GLN:HE21 30 0.79 (1,239) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 21 0.79 (1,239) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:62:ARG:HG3 21 0.79 (1,239) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:62:ARG:HG3 21 0.79 (1,972) 1:A:27:LEU:HD21 1:A:70:GLN:HE21 17 0.78 (1,972) 1:A:27:LEU:HD22 1:A:70:GLN:HE21 17 0.78 (1,972) 1:A:27:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 17 0.78 (1,972) 1:A:52:HIS:HB2 1:A:6:GLN:HE21 17 0.78 (1,972) 1:A:52:HEIS:HB2 1:A:6:GLN:HE21 30 0.78 (1,779) 1:A:52:HIS:HB2 1:A:6:GLN:HE21 30 0.78 (1,170) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD21 13 0.78 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48:LEU:HD23 13 0.78 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48:LEU:HD11 13 0.78 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48	(1,927)	1:A:57:PRO:HG3	1:A:56:LEU:HD22	14	0.79
(1,239) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 21 0.79 (1,239) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:62:ARG:HG3 21 0.79 (1,239) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:62:ARG:HG3 21 0.79 (1,972) 1:A:27:LEU:HD21 1:A:70:GLN:HE21 17 0.78 (1,972) 1:A:27:LEU:HD22 1:A:70:GLN:HE21 17 0.78 (1,972) 1:A:27:LEU:HD23 1:A:6:GLN:HE21 30 0.78 (1,779) 1:A:52:HIS:HB2 1:A:6:GLN:HE21 30 0.78 (1,700) 1:A:59:ARG:HA 1:A:6:GLN:HE21 30 0.78 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD21 13 0.78 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48:LEU:HD13 3 0.78 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48	(1,927)	1:A:57:PRO:HG3	1:A:56:LEU:HD23	14	0.79
(1,239) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:62:ARG:HG3 21 0.79 (1,239) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:62:ARG:HG3 21 0.79 (1,972) 1:A:27:LEU:HD21 1:A:70:GLN:HE21 17 0.78 (1,972) 1:A:27:LEU:HD22 1:A:70:GLN:HE21 17 0.78 (1,972) 1:A:27:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 17 0.78 (1,972) 1:A:27:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 17 0.78 (1,779) 1:A:52:HIS:HB2 1:A:6:GLN:HE21 30 0.78 (1,700) 1:A:59:ARG:HA 1:A:62:ARG:HD2 19 0.78 (1,700) 1:A:59:ARG:HA 1:A:62:ARG:HD2 19 0.78 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD21 13 0.78 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD23 13 0.78 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48:LEU:HD11 13 0.78 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48:LEU:HD13 13 0.78 (1,17) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:H	(1,719)	1:A:63:GLN:HB2	1:A:63:GLN:HE21	30	0.79
(1,239) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:62:ARG:HG3 21 0.79 (1,972) 1:A:27:LEU:HD21 1:A:70:GLN:HE21 17 0.78 (1,972) 1:A:27:LEU:HD22 1:A:70:GLN:HE21 17 0.78 (1,972) 1:A:27:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 17 0.78 (1,972) 1:A:52:HIS:HB2 1:A:6:GLN:HE21 30 0.78 (1,779) 1:A:52:HIS:HB2 1:A:6:GLN:HE21 30 0.78 (1,700) 1:A:59:ARG:HA 1:A:62:ARG:HD2 19 0.78 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD21 13 0.78 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD22 13 0.78 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48:LEU:HD13 13 0.78 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48:LEU:HD11 13 0.78 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48:LEU:HD12 13 0.78 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48:LEU:HD13 13 0.78 (1,17) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD1	(1,239)	1:A:31:LEU:HD11	1:A:62:ARG:HG3	21	0.79
(1,972) 1:A:27:LEU:HD21 1:A:70:GLN:HE21 17 0.78 (1,972) 1:A:27:LEU:HD22 1:A:70:GLN:HE21 17 0.78 (1,972) 1:A:27:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 17 0.78 (1,779) 1:A:52:HIS:HB2 1:A:6:GLN:HE21 30 0.78 (1,700) 1:A:59:ARG:HA 1:A:62:ARG:HD2 19 0.78 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD21 13 0.78 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD22 13 0.78 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48:LEU:HD13 13 0.78 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48:LEU:HD11 13 0.78 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48:LEU:HD12 13 0.78 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48:LEU:HD13 13 0.78 (1,17) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 13 0.78 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 15 0.77 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12	(1,239)	1:A:31:LEU:HD12	1:A:62:ARG:HG3	21	0.79
(1,972) 1:A:27:LEU:HD22 1:A:70:GLN:HE21 17 0.78 (1,972) 1:A:27:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 17 0.78 (1,779) 1:A:52:HIS:HB2 1:A:6:GLN:HE21 30 0.78 (1,700) 1:A:59:ARG:HA 1:A:62:ARG:HD2 19 0.78 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD21 13 0.78 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD22 13 0.78 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD23 13 0.78 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48:LEU:HD13 13 0.78 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48:LEU:HD12 13 0.78 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48:LEU:HD12 13 0.78 (1,17) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 13 0.78 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 15 0.77 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 15 0.77 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 <td>(1,239)</td> <td>1:A:31:LEU:HD13</td> <td>1:A:62:ARG:HG3</td> <td>21</td> <td>0.79</td>	(1,239)	1:A:31:LEU:HD13	1:A:62:ARG:HG3	21	0.79
(1,972) 1:A:27:LEU:HD23 1:A:70:GLN:HE21 17 0.78 (1,779) 1:A:52:HIS:HB2 1:A:6:GLN:HE21 30 0.78 (1,700) 1:A:59:ARG:HA 1:A:62:ARG:HD2 19 0.78 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD21 13 0.78 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD22 13 0.78 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48:LEU:HD23 13 0.78 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48:LEU:HD11 13 0.78 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48:LEU:HD12 13 0.78 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48:LEU:HD12 13 0.78 (1,17) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 13 0.78 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 15 0.77 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 15 0.77 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 19 0.77 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:74:SER:HB2	(1,972)	1:A:27:LEU:HD21	1:A:70:GLN:HE21	17	0.78
(1,779) 1:A:52:HIS:HB2 1:A:6:GLN:HE21 30 0.78 (1,700) 1:A:59:ARG:HA 1:A:62:ARG:HD2 19 0.78 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD21 13 0.78 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD22 13 0.78 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48:LEU:HD13 13 0.78 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48:LEU:HD12 13 0.78 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48:LEU:HD12 13 0.78 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48:LEU:HD13 13 0.78 (1,17) 1:A:65:THR:HB3 1:A:48:LEU:HD13 13 0.78 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 15 0.77 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 15 0.77 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 19 0.77 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:74:SER:HB2 26 0.77 (1,60) 1:A:47:ILE:HG21 1:A:74:SER:HB2	(1,972)	1:A:27:LEU:HD22	1:A:70:GLN:HE21	17	0.78
(1,700) 1:A:59:ARG:HA 1:A:62:ARG:HD2 19 0.78 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD21 13 0.78 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD22 13 0.78 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD23 13 0.78 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48:LEU:HD11 13 0.78 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48:LEU:HD12 13 0.78 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48:LEU:HD13 13 0.78 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48:LEU:HD13 13 0.78 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48:LEU:HD13 13 0.78 (1,17) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 15 0.77 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 15 0.77 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 19 0.77 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 19 0.77 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:74:SER:HB2	(1,972)	1:A:27:LEU:HD23	1:A:70:GLN:HE21	17	0.78
(1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD21 13 0.78 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD22 13 0.78 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD23 13 0.78 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48:LEU:HD11 13 0.78 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48:LEU:HD12 13 0.78 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48:LEU:HD13 13 0.78 (1,17) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 13 0.78 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 15 0.77 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 15 0.77 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 19 0.77 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 19 0.77 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:74:SER:HB2 26 0.77 (1,60) 1:A:47:ILE:HG21 1:A:74:SER:HB2 26 0.77 (1,60) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:74:SER:HB2	(1,779)	1:A:52:HIS:HB2	1:A:6:GLN:HE21	30	0.78
(1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD22 13 0.78 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD23 13 0.78 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48:LEU:HD11 13 0.78 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48:LEU:HD12 13 0.78 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48:LEU:HD13 13 0.78 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48:LEU:HD13 13 0.78 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48:LEU:HD13 13 0.78 (1,17) 1:A:65:THR:HB3 1:A:48:LEU:HD11 15 0.77 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 15 0.77 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 19 0.77 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 19 0.77 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:74:SER:HB2 26 0.77 (1,60) 1:A:47:ILE:HG21 1:A:74:SER:HB2 26 0.77 (1,60) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:74:SER:HB2 26 0.77 (1,60) 1:A:58:ILE:HG21 1:A:3	(1,700)	1:A:59:ARG:HA	1:A:62:ARG:HD2	19	0.78
(1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:9:LEU:HD23 13 0.78 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48:LEU:HD11 13 0.78 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48:LEU:HD12 13 0.78 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48:LEU:HD13 13 0.78 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 15 0.77 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 15 0.77 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 15 0.77 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 19 0.77 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 19 0.77 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 19 0.77 (1,801) 1:A:47:ILE:HG21 1:A:74:SER:HB2 26 0.77 (1,60) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:74:SER:HB2 26 0.77 (1,60) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:74:SER:HB2 26 0.77 (1,60) 1:A:58:ILE:HG21 1:A:31:LEU:HA 26 0.77	(1,17)	1:A:72:MET:HB3	1:A:9:LEU:HD21	13	0.78
(1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48:LEU:HD11 13 0.78 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48:LEU:HD12 13 0.78 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48:LEU:HD13 13 0.78 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 15 0.77 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 15 0.77 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 15 0.77 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 19 0.77 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 19 0.77 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 19 0.77 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 19 0.77 (1,60) 1:A:47:ILE:HG21 1:A:74:SER:HB2 26 0.77 (1,60) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:74:SER:HB2 26 0.77 (1,60) 1:A:58:ILE:HG21 1:A:31:LEU:HA 26 0.77 (1,60) 1:A:58:ILE:HG21 1:A:31:LEU:HA 26 0.77	(1,17)	1:A:72:MET:HB3	1:A:9:LEU:HD22	13	0.78
(1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48:LEU:HD12 13 0.78 (1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48:LEU:HD13 13 0.78 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 15 0.77 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 15 0.77 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 15 0.77 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 19 0.77 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 19 0.77 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 19 0.77 (1,60) 1:A:47:ILE:HG21 1:A:74:SER:HB2 26 0.77 (1,60) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:74:SER:HB2 26 0.77 (1,60) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:74:SER:HB2 26 0.77 (1,60) 1:A:58:ILE:HG21 1:A:31:LEU:HA 26 0.77	(1,17)	1:A:72:MET:HB3	1:A:9:LEU:HD23	13	0.78
(1,17) 1:A:72:MET:HB3 1:A:48:LEU:HD13 13 0.78 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 15 0.77 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 15 0.77 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 15 0.77 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 19 0.77 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 19 0.77 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 19 0.77 (1,60) 1:A:47:ILE:HG21 1:A:74:SER:HB2 26 0.77 (1,60) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:74:SER:HB2 26 0.77 (1,60) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:74:SER:HB2 26 0.77 (1,60) 1:A:58:ILE:HG21 1:A:31:LEU:HA 26 0.77	(1,17)	1:A:72:MET:HB3	1:A:48:LEU:HD11	13	0.78
(1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 15 0.77 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 15 0.77 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 15 0.77 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 19 0.77 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 19 0.77 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 19 0.77 (1,60) 1:A:47:ILE:HG21 1:A:74:SER:HB2 26 0.77 (1,60) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:74:SER:HB2 26 0.77 (1,60) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:74:SER:HB2 26 0.77 (1,60) 1:A:58:ILE:HG21 1:A:31:LEU:HA 26 0.77	(1,17)	1:A:72:MET:HB3	1:A:48:LEU:HD12	13	0.78
(1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 15 0.77 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 15 0.77 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 19 0.77 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 19 0.77 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 19 0.77 (1,60) 1:A:47:ILE:HG21 1:A:74:SER:HB2 26 0.77 (1,60) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:74:SER:HB2 26 0.77 (1,60) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:74:SER:HB2 26 0.77 (1,60) 1:A:58:ILE:HG21 1:A:31:LEU:HA 26 0.77	(1,17)	1:A:72:MET:HB3	1:A:48:LEU:HD13	13	0.78
(1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 15 0.77 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 19 0.77 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 19 0.77 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 19 0.77 (1,60) 1:A:47:ILE:HG21 1:A:74:SER:HB2 26 0.77 (1,60) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:74:SER:HB2 26 0.77 (1,60) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:74:SER:HB2 26 0.77 (1,60) 1:A:58:ILE:HG21 1:A:31:LEU:HA 26 0.77	(1,801)	1:A:65:THR:HA	1:A:31:LEU:HD11	15	0.77
(1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 19 0.77 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 19 0.77 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 19 0.77 (1,60) 1:A:47:ILE:HG21 1:A:74:SER:HB2 26 0.77 (1,60) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:74:SER:HB2 26 0.77 (1,60) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:74:SER:HB2 26 0.77 (1,60) 1:A:58:ILE:HG21 1:A:31:LEU:HA 26 0.77	(1,801)	1:A:65:THR:HA	1:A:31:LEU:HD12	15	0.77
(1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 19 0.77 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 19 0.77 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 19 0.77 (1,60) 1:A:47:ILE:HG21 1:A:74:SER:HB2 26 0.77 (1,60) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:74:SER:HB2 26 0.77 (1,60) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:74:SER:HB2 26 0.77 (1,60) 1:A:58:ILE:HG21 1:A:31:LEU:HA 26 0.77	(1,801)	1:A:65:THR:HA	1:A:31:LEU:HD13	15	0.77
(1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 19 0.77 (1,60) 1:A:47:ILE:HG21 1:A:74:SER:HB2 26 0.77 (1,60) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:74:SER:HB2 26 0.77 (1,60) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:74:SER:HB2 26 0.77 (1,60) 1:A:58:ILE:HG21 1:A:31:LEU:HA 26 0.77		1:A:65:THR:HA	1:A:31:LEU:HD11	19	0.77
(1,60) 1:A:47:ILE:HG21 1:A:74:SER:HB2 26 0.77 (1,60) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:74:SER:HB2 26 0.77 (1,60) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:74:SER:HB2 26 0.77 (1,60) 1:A:58:ILE:HG21 1:A:31:LEU:HA 26 0.77	(1,801)	1:A:65:THR:HA	1:A:31:LEU:HD12	19	0.77
(1,60) 1:A:47:ILE:HG21 1:A:74:SER:HB2 26 0.77 (1,60) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:74:SER:HB2 26 0.77 (1,60) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:74:SER:HB2 26 0.77 (1,60) 1:A:58:ILE:HG21 1:A:31:LEU:HA 26 0.77		1:A:65:THR:HA	1:A:31:LEU:HD13	19	0.77
(1,60) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:74:SER:HB2 26 0.77 (1,60) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:74:SER:HB2 26 0.77 (1,60) 1:A:58:ILE:HG21 1:A:31:LEU:HA 26 0.77		1:A:47:ILE:HG21	1:A:74:SER:HB2	26	0.77
(1,60) 1:A:58:ILE:HG21 1:A:31:LEU:HA 26 0.77		1:A:47:ILE:HG22	1:A:74:SER:HB2	26	0.77
	(1,60)	1:A:47:ILE:HG23	1:A:74:SER:HB2	26	0.77
(1.60) 1:A:58:ILE:HG22 1:A:31:LEU:HA 26 0.77	(1,60)	1:A:58:ILE:HG21	1:A:31:LEU:HA	26	0.77
(,,	(1,60)	1:A:58:ILE:HG22	1:A:31:LEU:HA	26	0.77



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,60)	1:A:58:ILE:HG23	1:A:31:LEU:HA	26	0.77
(1,233)	1:A:31:LEU:HD11	1:A:31:LEU:HA	5	0.77
(1,233)	1:A:31:LEU:HD12	1:A:31:LEU:HA	5	0.77
(1,233)	1:A:31:LEU:HD13	1:A:31:LEU:HA	5	0.77
(1,233)	1:A:31:LEU:HD11	1:A:31:LEU:HA	15	0.77
(1,233)	1:A:31:LEU:HD12	1:A:31:LEU:HA	15	0.77
(1,233)	1:A:31:LEU:HD13	1:A:31:LEU:HA	15	0.77
(1,1642)	1:A:9:LEU:HD11	1:A:6:GLN:HE21	11	0.77
(1,1642)	1:A:9:LEU:HD12	1:A:6:GLN:HE21	11	0.77
(1,1642)	1:A:9:LEU:HD13	1:A:6:GLN:HE21	11	0.77
(1,1302)	1:A:64:LEU:HB3	1:A:31:LEU:HB3	15	0.77
(1,572)	1:A:43:GLU:HB2	1:A:44:VAL:HG21	18	0.76
(1,572)	1:A:43:GLU:HB2	1:A:44:VAL:HG22	18	0.76
(1,572)	1:A:43:GLU:HB2	1:A:44:VAL:HG23	18	0.76
(1,233)	1:A:31:LEU:HD11	1:A:31:LEU:HA	13	0.76
(1,233)	1:A:31:LEU:HD12	1:A:31:LEU:HA	13	0.76
(1,233)	1:A:31:LEU:HD13	1:A:31:LEU:HA	13	0.76
(1,233)	1:A:31:LEU:HD11	1:A:31:LEU:HA	16	0.76
(1,233)	1:A:31:LEU:HD12	1:A:31:LEU:HA	16	0.76
(1,233)	1:A:31:LEU:HD13	1:A:31:LEU:HA	16	0.76
(1,1589)	1:A:20:ARG:HG3	1:A:67:ARG:HE	2	0.76
(1,972)	1:A:27:LEU:HD21	1:A:70:GLN:HE21	8	0.75
(1,972)	1:A:27:LEU:HD22	1:A:70:GLN:HE21	8	0.75
(1,972)	1:A:27:LEU:HD23	1:A:70:GLN:HE21	8	0.75
(1,972)	1:A:27:LEU:HD21	1:A:70:GLN:HE21	19	0.75
(1,972)	1:A:27:LEU:HD22	1:A:70:GLN:HE21	19	0.75
(1,972)	1:A:27:LEU:HD23	1:A:70:GLN:HE21	19	0.75
(1,1369)	1:A:71:GLU:HG2	1:A:72:MET:H	27	0.75
(1,1271)	1:A:62:ARG:HA	1:A:58:ILE:HG12	12	0.75
(1,719)	1:A:63:GLN:HB2	1:A:63:GLN:HE21	15	0.74
(1,264)	1:A:32:ALA:HA	1:A:34:LEU:HD11	28	0.74
(1,264)	1:A:32:ALA:HA	1:A:34:LEU:HD12	28	0.74
(1,264)	1:A:32:ALA:HA	1:A:34:LEU:HD13	28	0.74
(1,394)	1:A:19:ILE:HG21	1:A:25:ILE:HG13	2	0.73
(1,394)	1:A:19:ILE:HG22	1:A:25:ILE:HG13	2	0.73
(1,394)	1:A:19:ILE:HG23	1:A:25:ILE:HG13	2	0.73
(1,239)	1:A:31:LEU:HD11	1:A:62:ARG:HG3	23	0.73
(1,239)	1:A:31:LEU:HD12	1:A:62:ARG:HG3	23	0.73
(1,239)	1:A:31:LEU:HD13	1:A:62:ARG:HG3	23	0.73
(1,233)	1:A:31:LEU:HD11	1:A:31:LEU:HA	17	0.73
(1,233)	1:A:31:LEU:HD12	1:A:31:LEU:HA	17	0.73
(1,233)	1:A:31:LEU:HD13	1:A:31:LEU:HA	17	0.73



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,17)	1:A:72:MET:HB3	1:A:9:LEU:HD21	6	0.73
(1,17)	1:A:72:MET:HB3	1:A:9:LEU:HD22	6	0.73
(1,17)	1:A:72:MET:HB3	1:A:9:LEU:HD23	6	0.73
(1,17)	1:A:72:MET:HB3	1:A:48:LEU:HD11	6	0.73
(1,17)	1:A:72:MET:HB3	1:A:48:LEU:HD12	6	0.73
(1,17)	1:A:72:MET:HB3	1:A:48:LEU:HD13	6	0.73
(1,1638)	1:A:57:PRO:HB3	1:A:59:ARG:HB2	16	0.73
(1,1555)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:33:ASP:HB3	29	0.73
(1,1555)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:33:ASP:HB3	29	0.73
(1,1555)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:33:ASP:HB3	29	0.73
(1,1271)	1:A:62:ARG:HA	1:A:58:ILE:HG12	9	0.73
(1,1122)	1:A:48:LEU:HD11	1:A:52:HIS:HB3	18	0.73
(1,1122)	1:A:48:LEU:HD12	1:A:52:HIS:HB3	18	0.73
(1,1122)	1:A:48:LEU:HD13	1:A:52:HIS:HB3	18	0.73
(1,1020)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:33:ASP:HB2	9	0.73
(1,1020)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:33:ASP:HB2	9	0.73
(1,1020)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:33:ASP:HB2	9	0.73
(1,1020)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:33:ASP:HB2	25	0.73
(1,1020)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:33:ASP:HB2	25	0.73
(1,1020)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:33:ASP:HB2	25	0.73
(1,264)	1:A:32:ALA:HA	1:A:34:LEU:HD11	5	0.72
(1,264)	1:A:32:ALA:HA	1:A:34:LEU:HD12	5	0.72
(1,264)	1:A:32:ALA:HA	1:A:34:LEU:HD13	5	0.72
(1,239)	1:A:31:LEU:HD11	1:A:62:ARG:HG3	3	0.72
(1,239)	1:A:31:LEU:HD12	1:A:62:ARG:HG3	3	0.72
(1,239)	1:A:31:LEU:HD13	1:A:62:ARG:HG3	3	0.72
(1,1642)	1:A:9:LEU:HD11	1:A:6:GLN:HE21	18	0.72
(1,1642)	1:A:9:LEU:HD12	1:A:6:GLN:HE21	18	0.72
(1,1642)	1:A:9:LEU:HD13	1:A:6:GLN:HE21	18	0.72
(1,111)	1:A:55:VAL:HG21	1:A:49:GLU:HG3	2	0.72
(1,111)	1:A:55:VAL:HG22	1:A:49:GLU:HG3	2	0.72
(1,111)	1:A:55:VAL:HG23	1:A:49:GLU:HG3	2	0.72
(1,1020)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:33:ASP:HB2	12	0.72
(1,1020)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:33:ASP:HB2	12	0.72
(1,1020)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:33:ASP:HB2	12	0.72
(1,1020)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:33:ASP:HB2	22	0.71
(1,1020)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:33:ASP:HB2	22	0.71
(1,1020)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:33:ASP:HB2	22	0.71
(1,801)	1:A:65:THR:HA	1:A:31:LEU:HD11	17	0.7
(1,801)	1:A:65:THR:HA	1:A:31:LEU:HD12	17	0.7
(1,801)	1:A:65:THR:HA	1:A:31:LEU:HD13	17	0.7
(1,668)	1:A:49:GLU:HG2	1:A:46:GLN:HA	2	0.7



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,239)	1:A:31:LEU:HD11	1:A:62:ARG:HG3	1	0.7
(1,239)	1:A:31:LEU:HD12	1:A:62:ARG:HG3	1	0.7
(1,239)	1:A:31:LEU:HD13	1:A:62:ARG:HG3	1	0.7
(1,177)	1:A:22:LEU:HD11	1:A:24:GLY:HA2	8	0.7
(1,177)	1:A:22:LEU:HD12	1:A:24:GLY:HA2	8	0.7
(1,177)	1:A:22:LEU:HD13	1:A:24:GLY:HA2	8	0.7
(1,177)	1:A:22:LEU:HD11	1:A:24:GLY:HA2	17	0.7
(1,177)	1:A:22:LEU:HD12	1:A:24:GLY:HA2	17	0.7
(1,177)	1:A:22:LEU:HD13	1:A:24:GLY:HA2	17	0.7
(1,17)	1:A:72:MET:HB3	1:A:9:LEU:HD21	1	0.7
(1,17)	1:A:72:MET:HB3	1:A:9:LEU:HD22	1	0.7
(1,17)	1:A:72:MET:HB3	1:A:9:LEU:HD23	1	0.7
(1,17)	1:A:72:MET:HB3	1:A:48:LEU:HD11	1	0.7
(1,17)	1:A:72:MET:HB3	1:A:48:LEU:HD12	1	0.7
(1,17)	1:A:72:MET:HB3	1:A:48:LEU:HD13	1	0.7
(1,1592)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:30:SER:H	13	0.7
(1,1592)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:30:SER:H	13	0.7
(1,1592)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:30:SER:H	13	0.7
(1,1020)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:33:ASP:HB2	1	0.7
(1,1020)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:33:ASP:HB2	1	0.7
(1,1020)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:33:ASP:HB2	1	0.7
(1,972)	1:A:27:LEU:HD21	1:A:70:GLN:HE21	7	0.69
(1,972)	1:A:27:LEU:HD22	1:A:70:GLN:HE21	7	0.69
(1,972)	1:A:27:LEU:HD23	1:A:70:GLN:HE21	7	0.69
(1,778)	1:A:52:HIS:HB3	1:A:6:GLN:HE21	18	0.69
(1,233)	1:A:31:LEU:HD11	1:A:31:LEU:HA	19	0.69
(1,233)	1:A:31:LEU:HD12	1:A:31:LEU:HA	19	0.69
(1,233)	1:A:31:LEU:HD13	1:A:31:LEU:HA	19	0.69
(1,1020)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:33:ASP:HB2	11	0.69
(1,1020)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:33:ASP:HB2	11	0.69
(1,1020)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:33:ASP:HB2	11	0.69
(1,1020)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:33:ASP:HB2	21	0.69
(1,1020)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:33:ASP:HB2	21	0.69
(1,1020)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:33:ASP:HB2	21	0.69
(1,1020)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:33:ASP:HB2	23	0.69
(1,1020)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:33:ASP:HB2	23	0.69
(1,1020)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:33:ASP:HB2	23	0.69
(1,17)	1:A:72:MET:HB3	1:A:9:LEU:HD21	8	0.68
(1,17)	1:A:72:MET:HB3	1:A:9:LEU:HD22	8	0.68
(1,17)	1:A:72:MET:HB3	1:A:9:LEU:HD23	8	0.68
(1,17)	1:A:72:MET:HB3	1:A:48:LEU:HD11	8	0.68
(1,17)	1:A:72:MET:HB3	1:A:48:LEU:HD12	8	0.68



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,17)	1:A:72:MET:HB3	1:A:48:LEU:HD13	8	0.68
(1,1593)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:29:SER:HA	19	0.68
(1,1593)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:29:SER:HA	19	0.68
(1,1593)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:29:SER:HA	19	0.68
(1,177)	1:A:22:LEU:HD11	1:A:24:GLY:HA2	7	0.67
(1,177)	1:A:22:LEU:HD12	1:A:24:GLY:HA2	7	0.67
(1,177)	1:A:22:LEU:HD13	1:A:24:GLY:HA2	7	0.67
(1,1592)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:30:SER:H	14	0.67
(1,1592)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:30:SER:H	14	0.67
(1,1592)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:30:SER:H	14	0.67
(1,1239)	1:A:60:GLU:HB3	1:A:56:LEU:HB2	10	0.67
(1,1012)	1:A:34:LEU:HD11	1:A:31:LEU:H	28	0.67
(1,1012)	1:A:34:LEU:HD12	1:A:31:LEU:H	28	0.67
(1,1012)	1:A:34:LEU:HD13	1:A:31:LEU:H	28	0.67
(1,845)	1:A:8:ASP:HB2	1:A:11:LYS:HB2	25	0.66
(1,845)	1:A:8:ASP:HB2	1:A:11:LYS:HB3	25	0.66
(1,779)	1:A:52:HIS:HB2	1:A:6:GLN:HE21	5	0.66
(1,315)	1:A:40:MET:HB3	1:A:39:LEU:HD21	27	0.66
(1,315)	1:A:40:MET:HB3	1:A:39:LEU:HD22	27	0.66
(1,315)	1:A:40:MET:HB3	1:A:39:LEU:HD23	27	0.66
(1,1589)	1:A:20:ARG:HG3	1:A:67:ARG:HE	26	0.66
(1,1509)	1:A:72:MET:HG2	1:A:9:LEU:HD11	6	0.66
(1,1509)	1:A:72:MET:HG2	1:A:9:LEU:HD12	6	0.66
(1,1509)	1:A:72:MET:HG2	1:A:9:LEU:HD13	6	0.66
(1,111)	1:A:55:VAL:HG21	1:A:49:GLU:HG3	29	0.66
(1,111)	1:A:55:VAL:HG22	1:A:49:GLU:HG3	29	0.66
(1,111)	1:A:55:VAL:HG23	1:A:49:GLU:HG3	29	0.66
(1,778)	1:A:52:HIS:HB3	1:A:6:GLN:HE21	5	0.65
(1,76)	1:A:9:LEU:HD11	1:A:70:GLN:HB2	7	0.65
(1,76)	1:A:9:LEU:HD11	1:A:70:GLN:HB3	7	0.65
(1,76)	1:A:9:LEU:HD12	1:A:70:GLN:HB2	7	0.65
(1,76)	1:A:9:LEU:HD12	1:A:70:GLN:HB3	7	0.65
(1,76)	1:A:9:LEU:HD13	1:A:70:GLN:HB2	7	0.65
(1,76)	1:A:9:LEU:HD13	1:A:70:GLN:HB3	7	0.65
(1,1445)	1:A:44:VAL:HG11	1:A:47:ILE:HG13	18	0.65
(1,1445)	1:A:44:VAL:HG12	1:A:47:ILE:HG13	18	0.65
(1,1445)	1:A:44:VAL:HG13	1:A:47:ILE:HG13	18	0.65
(1,1271)	1:A:62:ARG:HA	1:A:58:ILE:HG12	19	0.65
(1,1248)	1:A:61:VAL:HA	1:A:62:ARG:HB3	6	0.65
(1,1020)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:33:ASP:HB2	7	0.65
(1,1020)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:33:ASP:HB2	7	0.65
(1,1020)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:33:ASP:HB2	7	0.65



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,60)	1:A:47:ILE:HG21	1:A:74:SER:HB2	11	0.64
(1,60)	1:A:47:ILE:HG22	1:A:74:SER:HB2	11	0.64
(1,60)	1:A:47:ILE:HG23	1:A:74:SER:HB2	11	0.64
(1,60)	1:A:58:ILE:HG21	1:A:31:LEU:HA	11	0.64
(1,60)	1:A:58:ILE:HG22	1:A:31:LEU:HA	11	0.64
(1,60)	1:A:58:ILE:HG23	1:A:31:LEU:HA	11	0.64
(1,499)	1:A:47:ILE:HD11	1:A:43:GLU:HG2	16	0.64
(1,499)	1:A:47:ILE:HD12	1:A:43:GLU:HG2	16	0.64
(1,499)	1:A:47:ILE:HD13	1:A:43:GLU:HG2	16	0.64
(1,1020)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:33:ASP:HB2	15	0.64
(1,1020)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:33:ASP:HB2	15	0.64
(1,1020)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:33:ASP:HB2	15	0.64
(1,316)	1:A:40:MET:HB2	1:A:39:LEU:HD21	28	0.63
(1,316)	1:A:40:MET:HB2	1:A:39:LEU:HD22	28	0.63
(1,316)	1:A:40:MET:HB2	1:A:39:LEU:HD23	28	0.63
(1,240)	1:A:31:LEU:HD11	1:A:34:LEU:HB2	15	0.63
(1,240)	1:A:31:LEU:HD12	1:A:34:LEU:HB2	15	0.63
(1,240)	1:A:31:LEU:HD13	1:A:34:LEU:HB2	15	0.63
(1,240)	1:A:31:LEU:HD11	1:A:34:LEU:HB2	19	0.63
(1,240)	1:A:31:LEU:HD12	1:A:34:LEU:HB2	19	0.63
(1,240)	1:A:31:LEU:HD13	1:A:34:LEU:HB2	19	0.63
(1,1302)	1:A:64:LEU:HB3	1:A:31:LEU:HB3	17	0.63
(1,240)	1:A:31:LEU:HD11	1:A:34:LEU:HB2	30	0.62
(1,240)	1:A:31:LEU:HD12	1:A:34:LEU:HB2	30	0.62
(1,240)	1:A:31:LEU:HD13	1:A:34:LEU:HB2	30	0.62
(1,1491)	1:A:42:VAL:HG21	1:A:46:GLN:HG2	15	0.62
(1,1491)	1:A:42:VAL:HG22	1:A:46:GLN:HG2	15	0.62
(1,1491)	1:A:42:VAL:HG23	1:A:46:GLN:HG2	15	0.62
(1,1020)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:33:ASP:HB2	20	0.62
(1,1020)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:33:ASP:HB2	20	0.62
(1,1020)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:33:ASP:HB2	20	0.62
(1,468)	1:A:47:ILE:HA	1:A:48:LEU:HD11	18	0.61
(1,468)	1:A:47:ILE:HA	1:A:48:LEU:HD12	18	0.61
(1,468)	1:A:47:ILE:HA	1:A:48:LEU:HD13	18	0.61
(1,239)	1:A:31:LEU:HD11	1:A:62:ARG:HG3	7	0.61
(1,239)	1:A:31:LEU:HD12	1:A:62:ARG:HG3	7	0.61
(1,239)	1:A:31:LEU:HD13	1:A:62:ARG:HG3	7	0.61
(1,1248)	1:A:61:VAL:HA	1:A:62:ARG:HB3	8	0.61
(1,1248)	1:A:61:VAL:HA	1:A:62:ARG:HB3	20	0.61
(1,1592)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:30:SER:H	20	0.6
(1,1592)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:30:SER:H	20	0.6
(1,1592)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:30:SER:H	20	0.6



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1248)	1:A:61:VAL:HA	1:A:62:ARG:HB3	16	0.6
(1,502)	1:A:19:ILE:HD11	1:A:25:ILE:HG13	2	0.59
(1,502)	1:A:19:ILE:HD12	1:A:25:ILE:HG13	2	0.59
(1,502)	1:A:19:ILE:HD13	1:A:25:ILE:HG13	2	0.59
(1,239)	1:A:31:LEU:HD11	1:A:62:ARG:HG3	22	0.59
(1,239)	1:A:31:LEU:HD12	1:A:62:ARG:HG3	22	0.59
(1,239)	1:A:31:LEU:HD13	1:A:62:ARG:HG3	22	0.59
(1,1610)	1:A:13:VAL:HG21	1:A:9:LEU:HD11	13	0.59
(1,1610)	1:A:13:VAL:HG21	1:A:9:LEU:HD12	13	0.59
(1,1610)	1:A:13:VAL:HG21	1:A:9:LEU:HD13	13	0.59
(1,1610)	1:A:13:VAL:HG22	1:A:9:LEU:HD11	13	0.59
(1,1610)	1:A:13:VAL:HG22	1:A:9:LEU:HD12	13	0.59
(1,1610)	1:A:13:VAL:HG22	1:A:9:LEU:HD13	13	0.59
(1,1610)	1:A:13:VAL:HG23	1:A:9:LEU:HD11	13	0.59
(1,1610)	1:A:13:VAL:HG23	1:A:9:LEU:HD12	13	0.59
(1,1610)	1:A:13:VAL:HG23	1:A:9:LEU:HD13	13	0.59
(1,1589)	1:A:20:ARG:HG3	1:A:67:ARG:HE	12	0.59
(1,1589)	1:A:20:ARG:HG3	1:A:67:ARG:HE	15	0.59
(1,1302)	1:A:64:LEU:HB3	1:A:31:LEU:HB3	11	0.59
(1,1128)	1:A:36:LEU:HD11	1:A:37:ASP:H	5	0.59
(1,1128)	1:A:36:LEU:HD12	1:A:37:ASP:H	5	0.59
(1,1128)	1:A:36:LEU:HD13	1:A:37:ASP:H	5	0.59
(1,296)	1:A:17:LEU:HD11	1:A:19:ILE:HG13	16	0.58
(1,296)	1:A:17:LEU:HD12	1:A:19:ILE:HG13	16	0.58
(1,296)	1:A:17:LEU:HD13	1:A:19:ILE:HG13	16	0.58
(1,177)	1:A:22:LEU:HD11	1:A:24:GLY:HA2	10	0.58
(1,177)	1:A:22:LEU:HD12	1:A:24:GLY:HA2	10	0.58
(1,177)	1:A:22:LEU:HD13	1:A:24:GLY:HA2	10	0.58
(1,177)	1:A:22:LEU:HD11	1:A:24:GLY:HA2	20	0.58
(1,177)	1:A:22:LEU:HD12	1:A:24:GLY:HA2	20	0.58
(1,177)	1:A:22:LEU:HD13	1:A:24:GLY:HA2	20	0.58
(1,1638)	1:A:57:PRO:HB3	1:A:59:ARG:HB2	28	0.58
(1,1271)	1:A:62:ARG:HA	1:A:58:ILE:HG12	10	0.58
(1,1248)	1:A:61:VAL:HA	1:A:62:ARG:HB3	3	0.58
(1,1248)	1:A:61:VAL:HA	1:A:62:ARG:HB3	15	0.58
(1,1248)	1:A:61:VAL:HA	1:A:62:ARG:HB3	23	0.58
(1,1271)	1:A:62:ARG:HA	1:A:58:ILE:HG12	2	0.57
(1,798)	1:A:51:GLU:HG2	1:A:50:ARG:HG2	23	0.56
(1,798)	1:A:51:GLU:HG3	1:A:50:ARG:HG2	23	0.56
(1,1303)	1:A:64:LEU:HB2	1:A:31:LEU:HB3	28	0.56
(1,1100)	1:A:40:MET:HG2	1:A:39:LEU:HD21	28	0.56
(1,1100)	1:A:40:MET:HG2	1:A:39:LEU:HD22	28	0.56



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1100)	1:A:40:MET:HG2	1:A:39:LEU:HD23	28	0.56
(1,60)	1:A:47:ILE:HG21	1:A:74:SER:HB2	20	0.55
(1,60)	1:A:47:ILE:HG22	1:A:74:SER:HB2	20	0.55
(1,60)	1:A:47:ILE:HG23	1:A:74:SER:HB2	20	0.55
(1,60)	1:A:58:ILE:HG21	1:A:31:LEU:HA	20	0.55
(1,60)	1:A:58:ILE:HG22	1:A:31:LEU:HA	20	0.55
(1,60)	1:A:58:ILE:HG23	1:A:31:LEU:HA	20	0.55
(1,240)	1:A:31:LEU:HD11	1:A:34:LEU:HB2	16	0.55
(1,240)	1:A:31:LEU:HD12	1:A:34:LEU:HB2	16	0.55
(1,240)	1:A:31:LEU:HD13	1:A:34:LEU:HB2	16	0.55
(1,177)	1:A:22:LEU:HD11	1:A:24:GLY:HA2	24	0.55
(1,177)	1:A:22:LEU:HD12	1:A:24:GLY:HA2	24	0.55
(1,177)	1:A:22:LEU:HD13	1:A:24:GLY:HA2	24	0.55
(1,1369)	1:A:71:GLU:HG2	1:A:72:MET:H	22	0.55
(1,1248)	1:A:61:VAL:HA	1:A:62:ARG:HB3	4	0.55
(1,1248)	1:A:61:VAL:HA	1:A:62:ARG:HB3	18	0.55
(1,1239)	1:A:60:GLU:HB3	1:A:56:LEU:HB2	8	0.55
(1,499)	1:A:47:ILE:HD11	1:A:43:GLU:HG2	11	0.54
(1,499)	1:A:47:ILE:HD12	1:A:43:GLU:HG2	11	0.54
(1,499)	1:A:47:ILE:HD13	1:A:43:GLU:HG2	11	0.54
(1,240)	1:A:31:LEU:HD11	1:A:34:LEU:HB2	17	0.54
(1,240)	1:A:31:LEU:HD12	1:A:34:LEU:HB2	17	0.54
(1,240)	1:A:31:LEU:HD13	1:A:34:LEU:HB2	17	0.54
(1,1248)	1:A:61:VAL:HA	1:A:62:ARG:HB3	5	0.54
(1,1248)	1:A:61:VAL:HA	1:A:62:ARG:HB3	13	0.54
(1,778)	1:A:52:HIS:HB3	1:A:6:GLN:HE21	27	0.53
(1,700)	1:A:59:ARG:HA	1:A:62:ARG:HD2	10	0.53
(1,240)	1:A:31:LEU:HD11	1:A:34:LEU:HB2	13	0.53
(1,240)	1:A:31:LEU:HD12	1:A:34:LEU:HB2	13	0.53
(1,240)	1:A:31:LEU:HD13	1:A:34:LEU:HB2	13	0.53
(1,1248)	1:A:61:VAL:HA	1:A:62:ARG:HB3	1	0.53
(1,1248)	1:A:61:VAL:HA	1:A:62:ARG:HB3	17	0.53
(1,1020)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:33:ASP:HB2	8	0.53
(1,1020)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:33:ASP:HB2	8	0.53
(1,1020)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:33:ASP:HB2	8	0.53
(1,499)	1:A:47:ILE:HD11	1:A:43:GLU:HG2	24	0.52
(1,499)	1:A:47:ILE:HD12	1:A:43:GLU:HG2	24	0.52
(1,499)	1:A:47:ILE:HD13	1:A:43:GLU:HG2	24	0.52
(1,1589)	1:A:20:ARG:HG3	1:A:67:ARG:HE	5	0.52
(1,972)	1:A:27:LEU:HD21	1:A:70:GLN:HE21	29	0.51
(1,972)	1:A:27:LEU:HD22	1:A:70:GLN:HE21	29	0.51
(1,972)	1:A:27:LEU:HD23	1:A:70:GLN:HE21	29	0.51



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,394)	1:A:19:ILE:HG21	1:A:25:ILE:HG13	10	0.51
(1,394)	1:A:19:ILE:HG22	1:A:25:ILE:HG13	10	0.51
(1,394)	1:A:19:ILE:HG23	1:A:25:ILE:HG13	10	0.51
(1,177)	1:A:22:LEU:HD11	1:A:24:GLY:HA2	29	0.51
(1,177)	1:A:22:LEU:HD12	1:A:24:GLY:HA2	29	0.51
(1,177)	1:A:22:LEU:HD13	1:A:24:GLY:HA2	29	0.51
(1,1618)	1:A:58:ILE:HG12	1:A:59:ARG:HD2	13	0.51
(1,1618)	1:A:58:ILE:HG12	1:A:59:ARG:HD3	13	0.51
(1,1248)	1:A:61:VAL:HA	1:A:62:ARG:HB3	21	0.51
(1,60)	1:A:47:ILE:HG21	1:A:74:SER:HB2	13	0.5
(1,60)	1:A:47:ILE:HG22	1:A:74:SER:HB2	13	0.5
(1,60)	1:A:47:ILE:HG23	1:A:74:SER:HB2	13	0.5
(1,60)	1:A:58:ILE:HG21	1:A:31:LEU:HA	13	0.5
(1,60)	1:A:58:ILE:HG22	1:A:31:LEU:HA	13	0.5
(1,60)	1:A:58:ILE:HG23	1:A:31:LEU:HA	13	0.5
(1,499)	1:A:47:ILE:HD11	1:A:43:GLU:HG2	27	0.5
(1,499)	1:A:47:ILE:HD12	1:A:43:GLU:HG2	27	0.5
(1,499)	1:A:47:ILE:HD13	1:A:43:GLU:HG2	27	0.5
(1,475)	1:A:22:LEU:HD21	1:A:20:ARG:HB2	12	0.5
(1,475)	1:A:22:LEU:HD22	1:A:20:ARG:HB2	12	0.5
(1,475)	1:A:22:LEU:HD23	1:A:20:ARG:HB2	12	0.5
(1,1618)	1:A:58:ILE:HG12	1:A:59:ARG:HD2	15	0.5
(1,1618)	1:A:58:ILE:HG12	1:A:59:ARG:HD3	15	0.5
(1,1248)	1:A:61:VAL:HA	1:A:62:ARG:HB3	22	0.5
(1,1196)	1:A:56:LEU:HD21	1:A:56:LEU:HA	20	0.5
(1,1196)	1:A:56:LEU:HD22	1:A:56:LEU:HA	20	0.5
(1,1196)	1:A:56:LEU:HD23	1:A:56:LEU:HA	20	0.5
(1,1019)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:34:LEU:HA	13	0.5
(1,1019)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:34:LEU:HA	13	0.5
(1,1019)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:34:LEU:HA	13	0.5
(1,1019)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:34:LEU:HA	24	0.5
(1,1019)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:34:LEU:HA	24	0.5
(1,1019)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:34:LEU:HA	24	0.5
(1,264)	1:A:32:ALA:HA	1:A:34:LEU:HD11	19	0.49
(1,264)	1:A:32:ALA:HA	1:A:34:LEU:HD12	19	0.49
(1,264)	1:A:32:ALA:HA	1:A:34:LEU:HD13	19	0.49
(1,239)	1:A:31:LEU:HD11	1:A:62:ARG:HG3	4	0.49
(1,239)	1:A:31:LEU:HD12	1:A:62:ARG:HG3	4	0.49
(1,239)	1:A:31:LEU:HD13	1:A:62:ARG:HG3	4	0.49
(1,1327)	1:A:68:LYS:HD2	1:A:71:GLU:HB2	3	0.49
(1,1327)	1:A:68:LYS:HD3	1:A:71:GLU:HB2	3	0.49
(1,1019)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:34:LEU:HA	14	0.49



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

(1,1019) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:34:LEU:HA 14 0.49 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HA 14 0.49 (1,778) 1:A:35:HB:HB3 1:A:6:GLN:HE21 12 0.48 (1,394) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:25:ILE:HG13 1 0.48 (1,394) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:25:ILE:HG13 1 0.48 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 27 0.48 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 27 0.48 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 27 0.48 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 27 0.48 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD11 1:A:6:GLN:HE21 10 0.48 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD12 1:A:6:GLN:HE21 10 0.48 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD12 1:A:6:GLN:HE21 10 0.48 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD12 1:A:6:GLN:HE21 10 0.48 (1,1642) 1:A:3:LEU:HD12 1:A:	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,778) 1:A:52:HIS:HB3 1:A:6:GLN:HE21 12 0.48 (1,394) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:25:ILE:HG13 1 0.48 (1,394) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:25:ILE:HG13 1 0.48 (1,394) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:25:ILE:HG13 1 0.48 (1,394) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:25:ILE:HG13 1 0.48 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 27 0.48 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 27 0.48 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 27 0.48 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD11 1:A:6:GLN:HE21 10 0.48 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD12 1:A:6:GLN:HE21 10 0.48 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD13 1:A:6:GLN:HE21 10 0.48 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD13 1:A:6:GLN:HE21 10 0.48 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD2 23 0.48 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD2 23 0.48 (1,1618) 1:A:34:LEU:HD12 1:A:34:LEU:HA 27 0.48 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:34:LEU:HA 27 0.48 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:34:LEU:HA 27 0.48 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HA 27 0.48 (1,468) 1:A:47:ILE:HA 1:A:48:LEU:HD11 2 0.47 (1,468) 1:A:47:ILE:HA 1:A:48:LEU:HD11 2 0.47 (1,468) 1:A:47:ILE:HA 1:A:48:LEU:HD11 2 0.47 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD11 1:A:65:THR:HA 11 0.47 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD12 1:A:65:THR:HA 11 0.47 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD13 1:A:65:THR:HA 11 0.47 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD13 1:A:65:THR:HA 11 0.47 (1,1302) 1:A:64:LEU:HB23 1:A:31:LEU:HB3 13 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:34:LEU:HB3 17 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:34:LEU:HA 20 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:34:LEU:HA 20 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HA 20 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:H	(1,1019)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:34:LEU:HA	14	0.49
(1,394) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:25:ILE:HG13 1 0.48 (1,394) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:25:ILE:HG13 1 0.48 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 27 0.48 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 27 0.48 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 27 0.48 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 27 0.48 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 27 0.48 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD11 1:A:6:GLN:HE21 10 0.48 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD11 1:A:6:GLN:HE21 10 0.48 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD12 1:A:6:GLN:HE21 10 0.48 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD13 1:A:6:GLN:HE21 10 0.48 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD2 23 0.48 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD3 23 0.48 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD3 23 0.48 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:34:LEU:HA 27 0.48 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:34:LEU:HA 27 0.48 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HA 27 0.48 (1,468) 1:A:47:ILE:HA 1:A:48:LEU:HD11 2 0.47 (1,468) 1:A:47:ILE:HA 1:A:48:LEU:HD11 2 0.47 (1,468) 1:A:47:ILE:HA 1:A:48:LEU:HD13 2 0.47 (1,468) 1:A:47:ILE:HA 1:A:48:LEU:HD13 2 0.47 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD11 1:A:65:THR:HA 11 0.47 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD11 1:A:65:THR:HA 11 0.47 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD13 1:A:65:THR:HA 11 0.47 (1,1302) 1:A:64:LEU:HB3 1:A:55:HE:HG12 11 0.47 (1,1302) 1:A:64:LEU:HB3 1:A:31:LEU:HB3 13 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:34:LEU:HA 17 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HA 20 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:3	(1,1019)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:34:LEU:HA	14	0.49
(1,394) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:25:ILE:HG13 1 0.48 (1,394) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:25:ILE:HG13 1 0.48 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 27 0.48 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 27 0.48 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 27 0.48 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:6:GLN:HE21 27 0.48 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:6:GLN:HE21 10 0.48 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD12 1:A:6:GLN:HE21 10 0.48 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD13 1:A:6:GLN:HE21 10 0.48 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD13 1:A:6:GLN:HE21 10 0.48 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD2 23 0.48 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD3 23 0.48 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:34:LEU:HA 27 0.48 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:34:LEU:HA 27 0.48 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:34:LEU:HA 27 0.48 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HA 27 0.48 (1,468) 1:A:47:ILE:HA 1:A:48:LEU:HD11 2 0.47 (1,468) 1:A:47:ILE:HA 1:A:48:LEU:HD12 2 0.47 (1,468) 1:A:47:ILE:HA 1:A:48:LEU:HD12 2 0.47 (1,468) 1:A:47:ILE:HA 1:A:48:LEU:HD12 2 0.47 (1,456) 1:A:66:LEU:HD11 1:A:65:THR:HA 11 0.47 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD12 1:A:65:THR:HA 11 0.47 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD13 1:A:65:THR:HA 11 0.47 (1,1309) 1:A:71:GLU:HG2 1:A:72:MET:H 24 0.47 (1,1309) 1:A:64:LEU:HD3 1:A:65:THR:HA 11 0.47 (1,1271) 1:A:62:ARG:HA 1:A:48:LEU:HB3 13 0.47 (1,1271) 1:A:62:ARG:HA 1:A:48:LEU:HB3 13 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:34:LEU:HB 17 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:34:LEU:HB 17 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:34:LEU:HA 17 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:34:LEU:HA 20 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:34:LEU:HA 20 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:H	(1,778)	1:A:52:HIS:HB3	1:A:6:GLN:HE21	12	0.48
(1,394) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:25:ILE:HG13 1 0.48 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 27 0.48 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 27 0.48 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 27 0.48 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 27 0.48 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD11 1:A:6:GLN:HE21 10 0.48 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD12 1:A:6:GLN:HE21 10 0.48 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD13 1:A:6:GLN:HE21 10 0.48 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD13 1:A:6:GLN:HE21 10 0.48 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD2 23 0.48 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD3 23 0.48 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:34:LEU:HA 27 0.48 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:34:LEU:HA 27 0.48 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:34:LEU:HA 27 0.48 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HA 27 0.48 (1,468) 1:A:47:ILE:HA 1:A:48:LEU:HD11 2 0.47 (1,468) 1:A:47:ILE:HA 1:A:48:LEU:HD12 2 0.47 (1,468) 1:A:47:ILE:HA 1:A:48:LEU:HD12 2 0.47 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD11 1:A:65:THR:HA 11 0.47 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD13 1:A:65:THR:HA 11 0.47 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD13 1:A:65:THR:HA 11 0.47 (1,1302) 1:A:64:LEU:HB3 1:A:31:LEU:HB3 13 0.47 (1,1248) 1:A:61:VAL:HB3 1:A:31:LEU:HB3 13 0.47 (1,1248) 1:A:61:VAL:HB3 1:A:31:LEU:HB3 13 0.47 (1,1219) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:34:LEU:HD1 11 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:34:LEU:HB3 13 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:34:LEU:HA 17 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:34:LEU:HA 20 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:34:LEU:HA 20 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:34:LEU:HA 20 0.46 (1,1618) 1:A:55:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD3 1 0.46 (1,1618) 1:A:55:ILE:H	(1,394)	1:A:19:ILE:HG21	1:A:25:ILE:HG13	1	0.48
(1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 27 0.48 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 27 0.48 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 27 0.48 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD11 1:A:6:GLN:HE21 10 0.48 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD11 1:A:6:GLN:HE21 10 0.48 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD12 1:A:6:GLN:HE21 10 0.48 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD13 1:A:6:GLN:HE21 10 0.48 (1,1618) 1:A:5:EU:HD13 1:A:6:GLN:HE21 10 0.48 (1,1618) 1:A:5:EU:HD13 1:A:6:GLN:HE21 10 0.48 (1,1618) 1:A:5:EU:HD13 1:A:6:GLN:HE21 10 0.48 (1,1618) 1:A:5:EU:HD12 1:A:59:ARG:HD2 23 0.48 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:34:LEU:HA 27 0.48 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:34:LEU:HA 27 0.48 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:34:LEU:HA 27 0.48 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HA 27 0.48 (1,468) 1:A:47:ILE:HA 1:A:48:LEU:HD11 2 0.47 (1,468) 1:A:47:ILE:HA 1:A:48:LEU:HD11 2 0.47 (1,468) 1:A:47:ILE:HA 1:A:48:LEU:HD12 2 0.47 (1,468) 1:A:47:ILE:HA 1:A:48:LEU:HD12 2 0.47 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD11 1:A:65:THR:HA 11 0.47 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD13 1:A:65:THR:HA 11 0.47 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD13 1:A:65:THR:HA 11 0.47 (1,1369) 1:A:71:GLU:HG2 1:A:72:MET:H 24 0.47 (1,1302) 1:A:64:LEU:HB3 1:A:34:LEU:HB3 13 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:34:LEU:HB3 13 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:34:LEU:HA 17 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:34:LEU:HA 17 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:34:LEU:HA 17 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:34:LEU:HA 17 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:34:LEU:HA 20 0.46 (1,1618) 1:A:55:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD3 1 0.46 (1,1618) 1:A:55:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD	(1,394)	1:A:19:ILE:HG22	1:A:25:ILE:HG13	1	0.48
(1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 27 0.48 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 27 0.48 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD11 1:A:6:GLN:HE21 10 0.48 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD12 1:A:6:GLN:HE21 10 0.48 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD13 1:A:6:GLN:HE21 10 0.48 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD13 1:A:6:GLN:HE21 10 0.48 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD2 23 0.48 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD2 23 0.48 (1,1618) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:34:LEU:HA 27 0.48 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:34:LEU:HA 27 0.48 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:34:LEU:HA 27 0.48 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HA 27 0.48 (1,168) 1:A:47:ILE:HA 1:A:48:LEU:HD12 2 0.47 (1,468) 1:A:47:ILE:HA 1:A:48:LEU:HD12 2 0.47 (1,468) 1:A:47:ILE:HA 1:A:48:LEU:HD12 2 0.47 (1,468) 1:A:47:ILE:HA 1:A:48:LEU:HD12 2 0.47 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD11 1:A:65:THR:HA 11 0.47 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD12 1:A:65:THR:HA 11 0.47 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD13 1:A:66:THR:HA 11 0.47 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD13 1:A:34:LEU:HB3 13 0.47 (1,121) 1:A:62:ARG:HB 1:A:34:LEU:HB3 13 0.47 (1,1248) 1:A:64:LEU:HB3 1:A:48:LEU:HB3 13 0.47 (1,1248) 1:A:64:LEU:HB3 1:A:48:LEU:HB3 13 0.47 (1,1248) 1:A:64:LEU:HB3 1:A:48:LEU:HB3 17 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:34:LEU:HA 20 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:34:LEU:HA 20 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:34:LEU:HA 20 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:34:LEU:HA 20 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:34:LEU:HA 20 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:34:LEU:HA 20 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:34:LEU:HA 20 0.46 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD2 1 0.46 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:	(1,394)	1:A:19:ILE:HG23	1:A:25:ILE:HG13	1	0.48
(1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 27 0.48 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD11 1:A:6:GLN:HE21 10 0.48 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD12 1:A:6:GLN:HE21 10 0.48 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD13 1:A:6:GLN:HE21 10 0.48 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD13 1:A:6:GLN:HE21 10 0.48 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD2 23 0.48 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD12 1:A:34:LEU:HA 27 0.48 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD12 1:A:34:LEU:HA 27 0.48 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD12 1:A:34:LEU:HA 27 0.48 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HA 27 0.48 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HA 27 0.48 (1,468) 1:A:47:ILE:HA 1:A:48:LEU:HD11 2 0.47 (1,468) 1:A:47:ILE:HA 1:A:48:LEU:HD12 2 0.47 (1,468) 1:A:47:ILE:HA 1:A:48:LEU:HD12 2 0.47 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD11 1:A:65:THR:HA 11 0.47 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD12 1:A:65:THR:HA 11 0.47 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD13 1:A:65:THR:HA 11 0.47 (1,1309) 1:A:71:GLU:HG2 1:A:72:MET:H 24 0.47 (1,1302) 1:A:64:LEU:HB3 1:A:31:LEU:HB3 13 0.47 (1,1271) 1:A:62:ARG:HA 1:A:58:ILE:HG12 11 0.47 (1,1248) 1:A:61:VAL:HA 1:A:62:ARG:HB3 7 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:34:LEU:HA 17 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:34:LEU:HA 20 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:34:LEU:HA 20 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HA 20 0.46 (1,1618) 1:A:55:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HB3 1 0.46 (1,1618) 1:A:55:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD3 1 0.46 (1,1618) 1:A:55:ILE:HG12 1:A:59:AR	(1,177)	1:A:22:LEU:HD11	1:A:24:GLY:HA2	27	0.48
(1,1642) 1:A:9:LEU:HD11 1:A:6:GLN:HE21 10 0.48 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD12 1:A:6:GLN:HE21 10 0.48 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD13 1:A:6:GLN:HE21 10 0.48 (1,1618) 1:A:59:LE:HG12 1:A:59:ARG:HD2 23 0.48 (1,1618) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:34:LEU:HA 27 0.48 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:34:LEU:HA 27 0.48 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HA 27 0.48 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HA 27 0.48 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HA 27 0.48 (1,468) 1:A:47:LE:HA 1:A:34:LEU:HD11 2 0.47 (1,468) 1:A:47:LE:HA 1:A:48:LEU:HD13 2 0.47 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD11 1:A:65:THR:HA 11 0.47 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD13 1:A:72:MET:H 24 0.47 (1,1309) 1:A:61:VAL:HA 1:A:31:LEU	(1,177)	1:A:22:LEU:HD12	1:A:24:GLY:HA2	27	0.48
(1,1642) 1:A:9:LEU:HD12 1:A:6:GLN:HE21 10 0.48 (1,1642) 1:A:9:LEU:HD13 1:A:6:GLN:HE21 10 0.48 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD2 23 0.48 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD3 23 0.48 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:34:LEU:HA 27 0.48 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:34:LEU:HA 27 0.48 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HA 27 0.48 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HA 27 0.48 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HD11 2 0.47 (1,468) 1:A:47:ILE:HA 1:A:48:LEU:HD11 2 0.47 (1,468) 1:A:47:ILE:HA 1:A:48:LEU:HD12 2 0.47 (1,468) 1:A:47:ILE:HA 1:A:48:LEU:HD13 2 0.47 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD11 1:A:65:THR:HA 11 0.47 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD12 1:A:65:THR:HA 11 0.47 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD13 1:A:65:THR:HA 11 0.47 (1,1309) 1:A:71:GLU:HG2 1:A:72:MET:H 24 0.47 (1,1302) 1:A:64:LEU:HB3 1:A:31:LEU:HB3 13 0.47 (1,1271) 1:A:62:ARG:HA 1:A:58:ILE:HG12 11 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:34:LEU:HA 17 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:34:LEU:HA 20 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:34:LEU:HA 20 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HA 20 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:34:LEU:HA 20 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:34:LEU:HA 20 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:34:LEU:HA 20 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HA 20 0.46 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD2 1 0.46 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:5	(1,177)	1:A:22:LEU:HD13	1:A:24:GLY:HA2	27	0.48
(1,1642) 1:A:9:LEU:HD13 1:A:6:GLN:HE21 10 0.48 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD2 23 0.48 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD3 23 0.48 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:34:LEU:HA 27 0.48 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:34:LEU:HA 27 0.48 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HA 27 0.48 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HA 27 0.48 (1,468) 1:A:47:ILE:HA 1:A:48:LEU:HD11 2 0.47 (1,468) 1:A:47:ILE:HA 1:A:48:LEU:HD12 2 0.47 (1,468) 1:A:66:LEU:HD1 1:A:65:THR:HA 11 0.47 (1,468) 1:A:66:LEU:HD12 1:A:65:THR:HA 11 0.47 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD13 1:A:65:THR:HA 11 0.47 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD13 1:A:65:THR:HA 11 0.47 (1,1302) 1:A:64:LEU:HB3 1:A:72:	(1,1642)	1:A:9:LEU:HD11	1:A:6:GLN:HE21	10	0.48
(1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD2 23 0.48 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD3 23 0.48 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:34:LEU:HA 27 0.48 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:34:LEU:HA 27 0.48 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HA 27 0.48 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HA 27 0.48 (1,468) 1:A:47:ILE:HA 1:A:48:LEU:HD11 2 0.47 (1,468) 1:A:47:ILE:HA 1:A:48:LEU:HD12 2 0.47 (1,468) 1:A:47:ILE:HA 1:A:48:LEU:HD13 2 0.47 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD11 1:A:65:THR:HA 11 0.47 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD12 1:A:65:THR:HA 11 0.47 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD13 1:A:65:THR:HA 11 0.47 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD3 1:A:65:THR:HA 11 0.47 (1,1302) 1:A:71:GLU:HG2 1:A:72:MET:H 24 0.47 (1,1302) 1:A:64:LEU:HB3 1:A:31:LEU:HB3 13 0.47 (1,1271) 1:A:62:ARG:HA 1:A:58:ILE:HG12 11 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:34:LEU:HA 17 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:34:LEU:HA 17 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HA 17 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HA 17 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:34:LEU:HA 20 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HA 20 0.46 (1,1618) 1:A:55:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD3 1 0.46 (1,1618) 1:A:55:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD3 1 0.46 (1,1618) 1:A:56:LEU:HD11 1:A:59:ARG:HD3 1 0.46	(1,1642)	1:A:9:LEU:HD12	1:A:6:GLN:HE21	10	0.48
(1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD3 23 0.48 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:34:LEU:HA 27 0.48 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:34:LEU:HA 27 0.48 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HA 27 0.48 (1,468) 1:A:47:ILE:HA 1:A:48:LEU:HD11 2 0.47 (1,468) 1:A:47:ILE:HA 1:A:48:LEU:HD12 2 0.47 (1,468) 1:A:47:ILE:HA 1:A:48:LEU:HD13 2 0.47 (1,468) 1:A:47:ILE:HA 1:A:48:LEU:HD13 2 0.47 (1,468) 1:A:47:ILE:HA 1:A:65:THR:HA 11 0.47 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD12 1:A:65:THR:HA 11 0.47 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD13 1:A:65:THR:HA 11 0.47 (1,1369) 1:A:71:GLU:HG2 1:A:72:MET:H 24 0.47 (1,1302) 1:A:64:LEU:HB3 1:A:33:IEU:HB3 13 0.47 (1,1271) 1:A:62:ARG:HA 1:A:62:ARG:HB3<	(1,1642)	1:A:9:LEU:HD13	1:A:6:GLN:HE21	10	0.48
(1,1019) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:34:LEU:HA 27 0.48 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:34:LEU:HA 27 0.48 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HA 27 0.48 (1,468) 1:A:47:ILE:HA 1:A:48:LEU:HD11 2 0.47 (1,468) 1:A:47:ILE:HA 1:A:48:LEU:HD12 2 0.47 (1,468) 1:A:47:ILE:HA 1:A:48:LEU:HD13 2 0.47 (1,468) 1:A:47:ILE:HA 1:A:48:LEU:HD13 2 0.47 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD11 1:A:65:THR:HA 11 0.47 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD12 1:A:65:THR:HA 11 0.47 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD13 1:A:65:THR:HA 11 0.47 (1,1369) 1:A:71:GLU:HG2 1:A:72:MET:H 24 0.47 (1,1302) 1:A:64:LEU:HB3 1:A:31:LEU:HB3 13 0.47 (1,1271) 1:A:62:ARG:HA 1:A:62:ARG:HB3 7 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:34:LEU:HA	(1,1618)	1:A:58:ILE:HG12	1:A:59:ARG:HD2	23	0.48
(1,1019) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:34:LEU:HA 27 0.48 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HA 27 0.48 (1,468) 1:A:47:ILE:HA 1:A:48:LEU:HD11 2 0.47 (1,468) 1:A:47:ILE:HA 1:A:48:LEU:HD12 2 0.47 (1,468) 1:A:47:ILE:HA 1:A:48:LEU:HD13 2 0.47 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD11 1:A:65:THR:HA 11 0.47 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD13 1:A:65:THR:HA 11 0.47 (1,1369) 1:A:71:GLU:HG2 1:A:72:MET:H 24 0.47 (1,1302) 1:A:64:LEU:HB3 1:A:31:LEU:HB3 13 0.47 (1,1271) 1:A:62:ARG:HA 1:A:58:ILE:HG12 11 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:34:LEU:HA 17 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:34:LEU:HA 17 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HA 20 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LE	(1,1618)	1:A:58:ILE:HG12	1:A:59:ARG:HD3	23	0.48
(1,1019) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:34:LEU:HA 27 0.48 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HA 27 0.48 (1,468) 1:A:47:ILE:HA 1:A:48:LEU:HD11 2 0.47 (1,468) 1:A:47:ILE:HA 1:A:48:LEU:HD12 2 0.47 (1,468) 1:A:47:ILE:HA 1:A:48:LEU:HD13 2 0.47 (1,468) 1:A:66:LEU:HD11 1:A:65:THR:HA 11 0.47 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD12 1:A:65:THR:HA 11 0.47 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD13 1:A:65:THR:HA 11 0.47 (1,1369) 1:A:71:GLU:HG2 1:A:72:MET:H 24 0.47 (1,1302) 1:A:64:LEU:HB3 1:A:31:LEU:HB3 13 0.47 (1,1271) 1:A:62:ARG:HA 1:A:58:ILE:HG12 11 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:34:LEU:HA 17 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HA 17 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU	(1,1019)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:34:LEU:HA	27	0.48
(1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HA 27 0.48 (1,468) 1:A:47:ILE:HA 1:A:48:LEU:HD11 2 0.47 (1,468) 1:A:47:ILE:HA 1:A:48:LEU:HD12 2 0.47 (1,468) 1:A:47:ILE:HA 1:A:48:LEU:HD13 2 0.47 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD11 1:A:65:THR:HA 11 0.47 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD13 1:A:65:THR:HA 11 0.47 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD13 1:A:65:THR:HA 11 0.47 (1,1369) 1:A:71:GLU:HG2 1:A:72:MET:H 24 0.47 (1,1302) 1:A:64:LEU:HB3 1:A:31:LEU:HB3 13 0.47 (1,1271) 1:A:62:ARG:HA 1:A:58:ILE:HG12 11 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:34:LEU:HA 17 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:34:LEU:HA 17 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HA 20 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LE	· · /	1:A:34:LEU:HD22	1:A:34:LEU:HA	27	0.48
(1,468) 1:A:47:ILE:HA 1:A:48:LEU:HD11 2 0.47 (1,468) 1:A:47:ILE:HA 1:A:48:LEU:HD12 2 0.47 (1,468) 1:A:47:ILE:HA 1:A:48:LEU:HD13 2 0.47 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD11 1:A:65:THR:HA 11 0.47 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD13 1:A:65:THR:HA 11 0.47 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD13 1:A:65:THR:HA 11 0.47 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD13 1:A:65:THR:HA 11 0.47 (1,1369) 1:A:71:GLU:HG2 1:A:72:MET:H 24 0.47 (1,1302) 1:A:64:LEU:HB3 1:A:31:LEU:HB3 13 0.47 (1,1271) 1:A:62:ARG:HA 1:A:58:ILE:HG12 11 0.47 (1,1271) 1:A:62:ARG:HA 1:A:62:ARG:HB3 7 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:34:LEU:HA 17 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:34:LEU:HA 17 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:		1:A:34:LEU:HD23	1:A:34:LEU:HA	27	0.48
(1,468) 1:A:47:ILE:HA 1:A:48:LEU:HD12 2 0.47 (1,468) 1:A:47:ILE:HA 1:A:48:LEU:HD13 2 0.47 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD11 1:A:65:THR:HA 11 0.47 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD12 1:A:65:THR:HA 11 0.47 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD13 1:A:65:THR:HA 11 0.47 (1,1369) 1:A:71:GLU:HG2 1:A:72:MET:H 24 0.47 (1,1302) 1:A:64:LEU:HB3 1:A:31:LEU:HB3 13 0.47 (1,1271) 1:A:62:ARG:HA 1:A:58:ILE:HG12 11 0.47 (1,1248) 1:A:61:VAL:HA 1:A:62:ARG:HB3 7 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:34:LEU:HA 17 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:34:LEU:HA 17 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HA 20 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HA 20 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LE	· · /	1:A:47:ILE:HA	1:A:48:LEU:HD11	2	0.47
(1,468) 1:A:47:ILE:HA 1:A:48:LEU:HD13 2 0.47 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD11 1:A:65:THR:HA 11 0.47 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD12 1:A:65:THR:HA 11 0.47 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD13 1:A:65:THR:HA 11 0.47 (1,1369) 1:A:71:GLU:HG2 1:A:72:MET:H 24 0.47 (1,1302) 1:A:64:LEU:HB3 1:A:31:LEU:HB3 13 0.47 (1,1271) 1:A:62:ARG:HA 1:A:58:ILE:HG12 11 0.47 (1,1248) 1:A:61:VAL:HA 1:A:62:ARG:HB3 7 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:34:LEU:HA 17 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:34:LEU:HA 17 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HA 20 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:34:LEU:HA 20 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HA 29 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD24 1:A:34:		1:A:47:ILE:HA	1:A:48:LEU:HD12	2	0.47
(1,1576) 1:A:66:LEU:HD12 1:A:65:THR:HA 11 0.47 (1,1576) 1:A:66:LEU:HD13 1:A:65:THR:HA 11 0.47 (1,1369) 1:A:71:GLU:HG2 1:A:72:MET:H 24 0.47 (1,1302) 1:A:64:LEU:HB3 1:A:31:LEU:HB3 13 0.47 (1,1271) 1:A:62:ARG:HA 1:A:58:ILE:HG12 11 0.47 (1,1248) 1:A:61:VAL:HA 1:A:62:ARG:HB3 7 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:34:LEU:HA 17 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:34:LEU:HA 17 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HA 20 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:34:LEU:HA 20 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HA 20 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HA 29 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD24 1:A:34:LEU:HA 29 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD25 1:A:3	· '	1:A:47:ILE:HA	1:A:48:LEU:HD13	2	0.47
(1,1576) 1:A:66:LEU:HD13 1:A:65:THR:HA 11 0.47 (1,1369) 1:A:71:GLU:HG2 1:A:72:MET:H 24 0.47 (1,1302) 1:A:64:LEU:HB3 1:A:31:LEU:HB3 13 0.47 (1,1271) 1:A:62:ARG:HA 1:A:58:ILE:HG12 11 0.47 (1,1248) 1:A:61:VAL:HA 1:A:62:ARG:HB3 7 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:34:LEU:HA 17 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:34:LEU:HA 17 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HA 20 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:34:LEU:HA 20 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:34:LEU:HA 20 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HA 20 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:34:LEU:HA 29 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:34:LEU:HA 29 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD24 1:A:3	(1,1576)	1:A:66:LEU:HD11	1:A:65:THR:HA	11	0.47
(1,1369) 1:A:71:GLU:HG2 1:A:72:MET:H 24 0.47 (1,1302) 1:A:64:LEU:HB3 1:A:31:LEU:HB3 13 0.47 (1,1271) 1:A:62:ARG:HA 1:A:58:ILE:HG12 11 0.47 (1,1248) 1:A:61:VAL:HA 1:A:62:ARG:HB3 7 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:34:LEU:HA 17 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:34:LEU:HA 17 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HA 17 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:34:LEU:HA 20 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:34:LEU:HA 20 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HA 20 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:34:LEU:HA 29 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HA 29 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:36:GLN:HE21 1 0.46 (1,1638) 1:A:55:HIS:HB3 1:A:5	(1,1576)	1:A:66:LEU:HD12	1:A:65:THR:HA	11	0.47
(1,1302) 1:A:64:LEU:HB3 1:A:31:LEU:HB3 13 0.47 (1,1271) 1:A:62:ARG:HA 1:A:58:ILE:HG12 11 0.47 (1,1248) 1:A:61:VAL:HA 1:A:62:ARG:HB3 7 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:34:LEU:HA 17 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:34:LEU:HA 17 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HA 20 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:34:LEU:HA 20 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HA 20 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HA 29 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:34:LEU:HA 29 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HA 29 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HA 29 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HA 29 0.47 (1,1019) 1:A:35:HB3 1:A:59:A	(1,1576)	1:A:66:LEU:HD13	1:A:65:THR:HA	11	0.47
(1,1271) 1:A:62:ARG:HA 1:A:58:ILE:HG12 11 0.47 (1,1248) 1:A:61:VAL:HA 1:A:62:ARG:HB3 7 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:34:LEU:HA 17 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:34:LEU:HA 17 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HA 20 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:34:LEU:HA 20 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HA 20 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HA 29 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:34:LEU:HA 29 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HA 29 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HA 29 0.47 (1,1019) 1:A:52:HIS:HB3 1:A:66:GLN:HE21 1 0.46 (1,1638) 1:A:57:PRO:HB3 1:A:59:ARG:HD2 1 0.46 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:	(1,1369)	1:A:71:GLU:HG2	1:A:72:MET:H	24	0.47
(1,1248) 1:A:61:VAL:HA 1:A:62:ARG:HB3 7 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:34:LEU:HA 17 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:34:LEU:HA 17 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HA 20 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:34:LEU:HA 20 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:34:LEU:HA 20 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HA 29 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:34:LEU:HA 29 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HA 29 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HA 29 0.47 (1,1618) 1:A:52:HIS:HB3 1:A:6:GLN:HE21 1 0.46 (1,1638) 1:A:57:PRO:HB3 1:A:59:ARG:HB2 12 0.46 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD3 1 0.46 (1,1575) 1:A:66:LEU:HD11 1:A:	(1,1302)	1:A:64:LEU:HB3	1:A:31:LEU:HB3	13	0.47
(1,1019) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:34:LEU:HA 17 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:34:LEU:HA 17 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HA 17 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:34:LEU:HA 20 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:34:LEU:HA 20 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HA 20 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:34:LEU:HA 29 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:34:LEU:HA 29 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HA 29 0.47 (1,778) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:6:GLN:HE21 1 0.46 (1,1638) 1:A:57:PRO:HB3 1:A:6:GLN:HE21 1 0.46 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD2 1 0.46 (1,1575) 1:A:66:LEU:HD11 1:A:13:VAL:H 30 0.46	(1,1271)	1:A:62:ARG:HA	1:A:58:ILE:HG12	11	0.47
(1,1019) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:34:LEU:HA 17 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HA 17 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:34:LEU:HA 20 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:34:LEU:HA 20 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HA 29 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:34:LEU:HA 29 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:34:LEU:HA 29 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HA 29 0.47 (1,778) 1:A:52:HIS:HB3 1:A:6:GLN:HE21 1 0.46 (1,1638) 1:A:57:PRO:HB3 1:A:59:ARG:HB2 12 0.46 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD3 1 0.46 (1,1575) 1:A:66:LEU:HD11 1:A:13:VAL:H 30 0.46	(1,1248)	1:A:61:VAL:HA	1:A:62:ARG:HB3	7	0.47
(1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HA 17 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:34:LEU:HA 20 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:34:LEU:HA 20 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HA 29 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:34:LEU:HA 29 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:34:LEU:HA 29 0.47 (1,7019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HA 29 0.47 (1,778) 1:A:52:HIS:HB3 1:A:6:GLN:HE21 1 0.46 (1,1638) 1:A:57:PRO:HB3 1:A:59:ARG:HB2 12 0.46 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD3 1 0.46 (1,1575) 1:A:66:LEU:HD11 1:A:13:VAL:H 30 0.46	(1,1019)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:34:LEU:HA	17	0.47
(1,1019) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:34:LEU:HA 20 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:34:LEU:HA 20 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HA 20 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:34:LEU:HA 29 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:34:LEU:HA 29 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HA 29 0.47 (1,778) 1:A:52:HIS:HB3 1:A:6:GLN:HE21 1 0.46 (1,1638) 1:A:57:PRO:HB3 1:A:59:ARG:HB2 12 0.46 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD3 1 0.46 (1,1575) 1:A:66:LEU:HD11 1:A:13:VAL:H 30 0.46	(1,1019)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:34:LEU:HA	17	0.47
(1,1019) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:34:LEU:HA 20 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HA 20 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:34:LEU:HA 29 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:34:LEU:HA 29 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HA 29 0.47 (1,778) 1:A:52:HIS:HB3 1:A:6:GLN:HE21 1 0.46 (1,1638) 1:A:57:PRO:HB3 1:A:59:ARG:HB2 12 0.46 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD2 1 0.46 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD3 1 0.46 (1,1575) 1:A:66:LEU:HD11 1:A:13:VAL:H 30 0.46	(1,1019)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:34:LEU:HA	17	0.47
(1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HA 20 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:34:LEU:HA 29 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:34:LEU:HA 29 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HA 29 0.47 (1,778) 1:A:52:HIS:HB3 1:A:6:GLN:HE21 1 0.46 (1,1638) 1:A:57:PRO:HB3 1:A:59:ARG:HB2 12 0.46 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD2 1 0.46 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD3 1 0.46 (1,1575) 1:A:66:LEU:HD11 1:A:13:VAL:H 30 0.46	(1,1019)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:34:LEU:HA	20	0.47
(1,1019) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:34:LEU:HA 29 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:34:LEU:HA 29 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HA 29 0.47 (1,778) 1:A:52:HIS:HB3 1:A:6:GLN:HE21 1 0.46 (1,1638) 1:A:57:PRO:HB3 1:A:59:ARG:HB2 12 0.46 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD2 1 0.46 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD3 1 0.46 (1,1575) 1:A:66:LEU:HD11 1:A:13:VAL:H 30 0.46	(1,1019)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:34:LEU:HA	20	0.47
(1,1019) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:34:LEU:HA 29 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:34:LEU:HA 29 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HA 29 0.47 (1,778) 1:A:52:HIS:HB3 1:A:6:GLN:HE21 1 0.46 (1,1638) 1:A:57:PRO:HB3 1:A:59:ARG:HB2 12 0.46 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD2 1 0.46 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD3 1 0.46 (1,1575) 1:A:66:LEU:HD11 1:A:13:VAL:H 30 0.46	· · /	1:A:34:LEU:HD23	1:A:34:LEU:HA	20	0.47
(1,1019) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:34:LEU:HA 29 0.47 (1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HA 29 0.47 (1,778) 1:A:52:HIS:HB3 1:A:6:GLN:HE21 1 0.46 (1,1638) 1:A:57:PRO:HB3 1:A:59:ARG:HB2 12 0.46 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD2 1 0.46 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD3 1 0.46 (1,1575) 1:A:66:LEU:HD11 1:A:13:VAL:H 30 0.46	· · /	1:A:34:LEU:HD21	1:A:34:LEU:HA	29	0.47
(1,1019) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HA 29 0.47 (1,778) 1:A:52:HIS:HB3 1:A:6:GLN:HE21 1 0.46 (1,1638) 1:A:57:PRO:HB3 1:A:59:ARG:HB2 12 0.46 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD2 1 0.46 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD3 1 0.46 (1,1575) 1:A:66:LEU:HD11 1:A:13:VAL:H 30 0.46		1:A:34:LEU:HD22	1:A:34:LEU:HA	29	0.47
(1,778) 1:A:52:HIS:HB3 1:A:6:GLN:HE21 1 0.46 (1,1638) 1:A:57:PRO:HB3 1:A:59:ARG:HB2 12 0.46 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD2 1 0.46 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD3 1 0.46 (1,1575) 1:A:66:LEU:HD11 1:A:13:VAL:H 30 0.46	· · /	1:A:34:LEU:HD23	1:A:34:LEU:HA	29	0.47
(1,1638) 1:A:57:PRO:HB3 1:A:59:ARG:HB2 12 0.46 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD2 1 0.46 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD3 1 0.46 (1,1575) 1:A:66:LEU:HD11 1:A:13:VAL:H 30 0.46		1:A:52:HIS:HB3	1:A:6:GLN:HE21	1	0.46
(1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD2 1 0.46 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD3 1 0.46 (1,1575) 1:A:66:LEU:HD11 1:A:13:VAL:H 30 0.46		1:A:57:PRO:HB3	1:A:59:ARG:HB2	12	0.46
(1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD3 1 0.46 (1,1575) 1:A:66:LEU:HD11 1:A:13:VAL:H 30 0.46		1:A:58:ILE:HG12	1:A:59:ARG:HD2	1	0.46
(1,1575) 1:A:66:LEU:HD11 1:A:13:VAL:H 30 0.46	/	1:A:58:ILE:HG12	1:A:59:ARG:HD3	1	0.46
	· · /	1:A:66:LEU:HD11	1:A:13:VAL:H	30	0.46
	(1,1575)				



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1575)	1:A:66:LEU:HD13	1:A:13:VAL:H	30	0.46
(1,1508)	1:A:72:MET:HG3	1:A:9:LEU:HD11	13	0.46
(1,1508)	1:A:72:MET:HG3	1:A:9:LEU:HD12	13	0.46
(1,1508)	1:A:72:MET:HG3	1:A:9:LEU:HD13	13	0.46
(1,972)	1:A:27:LEU:HD21	1:A:70:GLN:HE21	12	0.45
(1,972)	1:A:27:LEU:HD22	1:A:70:GLN:HE21	12	0.45
(1,972)	1:A:27:LEU:HD23	1:A:70:GLN:HE21	12	0.45
(1,798)	1:A:51:GLU:HG2	1:A:50:ARG:HG2	12	0.45
(1,798)	1:A:51:GLU:HG3	1:A:50:ARG:HG2	12	0.45
(1,60)	1:A:47:ILE:HG21	1:A:74:SER:HB2	16	0.45
(1,60)	1:A:47:ILE:HG22	1:A:74:SER:HB2	16	0.45
(1,60)	1:A:47:ILE:HG23	1:A:74:SER:HB2	16	0.45
(1,60)	1:A:58:ILE:HG21	1:A:31:LEU:HA	16	0.45
(1,60)	1:A:58:ILE:HG22	1:A:31:LEU:HA	16	0.45
(1,60)	1:A:58:ILE:HG23	1:A:31:LEU:HA	16	0.45
(1,394)	1:A:19:ILE:HG21	1:A:25:ILE:HG13	22	0.45
(1,394)	1:A:19:ILE:HG22	1:A:25:ILE:HG13	22	0.45
(1,394)	1:A:19:ILE:HG23	1:A:25:ILE:HG13	22	0.45
(1,1592)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:30:SER:H	26	0.45
(1,1592)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:30:SER:H	26	0.45
(1,1592)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:30:SER:H	26	0.45
(1,1126)	1:A:48:LEU:HD11	1:A:52:HIS:H	22	0.45
(1,1126)	1:A:48:LEU:HD12	1:A:52:HIS:H	22	0.45
(1,1126)	1:A:48:LEU:HD13	1:A:52:HIS:H	22	0.45
(1,1123)	1:A:48:LEU:HD11	1:A:52:HIS:HB2	18	0.45
(1,1123)	1:A:48:LEU:HD12	1:A:52:HIS:HB2	18	0.45
(1,1123)	1:A:48:LEU:HD13	1:A:52:HIS:HB2	18	0.45
(1,1020)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:33:ASP:HB2	18	0.45
(1,1020)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:33:ASP:HB2	18	0.45
(1,1020)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:33:ASP:HB2	18	0.45
(1,72)	1:A:48:LEU:HD11	1:A:6:GLN:HE21	18	0.44
(1,72)	1:A:48:LEU:HD12	1:A:6:GLN:HE21	18	0.44
(1,72)	1:A:48:LEU:HD13	1:A:6:GLN:HE21	18	0.44
(1,72)	1:A:9:LEU:HD21	1:A:6:GLN:HE21	18	0.44
(1,72)	1:A:9:LEU:HD22	1:A:6:GLN:HE21	18	0.44
(1,72)	1:A:9:LEU:HD23	1:A:6:GLN:HE21	18	0.44
(1,593)	1:A:66:LEU:HD11	1:A:66:LEU:HA	30	0.44
(1,593)	1:A:66:LEU:HD12	1:A:66:LEU:HA	30	0.44
(1,593)	1:A:66:LEU:HD13	1:A:66:LEU:HA	30	0.44
(1,394)	1:A:19:ILE:HG21	1:A:25:ILE:HG13	24	0.44
(1,394)	1:A:19:ILE:HG22	1:A:25:ILE:HG13	24	0.44
(1,394)	1:A:19:ILE:HG23	1:A:25:ILE:HG13	24	0.44



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,316)	1:A:40:MET:HB2	1:A:39:LEU:HD21	24	0.44
(1,316)	1:A:40:MET:HB2	1:A:39:LEU:HD22	24	0.44
(1,316)	1:A:40:MET:HB2	1:A:39:LEU:HD23	24	0.44
(1,316)	1:A:40:MET:HB2	1:A:39:LEU:HD21	27	0.44
(1,316)	1:A:40:MET:HB2	1:A:39:LEU:HD22	27	0.44
(1,316)	1:A:40:MET:HB2	1:A:39:LEU:HD23	27	0.44
(1,1554)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:26:ASN:HB3	5	0.44
(1,1554)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:26:ASN:HB3	5	0.44
(1,1554)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:26:ASN:HB3	5	0.44
(1,1221)	1:A:58:ILE:HG21	1:A:57:PRO:HB3	14	0.44
(1,1221)	1:A:58:ILE:HG22	1:A:57:PRO:HB3	14	0.44
(1,1221)	1:A:58:ILE:HG23	1:A:57:PRO:HB3	14	0.44
(1,1020)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:33:ASP:HB2	16	0.44
(1,1020)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:33:ASP:HB2	16	0.44
(1,1020)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:33:ASP:HB2	16	0.44
(1,1019)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:34:LEU:HA	3	0.44
(1,1019)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:34:LEU:HA	3	0.44
(1,1019)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:34:LEU:HA	3	0.44
(1,1008)	1:A:34:LEU:HD11	1:A:31:LEU:HA	5	0.44
(1,1008)	1:A:34:LEU:HD12	1:A:31:LEU:HA	5	0.44
(1,1008)	1:A:34:LEU:HD13	1:A:31:LEU:HA	5	0.44
(1,1006)	1:A:33:ASP:HB2	1:A:30:SER:H	27	0.44
(1,972)	1:A:27:LEU:HD21	1:A:70:GLN:HE21	30	0.43
(1,972)	1:A:27:LEU:HD22	1:A:70:GLN:HE21	30	0.43
(1,972)	1:A:27:LEU:HD23	1:A:70:GLN:HE21	30	0.43
(1,847)	1:A:8:ASP:HB2	1:A:11:LYS:HD2	25	0.43
(1,847)	1:A:8:ASP:HB2	1:A:11:LYS:HD3	25	0.43
(1,1554)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:26:ASN:HB3	3	0.43
(1,1554)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:26:ASN:HB3	3	0.43
(1,1554)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:26:ASN:HB3	3	0.43
(1,1099)	1:A:40:MET:HG3	1:A:39:LEU:HD21	27	0.43
(1,1099)	1:A:40:MET:HG3	1:A:39:LEU:HD22	27	0.43
(1,1099)	1:A:40:MET:HG3	1:A:39:LEU:HD23	27	0.43
(1,1019)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:34:LEU:HA	19	0.43
(1,1019)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:34:LEU:HA	19	0.43
(1,1019)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:34:LEU:HA	19	0.43
(1,1019)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:34:LEU:HA	26	0.43
(1,1019)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:34:LEU:HA	26	0.43
(1,1019)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:34:LEU:HA	26	0.43
(1,739)	1:A:70:GLN:HA	1:A:71:GLU:HB2	15	0.42
(1,593)	1:A:66:LEU:HD11	1:A:66:LEU:HA	18	0.42
(1,593)	1:A:66:LEU:HD12	1:A:66:LEU:HA	18	0.42



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,593)	1:A:66:LEU:HD13	1:A:66:LEU:HA	18	0.42
(1,296)	1:A:17:LEU:HD11	1:A:19:ILE:HG13	7	0.42
(1,296)	1:A:17:LEU:HD12	1:A:19:ILE:HG13	7	0.42
(1,296)	1:A:17:LEU:HD13	1:A:19:ILE:HG13	7	0.42
(1,1618)	1:A:58:ILE:HG12	1:A:59:ARG:HD2	22	0.42
(1,1618)	1:A:58:ILE:HG12	1:A:59:ARG:HD3	22	0.42
(1,1369)	1:A:71:GLU:HG2	1:A:72:MET:H	25	0.42
(1,1100)	1:A:40:MET:HG2	1:A:39:LEU:HD21	24	0.42
(1,1100)	1:A:40:MET:HG2	1:A:39:LEU:HD22	24	0.42
(1,1100)	1:A:40:MET:HG2	1:A:39:LEU:HD23	24	0.42
(1,972)	1:A:27:LEU:HD21	1:A:70:GLN:HE21	24	0.41
(1,972)	1:A:27:LEU:HD22	1:A:70:GLN:HE21	24	0.41
(1,972)	1:A:27:LEU:HD23	1:A:70:GLN:HE21	24	0.41
(1,798)	1:A:51:GLU:HG2	1:A:50:ARG:HG2	25	0.41
(1,798)	1:A:51:GLU:HG3	1:A:50:ARG:HG2	25	0.41
(1,475)	1:A:22:LEU:HD21	1:A:20:ARG:HB2	7	0.41
(1,475)	1:A:22:LEU:HD22	1:A:20:ARG:HB2	7	0.41
(1,475)	1:A:22:LEU:HD23	1:A:20:ARG:HB2	7	0.41
(1,222)	1:A:31:LEU:HB3	1:A:36:LEU:HD21	5	0.41
(1,222)	1:A:31:LEU:HB3	1:A:36:LEU:HD22	5	0.41
(1,222)	1:A:31:LEU:HB3	1:A:36:LEU:HD23	5	0.41
(1,1592)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:30:SER:H	29	0.41
(1,1592)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:30:SER:H	29	0.41
(1,1592)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:30:SER:H	29	0.41
(1,1491)	1:A:42:VAL:HG21	1:A:46:GLN:HG2	12	0.41
(1,1491)	1:A:42:VAL:HG22	1:A:46:GLN:HG2	12	0.41
(1,1491)	1:A:42:VAL:HG23	1:A:46:GLN:HG2	12	0.41
(1,1491)	1:A:42:VAL:HG21	1:A:46:GLN:HG2	22	0.41
(1,1491)	1:A:42:VAL:HG22	1:A:46:GLN:HG2	22	0.41
(1,1491)	1:A:42:VAL:HG23	1:A:46:GLN:HG2	22	0.41
(1,1271)	1:A:62:ARG:HA	1:A:58:ILE:HG12	26	0.41
(1,1241)	1:A:60:GLU:HB2	1:A:61:VAL:HG21	2	0.41
(1,1241)	1:A:60:GLU:HB2	1:A:61:VAL:HG22	2	0.41
(1,1241)	1:A:60:GLU:HB2	1:A:61:VAL:HG23	2	0.41
(1,1126)	1:A:48:LEU:HD11	1:A:52:HIS:H	18	0.41
(1,1126)	1:A:48:LEU:HD12	1:A:52:HIS:H	18	0.41
(1,1126)	1:A:48:LEU:HD13	1:A:52:HIS:H	18	0.41
(1,1107)	1:A:48:LEU:HA	1:A:52:HIS:HB2	1	0.41
(1,1028)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:33:ASP:H	27	0.41
(1,1028)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:33:ASP:H	27	0.41
(1,1028)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:33:ASP:H	27	0.41
(1,787)	1:A:51:GLU:HB3	1:A:6:GLN:HE21	5	0.4



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,460)	1:A:47:ILE:HG13	1:A:48:LEU:HD11	18	0.4
(1,460)	1:A:47:ILE:HG13	1:A:48:LEU:HD12	18	0.4
(1,460)	1:A:47:ILE:HG13	1:A:48:LEU:HD13	18	0.4
(1,1584)	1:A:59:ARG:HG3	1:A:58:ILE:H	20	0.4
(1,1491)	1:A:42:VAL:HG21	1:A:46:GLN:HG2	2	0.4
(1,1491)	1:A:42:VAL:HG22	1:A:46:GLN:HG2	2	0.4
(1,1491)	1:A:42:VAL:HG23	1:A:46:GLN:HG2	2	0.4
(1,1028)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:33:ASP:H	3	0.4
(1,1028)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:33:ASP:H	3	0.4
(1,1028)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:33:ASP:H	3	0.4
(1,1019)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:34:LEU:HA	28	0.4
(1,1019)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:34:LEU:HA	28	0.4
(1,1019)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:34:LEU:HA	28	0.4
(1,972)	1:A:27:LEU:HD21	1:A:70:GLN:HE21	27	0.39
(1,972)	1:A:27:LEU:HD22	1:A:70:GLN:HE21	27	0.39
(1,972)	1:A:27:LEU:HD23	1:A:70:GLN:HE21	27	0.39
(1,896)	1:A:47:ILE:HG21	1:A:6:GLN:HE21	12	0.39
(1,896)	1:A:47:ILE:HG22	1:A:6:GLN:HE21	12	0.39
(1,896)	1:A:47:ILE:HG23	1:A:6:GLN:HE21	12	0.39
(1,593)	1:A:66:LEU:HD11	1:A:66:LEU:HA	11	0.39
(1,593)	1:A:66:LEU:HD12	1:A:66:LEU:HA	11	0.39
(1,593)	1:A:66:LEU:HD13	1:A:66:LEU:HA	11	0.39
(1,1592)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:30:SER:H	17	0.39
(1,1592)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:30:SER:H	17	0.39
(1,1592)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:30:SER:H	17	0.39
(1,1548)	1:A:19:ILE:HG21	1:A:21:ASP:HB2	22	0.39
(1,1548)	1:A:19:ILE:HG22	1:A:21:ASP:HB2	22	0.39
(1,1548)	1:A:19:ILE:HG23	1:A:21:ASP:HB2	22	0.39
(1,1491)	1:A:42:VAL:HG21	1:A:46:GLN:HG2	6	0.39
(1,1491)	1:A:42:VAL:HG22	1:A:46:GLN:HG2	6	0.39
(1,1491)	1:A:42:VAL:HG23	1:A:46:GLN:HG2	6	0.39
(1,1303)	1:A:64:LEU:HB2	1:A:31:LEU:HB3	7	0.39
(1,1302)	1:A:64:LEU:HB3	1:A:31:LEU:HB3	30	0.39
(1,1179)	1:A:55:VAL:HG11	1:A:56:LEU:HB3	1	0.39
(1,1179)	1:A:55:VAL:HG12	1:A:56:LEU:HB3	1	0.39
(1,1179)	1:A:55:VAL:HG13	1:A:56:LEU:HB3	1	0.39
(1,116)	1:A:55:VAL:HG21	1:A:54:LEU:HB3	1	0.39
(1,116)	1:A:55:VAL:HG22	1:A:54:LEU:HB3	1	0.39
(1,116)	1:A:55:VAL:HG23	1:A:54:LEU:HB3	1	0.39
(1,32)	1:A:27:LEU:HD11	1:A:70:GLN:HE21	12	0.38
(1,32)	1:A:27:LEU:HD12	1:A:70:GLN:HE21	12	0.38
(1,32)	1:A:27:LEU:HD13	1:A:70:GLN:HE21	12	0.38



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,32)	1:A:66:LEU:HD11	1:A:70:GLN:HE21	12	0.38
(1,32)	1:A:66:LEU:HD12	1:A:70:GLN:HE21	12	0.38
(1,32)	1:A:66:LEU:HD13	1:A:70:GLN:HE21	12	0.38
(1,1589)	1:A:20:ARG:HG3	1:A:67:ARG:HE	21	0.38
(1,1642)	1:A:9:LEU:HD11	1:A:6:GLN:HE21	28	0.37
(1,1642)	1:A:9:LEU:HD12	1:A:6:GLN:HE21	28	0.37
(1,1642)	1:A:9:LEU:HD13	1:A:6:GLN:HE21	28	0.37
(1,114)	1:A:55:VAL:HG11	1:A:57:PRO:HG3	1	0.37
(1,114)	1:A:55:VAL:HG12	1:A:57:PRO:HG3	1	0.37
(1,114)	1:A:55:VAL:HG13	1:A:57:PRO:HG3	1	0.37
(1,1638)	1:A:57:PRO:HB3	1:A:59:ARG:HB2	7	0.36
(1,1638)	1:A:57:PRO:HB3	1:A:59:ARG:HB2	24	0.36
(1,1008)	1:A:34:LEU:HD11	1:A:31:LEU:HA	28	0.36
(1,1008)	1:A:34:LEU:HD12	1:A:31:LEU:HA	28	0.36
(1,1008)	1:A:34:LEU:HD13	1:A:31:LEU:HA	28	0.36
(1,315)	1:A:40:MET:HB3	1:A:39:LEU:HD21	8	0.35
(1,315)	1:A:40:MET:HB3	1:A:39:LEU:HD22	8	0.35
(1,315)	1:A:40:MET:HB3	1:A:39:LEU:HD23	8	0.35
(1,177)	1:A:22:LEU:HD11	1:A:24:GLY:HA2	3	0.35
(1,177)	1:A:22:LEU:HD12	1:A:24:GLY:HA2	3	0.35
(1,177)	1:A:22:LEU:HD13	1:A:24:GLY:HA2	3	0.35
(1,1642)	1:A:9:LEU:HD11	1:A:6:GLN:HE21	1	0.35
(1,1642)	1:A:9:LEU:HD12	1:A:6:GLN:HE21	1	0.35
(1,1642)	1:A:9:LEU:HD13	1:A:6:GLN:HE21	1	0.35
(1,1638)	1:A:57:PRO:HB3	1:A:59:ARG:HB2	19	0.35
(1,1491)	1:A:42:VAL:HG21	1:A:46:GLN:HG2	16	0.35
(1,1491)	1:A:42:VAL:HG22	1:A:46:GLN:HG2	16	0.35
(1,1491)	1:A:42:VAL:HG23	1:A:46:GLN:HG2	16	0.35
(1,1369)	1:A:71:GLU:HG2	1:A:72:MET:H	19	0.35
(1,1303)	1:A:64:LEU:HB2	1:A:31:LEU:HB3	19	0.35
(1,1303)	1:A:64:LEU:HB2	1:A:31:LEU:HB3	22	0.35
(1,1302)	1:A:64:LEU:HB3	1:A:31:LEU:HB3	16	0.35
(1,1183)	1:A:56:LEU:HB2	1:A:57:PRO:HB2	14	0.35
(1,1183)	1:A:56:LEU:HB2	1:A:57:PRO:HG2	14	0.35
(1,994)	1:A:33:ASP:HA	1:A:34:LEU:HD21	27	0.34
(1,994)	1:A:33:ASP:HA	1:A:34:LEU:HD22	27	0.34
(1,994)	1:A:33:ASP:HA	1:A:34:LEU:HD23	27	0.34
(1,787)	1:A:51:GLU:HB3	1:A:6:GLN:HE21	3	0.34
(1,394)	1:A:19:ILE:HG21	1:A:25:ILE:HG13	7	0.34
(1,394)	1:A:19:ILE:HG22	1:A:25:ILE:HG13	7	0.34
(1,394)	1:A:19:ILE:HG23	1:A:25:ILE:HG13	7	0.34
(1,1369)	1:A:71:GLU:HG2	1:A:72:MET:H	10	0.34



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,845)	1:A:8:ASP:HB2	1:A:11:LYS:HB2	20	0.33
(1,845)	1:A:8:ASP:HB2	1:A:11:LYS:HB3	20	0.33
(1,502)	1:A:19:ILE:HD11	1:A:25:ILE:HG13	1	0.33
(1,502)	1:A:19:ILE:HD12	1:A:25:ILE:HG13	1	0.33
(1,502)	1:A:19:ILE:HD13	1:A:25:ILE:HG13	1	0.33
(1,1389)	1:A:12:ALA:HB1	1:A:9:LEU:HD21	13	0.33
(1,1389)	1:A:12:ALA:HB1	1:A:9:LEU:HD22	13	0.33
(1,1389)	1:A:12:ALA:HB1	1:A:9:LEU:HD23	13	0.33
(1,1389)	1:A:12:ALA:HB2	1:A:9:LEU:HD21	13	0.33
(1,1389)	1:A:12:ALA:HB2	1:A:9:LEU:HD22	13	0.33
(1,1389)	1:A:12:ALA:HB2	1:A:9:LEU:HD23	13	0.33
(1,1389)	1:A:12:ALA:HB3	1:A:9:LEU:HD21	13	0.33
(1,1389)	1:A:12:ALA:HB3	1:A:9:LEU:HD22	13	0.33
(1,1389)	1:A:12:ALA:HB3	1:A:9:LEU:HD23	13	0.33
(1,1369)	1:A:71:GLU:HG2	1:A:72:MET:H	28	0.33
(1,994)	1:A:33:ASP:HA	1:A:34:LEU:HD21	3	0.32
(1,994)	1:A:33:ASP:HA	1:A:34:LEU:HD22	3	0.32
(1,994)	1:A:33:ASP:HA	1:A:34:LEU:HD23	3	0.32
(1,778)	1:A:52:HIS:HB3	1:A:6:GLN:HE21	14	0.32
(1,668)	1:A:49:GLU:HG2	1:A:46:GLN:HA	18	0.32
(1,468)	1:A:47:ILE:HA	1:A:48:LEU:HD11	22	0.32
(1,468)	1:A:47:ILE:HA	1:A:48:LEU:HD12	22	0.32
(1,468)	1:A:47:ILE:HA	1:A:48:LEU:HD13	22	0.32
(1,460)	1:A:47:ILE:HG13	1:A:48:LEU:HD11	2	0.32
(1,460)	1:A:47:ILE:HG13	1:A:48:LEU:HD12	2	0.32
(1,460)	1:A:47:ILE:HG13	1:A:48:LEU:HD13	2	0.32
(1,1271)	1:A:62:ARG:HA	1:A:58:ILE:HG12	27	0.32
(1,1018)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:29:SER:HB2	13	0.32
(1,1018)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:29:SER:HB2	13	0.32
(1,1018)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:29:SER:HB2	13	0.32
(1,1018)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:29:SER:HB2	20	0.32
(1,1018)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:29:SER:HB2	20	0.32
(1,1018)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:29:SER:HB2	20	0.32
(1,54)	1:A:20:ARG:HG3	1:A:67:ARG:HD3	16	0.31
(1,54)	1:A:20:ARG:HG3	1:A:10:VAL:HA	16	0.31
(1,54)	1:A:7:ARG:HG2	1:A:10:VAL:HA	16	0.31
(1,54)	1:A:7:ARG:HG3	1:A:10:VAL:HA	16	0.31
(1,236)	1:A:31:LEU:HD11	1:A:66:LEU:H	13	0.31
(1,236)	1:A:31:LEU:HD12	1:A:66:LEU:H	13	0.31
(1,236)	1:A:31:LEU:HD13	1:A:66:LEU:H	13	0.31
(1,1618)	1:A:58:ILE:HG12	1:A:59:ARG:HD2	14	0.31
(1,1618)	1:A:58:ILE:HG12	1:A:59:ARG:HD3	14	0.31



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1369)	1:A:71:GLU:HG2	1:A:72:MET:H	21	0.31
(1,1220)	1:A:58:ILE:HG21	1:A:62:ARG:HD2	26	0.31
(1,1220)	1:A:58:ILE:HG22	1:A:62:ARG:HD2	26	0.31
(1,1220)	1:A:58:ILE:HG23	1:A:62:ARG:HD2	26	0.31
(1,1018)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:29:SER:HB2	14	0.31
(1,1018)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:29:SER:HB2	14	0.31
(1,1018)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:29:SER:HB2	14	0.31
(1,994)	1:A:33:ASP:HA	1:A:34:LEU:HD21	17	0.3
(1,994)	1:A:33:ASP:HA	1:A:34:LEU:HD22	17	0.3
(1,994)	1:A:33:ASP:HA	1:A:34:LEU:HD23	17	0.3
(1,845)	1:A:8:ASP:HB2	1:A:11:LYS:HB2	3	0.3
(1,845)	1:A:8:ASP:HB2	1:A:11:LYS:HB3	3	0.3
(1,60)	1:A:47:ILE:HG21	1:A:74:SER:HB2	14	0.3
(1,60)	1:A:47:ILE:HG22	1:A:74:SER:HB2	14	0.3
(1,60)	1:A:47:ILE:HG23	1:A:74:SER:HB2	14	0.3
(1,60)	1:A:58:ILE:HG21	1:A:31:LEU:HA	14	0.3
(1,60)	1:A:58:ILE:HG22	1:A:31:LEU:HA	14	0.3
(1,60)	1:A:58:ILE:HG23	1:A:31:LEU:HA	14	0.3
(1,475)	1:A:22:LEU:HD21	1:A:20:ARG:HB2	19	0.3
(1,475)	1:A:22:LEU:HD22	1:A:20:ARG:HB2	19	0.3
(1,475)	1:A:22:LEU:HD23	1:A:20:ARG:HB2	19	0.3
(1,469)	1:A:17:LEU:HD11	1:A:16:ILE:H	16	0.3
(1,469)	1:A:17:LEU:HD12	1:A:16:ILE:H	16	0.3
(1,469)	1:A:17:LEU:HD13	1:A:16:ILE:H	16	0.3
(1,1618)	1:A:58:ILE:HG12	1:A:59:ARG:HD2	9	0.3
(1,1618)	1:A:58:ILE:HG12	1:A:59:ARG:HD3	9	0.3
(1,1542)	1:A:44:VAL:HG21	1:A:40:MET:HB2	18	0.3
(1,1542)	1:A:44:VAL:HG22	1:A:40:MET:HB2	18	0.3
(1,1542)	1:A:44:VAL:HG23	1:A:40:MET:HB2	18	0.3
(1,1271)	1:A:62:ARG:HA	1:A:58:ILE:HG12	25	0.3
(1,1263)	1:A:61:VAL:HG11	1:A:62:ARG:HB3	22	0.3
(1,1263)	1:A:61:VAL:HG12	1:A:62:ARG:HB3	22	0.3
(1,1263)	1:A:61:VAL:HG13	1:A:62:ARG:HB3	22	0.3
(1,1018)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:29:SER:HB2	26	0.3
(1,1018)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:29:SER:HB2	26	0.3
(1,1018)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:29:SER:HB2	26	0.3
(1,668)	1:A:49:GLU:HG2	1:A:46:GLN:HA	29	0.29
(1,1263)	1:A:61:VAL:HG11	1:A:62:ARG:HB3	7	0.29
(1,1263)	1:A:61:VAL:HG12	1:A:62:ARG:HB3	7	0.29
(1,1263)	1:A:61:VAL:HG13	1:A:62:ARG:HB3	7	0.29
(1,1099)	1:A:40:MET:HG3	1:A:39:LEU:HD21	8	0.29
(1,1099)	1:A:40:MET:HG3	1:A:39:LEU:HD22	8	0.29



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1099)	1:A:40:MET:HG3	1:A:39:LEU:HD23	8	0.29
(1,1019)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:34:LEU:HA	5	0.29
(1,1019)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:34:LEU:HA	5	0.29
(1,1019)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:34:LEU:HA	5	0.29
(1,994)	1:A:33:ASP:HA	1:A:34:LEU:HD21	13	0.28
(1,994)	1:A:33:ASP:HA	1:A:34:LEU:HD22	13	0.28
(1,994)	1:A:33:ASP:HA	1:A:34:LEU:HD23	13	0.28
(1,994)	1:A:33:ASP:HA	1:A:34:LEU:HD21	14	0.28
(1,994)	1:A:33:ASP:HA	1:A:34:LEU:HD22	14	0.28
(1,994)	1:A:33:ASP:HA	1:A:34:LEU:HD23	14	0.28
(1,845)	1:A:8:ASP:HB2	1:A:11:LYS:HB2	30	0.28
(1,845)	1:A:8:ASP:HB2	1:A:11:LYS:HB3	30	0.28
(1,1491)	1:A:42:VAL:HG21	1:A:46:GLN:HG2	4	0.28
(1,1491)	1:A:42:VAL:HG22	1:A:46:GLN:HG2	4	0.28
(1,1491)	1:A:42:VAL:HG23	1:A:46:GLN:HG2	4	0.28
(1,1018)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:29:SER:HB2	24	0.28
(1,1018)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:29:SER:HB2	24	0.28
(1,1018)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:29:SER:HB2	24	0.28
(1,787)	1:A:51:GLU:HB3	1:A:6:GLN:HE21	26	0.27
(1,549)	1:A:72:MET:HB2	1:A:72:MET:H	18	0.27
(1,502)	1:A:19:ILE:HD11	1:A:25:ILE:HG13	24	0.27
(1,502)	1:A:19:ILE:HD12	1:A:25:ILE:HG13	24	0.27
(1,502)	1:A:19:ILE:HD13	1:A:25:ILE:HG13	24	0.27
(1,1584)	1:A:59:ARG:HG3	1:A:58:ILE:H	22	0.27
(1,1548)	1:A:19:ILE:HG21	1:A:21:ASP:HB2	25	0.27
(1,1548)	1:A:19:ILE:HG22	1:A:21:ASP:HB2	25	0.27
(1,1548)	1:A:19:ILE:HG23	1:A:21:ASP:HB2	25	0.27
(1,1540)	1:A:44:VAL:HG21	1:A:40:MET:HA	18	0.27
(1,1540)	1:A:44:VAL:HG22	1:A:40:MET:HA	18	0.27
(1,1540)	1:A:44:VAL:HG23	1:A:40:MET:HA	18	0.27
(1,1180)	1:A:55:VAL:HG21	1:A:53:ASP:HA	1	0.27
(1,1180)	1:A:55:VAL:HG22	1:A:53:ASP:HA	1	0.27
(1,1180)	1:A:55:VAL:HG23	1:A:53:ASP:HA	1	0.27
(1,994)	1:A:33:ASP:HA	1:A:34:LEU:HD21	24	0.26
(1,994)	1:A:33:ASP:HA	1:A:34:LEU:HD22	24	0.26
(1,994)	1:A:33:ASP:HA	1:A:34:LEU:HD23	24	0.26
(1,549)	1:A:72:MET:HB2	1:A:72:MET:H	6	0.26
(1,1643)	1:A:9:LEU:HD11	1:A:72:MET:H	13	0.26
(1,1643)	1:A:9:LEU:HD12	1:A:72:MET:H	13	0.26
(1,1643)	1:A:9:LEU:HD13	1:A:72:MET:H	13	0.26
(1,1584)	1:A:59:ARG:HG3	1:A:58:ILE:H	1	0.26
(1,1575)	1:A:66:LEU:HD11	1:A:13:VAL:H	11	0.26



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1575)	1:A:66:LEU:HD12	1:A:13:VAL:H	11	0.26
(1,1575)	1:A:66:LEU:HD13	1:A:13:VAL:H	11	0.26
(1,1554)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:26:ASN:HB3	24	0.26
(1,1554)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:26:ASN:HB3	24	0.26
(1,1554)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:26:ASN:HB3	24	0.26
(1,111)	1:A:55:VAL:HG21	1:A:49:GLU:HG3	25	0.26
(1,111)	1:A:55:VAL:HG22	1:A:49:GLU:HG3	25	0.26
(1,111)	1:A:55:VAL:HG23	1:A:49:GLU:HG3	25	0.26
(1,1091)	1:A:39:LEU:HD11	1:A:39:LEU:HA	8	0.26
(1,1091)	1:A:39:LEU:HD12	1:A:39:LEU:HA	8	0.26
(1,1091)	1:A:39:LEU:HD13	1:A:39:LEU:HA	8	0.26
(1,1020)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:33:ASP:HB2	29	0.26
(1,1020)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:33:ASP:HB2	29	0.26
(1,1020)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:33:ASP:HB2	29	0.26
(1,845)	1:A:8:ASP:HB2	1:A:11:LYS:HB2	24	0.25
(1,845)	1:A:8:ASP:HB2	1:A:11:LYS:HB3	24	0.25
(1,845)	1:A:8:ASP:HB2	1:A:11:LYS:HB2	28	0.25
(1,845)	1:A:8:ASP:HB2	1:A:11:LYS:HB3	28	0.25
(1,798)	1:A:51:GLU:HG2	1:A:50:ARG:HG2	15	0.25
(1,798)	1:A:51:GLU:HG3	1:A:50:ARG:HG2	15	0.25
(1,60)	1:A:47:ILE:HG21	1:A:74:SER:HB2	23	0.25
(1,60)	1:A:47:ILE:HG22	1:A:74:SER:HB2	23	0.25
(1,60)	1:A:47:ILE:HG23	1:A:74:SER:HB2	23	0.25
(1,60)	1:A:58:ILE:HG21	1:A:31:LEU:HA	23	0.25
(1,60)	1:A:58:ILE:HG22	1:A:31:LEU:HA	23	0.25
(1,60)	1:A:58:ILE:HG23	1:A:31:LEU:HA	23	0.25
(1,475)	1:A:22:LEU:HD21	1:A:20:ARG:HB2	1	0.25
(1,475)	1:A:22:LEU:HD22	1:A:20:ARG:HB2	1	0.25
(1,475)	1:A:22:LEU:HD23	1:A:20:ARG:HB2	1	0.25
(1,1271)	1:A:62:ARG:HA	1:A:58:ILE:HG12	29	0.25
(1,994)	1:A:33:ASP:HA	1:A:34:LEU:HD21	26	0.24
(1,994)	1:A:33:ASP:HA	1:A:34:LEU:HD22	26	0.24
(1,994)	1:A:33:ASP:HA	1:A:34:LEU:HD23	26	0.24
(1,787)	1:A:51:GLU:HB3	1:A:6:GLN:HE21	15	0.24
(1,779)	1:A:52:HIS:HB2	1:A:6:GLN:HE21	11	0.24
(1,778)	1:A:52:HIS:HB3	1:A:6:GLN:HE21	17	0.24
(1,664)	1:A:49:GLU:HG2	1:A:55:VAL:HG21	15	0.24
(1,664)	1:A:49:GLU:HG2	1:A:55:VAL:HG22	15	0.24
(1,664)	1:A:49:GLU:HG2	1:A:55:VAL:HG23	15	0.24
(1,506)	1:A:19:ILE:HD11	1:A:18:GLY:HA2	15	0.24
(1,506)	1:A:19:ILE:HD12	1:A:18:GLY:HA2	15	0.24
(1,506)	1:A:19:ILE:HD13	1:A:18:GLY:HA2	15	0.24



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1698)	1:A:38:SER:H	1:A:39:LEU:H	22	0.24
(1,1642)	1:A:9:LEU:HD11	1:A:6:GLN:HE21	7	0.24
(1,1642)	1:A:9:LEU:HD12	1:A:6:GLN:HE21	7	0.24
(1,1642)	1:A:9:LEU:HD13	1:A:6:GLN:HE21	7	0.24
(1,54)	1:A:20:ARG:HG3	1:A:67:ARG:HD3	18	0.23
(1,54)	1:A:20:ARG:HG3	1:A:10:VAL:HA	18	0.23
(1,54)	1:A:7:ARG:HG2	1:A:10:VAL:HA	18	0.23
(1,54)	1:A:7:ARG:HG3	1:A:10:VAL:HA	18	0.23
(1,475)	1:A:22:LEU:HD21	1:A:20:ARG:HB2	3	0.23
(1,475)	1:A:22:LEU:HD22	1:A:20:ARG:HB2	3	0.23
(1,475)	1:A:22:LEU:HD23	1:A:20:ARG:HB2	3	0.23
(1,475)	1:A:22:LEU:HD21	1:A:20:ARG:HB2	15	0.23
(1,475)	1:A:22:LEU:HD22	1:A:20:ARG:HB2	15	0.23
(1,475)	1:A:22:LEU:HD23	1:A:20:ARG:HB2	15	0.23
(1,475)	1:A:22:LEU:HD21	1:A:20:ARG:HB2	26	0.23
(1,475)	1:A:22:LEU:HD22	1:A:20:ARG:HB2	26	0.23
(1,475)	1:A:22:LEU:HD23	1:A:20:ARG:HB2	26	0.23
(1,177)	1:A:22:LEU:HD11	1:A:24:GLY:HA2	2	0.23
(1,177)	1:A:22:LEU:HD12	1:A:24:GLY:HA2	2	0.23
(1,177)	1:A:22:LEU:HD13	1:A:24:GLY:HA2	2	0.23
(1,1303)	1:A:64:LEU:HB2	1:A:31:LEU:HB3	15	0.23
(1,1263)	1:A:61:VAL:HG11	1:A:62:ARG:HB3	21	0.23
(1,1263)	1:A:61:VAL:HG12	1:A:62:ARG:HB3	21	0.23
(1,1263)	1:A:61:VAL:HG13	1:A:62:ARG:HB3	21	0.23
(1,1133)	1:A:53:ASP:HA	1:A:53:ASP:H	12	0.23
(1,1082)	1:A:39:LEU:HB3	1:A:39:LEU:H	17	0.23
(1,1028)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:33:ASP:H	26	0.23
(1,1028)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:33:ASP:H	26	0.23
(1,1028)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:33:ASP:H	26	0.23
(1,774)	1:A:6:GLN:HA	1:A:6:GLN:HG3	16	0.22
(1,700)	1:A:59:ARG:HA	1:A:62:ARG:HD2	30	0.22
(1,502)	1:A:19:ILE:HD11	1:A:25:ILE:HG13	7	0.22
(1,502)	1:A:19:ILE:HD12	1:A:25:ILE:HG13	7	0.22
(1,502)	1:A:19:ILE:HD13	1:A:25:ILE:HG13	7	0.22
(1,394)	1:A:19:ILE:HG21	1:A:25:ILE:HG13	9	0.22
(1,394)	1:A:19:ILE:HG22	1:A:25:ILE:HG13	9	0.22
(1,394)	1:A:19:ILE:HG23	1:A:25:ILE:HG13	9	0.22
(1,1618)	1:A:58:ILE:HG12	1:A:59:ARG:HD2	12	0.22
(1,1618)	1:A:58:ILE:HG12	1:A:59:ARG:HD3	12	0.22
(1,1303)	1:A:64:LEU:HB2	1:A:31:LEU:HB3	18	0.22
(1,1271)	1:A:62:ARG:HA	1:A:58:ILE:HG12	14	0.22
(1,994)	1:A:33:ASP:HA	1:A:34:LEU:HD21	20	0.21



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,994)	1:A:33:ASP:HA	1:A:34:LEU:HD22	20	0.21
(1,994)	1:A:33:ASP:HA	1:A:34:LEU:HD23	20	0.21
(1,952)	1:A:11:LYS:HG2	1:A:11:LYS:H	8	0.21
(1,844)	1:A:8:ASP:HB3	1:A:11:LYS:HB2	18	0.21
(1,844)	1:A:8:ASP:HB3	1:A:11:LYS:HB3	18	0.21
(1,475)	1:A:22:LEU:HD21	1:A:20:ARG:HB2	13	0.21
(1,475)	1:A:22:LEU:HD22	1:A:20:ARG:HB2	13	0.21
(1,475)	1:A:22:LEU:HD23	1:A:20:ARG:HB2	13	0.21
(1,475)	1:A:22:LEU:HD21	1:A:20:ARG:HB2	14	0.21
(1,475)	1:A:22:LEU:HD22	1:A:20:ARG:HB2	14	0.21
(1,475)	1:A:22:LEU:HD23	1:A:20:ARG:HB2	14	0.21
(1,394)	1:A:19:ILE:HG21	1:A:25:ILE:HG13	4	0.21
(1,394)	1:A:19:ILE:HG22	1:A:25:ILE:HG13	4	0.21
(1,394)	1:A:19:ILE:HG23	1:A:25:ILE:HG13	4	0.21
(1,323)	1:A:45:ARG:HB2	1:A:45:ARG:HG2	1	0.21
(1,323)	1:A:45:ARG:HB2	1:A:45:ARG:HG2	3	0.21
(1,323)	1:A:45:ARG:HB2	1:A:45:ARG:HG2	8	0.21
(1,323)	1:A:45:ARG:HB2	1:A:45:ARG:HG2	13	0.21
(1,323)	1:A:45:ARG:HB2	1:A:45:ARG:HG2	16	0.21
(1,323)	1:A:45:ARG:HB2	1:A:45:ARG:HG2	24	0.21
(1,264)	1:A:32:ALA:HA	1:A:34:LEU:HD11	17	0.21
(1,264)	1:A:32:ALA:HA	1:A:34:LEU:HD12	17	0.21
(1,264)	1:A:32:ALA:HA	1:A:34:LEU:HD13	17	0.21
(1,264)	1:A:32:ALA:HA	1:A:34:LEU:HD11	26	0.21
(1,264)	1:A:32:ALA:HA	1:A:34:LEU:HD12	26	0.21
(1,264)	1:A:32:ALA:HA	1:A:34:LEU:HD13	26	0.21
(1,1593)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:29:SER:HA	28	0.21
(1,1593)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:29:SER:HA	28	0.21
(1,1593)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:29:SER:HA	28	0.21
(1,1327)	1:A:68:LYS:HD2	1:A:71:GLU:HB2	11	0.21
(1,1327)	1:A:68:LYS:HD3	1:A:71:GLU:HB2	11	0.21
(1,1302)	1:A:64:LEU:HB3	1:A:31:LEU:HB3	5	0.21
(1,1276)	1:A:62:ARG:HB3	1:A:32:ALA:HB1	16	0.21
(1,1276)	1:A:62:ARG:HB3	1:A:32:ALA:HB2	16	0.21
(1,1276)	1:A:62:ARG:HB3	1:A:32:ALA:HB3	16	0.21
(1,1049)	1:A:36:LEU:HD21	1:A:40:MET:HB3	9	0.21
(1,1049)	1:A:36:LEU:HD22	1:A:40:MET:HB3	9	0.21
(1,1049)	1:A:36:LEU:HD23	1:A:40:MET:HB3	9	0.21
(1,1018)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:29:SER:HB2	17	0.21
(1,1018)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:29:SER:HB2	17	0.21
(1,1018)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:29:SER:HB2	17	0.21
(1,1018)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:29:SER:HB2	19	0.21



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1018)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:29:SER:HB2	19	0.21
(1,1018)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:29:SER:HB2	19	0.21
(1,1018)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:29:SER:HB2	28	0.21
(1,1018)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:29:SER:HB2	28	0.21
(1,1018)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:29:SER:HB2	28	0.21
(1,1008)	1:A:34:LEU:HD11	1:A:31:LEU:HA	19	0.21
(1,1008)	1:A:34:LEU:HD12	1:A:31:LEU:HA	19	0.21
(1,1008)	1:A:34:LEU:HD13	1:A:31:LEU:HA	19	0.21
(1,927)	1:A:57:PRO:HG3	1:A:56:LEU:HD21	20	0.2
(1,927)	1:A:57:PRO:HG3	1:A:56:LEU:HD22	20	0.2
(1,927)	1:A:57:PRO:HG3	1:A:56:LEU:HD23	20	0.2
(1,85)	1:A:24:GLY:H	1:A:23:ALA:HA	1	0.2
(1,85)	1:A:24:GLY:H	1:A:25:ILE:HA	1	0.2
(1,664)	1:A:49:GLU:HG2	1:A:55:VAL:HG21	25	0.2
(1,664)	1:A:49:GLU:HG2	1:A:55:VAL:HG22	25	0.2
(1,664)	1:A:49:GLU:HG2	1:A:55:VAL:HG23	25	0.2
(1,506)	1:A:19:ILE:HD11	1:A:18:GLY:HA2	26	0.2
(1,506)	1:A:19:ILE:HD12	1:A:18:GLY:HA2	26	0.2
(1,506)	1:A:19:ILE:HD13	1:A:18:GLY:HA2	26	0.2
(1,475)	1:A:22:LEU:HD21	1:A:20:ARG:HB2	2	0.2
(1,475)	1:A:22:LEU:HD22	1:A:20:ARG:HB2	2	0.2
(1,475)	1:A:22:LEU:HD23	1:A:20:ARG:HB2	2	0.2
(1,475)	1:A:22:LEU:HD21	1:A:20:ARG:HB2	8	0.2
(1,475)	1:A:22:LEU:HD22	1:A:20:ARG:HB2	8	0.2
(1,475)	1:A:22:LEU:HD23	1:A:20:ARG:HB2	8	0.2
(1,475)	1:A:22:LEU:HD21	1:A:20:ARG:HB2	22	0.2
(1,475)	1:A:22:LEU:HD22	1:A:20:ARG:HB2	22	0.2
(1,475)	1:A:22:LEU:HD23	1:A:20:ARG:HB2	22	0.2
(1,323)	1:A:45:ARG:HB2	1:A:45:ARG:HG2	4	0.2
(1,323)	1:A:45:ARG:HB2	1:A:45:ARG:HG2	5	0.2
(1,323)	1:A:45:ARG:HB2	1:A:45:ARG:HG2	6	0.2
(1,323)	1:A:45:ARG:HB2	1:A:45:ARG:HG2	7	0.2
(1,323)	1:A:45:ARG:HB2	1:A:45:ARG:HG2	9	0.2
(1,323)	1:A:45:ARG:HB2	1:A:45:ARG:HG2	11	0.2
(1,323)	1:A:45:ARG:HB2	1:A:45:ARG:HG2	12	0.2
(1,323)	1:A:45:ARG:HB2	1:A:45:ARG:HG2	20	0.2
(1,323)	1:A:45:ARG:HB2	1:A:45:ARG:HG2	21	0.2
(1,323)	1:A:45:ARG:HB2	1:A:45:ARG:HG2	23	0.2
(1,323)	1:A:45:ARG:HB2	1:A:45:ARG:HG2	26	0.2
(1,323)	1:A:45:ARG:HB2	1:A:45:ARG:HG2	27	0.2
(1,323)	1:A:45:ARG:HB2	1:A:45:ARG:HG2	29	0.2
(1,323)	1:A:45:ARG:HB2	1:A:45:ARG:HG2	30	0.2



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,264)	1:A:32:ALA:HA	1:A:34:LEU:HD11	11	0.2
(1,264)	1:A:32:ALA:HA	1:A:34:LEU:HD12	11	0.2
(1,264)	1:A:32:ALA:HA	1:A:34:LEU:HD13	11	0.2
(1,192)	1:A:29:SER:HB3	1:A:34:LEU:HD21	24	0.2
(1,192)	1:A:29:SER:HB3	1:A:34:LEU:HD22	24	0.2
(1,192)	1:A:29:SER:HB3	1:A:34:LEU:HD23	24	0.2
(1,1618)	1:A:58:ILE:HG12	1:A:59:ARG:HD2	19	0.2
(1,1618)	1:A:58:ILE:HG12	1:A:59:ARG:HD3	19	0.2
(1,1584)	1:A:59:ARG:HG3	1:A:58:ILE:H	15	0.2
(1,1554)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:26:ASN:HB3	27	0.2
(1,1554)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:26:ASN:HB3	27	0.2
(1,1554)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:26:ASN:HB3	27	0.2
(1,1548)	1:A:19:ILE:HG21	1:A:21:ASP:HB2	1	0.2
(1,1548)	1:A:19:ILE:HG22	1:A:21:ASP:HB2	1	0.2
(1,1548)	1:A:19:ILE:HG23	1:A:21:ASP:HB2	1	0.2
(1,1491)	1:A:42:VAL:HG21	1:A:46:GLN:HG2	20	0.2
(1,1491)	1:A:42:VAL:HG22	1:A:46:GLN:HG2	20	0.2
(1,1491)	1:A:42:VAL:HG23	1:A:46:GLN:HG2	20	0.2
(1,1415)	1:A:42:VAL:HG11	1:A:46:GLN:HE21	6	0.2
(1,1415)	1:A:42:VAL:HG12	1:A:46:GLN:HE21	6	0.2
(1,1415)	1:A:42:VAL:HG13	1:A:46:GLN:HE21	6	0.2
(1,1369)	1:A:71:GLU:HG2	1:A:72:MET:H	12	0.2
(1,1354)	1:A:69:LEU:HD21	1:A:67:ARG:HD3	9	0.2
(1,1354)	1:A:69:LEU:HD22	1:A:67:ARG:HD3	9	0.2
(1,1354)	1:A:69:LEU:HD23	1:A:67:ARG:HD3	9	0.2
(1,1276)	1:A:62:ARG:HB3	1:A:32:ALA:HB1	13	0.2
(1,1276)	1:A:62:ARG:HB3	1:A:32:ALA:HB2	13	0.2
(1,1276)	1:A:62:ARG:HB3	1:A:32:ALA:HB3	13	0.2
(1,1276)	1:A:62:ARG:HB3	1:A:32:ALA:HB1	17	0.2
(1,1276)	1:A:62:ARG:HB3	1:A:32:ALA:HB2	17	0.2
(1,1276)	1:A:62:ARG:HB3	1:A:32:ALA:HB3	17	0.2
(1,1037)	1:A:36:LEU:HB3	1:A:40:MET:HA	5	0.2
(1,1028)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:33:ASP:H	17	0.2
(1,1028)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:33:ASP:H	17	0.2
(1,1028)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:33:ASP:H	17	0.2
(1,1018)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:29:SER:HB2	29	0.2
(1,1018)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:29:SER:HB2	29	0.2
(1,1018)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:29:SER:HB2	29	0.2
(1,700)	1:A:59:ARG:HA	1:A:62:ARG:HD2	27	0.19
(1,571)	1:A:43:GLU:HB3	1:A:44:VAL:HG21	18	0.19
(1,571)	1:A:43:GLU:HB3	1:A:44:VAL:HG22	18	0.19
(1,571)	1:A:43:GLU:HB3	1:A:44:VAL:HG23	18	0.19



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,323)	1:A:45:ARG:HB2	1:A:45:ARG:HG2	2	0.19
(1,323)	1:A:45:ARG:HB2	1:A:45:ARG:HG2	10	0.19
(1,323)	1:A:45:ARG:HB2	1:A:45:ARG:HG2	15	0.19
(1,323)	1:A:45:ARG:HB2	1:A:45:ARG:HG2	18	0.19
(1,323)	1:A:45:ARG:HB2	1:A:45:ARG:HG2	19	0.19
(1,323)	1:A:45:ARG:HB2	1:A:45:ARG:HG2	22	0.19
(1,323)	1:A:45:ARG:HB2	1:A:45:ARG:HG2	25	0.19
(1,323)	1:A:45:ARG:HB2	1:A:45:ARG:HG2	28	0.19
(1,18)	1:A:71:GLU:HA	1:A:74:SER:H	6	0.19
(1,18)	1:A:71:GLU:HA	1:A:69:LEU:H	6	0.19
(1,1618)	1:A:58:ILE:HG12	1:A:59:ARG:HD2	16	0.19
(1,1618)	1:A:58:ILE:HG12	1:A:59:ARG:HD3	16	0.19
(1,1491)	1:A:42:VAL:HG21	1:A:46:GLN:HG2	21	0.19
(1,1491)	1:A:42:VAL:HG22	1:A:46:GLN:HG2	21	0.19
(1,1491)	1:A:42:VAL:HG23	1:A:46:GLN:HG2	21	0.19
(1,1276)	1:A:62:ARG:HB3	1:A:32:ALA:HB1	15	0.19
(1,1276)	1:A:62:ARG:HB3	1:A:32:ALA:HB2	15	0.19
(1,1276)	1:A:62:ARG:HB3	1:A:32:ALA:HB3	15	0.19
(1,1276)	1:A:62:ARG:HB3	1:A:32:ALA:HB1	20	0.19
(1,1276)	1:A:62:ARG:HB3	1:A:32:ALA:HB2	20	0.19
(1,1276)	1:A:62:ARG:HB3	1:A:32:ALA:HB3	20	0.19
(1,994)	1:A:33:ASP:HA	1:A:34:LEU:HD21	29	0.18
(1,994)	1:A:33:ASP:HA	1:A:34:LEU:HD22	29	0.18
(1,994)	1:A:33:ASP:HA	1:A:34:LEU:HD23	29	0.18
(1,972)	1:A:27:LEU:HD21	1:A:70:GLN:HE21	2	0.18
(1,972)	1:A:27:LEU:HD22	1:A:70:GLN:HE21	2	0.18
(1,972)	1:A:27:LEU:HD23	1:A:70:GLN:HE21	2	0.18
(1,85)	1:A:24:GLY:H	1:A:23:ALA:HA	14	0.18
(1,85)	1:A:24:GLY:H	1:A:25:ILE:HA	14	0.18
(1,779)	1:A:52:HIS:HB2	1:A:6:GLN:HE21	7	0.18
(1,668)	1:A:49:GLU:HG2	1:A:46:GLN:HA	19	0.18
(1,460)	1:A:47:ILE:HG13	1:A:48:LEU:HD11	22	0.18
(1,460)	1:A:47:ILE:HG13	1:A:48:LEU:HD12	22	0.18
(1,460)	1:A:47:ILE:HG13	1:A:48:LEU:HD13	22	0.18
(1,394)	1:A:19:ILE:HG21	1:A:25:ILE:HG13	29	0.18
(1,394)	1:A:19:ILE:HG22	1:A:25:ILE:HG13	29	0.18
(1,394)	1:A:19:ILE:HG23	1:A:25:ILE:HG13	29	0.18
(1,38)	1:A:58:ILE:HG21	1:A:32:ALA:HA	24	0.18
(1,38)	1:A:58:ILE:HG22	1:A:32:ALA:HA	24	0.18
(1,38)	1:A:58:ILE:HG23	1:A:32:ALA:HA	24	0.18
(1,38)	1:A:47:ILE:HG21	1:A:50:ARG:HA	24	0.18
(1,38)	1:A:47:ILE:HG22	1:A:50:ARG:HA	24	0.18



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,38)	1:A:47:ILE:HG23	1:A:50:ARG:HA	24	0.18
(1,323)	1:A:45:ARG:HB2	1:A:45:ARG:HG2	14	0.18
(1,323)	1:A:45:ARG:HB2	1:A:45:ARG:HG2	17	0.18
(1,316)	1:A:40:MET:HB2	1:A:39:LEU:HD21	8	0.18
(1,316)	1:A:40:MET:HB2	1:A:39:LEU:HD22	8	0.18
(1,316)	1:A:40:MET:HB2	1:A:39:LEU:HD23	8	0.18
(1,1698)	1:A:38:SER:H	1:A:39:LEU:H	17	0.18
(1,1584)	1:A:59:ARG:HG3	1:A:58:ILE:H	13	0.18
(1,1581)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:70:GLN:HG3	3	0.18
(1,1581)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:70:GLN:HG3	3	0.18
(1,1581)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:70:GLN:HG3	3	0.18
(1,1491)	1:A:42:VAL:HG21	1:A:46:GLN:HG2	24	0.18
(1,1491)	1:A:42:VAL:HG22	1:A:46:GLN:HG2	24	0.18
(1,1491)	1:A:42:VAL:HG23	1:A:46:GLN:HG2	24	0.18
(1,1276)	1:A:62:ARG:HB3	1:A:32:ALA:HB1	18	0.18
(1,1276)	1:A:62:ARG:HB3	1:A:32:ALA:HB2	18	0.18
(1,1276)	1:A:62:ARG:HB3	1:A:32:ALA:HB3	18	0.18
(1,1071)	1:A:36:LEU:HG	1:A:38:SER:H	18	0.18
(1,851)	1:A:9:LEU:HA	1:A:9:LEU:HD21	13	0.17
(1,851)	1:A:9:LEU:HA	1:A:9:LEU:HD22	13	0.17
(1,851)	1:A:9:LEU:HA	1:A:9:LEU:HD23	13	0.17
(1,813)	1:A:65:THR:HG21	1:A:69:LEU:H	20	0.17
(1,813)	1:A:65:THR:HG22	1:A:69:LEU:H	20	0.17
(1,813)	1:A:65:THR:HG23	1:A:69:LEU:H	20	0.17
(1,813)	1:A:65:THR:HG21	1:A:69:LEU:H	22	0.17
(1,813)	1:A:65:THR:HG22	1:A:69:LEU:H	22	0.17
(1,813)	1:A:65:THR:HG23	1:A:69:LEU:H	22	0.17
(1,813)	1:A:65:THR:HG21	1:A:69:LEU:H	29	0.17
(1,813)	1:A:65:THR:HG22	1:A:69:LEU:H	29	0.17
(1,813)	1:A:65:THR:HG23	1:A:69:LEU:H	29	0.17
(1,662)	1:A:49:GLU:HA	1:A:46:GLN:HA	5	0.17
(1,662)	1:A:49:GLU:HA	1:A:46:GLN:HA	8	0.17
(1,549)	1:A:72:MET:HB2	1:A:72:MET:H	13	0.17
(1,475)	1:A:22:LEU:HD21	1:A:20:ARG:HB2	5	0.17
(1,475)	1:A:22:LEU:HD22	1:A:20:ARG:HB2	5	0.17
(1,475)	1:A:22:LEU:HD23	1:A:20:ARG:HB2	5	0.17
(1,475)	1:A:22:LEU:HD21	1:A:20:ARG:HB2	17	0.17
(1,475)	1:A:22:LEU:HD22	1:A:20:ARG:HB2	17	0.17
(1,475)	1:A:22:LEU:HD23	1:A:20:ARG:HB2	17	0.17
(1,240)	1:A:31:LEU:HD11	1:A:34:LEU:HB2	5	0.17
(1,240)	1:A:31:LEU:HD12	1:A:34:LEU:HB2	5	0.17
(1,240)	1:A:31:LEU:HD13	1:A:34:LEU:HB2	5	0.17



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

(1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:74:SER:H 13 0.17 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 13 0.17 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 6 0.17 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 6 0.17 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 6 0.17 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 6 0.17 (1,171) 1:A:22:LEU:HG 1:A:24:GLY:HA2 6 0.17 (1,171) 1:A:22:LEU:HG 1:A:25:ASP:HA 23 0.17 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD2 17 0.17 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD3 17 0.17 (1,1548) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:21:ASP:HB2 10 0.17 (1,1548) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:21:ASP:HB2 10 0.17 (1,1548) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:21:ASP:HB2 10 0.17 (1,1491) 1:A:42:VAL:HG23 1:A:46:GLN:HG2 27 0.17 (1,1491) 1:A:42:VAL:HG21 1:A:46:GLN:HG2 27 0.17 (1,1491) 1:A:42:VAL:HG23 1:A:46:GLN:HG2 27 0.17 (1,1491) 1:A:42:VAL:HG23 1:A:46:GLN:HG2 27 0.17 (1,1276) 1:A:62:ARG:HB3 1:A:32:ALA:HB1 7 0.17 (1,1276) 1:A:62:ARG:HB3 1:A:32:ALA:HB3 7 0.17 (1,1276) 1:A:62:ARG:HB3 1:A:32:ALA:HB3 7 0.17 (1,1276) 1:A:62:ARG:HB3 1:A:33:ASP:H 19 0.17 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:H 19 0.17 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:H 24 0.17 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:H 24 0.17 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:H 24 0.17 (1,862) 1:A:10:VAL:HA 1:A:9:LEU:HD22 1:A 0.16 (1,862) 1:A:10:VAL:HA 1:A:9:LEU:HD22 1:A 0.16 (1,855) 1:A:24:GLY:H 1:A:23:ALA:HB 9 0.16 (1,855) 1:A:24:GLY:H 1:A:23:ALA:HB 9 0.16 (1,855) 1:A:24:GLY:H 1:A:23:ALA:HA 9 0.16 (1,851) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 2 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 2 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 4 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 4 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 4 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 4 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 4 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 8 0.16 (1,813) 1:A:6	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 6 0.17 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 6 0.17 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 6 0.17 (1,171) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:21:ASP:HA 23 0.17 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD2 17 0.17 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD3 17 0.17 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD3 17 0.17 (1,1548) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:21:ASP:HB2 10 0.17 (1,1548) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:21:ASP:HB2 10 0.17 (1,1548) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:21:ASP:HB2 10 0.17 (1,1491) 1:A:42:VAL:HG21 1:A:46:GLN:HG2 27 0.17 (1,1491) 1:A:42:VAL:HG21 1:A:46:GLN:HG2 27 0.17 (1,1491) 1:A:42:VAL:HG23 1:A:46:GLN:HG2 27 0.17 (1,1276) 1:A:62:ARG:HB3 1:A:32:ALA:HB1 7 0.17 (1,1276) 1:A:62:ARG:HB3 1:A:32:ALA:HB3 7 0.17 (1,1276) 1:A:62:ARG:HB3 1:A:32:ALA:HB3 7 0.17 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:H 24 0.17 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:H 24 0.17 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:H 24 0.17 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:H 24 0.17 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:H 24 0.17 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:H 24 0.17 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:H 24 0.17 (1,1662) 1:A:10:VAL:HA 1:A:9:LEU:HD21 13 0.16 (1,862) 1:A:10:VAL:HA 1:A:9:LEU:HD22 13 0.16 (1,862) 1:A:10:VAL:HA 1:A:9:LEU:HD23 13 0.16 (1,863) 1:A:24:GLY:H 1:A:23:ALA:HA 9 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 2 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 2 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 4 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 4 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 4 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 8 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 8 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 8 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 8 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 8 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 8 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 8 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 8 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 8 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 8 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 8 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 8 0.16	(1,18)	1:A:71:GLU:HA	1:A:74:SER:H	13	0.17
(1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 6 0.17 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 6 0.17 (1,171) 1:A:22:LEU:HG 1:A:21:ASP:HA 23 0.17 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD2 17 0.17 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD2 17 0.17 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD3 17 0.17 (1,1548) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:21:ASP:HB2 10 0.17 (1,1548) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:21:ASP:HB2 10 0.17 (1,1548) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:21:ASP:HB2 10 0.17 (1,1491) 1:A:42:VAL:HG21 1:A:46:GLN:HG2 27 0.17 (1,1491) 1:A:42:VAL:HG21 1:A:46:GLN:HG2 27 0.17 (1,1491) 1:A:42:VAL:HG23 1:A:46:GLN:HG2 27 0.17 (1,1491) 1:A:42:VAL:HG23 1:A:46:GLN:HG2 27 0.17 (1,1491) 1:A:42:VAL:HG23 1:A:46:GLN:HG2 27 0.17 (1,1276) 1:A:62:ARG:HB3 1:A:32:ALA:HB1 7 0.17 (1,1276) 1:A:62:ARG:HB3 1:A:32:ALA:HB2 7 0.17 (1,1276) 1:A:62:ARG:HB3 1:A:32:ALA:HB3 7 0.17 (1,1128) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:H 19 0.17 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:H 24 0.17 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:H 24 0.17 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:H 24 0.17 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:H 24 0.17 (1,1028) 1:A:10:VAL:HA 1:A:9:LEU:HD21 13 0.16 (1,862) 1:A:10:VAL:HA 1:A:9:LEU:HD22 13 0.16 (1,862) 1:A:10:VAL:HA 1:A:9:LEU:HD23 13 0.16 (1,862) 1:A:10:VAL:HA 1:A:9:LEU:HD23 13 0.16 (1,862) 1:A:10:VAL:HA 1:A:9:LEU:HD23 13 0.16 (1,863) 1:A:24:GLY:H 1:A:25:ILE:HA 9 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 2 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 2 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 4 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 4 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 8 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 8 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 8 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 8 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 8 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 8 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 8 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 8 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 8 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 8 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 8 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 8 0.16	(1,18)	1:A:71:GLU:HA	1:A:69:LEU:H	13	0.17
(1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 6 0.17 (1,171) 1:A:22:LEU:HG 1:A:21:ASP:HA 23 0.17 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD2 17 0.17 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD3 17 0.17 (1,1548) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:21:ASP:HB2 10 0.17 (1,1548) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:21:ASP:HB2 10 0.17 (1,1548) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:21:ASP:HB2 10 0.17 (1,1548) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:21:ASP:HB2 10 0.17 (1,1491) 1:A:42:VAL:HG23 1:A:24:A6:GLN:HG2 27 0.17 (1,1491) 1:A:42:VAL:HG21 1:A:46:GLN:HG2 27 0.17 (1,1491) 1:A:42:VAL:HG23 1:A:46:GLN:HG2 27 0.17 (1,1491) 1:A:42:VAL:HG23 1:A:46:GLN:HG2 27 0.17 (1,1276) 1:A:62:ARG:HB3 1:A:32:ALA:HB1 7 0.17 (1,1276) 1:A:62:ARG:HB3 1:A:32:ALA:HB2 7 0.17 (1,1276) 1:A:62:ARG:HB3 1:A:32:ALA:HB2 7 0.17 (1,1276) 1:A:62:ARG:HB3 1:A:32:ALA:HB3 7 0.17 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:H 19 0.17 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:H 24 0.17 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:H 24 0.17 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:H 24 0.17 (1,862) 1:A:10:VAL:HA 1:A:9:LEU:HD21 13 0.16 (1,862) 1:A:10:VAL:HA 1:A:9:LEU:HD22 13 0.16 (1,862) 1:A:10:VAL:HA 1:A:9:LEU:HD23 13 0.16 (1,862) 1:A:10:VAL:HA 1:A:9:LEU:HD23 13 0.16 (1,853) 1:A:24:GLY:H 1:A:23:ALA:HA 9 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 2 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 2 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 4 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 4 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 4 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 4 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 8 0.16 (1,	(1,177)	1:A:22:LEU:HD11	1:A:24:GLY:HA2	6	0.17
(1,171) 1:A:22:LEU:HG 1:A:21:ASP:HA 23 0.17 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD2 17 0.17 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD3 17 0.17 (1,1548) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:21:ASP:HB2 10 0.17 (1,1548) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:21:ASP:HB2 10 0.17 (1,1548) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:21:ASP:HB2 10 0.17 (1,1548) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:21:ASP:HB2 10 0.17 (1,1491) 1:A:42:VAL:HG23 1:A:21:ASP:HB2 10 0.17 (1,1491) 1:A:42:VAL:HG21 1:A:46:GLN:HG2 27 0.17 (1,1491) 1:A:42:VAL:HG22 1:A:46:GLN:HG2 27 0.17 (1,1491) 1:A:42:VAL:HG23 1:A:46:GLN:HG2 27 0.17 (1,1491) 1:A:42:VAL:HG23 1:A:46:GLN:HG2 27 0.17 (1,1276) 1:A:62:ARG:HB3 1:A:32:ALA:HB1 7 0.17 (1,1276) 1:A:62:ARG:HB3 1:A:32:ALA:HB2 7 0.17 (1,1276) 1:A:62:ARG:HB3 1:A:32:ALA:HB2 7 0.17 (1,1276) 1:A:62:ARG:HB3 1:A:32:ALA:HB3 7 0.17 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:H 19 0.17 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:H 24 0.17 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:H 24 0.17 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:H 24 0.17 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:H 24 0.17 (1,862) 1:A:10:VAL:HA 1:A:9:LEU:HD21 13 0.16 (1,85) 1:A:24:GLY:H 1:A:23:ALA:HA 9 0.16 (1,85) 1:A:24:GLY:H 1:A:25:LE:HA 9 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 2 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 2 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 4 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 4 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 4 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 4 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 8 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 8 0.16 (1,813)	(1,177)	1:A:22:LEU:HD12	1:A:24:GLY:HA2	6	0.17
(1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD2 17 0.17 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD3 17 0.17 (1,1548) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:21:ASP:HB2 10 0.17 (1,1548) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:21:ASP:HB2 10 0.17 (1,1548) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:21:ASP:HB2 10 0.17 (1,1491) 1:A:42:VAL:HG21 1:A:46:GLN:HG2 27 0.17 (1,1491) 1:A:42:VAL:HG21 1:A:46:GLN:HG2 27 0.17 (1,1491) 1:A:42:VAL:HG22 1:A:46:GLN:HG2 27 0.17 (1,1491) 1:A:42:VAL:HG23 1:A:34:GGN:HG2 27 0.17 (1,1491) 1:A:42:VAL:HG23 1:A:32:ALA:HB3 7 0.17 (1,1276) 1:A:62:ARG:HB3 1:A:32:ALA:HB1 7 0.17 (1,1276) 1:A:62:ARG:HB3 1:A:32:ALA:HB2 7 0.17 (1,1276) 1:A:62:ARG:HB3 1:A:32:ALA:HB3 7 0.17 (1,1276) 1:A:62:ARG:HB3 1:A:33:ASP:H 19 0.17 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:H 24 0.17 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:H 24 0.17 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:H 24 0.17 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:H 24 0.17 (1,862) 1:A:10:VAL:HA 1:A:9:LEU:HD21 13 0.16 (1,862) 1:A:10:VAL:HA 1:A:9:LEU:HD23 13 0.16 (1,862) 1:A:10:VAL:HA 1:A:9:LEU:HD23 13 0.16 (1,862) 1:A:10:VAL:HA 1:A:9:LEU:HD23 13 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 2 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 2 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 4 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 4 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 8 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 8 0.16 (1,813)	(1,177)	1:A:22:LEU:HD13	1:A:24:GLY:HA2	6	0.17
(1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD3 17 0.17 (1,1548) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:21:ASP:HB2 10 0.17 (1,1548) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:21:ASP:HB2 10 0.17 (1,1548) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:21:ASP:HB2 10 0.17 (1,1491) 1:A:42:VAL:HG21 1:A:46:GLN:HG2 27 0.17 (1,1491) 1:A:42:VAL:HG23 1:A:46:GLN:HG2 27 0.17 (1,1491) 1:A:42:VAL:HG23 1:A:46:GLN:HG2 27 0.17 (1,1476) 1:A:62:ARG:HB3 1:A:32:ALA:HB1 7 0.17 (1,1276) 1:A:62:ARG:HB3 1:A:32:ALA:HB2 7 0.17 (1,1276) 1:A:62:ARG:HB3 1:A:33:ASP:H 19 0.17 (1,1276) 1:A:62:ARG:HB3 1:A:33:ASP:H 19 0.17 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:H 19 0.17 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:H 24 0.17 (1,862) 1:A:10:VAL:HA 1:A:9	(1,171)	1:A:22:LEU:HG	1:A:21:ASP:HA	23	0.17
(1,1548) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:21:ASP:HB2 10 0.17 (1,1548) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:21:ASP:HB2 10 0.17 (1,1548) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:21:ASP:HB2 10 0.17 (1,1491) 1:A:42:VAL:HG21 1:A:46:GLN:HG2 27 0.17 (1,1491) 1:A:42:VAL:HG22 1:A:46:GLN:HG2 27 0.17 (1,1491) 1:A:42:VAL:HG23 1:A:46:GLN:HG2 27 0.17 (1,1276) 1:A:62:ARG:HB3 1:A:32:ALA:HB1 7 0.17 (1,1276) 1:A:62:ARG:HB3 1:A:32:ALA:HB3 7 0.17 (1,1276) 1:A:62:ARG:HB3 1:A:32:ALA:HB3 7 0.17 (1,1276) 1:A:62:ARG:HB3 1:A:32:ALA:HB3 7 0.17 (1,1276) 1:A:62:ARG:HB3 1:A:33:ASP:H 19 0.17 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:H 19 0.17 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:H 24 0.17 (1,1028) 1:A:10:VAL:HA 1:A:3	(1,1618)	1:A:58:ILE:HG12	1:A:59:ARG:HD2	17	0.17
(1,1548) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:21:ASP:HB2 10 0.17 (1,1548) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:21:ASP:HB2 10 0.17 (1,1491) 1:A:42:VAL:HG21 1:A:46:GLN:HG2 27 0.17 (1,1491) 1:A:42:VAL:HG23 1:A:46:GLN:HG2 27 0.17 (1,1491) 1:A:42:VAL:HG23 1:A:46:GLN:HG2 27 0.17 (1,1491) 1:A:42:VAL:HG23 1:A:46:GLN:HG2 27 0.17 (1,1276) 1:A:62:ARG:HB3 1:A:32:ALA:HB1 7 0.17 (1,1276) 1:A:62:ARG:HB3 1:A:32:ALA:HB2 7 0.17 (1,1276) 1:A:62:CARG:HB3 1:A:33:ASP:H 19 0.17 (1,1076) 1:A:62:ARG:HB3 1:A:33:ASP:H 19 0.17 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:H 19 0.17 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:H 24 0.17 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:H 24 0.17 (1,1028) 1:A:10:VAL:HA 1:A:3	(1,1618)	1:A:58:ILE:HG12	1:A:59:ARG:HD3	17	0.17
(1,1548) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:21:ASP:HB2 10 0.17 (1,1491) 1:A:42:VAL:HG21 1:A:46:GLN:HG2 27 0.17 (1,1491) 1:A:42:VAL:HG22 1:A:46:GLN:HG2 27 0.17 (1,1491) 1:A:42:VAL:HG23 1:A:46:GLN:HG2 27 0.17 (1,1276) 1:A:62:ARG:HB3 1:A:32:ALA:HB1 7 0.17 (1,1276) 1:A:62:ARG:HB3 1:A:32:ALA:HB3 7 0.17 (1,1276) 1:A:62:ARG:HB3 1:A:33:ASP:H 19 0.17 (1,1076) 1:A:62:ARG:HB3 1:A:33:ASP:H 19 0.17 (1,1076) 1:A:62:ARG:HB3 1:A:33:ASP:H 19 0.17 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:H 19 0.17 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:H 24 0.17 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:H 24 0.17 (1,1028) 1:A:10:VAL:HA 1:A:39:LEU:HD21 13 0.16 (1,862) 1:A:10:VAL:HA 1:A:39:LEU:	(1,1548)	1:A:19:ILE:HG21	1:A:21:ASP:HB2	10	0.17
(1,1491) 1:A:42:VAL:HG21 1:A:46:GLN:HG2 27 0.17 (1,1491) 1:A:42:VAL:HG22 1:A:46:GLN:HG2 27 0.17 (1,1491) 1:A:42:VAL:HG23 1:A:46:GLN:HG2 27 0.17 (1,1276) 1:A:62:ARG:HB3 1:A:32:ALA:HB1 7 0.17 (1,1276) 1:A:62:ARG:HB3 1:A:32:ALA:HB3 7 0.17 (1,1276) 1:A:62:ARG:HB3 1:A:33:ASP:H 19 0.17 (1,1276) 1:A:62:ARG:HB3 1:A:33:ASP:H 19 0.17 (1,1276) 1:A:62:ARG:HB3 1:A:33:ASP:H 19 0.17 (1,1276) 1:A:63:ASP:HA 1:A:33:ASP:H 19 0.17 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:H 24 0.17 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:H 24 0.17 (1,1028) 1:A:10:VAL:HA 1:A:9:LEU:HD21 13 0.16 (1,862) 1:A:10:VAL:HA 1:A:9:LEU:HD22 13 0.16 (1,862) 1:A:10:VAL:HA 1:A:9:LEU:HD23 <td>(1,1548)</td> <td>1:A:19:ILE:HG22</td> <td>1:A:21:ASP:HB2</td> <td>10</td> <td>0.17</td>	(1,1548)	1:A:19:ILE:HG22	1:A:21:ASP:HB2	10	0.17
(1,1491) 1:A:42:VAL:HG22 1:A:46:GLN:HG2 27 0.17 (1,1491) 1:A:42:VAL:HG23 1:A:46:GLN:HG2 27 0.17 (1,1276) 1:A:62:ARG:HB3 1:A:32:ALA:HB1 7 0.17 (1,1276) 1:A:62:ARG:HB3 1:A:32:ALA:HB2 7 0.17 (1,1276) 1:A:62:ARG:HB3 1:A:32:ALA:HB3 7 0.17 (1,1133) 1:A:62:ARG:HB3 1:A:33:ASP:H 19 0.17 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:H 24 0.17 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:H 24 0.17 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:H 24 0.17 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:H 24 0.17 (1,862) 1:A:10:VAL:HA 1:A:9:LEU:HD21 13 0.16 (1,862) 1:A:10:VAL:HA 1:A:9:LEU:HD23 13 0.16 (1,862) 1:A:10:VAL:HA 1:A:29:LEU:HD23 13 0.16 (1,862) 1:A:10:VAL:HA 1:A:29:LEU:HD23<	(1,1548)	1:A:19:ILE:HG23	1:A:21:ASP:HB2	10	0.17
(1,1491) 1:A:42:VAL:HG23 1:A:46:GLN:HG2 27 0.17 (1,1276) 1:A:62:ARG:HB3 1:A:32:ALA:HB1 7 0.17 (1,1276) 1:A:62:ARG:HB3 1:A:32:ALA:HB2 7 0.17 (1,1276) 1:A:62:ARG:HB3 1:A:32:ALA:HB3 7 0.17 (1,103) 1:A:53:ASP:HA 1:A:53:ASP:H 19 0.17 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:H 24 0.17 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:H 24 0.17 (1,1028) 1:A:10:VAL:HD23 1:A:33:ASP:H 24 0.17 (1,862) 1:A:10:VAL:HA 1:A:9:LEU:HD21 13 0.16 (1,862) 1:A:10:VAL:HA 1:A:29:LEU:HD23 13 0.16 (1,862) 1:A:10:VAL:HA 1:A:23:ALA:HA 9 0.16 (1,85) 1:A:24:GLY:H 1:A:23:ALA:HA 9 0.16 (1,85) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 2 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H <t< td=""><td>(1,1491)</td><td>1:A:42:VAL:HG21</td><td>1:A:46:GLN:HG2</td><td>27</td><td>0.17</td></t<>	(1,1491)	1:A:42:VAL:HG21	1:A:46:GLN:HG2	27	0.17
(1,1276) 1:A:62:ARG:HB3 1:A:32:ALA:HB1 7 0.17 (1,1276) 1:A:62:ARG:HB3 1:A:32:ALA:HB2 7 0.17 (1,1276) 1:A:62:ARG:HB3 1:A:32:ALA:HB3 7 0.17 (1,1133) 1:A:53:ASP:HA 1:A:53:ASP:H 19 0.17 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:H 24 0.17 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:H 24 0.17 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:H 24 0.17 (1,1028) 1:A:10:VAL:HA 1:A:9:LEU:HD21 13 0.16 (1,862) 1:A:10:VAL:HA 1:A:9:LEU:HD22 13 0.16 (1,862) 1:A:10:VAL:HA 1:A:29:LEU:HD23 13 0.16 (1,862) 1:A:10:VAL:HA 1:A:29:LEU:HD23 13 0.16 (1,862) 1:A:10:VAL:HA 1:A:29:LEU:HD23 13 0.16 (1,85) 1:A:24:GLY:H 1:A:23:ALA:HA 9 0.16 (1,85) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H	(1,1491)	1:A:42:VAL:HG22	1:A:46:GLN:HG2	27	0.17
(1,1276) 1:A:62:ARG:HB3 1:A:32:ALA:HB2 7 0.17 (1,1276) 1:A:62:ARG:HB3 1:A:32:ALA:HB3 7 0.17 (1,1133) 1:A:53:ASP:HA 1:A:53:ASP:H 19 0.17 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:H 24 0.17 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:H 24 0.17 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:H 24 0.17 (1,1028) 1:A:10:VAL:HA 1:A:9:LEU:HD21 13 0.16 (1,862) 1:A:10:VAL:HA 1:A:9:LEU:HD22 13 0.16 (1,862) 1:A:10:VAL:HA 1:A:9:LEU:HD23 13 0.16 (1,862) 1:A:10:VAL:HA 1:A:9:LEU:HD23 13 0.16 (1,862) 1:A:40:VAL:HA 1:A:9:LEU:HD23 13 0.16 (1,862) 1:A:40:VAL:HA 1:A:9:LEU:HD23 13 0.16 (1,85) 1:A:24:GLY:H 1:A:29:LEU:HD23 13 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H	(1,1491)	1:A:42:VAL:HG23	1:A:46:GLN:HG2	27	0.17
(1,1276) 1:A:62:ARG:HB3 1:A:32:ALA:HB3 7 0.17 (1,1133) 1:A:53:ASP:HA 1:A:53:ASP:H 19 0.17 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:H 24 0.17 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:H 24 0.17 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:H 24 0.17 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:H 24 0.17 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:3 0.16 (1,862) 1:A:10:VAL:HA 1:A:9:LEU:HD21 13 0.16 (1,862) 1:A:10:VAL:HA 1:A:9:LEU:HD22 13 0.16 (1,862) 1:A:10:VAL:HA 1:A:9:LEU:HD23 13 0.16 (1,862) 1:A:10:VAL:HA 1:A:9:LEU:HD23 13 0.16 (1,862) 1:A:4:GLY:H 1:A:29:LEU:HD23 13 0.16 (1,85) 1:A:24:GLY:H 1:A:29:LEU:HD23 13 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 2 0.1	(1,1276)	1:A:62:ARG:HB3	1:A:32:ALA:HB1	7	0.17
(1,1133) 1:A:53:ASP:HA 1:A:53:ASP:H 19 0.17 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:H 24 0.17 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:H 24 0.17 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:H 24 0.17 (1,862) 1:A:10:VAL:HA 1:A:9:LEU:HD21 13 0.16 (1,862) 1:A:10:VAL:HA 1:A:9:LEU:HD22 13 0.16 (1,862) 1:A:10:VAL:HA 1:A:9:LEU:HD23 13 0.16 (1,862) 1:A:10:VAL:HA 1:A:9:LEU:HD23 13 0.16 (1,862) 1:A:4:GLY:H 1:A:23:ALA:HA 9 0.16 (1,85) 1:A:24:GLY:H 1:A:25:ILE:HA 9 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 2 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 2 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 4 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 8	(1,1276)	1:A:62:ARG:HB3	1:A:32:ALA:HB2	7	0.17
(1,1028) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:H 24 0.17 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:H 24 0.17 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:H 24 0.17 (1,862) 1:A:10:VAL:HA 1:A:9:LEU:HD21 13 0.16 (1,862) 1:A:10:VAL:HA 1:A:9:LEU:HD22 13 0.16 (1,862) 1:A:10:VAL:HA 1:A:9:LEU:HD23 13 0.16 (1,862) 1:A:10:VAL:HA 1:A:9:LEU:HD23 13 0.16 (1,85) 1:A:24:GLY:H 1:A:23:ALA:HA 9 0.16 (1,85) 1:A:24:GLY:H 1:A:69:LEU:H 2 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 2 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 2 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 4 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 4 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 8	(1,1276)	1:A:62:ARG:HB3	1:A:32:ALA:HB3	7	0.17
(1,1028) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:H 24 0.17 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:H 24 0.17 (1,862) 1:A:10:VAL:HA 1:A:9:LEU:HD21 13 0.16 (1,862) 1:A:10:VAL:HA 1:A:9:LEU:HD22 13 0.16 (1,862) 1:A:10:VAL:HA 1:A:9:LEU:HD23 13 0.16 (1,85) 1:A:24:GLY:H 1:A:23:ALA:HA 9 0.16 (1,85) 1:A:24:GLY:H 1:A:69:LEU:H 9 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 2 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 2 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 4 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 4 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 4 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 8 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG24 1:A:69:LEU:H 8	(1,1133)	1:A:53:ASP:HA	1:A:53:ASP:H	19	0.17
(1,1028) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:H 24 0.17 (1,862) 1:A:10:VAL:HA 1:A:9:LEU:HD21 13 0.16 (1,862) 1:A:10:VAL:HA 1:A:9:LEU:HD22 13 0.16 (1,862) 1:A:10:VAL:HA 1:A:9:LEU:HD23 13 0.16 (1,85) 1:A:24:GLY:H 1:A:23:ALA:HA 9 0.16 (1,85) 1:A:24:GLY:H 1:A:25:ILE:HA 9 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 2 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 2 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 4 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 4 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 4 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 8 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 8 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 8	(1,1028)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:33:ASP:H	24	0.17
(1,862) 1:A:10:VAL:HA 1:A:9:LEU:HD21 13 0.16 (1,862) 1:A:10:VAL:HA 1:A:9:LEU:HD22 13 0.16 (1,862) 1:A:10:VAL:HA 1:A:9:LEU:HD23 13 0.16 (1,852) 1:A:24:GLY:H 1:A:23:ALA:HA 9 0.16 (1,85) 1:A:24:GLY:H 1:A:69:LEU:H 9 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 2 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 2 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 4 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 4 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 4 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 8 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 8 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 8 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 8	(1,1028)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:33:ASP:H	24	0.17
(1,862) 1:A:10:VAL:HA 1:A:9:LEU:HD22 13 0.16 (1,862) 1:A:10:VAL:HA 1:A:9:LEU:HD23 13 0.16 (1,85) 1:A:24:GLY:H 1:A:23:ALA:HA 9 0.16 (1,85) 1:A:24:GLY:H 1:A:25:ILE:HA 9 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 2 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 2 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 2 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 4 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 4 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 8 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 8 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 8 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 8 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 8 0.16 (1,504) 1:A:72:MET:HB2 1:A:72:MET:H 24 <td>(1,1028)</td> <td>1:A:34:LEU:HD23</td> <td>1:A:33:ASP:H</td> <td>24</td> <td>0.17</td>	(1,1028)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:33:ASP:H	24	0.17
(1,862) 1:A:10:VAL:HA 1:A:9:LEU:HD23 13 0.16 (1,85) 1:A:24:GLY:H 1:A:23:ALA:HA 9 0.16 (1,85) 1:A:24:GLY:H 1:A:25:ILE:HA 9 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 2 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 2 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 4 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 4 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 4 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 8 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 8 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 8 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 8 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 8 0.16 (1,549) 1:A:72:MET:HB2 1:A:72:MET:H 24 <	(1,862)	1:A:10:VAL:HA	1:A:9:LEU:HD21	13	0.16
(1,85) 1:A:24:GLY:H 1:A:23:ALA:HA 9 0.16 (1,85) 1:A:24:GLY:H 1:A:25:ILE:HA 9 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 2 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 2 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 2 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 4 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 4 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 8 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 8 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 8 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 8 0.16 (1,504) 1:A:72:MET:HB2 1:A:72:MET:H 24 0.16 (1,506) 1:A:19:ILE:HD11 1:A:18:GLY:HA2 24 0.16 (1,506) 1:A:19:ILE:HD13 1:A:18:GLY:HA2 24	(1,862)	1:A:10:VAL:HA	1:A:9:LEU:HD22	13	0.16
(1,85) 1:A:24:GLY:H 1:A:25:ILE:HA 9 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 2 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 2 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 2 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 4 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 4 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 8 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 8 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 8 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 8 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 8 0.16 (1,504) 1:A:72:MET:HB2 1:A:69:LEU:H 8 0.16 (1,506) 1:A:19:ILE:HD11 1:A:18:GLY:HA2 24 0.16 (1,506) 1:A:19:ILE:HD13 1:A:18:GLY:HA2 24 0.16 (1,506) 1:A:19:ILE:HD13 1:A:18:GLY:HA2 <	(1,862)	1:A:10:VAL:HA	1:A:9:LEU:HD23	13	0.16
(1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 2 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 2 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 2 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 4 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 4 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 8 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 8 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 8 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 8 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 8 0.16 (1,549) 1:A:72:MET:HB2 1:A:72:MET:H 24 0.16 (1,506) 1:A:19:ILE:HD11 1:A:18:GLY:HA2 24 0.16 (1,506) 1:A:19:ILE:HD12 1:A:18:GLY:HA2 24 0.16 (1,506) 1:A:19:ILE:HD13 1:A:18:GLY:HA2 24 0.16	(1,85)	1:A:24:GLY:H	1:A:23:ALA:HA	9	0.16
(1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 2 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 2 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 4 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 4 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 8 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 8 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 8 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 8 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 8 0.16 (1,549) 1:A:72:MET:HB2 1:A:69:LEU:H 8 0.16 (1,506) 1:A:19:ILE:HD11 1:A:18:GLY:HA2 24 0.16 (1,506) 1:A:19:ILE:HD12 1:A:18:GLY:HA2 24 0.16 (1,506) 1:A:19:ILE:HD13 1:A:18:GLY:HA2 24 0.16	(1,85)	1:A:24:GLY:H	1:A:25:ILE:HA	9	0.16
(1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 2 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 4 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 4 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 4 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 8 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 8 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 8 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 8 0.16 (1,549) 1:A:72:MET:HB2 1:A:72:MET:H 24 0.16 (1,506) 1:A:19:ILE:HD11 1:A:18:GLY:HA2 24 0.16 (1,506) 1:A:19:ILE:HD12 1:A:18:GLY:HA2 24 0.16 (1,506) 1:A:19:ILE:HD13 1:A:18:GLY:HA2 24 0.16	(1,813)	1:A:65:THR:HG21	1:A:69:LEU:H	2	0.16
(1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 4 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 4 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 4 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 8 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 8 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 8 0.16 (1,813) 1:A:72:MET:HB23 1:A:69:LEU:H 8 0.16 (1,549) 1:A:72:MET:HB2 1:A:72:MET:H 24 0.16 (1,506) 1:A:19:ILE:HD11 1:A:18:GLY:HA2 24 0.16 (1,506) 1:A:19:ILE:HD12 1:A:18:GLY:HA2 24 0.16 (1,506) 1:A:19:ILE:HD13 1:A:18:GLY:HA2 24 0.16	(1,813)	1:A:65:THR:HG22	1:A:69:LEU:H	2	0.16
(1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 4 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 4 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 8 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 8 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 8 0.16 (1,813) 1:A:72:MET:HB23 1:A:72:MET:H 24 0.16 (1,549) 1:A:72:MET:HB2 1:A:72:MET:H 24 0.16 (1,506) 1:A:19:ILE:HD11 1:A:18:GLY:HA2 24 0.16 (1,506) 1:A:19:ILE:HD12 1:A:18:GLY:HA2 24 0.16 (1,506) 1:A:19:ILE:HD13 1:A:18:GLY:HA2 24 0.16	(1,813)	1:A:65:THR:HG23	1:A:69:LEU:H	2	0.16
(1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 4 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 8 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 8 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 8 0.16 (1,813) 1:A:72:MET:HB23 1:A:72:MET:H 24 0.16 (1,549) 1:A:72:MET:HB2 1:A:72:MET:H 24 0.16 (1,506) 1:A:19:ILE:HD11 1:A:18:GLY:HA2 24 0.16 (1,506) 1:A:19:ILE:HD12 1:A:18:GLY:HA2 24 0.16 (1,506) 1:A:19:ILE:HD13 1:A:18:GLY:HA2 24 0.16	(1,813)	1:A:65:THR:HG21	1:A:69:LEU:H	4	0.16
(1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 8 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 8 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 8 0.16 (1,813) 1:A:72:MET:HB23 1:A:72:MET:H 24 0.16 (1,549) 1:A:72:MET:HB2 1:A:72:MET:H 24 0.16 (1,506) 1:A:19:ILE:HD11 1:A:18:GLY:HA2 24 0.16 (1,506) 1:A:19:ILE:HD13 1:A:18:GLY:HA2 24 0.16 (1,506) 1:A:19:ILE:HD13 1:A:18:GLY:HA2 24 0.16	(1,813)	1:A:65:THR:HG22	1:A:69:LEU:H	4	0.16
(1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 8 0.16 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 8 0.16 (1,549) 1:A:72:MET:HB2 1:A:72:MET:H 24 0.16 (1,506) 1:A:19:ILE:HD11 1:A:18:GLY:HA2 24 0.16 (1,506) 1:A:19:ILE:HD12 1:A:18:GLY:HA2 24 0.16 (1,506) 1:A:19:ILE:HD13 1:A:18:GLY:HA2 24 0.16	(1,813)	1:A:65:THR:HG23	1:A:69:LEU:H	4	0.16
(1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 8 0.16 (1,549) 1:A:72:MET:HB2 1:A:72:MET:H 24 0.16 (1,506) 1:A:19:ILE:HD11 1:A:18:GLY:HA2 24 0.16 (1,506) 1:A:19:ILE:HD12 1:A:18:GLY:HA2 24 0.16 (1,506) 1:A:19:ILE:HD13 1:A:18:GLY:HA2 24 0.16	_ `	1:A:65:THR:HG21	1:A:69:LEU:H	8	0.16
(1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 8 0.16 (1,549) 1:A:72:MET:HB2 1:A:72:MET:H 24 0.16 (1,506) 1:A:19:ILE:HD11 1:A:18:GLY:HA2 24 0.16 (1,506) 1:A:19:ILE:HD12 1:A:18:GLY:HA2 24 0.16 (1,506) 1:A:19:ILE:HD13 1:A:18:GLY:HA2 24 0.16	/	1:A:65:THR:HG22	1:A:69:LEU:H	8	0.16
(1,549) 1:A:72:MET:HB2 1:A:72:MET:H 24 0.16 (1,506) 1:A:19:ILE:HD11 1:A:18:GLY:HA2 24 0.16 (1,506) 1:A:19:ILE:HD12 1:A:18:GLY:HA2 24 0.16 (1,506) 1:A:19:ILE:HD13 1:A:18:GLY:HA2 24 0.16		1:A:65:THR:HG23	1:A:69:LEU:H	8	0.16
(1,506) 1:A:19:ILE:HD11 1:A:18:GLY:HA2 24 0.16 (1,506) 1:A:19:ILE:HD12 1:A:18:GLY:HA2 24 0.16 (1,506) 1:A:19:ILE:HD13 1:A:18:GLY:HA2 24 0.16		1:A:72:MET:HB2	1:A:72:MET:H	24	0.16
(1,506) 1:A:19:ILE:HD12 1:A:18:GLY:HA2 24 0.16 (1,506) 1:A:19:ILE:HD13 1:A:18:GLY:HA2 24 0.16		1:A:19:ILE:HD11	1:A:18:GLY:HA2	24	0.16
(1,506) 1:A:19:ILE:HD13 1:A:18:GLY:HA2 24 0.16		1:A:19:ILE:HD12	1:A:18:GLY:HA2	24	0.16
		1:A:19:ILE:HD13	1:A:18:GLY:HA2	24	0.16
		1:A:22:LEU:HD21	1:A:20:ARG:HB2	6	0.16
(1,475) 1:A:22:LEU:HD22 1:A:20:ARG:HB2 6 0.16	(1,475)	1:A:22:LEU:HD22	1:A:20:ARG:HB2	6	0.16
(1,475) 1:A:22:LEU:HD23 1:A:20:ARG:HB2 6 0.16		1:A:22:LEU:HD23	1:A:20:ARG:HB2	6	0.16



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,20)	1:A:66:LEU:HB3	1:A:19:ILE:HD11	14	0.16
(1,20)	1:A:66:LEU:HB3	1:A:19:ILE:HD12	14	0.16
(1,20)	1:A:66:LEU:HB3	1:A:19:ILE:HD13	14	0.16
(1,20)	1:A:66:LEU:HB3	1:A:69:LEU:HD21	14	0.16
(1,20)	1:A:66:LEU:HB3	1:A:69:LEU:HD22	14	0.16
(1,20)	1:A:66:LEU:HB3	1:A:69:LEU:HD23	14	0.16
(1,20)	1:A:66:LEU:HB3	1:A:27:LEU:HD21	14	0.16
(1,20)	1:A:66:LEU:HB3	1:A:27:LEU:HD22	14	0.16
(1,20)	1:A:66:LEU:HB3	1:A:27:LEU:HD23	14	0.16
(1,1415)	1:A:42:VAL:HG11	1:A:46:GLN:HE21	15	0.16
(1,1415)	1:A:42:VAL:HG12	1:A:46:GLN:HE21	15	0.16
(1,1415)	1:A:42:VAL:HG13	1:A:46:GLN:HE21	15	0.16
(1,1394)	1:A:44:VAL:HA	1:A:44:VAL:HG11	18	0.16
(1,1394)	1:A:44:VAL:HA	1:A:44:VAL:HG12	18	0.16
(1,1394)	1:A:44:VAL:HA	1:A:44:VAL:HG13	18	0.16
(1,1327)	1:A:68:LYS:HD2	1:A:71:GLU:HB2	6	0.16
(1,1327)	1:A:68:LYS:HD3	1:A:71:GLU:HB2	6	0.16
(1,1314)	1:A:64:LEU:HD21	1:A:68:LYS:HD2	12	0.16
(1,1314)	1:A:64:LEU:HD21	1:A:68:LYS:HD3	12	0.16
(1,1314)	1:A:64:LEU:HD22	1:A:68:LYS:HD2	12	0.16
(1,1314)	1:A:64:LEU:HD22	1:A:68:LYS:HD3	12	0.16
(1,1314)	1:A:64:LEU:HD23	1:A:68:LYS:HD2	12	0.16
(1,1314)	1:A:64:LEU:HD23	1:A:68:LYS:HD3	12	0.16
(1,851)	1:A:9:LEU:HA	1:A:9:LEU:HD21	6	0.15
(1,851)	1:A:9:LEU:HA	1:A:9:LEU:HD22	6	0.15
(1,851)	1:A:9:LEU:HA	1:A:9:LEU:HD23	6	0.15
(1,85)	1:A:24:GLY:H	1:A:23:ALA:HA	30	0.15
(1,85)	1:A:24:GLY:H	1:A:25:ILE:HA	30	0.15
(1,704)	1:A:59:ARG:HB2	1:A:59:ARG:H	9	0.15
(1,704)	1:A:59:ARG:HB2	1:A:59:ARG:H	12	0.15
(1,704)	1:A:59:ARG:HB2	1:A:59:ARG:H	14	0.15
(1,502)	1:A:19:ILE:HD11	1:A:25:ILE:HG13	9	0.15
(1,502)	1:A:19:ILE:HD12	1:A:25:ILE:HG13	9	0.15
(1,502)	1:A:19:ILE:HD13	1:A:25:ILE:HG13	9	0.15
(1,475)	1:A:22:LEU:HD21	1:A:20:ARG:HB2	16	0.15
(1,475)	1:A:22:LEU:HD22	1:A:20:ARG:HB2	16	0.15
(1,475)	1:A:22:LEU:HD23	1:A:20:ARG:HB2	16	0.15
(1,394)	1:A:19:ILE:HG21	1:A:25:ILE:HG13	6	0.15
(1,394)	1:A:19:ILE:HG22	1:A:25:ILE:HG13	6	0.15
(1,394)	1:A:19:ILE:HG23	1:A:25:ILE:HG13	6	0.15
(1,38)	1:A:58:ILE:HG21	1:A:32:ALA:HA	20	0.15
(1,38)	1:A:58:ILE:HG22	1:A:32:ALA:HA	20	0.15



Continued from previous page...

Key	$\frac{d\ from\ previous\ page.}{\mathbf{Atom-1}}$	Atom-2	Model	Violation (Å)
$\begin{array}{ c c }\hline (1,38) \\ \hline \end{array}$	1:A:58:ILE:HG23	1:A:32:ALA:HA	20	0.15
(1,38)	1:A:47:ILE:HG21	1:A:50:ARG:HA	20	0.15
(1,38)	1:A:47:ILE:HG21	1:A:50:ARG:HA	20	0.15
(1,38)	1:A:47:ILE:HG22	1:A:50:ARG:HA	20	0.15
(1,1727)	1:A:86:LYS:H	1:A:85:PRO:HA	5	0.15
(1,1727) $(1,1698)$	1:A:38:SER:H	1:A:39:LEU:H	30	0.15
(1,1098) (1,1584)	1:A:59:ARG:HG3	1:A:58:ILE:H	16	0.15
(1,1564) $(1,1569)$	1:A:10:VAL:HG21	1:A:70:GLN:HB2	7	0.15
('	1:A:10:VAL:HG21	1:A:70:GLN:HB3	7	0.15
(1,1569)			7	
(1,1569)	1:A:10:VAL:HG22	1:A:70:GLN:HB2		0.15
(1,1569)	1:A:10:VAL:HG22	1:A:70:GLN:HB3	7	0.15
(1,1569)	1:A:10:VAL:HG23	1:A:70:GLN:HB2	7	0.15
(1,1569)	1:A:10:VAL:HG23	1:A:70:GLN:HB3	7	0.15
(1,1327)	1:A:68:LYS:HD2	1:A:71:GLU:HB2	19	0.15
(1,1327)	1:A:68:LYS:HD3	1:A:71:GLU:HB2	19	0.15
(1,1163)	1:A:54:LEU:HD11	1:A:51:GLU:HB2	18	0.15
(1,1163)	1:A:54:LEU:HD12	1:A:51:GLU:HB2	18	0.15
(1,1163)	1:A:54:LEU:HD13	1:A:51:GLU:HB2	18	0.15
(1,1091)	1:A:39:LEU:HD11	1:A:39:LEU:HA	12	0.15
(1,1091)	1:A:39:LEU:HD12	1:A:39:LEU:HA	12	0.15
(1,1091)	1:A:39:LEU:HD13	1:A:39:LEU:HA	12	0.15
(1,1061)	1:A:36:LEU:HD21	1:A:38:SER:H	7	0.15
(1,1061)	1:A:36:LEU:HD22	1:A:38:SER:H	7	0.15
(1,1061)	1:A:36:LEU:HD23	1:A:38:SER:H	7	0.15
(1,1037)	1:A:36:LEU:HB3	1:A:40:MET:HA	29	0.15
(1,1028)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:33:ASP:H	14	0.15
(1,1028)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:33:ASP:H	14	0.15
(1,1028)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:33:ASP:H	14	0.15
(1,845)	1:A:8:ASP:HB2	1:A:11:LYS:HB2	14	0.14
(1,845)	1:A:8:ASP:HB2	1:A:11:LYS:HB3	14	0.14
(1,83)	1:A:73:SER:HB3	1:A:69:LEU:HD11	9	0.14
(1,83)	1:A:73:SER:HB3	1:A:69:LEU:HD12	9	0.14
(1,83)	1:A:73:SER:HB3	1:A:69:LEU:HD13	9	0.14
(1,83)	1:A:73:SER:HB3	1:A:69:LEU:HD21	9	0.14
(1,83)	1:A:73:SER:HB3	1:A:69:LEU:HD22	9	0.14
(1,83)	1:A:73:SER:HB3	1:A:69:LEU:HD23	9	0.14
(1,83)	1:A:73:SER:HB3	1:A:54:LEU:HD21	9	0.14
(1,83)	1:A:73:SER:HB3	1:A:54:LEU:HD22	9	0.14
(1,83)	1:A:73:SER:HB3	1:A:54:LEU:HD23	9	0.14
(1,813)	1:A:65:THR:HG21	1:A:69:LEU:H	6	0.14
(1,813)	1:A:65:THR:HG22	1:A:69:LEU:H	6	0.14
(1,813)	1:A:65:THR:HG23	1:A:69:LEU:H	6	0.14
\			Continue	



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,704)	1:A:59:ARG:HB2	1:A:59:ARG:H	19	0.14
(1,475)	1:A:22:LEU:HD21	1:A:20:ARG:HB2	18	0.14
(1,475)	1:A:22:LEU:HD22	1:A:20:ARG:HB2	18	0.14
(1,475)	1:A:22:LEU:HD23	1:A:20:ARG:HB2	18	0.14
(1,264)	1:A:32:ALA:HA	1:A:34:LEU:HD11	6	0.14
(1,264)	1:A:32:ALA:HA	1:A:34:LEU:HD12	6	0.14
(1,264)	1:A:32:ALA:HA	1:A:34:LEU:HD13	6	0.14
(1,264)	1:A:32:ALA:HA	1:A:34:LEU:HD11	7	0.14
(1,264)	1:A:32:ALA:HA	1:A:34:LEU:HD12	7	0.14
(1,264)	1:A:32:ALA:HA	1:A:34:LEU:HD13	7	0.14
(1,264)	1:A:32:ALA:HA	1:A:34:LEU:HD11	21	0.14
(1,264)	1:A:32:ALA:HA	1:A:34:LEU:HD12	21	0.14
(1,264)	1:A:32:ALA:HA	1:A:34:LEU:HD13	21	0.14
(1,264)	1:A:32:ALA:HA	1:A:34:LEU:HD11	30	0.14
(1,264)	1:A:32:ALA:HA	1:A:34:LEU:HD12	30	0.14
(1,264)	1:A:32:ALA:HA	1:A:34:LEU:HD13	30	0.14
(1,192)	1:A:29:SER:HB3	1:A:34:LEU:HD21	20	0.14
(1,192)	1:A:29:SER:HB3	1:A:34:LEU:HD22	20	0.14
(1,192)	1:A:29:SER:HB3	1:A:34:LEU:HD23	20	0.14
(1,1584)	1:A:59:ARG:HG3	1:A:58:ILE:H	12	0.14
(1,1584)	1:A:59:ARG:HG3	1:A:58:ILE:H	23	0.14
(1,1576)	1:A:66:LEU:HD11	1:A:65:THR:HA	14	0.14
(1,1576)	1:A:66:LEU:HD12	1:A:65:THR:HA	14	0.14
(1,1576)	1:A:66:LEU:HD13	1:A:65:THR:HA	14	0.14
(1,1576)	1:A:66:LEU:HD11	1:A:65:THR:HA	18	0.14
(1,1576)	1:A:66:LEU:HD12	1:A:65:THR:HA	18	0.14
(1,1576)	1:A:66:LEU:HD13	1:A:65:THR:HA	18	0.14
(1,1497)	1:A:65:THR:HG21	1:A:63:GLN:HB2	13	0.14
(1,1497)	1:A:65:THR:HG22	1:A:63:GLN:HB2	13	0.14
(1,1497)	1:A:65:THR:HG23	1:A:63:GLN:HB2	13	0.14
(1,1484)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:19:ILE:HB	9	0.14
(1,1484)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:19:ILE:HB	9	0.14
(1,1484)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:19:ILE:HB	9	0.14
(1,1376)	1:A:12:ALA:HB1	1:A:7:ARG:HD2	5	0.14
(1,1376)	1:A:12:ALA:HB1	1:A:7:ARG:HD3	5	0.14
(1,1376)	1:A:12:ALA:HB2	1:A:7:ARG:HD2	5	0.14
(1,1376)	1:A:12:ALA:HB2	1:A:7:ARG:HD3	5	0.14
(1,1376)	1:A:12:ALA:HB3	1:A:7:ARG:HD2	5	0.14
(1,1376)	1:A:12:ALA:HB3	1:A:7:ARG:HD3	5	0.14
(1,1369)	1:A:71:GLU:HG2	1:A:72:MET:H	7	0.14
(1,1327)	1:A:68:LYS:HD2	1:A:71:GLU:HB2	18	0.14
(1,1327)	1:A:68:LYS:HD3	1:A:71:GLU:HB2	18	0.14
		- 3:2		ort i



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

(1,1308) 1:A:64:LEU:HA 1:A:63:GLN:HE21 16 0.14 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG11 1:A:62:ARG:HB3 4 0.14 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG12 1:A:62:ARG:HB3 4 0.14 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG13 1:A:62:ARG:HB3 4 0.14 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG13 1:A:62:ARG:HB3 4 0.14 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG13 1:A:62:ARG:HB3 4 0.14 (1,1168) 1:A:61:VAL:HG13 1:A:62:ARG:HB3 4 0.14 (1,1168) 1:A:54:LEU:HG 1:A:56:LEU:HD21 17 0.14 (1,1168) 1:A:54:LEU:HG 1:A:56:LEU:HD23 17 0.14 (1,1168) 1:A:54:LEU:HG 1:A:56:LEU:HD22 26 0.14 (1,1168) 1:A:54:LEU:HG 1:A:56:LEU:HD23 26 0.14 (1,1061) 1:A:36:LEU:HD21 1:A:38:SER:H 11 0.14 (1,1061) 1:A:36:LEU:HD23 1:A:38:SER:H 11 0.14 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD21 1:A	
(1,1263) 1:A:61:VAL:HG12 1:A:62:ARG:HB3 4 0.14 (1,1263) 1:A:61:VAL:HG13 1:A:62:ARG:HB3 4 0.14 (1,1168) 1:A:54:LEU:HG 1:A:56:LEU:HD21 17 0.14 (1,1168) 1:A:54:LEU:HG 1:A:56:LEU:HD22 17 0.14 (1,1168) 1:A:54:LEU:HG 1:A:56:LEU:HD23 17 0.14 (1,1168) 1:A:54:LEU:HG 1:A:56:LEU:HD21 26 0.14 (1,1168) 1:A:54:LEU:HG 1:A:56:LEU:HD22 26 0.14 (1,1168) 1:A:54:LEU:HG 1:A:56:LEU:HD23 26 0.14 (1,1061) 1:A:36:LEU:HD21 1:A:38:SER:H 11 0.14 (1,1061) 1:A:36:LEU:HD22 1:A:38:SER:H 11 0.14 (1,1061) 1:A:36:LEU:HD23 1:A:38:SER:H 11 0.14 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:H 20 0.14 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:H 20 0.14 (1,9) 1:A:16:ILE:HG21 1:A:43:GL	
(1,1263) 1:A:61:VAL:HG13 1:A:62:ARG:HB3 4 0.14 (1,1168) 1:A:54:LEU:HG 1:A:56:LEU:HD21 17 0.14 (1,1168) 1:A:54:LEU:HG 1:A:56:LEU:HD22 17 0.14 (1,1168) 1:A:54:LEU:HG 1:A:56:LEU:HD23 17 0.14 (1,1168) 1:A:54:LEU:HG 1:A:56:LEU:HD21 26 0.14 (1,1168) 1:A:54:LEU:HG 1:A:56:LEU:HD22 26 0.14 (1,1168) 1:A:54:LEU:HG 1:A:56:LEU:HD23 26 0.14 (1,1061) 1:A:36:LEU:HD21 1:A:38:SER:H 11 0.14 (1,1061) 1:A:36:LEU:HD22 1:A:38:SER:H 11 0.14 (1,1061) 1:A:36:LEU:HD23 1:A:38:SER:H 11 0.14 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:H 20 0.14 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:H 20 0.14 (1,9) 1:A:16:ILE:HG21 1:A:43:GLU:H 23 0.13 (1,9) 1:A:16:ILE:HG22 1:A:43:GLU:H<	
(1,1168) 1:A:54:LEU:HG 1:A:56:LEU:HD21 17 0.14 (1,1168) 1:A:54:LEU:HG 1:A:56:LEU:HD22 17 0.14 (1,1168) 1:A:54:LEU:HG 1:A:56:LEU:HD23 17 0.14 (1,1168) 1:A:54:LEU:HG 1:A:56:LEU:HD21 26 0.14 (1,1168) 1:A:54:LEU:HG 1:A:56:LEU:HD22 26 0.14 (1,1168) 1:A:54:LEU:HG 1:A:56:LEU:HD23 26 0.14 (1,1061) 1:A:36:LEU:HD21 1:A:38:SER:H 11 0.14 (1,1061) 1:A:36:LEU:HD22 1:A:38:SER:H 11 0.14 (1,1061) 1:A:36:LEU:HD23 1:A:38:SER:H 11 0.14 (1,1061) 1:A:36:LEU:HD23 1:A:40:MET:HA 21 0.14 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:H 20 0.14 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:H 20 0.14 (1,9) 1:A:16:ILE:HG21 1:A:43:GLU:H 23 0.13 (1,9) 1:A:16:ILE:HG22 1:A:43:GLU:H<	
(1,1168) 1:A:54:LEU:HG 1:A:56:LEU:HD22 17 0.14 (1,1168) 1:A:54:LEU:HG 1:A:56:LEU:HD23 17 0.14 (1,1168) 1:A:54:LEU:HG 1:A:56:LEU:HD21 26 0.14 (1,1168) 1:A:54:LEU:HG 1:A:56:LEU:HD22 26 0.14 (1,1168) 1:A:54:LEU:HG 1:A:56:LEU:HD23 26 0.14 (1,1061) 1:A:36:LEU:HD21 1:A:38:SER:H 11 0.14 (1,1061) 1:A:36:LEU:HD22 1:A:38:SER:H 11 0.14 (1,1061) 1:A:36:LEU:HD23 1:A:38:SER:H 11 0.14 (1,1070) 1:A:36:LEU:HD23 1:A:38:SER:H 11 0.14 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:H 20 0.14 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:H 20 0.14 (1,9) 1:A:16:ILE:HG21 1:A:43:GLU:H 23 0.13 (1,9) 1:A:16:ILE:HG22 1:A:43:GLU:H 23 0.13	
(1,1168) 1:A:54:LEU:HG 1:A:56:LEU:HD23 17 0.14 (1,1168) 1:A:54:LEU:HG 1:A:56:LEU:HD21 26 0.14 (1,1168) 1:A:54:LEU:HG 1:A:56:LEU:HD22 26 0.14 (1,1168) 1:A:54:LEU:HG 1:A:56:LEU:HD23 26 0.14 (1,1061) 1:A:36:LEU:HD21 1:A:38:SER:H 11 0.14 (1,1061) 1:A:36:LEU:HD22 1:A:38:SER:H 11 0.14 (1,1061) 1:A:36:LEU:HD23 1:A:38:SER:H 11 0.14 (1,1037) 1:A:36:LEU:HD23 1:A:40:MET:HA 21 0.14 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:H 20 0.14 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:H 20 0.14 (1,9) 1:A:16:ILE:HG21 1:A:43:GLU:H 23 0.13 (1,9) 1:A:16:ILE:HG22 1:A:43:GLU:H 23 0.13	
(1,1168) 1:A:54:LEU:HG 1:A:56:LEU:HD21 26 0.14 (1,1168) 1:A:54:LEU:HG 1:A:56:LEU:HD22 26 0.14 (1,1168) 1:A:54:LEU:HG 1:A:56:LEU:HD23 26 0.14 (1,1061) 1:A:36:LEU:HD21 1:A:38:SER:H 11 0.14 (1,1061) 1:A:36:LEU:HD22 1:A:38:SER:H 11 0.14 (1,1061) 1:A:36:LEU:HD23 1:A:38:SER:H 11 0.14 (1,1037) 1:A:36:LEU:HD23 1:A:40:MET:HA 21 0.14 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:H 20 0.14 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:H 20 0.14 (1,9) 1:A:16:ILE:HG21 1:A:43:GLU:H 23 0.13 (1,9) 1:A:16:ILE:HG22 1:A:43:GLU:H 23 0.13	
(1,1168) 1:A:54:LEU:HG 1:A:56:LEU:HD22 26 0.14 (1,1168) 1:A:54:LEU:HG 1:A:56:LEU:HD23 26 0.14 (1,1061) 1:A:36:LEU:HD21 1:A:38:SER:H 11 0.14 (1,1061) 1:A:36:LEU:HD22 1:A:38:SER:H 11 0.14 (1,1061) 1:A:36:LEU:HD23 1:A:38:SER:H 11 0.14 (1,1037) 1:A:36:LEU:HD23 1:A:38:SER:H 11 0.14 (1,1028) 1:A:36:LEU:HD21 1:A:33:ASP:H 20 0.14 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:H 20 0.14 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:H 20 0.14 (1,9) 1:A:16:ILE:HG21 1:A:43:GLU:H 23 0.13 (1,9) 1:A:16:ILE:HG22 1:A:43:GLU:H 23 0.13	
(1,1168) 1:A:54:LEU:HG 1:A:56:LEU:HD23 26 0.14 (1,1061) 1:A:36:LEU:HD21 1:A:38:SER:H 11 0.14 (1,1061) 1:A:36:LEU:HD22 1:A:38:SER:H 11 0.14 (1,1061) 1:A:36:LEU:HD23 1:A:38:SER:H 11 0.14 (1,1037) 1:A:36:LEU:HD23 1:A:40:MET:HA 21 0.14 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:H 20 0.14 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:H 20 0.14 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:H 20 0.14 (1,9) 1:A:16:ILE:HG21 1:A:43:GLU:H 23 0.13 (1,9) 1:A:16:ILE:HG22 1:A:43:GLU:H 23 0.13	
(1,1061) 1:A:36:LEU:HD21 1:A:38:SER:H 11 0.14 (1,1061) 1:A:36:LEU:HD22 1:A:38:SER:H 11 0.14 (1,1061) 1:A:36:LEU:HD23 1:A:38:SER:H 11 0.14 (1,1037) 1:A:36:LEU:HD23 1:A:40:MET:HA 21 0.14 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:H 20 0.14 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:H 20 0.14 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:H 20 0.14 (1,9) 1:A:16:ILE:HG21 1:A:43:GLU:H 23 0.13 (1,9) 1:A:16:ILE:HG22 1:A:43:GLU:H 23 0.13	
(1,1061) 1:A:36:LEU:HD22 1:A:38:SER:H 11 0.14 (1,1061) 1:A:36:LEU:HD23 1:A:38:SER:H 11 0.14 (1,1037) 1:A:36:LEU:HB3 1:A:40:MET:HA 21 0.14 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:H 20 0.14 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:H 20 0.14 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:H 20 0.14 (1,9) 1:A:16:ILE:HG21 1:A:43:GLU:H 23 0.13 (1,9) 1:A:16:ILE:HG22 1:A:43:GLU:H 23 0.13	
(1,1061) 1:A:36:LEU:HD23 1:A:38:SER:H 11 0.14 (1,1037) 1:A:36:LEU:HB3 1:A:40:MET:HA 21 0.14 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:H 20 0.14 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:H 20 0.14 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:H 20 0.14 (1,9) 1:A:16:ILE:HG21 1:A:43:GLU:H 23 0.13 (1,9) 1:A:16:ILE:HG22 1:A:43:GLU:H 23 0.13	
(1,1037) 1:A:36:LEU:HB3 1:A:40:MET:HA 21 0.14 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:H 20 0.14 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:H 20 0.14 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:H 20 0.14 (1,9) 1:A:16:ILE:HG21 1:A:43:GLU:H 23 0.13 (1,9) 1:A:16:ILE:HG22 1:A:43:GLU:H 23 0.13	
(1,1028) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:33:ASP:H 20 0.14 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:H 20 0.14 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:H 20 0.14 (1,9) 1:A:16:ILE:HG21 1:A:43:GLU:H 23 0.13 (1,9) 1:A:16:ILE:HG22 1:A:43:GLU:H 23 0.13	
(1,1028) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:33:ASP:H 20 0.14 (1,1028) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:H 20 0.14 (1,9) 1:A:16:ILE:HG21 1:A:43:GLU:H 23 0.13 (1,9) 1:A:16:ILE:HG22 1:A:43:GLU:H 23 0.13	
(1,1028) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:33:ASP:H 20 0.14 (1,9) 1:A:16:ILE:HG21 1:A:43:GLU:H 23 0.13 (1,9) 1:A:16:ILE:HG22 1:A:43:GLU:H 23 0.13	
(1,9) 1:A:16:ILE:HG21 1:A:43:GLU:H 23 0.13 (1,9) 1:A:16:ILE:HG22 1:A:43:GLU:H 23 0.13	
(1,9) 1:A:16:ILE:HG22 1:A:43:GLU:H 23 0.13	
() /	
(1.0) 1. Λ .16. Π F. Π C23 1. Λ .42. $C\Pi$ Π . Π 22 0.12	
(1,9) 1.A.10.1LE.1IG25 1.A.43.GLU.H 25 0.15	
(1,9) 1:A:16:ILE:HG21 1:A:42:VAL:H 23 0.13	
(1,9) 1:A:16:ILE:HG22 1:A:42:VAL:H 23 0.13	
(1,9) 1:A:16:ILE:HG23 1:A:42:VAL:H 23 0.13	
(1,9) 1:A:47:ILE:HG21 1:A:50:ARG:HE 23 0.13	
(1,9) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:50:ARG:HE 23 0.13	
(1,9) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:50:ARG:HE 23 0.13	
(1,85) 1:A:24:GLY:H 1:A:23:ALA:HA 12 0.13	
(1,85) 1:A:24:GLY:H 1:A:25:ILE:HA 12 0.13	
(1,85) 1:A:24:GLY:H 1:A:23:ALA:HA 18 0.13	
(1,85) 1:A:24:GLY:H 1:A:25:ILE:HA 18 0.13	
(1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 1 0.13	
(1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 1 0.13	
(1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 1 0.13	
(1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 3 0.13	
(1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 3 0.13	
(1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 3 0.13	
(1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 5 0.13	
(1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 5 0.13	
(1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 5 0.13	
(1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 7 0.13	
(1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 7 0.13	
(1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 7 0.13	



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,813)	1:A:65:THR:HG21	1:A:69:LEU:H	28	0.13
(1,813)	1:A:65:THR:HG22	1:A:69:LEU:H	28	0.13
(1,813)	1:A:65:THR:HG23	1:A:69:LEU:H	28	0.13
(1,72)	1:A:48:LEU:HD11	1:A:6:GLN:HE21	30	0.13
(1,72)	1:A:48:LEU:HD12	1:A:6:GLN:HE21	30	0.13
(1,72)	1:A:48:LEU:HD13	1:A:6:GLN:HE21	30	0.13
(1,72)	1:A:9:LEU:HD21	1:A:6:GLN:HE21	30	0.13
(1,72)	1:A:9:LEU:HD22	1:A:6:GLN:HE21	30	0.13
(1,72)	1:A:9:LEU:HD23	1:A:6:GLN:HE21	30	0.13
(1,549)	1:A:72:MET:HB2	1:A:72:MET:H	8	0.13
(1,54)	1:A:20:ARG:HG3	1:A:67:ARG:HD3	25	0.13
(1,54)	1:A:20:ARG:HG3	1:A:10:VAL:HA	25	0.13
(1,54)	1:A:7:ARG:HG2	1:A:10:VAL:HA	25	0.13
(1,54)	1:A:7:ARG:HG3	1:A:10:VAL:HA	25	0.13
(1,479)	1:A:23:ALA:HA	1:A:21:ASP:HA	19	0.13
(1,469)	1:A:17:LEU:HD11	1:A:16:ILE:H	7	0.13
(1,469)	1:A:17:LEU:HD12	1:A:16:ILE:H	7	0.13
(1,469)	1:A:17:LEU:HD13	1:A:16:ILE:H	7	0.13
(1,291)	1:A:17:LEU:HG	1:A:17:LEU:H	7	0.13
(1,264)	1:A:32:ALA:HA	1:A:34:LEU:HD11	12	0.13
(1,264)	1:A:32:ALA:HA	1:A:34:LEU:HD12	12	0.13
(1,264)	1:A:32:ALA:HA	1:A:34:LEU:HD13	12	0.13
(1,264)	1:A:32:ALA:HA	1:A:34:LEU:HD11	29	0.13
(1,264)	1:A:32:ALA:HA	1:A:34:LEU:HD12	29	0.13
(1,264)	1:A:32:ALA:HA	1:A:34:LEU:HD13	29	0.13
(1,213)	1:A:30:SER:HB3	1:A:33:ASP:HA	27	0.13
(1,1727)	1:A:86:LYS:H	1:A:85:PRO:HA	22	0.13
(1,1638)	1:A:57:PRO:HB3	1:A:59:ARG:HB2	9	0.13
(1,1484)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:19:ILE:HB	1	0.13
(1,1484)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:19:ILE:HB	1	0.13
(1,1484)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:19:ILE:HB	1	0.13
(1,1484)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:19:ILE:HB	4	0.13
(1,1484)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:19:ILE:HB	4	0.13
(1,1484)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:19:ILE:HB	4	0.13
(1,1484)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:19:ILE:HB	12	0.13
(1,1484)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:19:ILE:HB	12	0.13
(1,1484)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:19:ILE:HB	12	0.13
(1,1484)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:19:ILE:HB	18	0.13
(1,1484)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:19:ILE:HB	18	0.13
(1,1484)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:19:ILE:HB	18	0.13
(1,1484)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:19:ILE:HB	25	0.13
(1,1484)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:19:ILE:HB	25	0.13



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1484)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:19:ILE:HB	25	0.13
(1,1263)	1:A:61:VAL:HG11	1:A:62:ARG:HB3	18	0.13
(1,1263)	1:A:61:VAL:HG12	1:A:62:ARG:HB3	18	0.13
(1,1263)	1:A:61:VAL:HG13	1:A:62:ARG:HB3	18	0.13
(1,1107)	1:A:48:LEU:HA	1:A:52:HIS:HB2	17	0.13
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD11	1:A:44:VAL:HG21	18	0.13
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD11	1:A:44:VAL:HG22	18	0.13
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD11	1:A:44:VAL:HG23	18	0.13
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD12	1:A:44:VAL:HG21	18	0.13
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD12	1:A:44:VAL:HG22	18	0.13
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD12	1:A:44:VAL:HG23	18	0.13
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD13	1:A:44:VAL:HG21	18	0.13
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD13	1:A:44:VAL:HG22	18	0.13
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD13	1:A:44:VAL:HG23	18	0.13
(1,1037)	1:A:36:LEU:HB3	1:A:40:MET:HA	6	0.13
(1,1037)	1:A:36:LEU:HB3	1:A:40:MET:HA	26	0.13
(1,1037)	1:A:36:LEU:HB3	1:A:40:MET:HA	27	0.13
(1,1017)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:31:LEU:HA	28	0.13
(1,1017)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:31:LEU:HA	28	0.13
(1,1017)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:31:LEU:HA	28	0.13
(1,972)	1:A:27:LEU:HD21	1:A:70:GLN:HE21	21	0.12
(1,972)	1:A:27:LEU:HD22	1:A:70:GLN:HE21	21	0.12
(1,972)	1:A:27:LEU:HD23	1:A:70:GLN:HE21	21	0.12
(1,85)	1:A:24:GLY:H	1:A:23:ALA:HA	25	0.12
(1,85)	1:A:24:GLY:H	1:A:25:ILE:HA	25	0.12
(1,85)	1:A:24:GLY:H	1:A:23:ALA:HA	26	0.12
(1,85)	1:A:24:GLY:H	1:A:25:ILE:HA	26	0.12
(1,85)	1:A:24:GLY:H	1:A:23:ALA:HA	28	0.12
(1,85)	1:A:24:GLY:H	1:A:25:ILE:HA	28	0.12
(1,813)	1:A:65:THR:HG21	1:A:69:LEU:H	10	0.12
(1,813)	1:A:65:THR:HG22	1:A:69:LEU:H	10	0.12
(1,813)	1:A:65:THR:HG23	1:A:69:LEU:H	10	0.12
(1,813)	1:A:65:THR:HG21	1:A:69:LEU:H	12	0.12
(1,813)	1:A:65:THR:HG22	1:A:69:LEU:H	12	0.12
(1,813)	1:A:65:THR:HG23	1:A:69:LEU:H	12	0.12
(1,778)	1:A:52:HIS:HB3	1:A:6:GLN:HE21	22	0.12
(1,662)	1:A:49:GLU:HA	1:A:46:GLN:HA	10	0.12
(1,662)	1:A:49:GLU:HA	1:A:46:GLN:HA	18	0.12
(1,662)	1:A:49:GLU:HA	1:A:46:GLN:HA	21	0.12
(1,506)	1:A:19:ILE:HD11	1:A:18:GLY:HA2	12	0.12
(1,506)	1:A:19:ILE:HD12	1:A:18:GLY:HA2	12	0.12
(1,506)	1:A:19:ILE:HD13	1:A:18:GLY:HA2	12	0.12



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

(1,391) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:21:ASP:HA 25 0.12 (1,391) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:21:ASP:HA 25 0.12 (1,391) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:21:ASP:HA 25 0.12 (1,38) 1:A:58:ILE:HG21 1:A:32:ALA:HA 14 0.12 (1,38) 1:A:58:ILE:HG22 1:A:32:ALA:HA 14 0.12 (1,38) 1:A:58:ILE:HG23 1:A:32:ALA:HA 14 0.12 (1,38) 1:A:47:ILE:HG21 1:A:50:ARG:HA 14 0.12 (1,38) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:50:ARG:HA 14 0.12 (1,38) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:50:ARG:HA 14 0.12 (1,38) 1:A:32:ALA:HG23 1:A:50:ARG:HA 14 0.12 (1,38) 1:A:32:ALA:HG23 1:A:34:LEU:HD11 2 0.12 (1,264) 1:A:33:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 0.12 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 1 0.12 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:62:ARG:HG3 9	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,391) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:21:ASP:HA 25 0.12 (1,38) 1:A:58:ILE:HG21 1:A:32:ALA:HA 14 0.12 (1,38) 1:A:58:ILE:HG22 1:A:32:ALA:HA 14 0.12 (1,38) 1:A:58:ILE:HG23 1:A:32:ALA:HA 14 0.12 (1,38) 1:A:47:ILE:HG21 1:A:50:ARG:HA 14 0.12 (1,38) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:50:ARG:HA 14 0.12 (1,38) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:50:ARG:HA 14 0.12 (1,38) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:50:ARG:HA 14 0.12 (1,38) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:50:ARG:HA 14 0.12 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 2 0.12 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 2 0.12 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 18 0.12 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 18 0.12 (1,264) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3	(1,391)	1:A:19:ILE:HG21	1:A:21:ASP:HA	25	0.12
(1,38) 1:A:58:ILE:HG21 1:A:32:ALA:HA 14 0.12 (1,38) 1:A:58:ILE:HG22 1:A:32:ALA:HA 14 0.12 (1,38) 1:A:58:ILE:HG23 1:A:32:ALA:HA 14 0.12 (1,38) 1:A:47:ILE:HG21 1:A:50:ARG:HA 14 0.12 (1,38) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:50:ARG:HA 14 0.12 (1,38) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:50:ARG:HA 14 0.12 (1,38) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:50:ARG:HA 14 0.12 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 2 0.12 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 2 0.12 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 2 0.12 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 18 0.12 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 18 0.12 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:62:ARG:HG3 9 0.12 (1,239) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3	(1,391)	1:A:19:ILE:HG22	1:A:21:ASP:HA	25	0.12
(1,38) 1:A:58:ILE:HG22 1:A:32:ALA:HA 14 0.12 (1,38) 1:A:58:ILE:HG23 1:A:32:ALA:HA 14 0.12 (1,38) 1:A:47:ILE:HG21 1:A:50:ARG:HA 14 0.12 (1,38) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:50:ARG:HA 14 0.12 (1,38) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:50:ARG:HA 14 0.12 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:50:ARG:HA 14 0.12 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 2 0.12 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 2 0.12 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 2 0.12 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 18 0.12 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 18 0.12 (1,264) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 9 0.12 (1,239) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 9 0.12 (1,239) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:62:ARG:HG3	(1,391)	1:A:19:ILE:HG23	1:A:21:ASP:HA	25	0.12
(1,38) 1:A:58:ILE:HG23 1:A:32:ALA:HA 14 0.12 (1,38) 1:A:47:ILE:HG21 1:A:50:ARG:HA 14 0.12 (1,38) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:50:ARG:HA 14 0.12 (1,38) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:50:ARG:HA 14 0.12 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 2 0.12 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 2 0.12 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 2 0.12 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 18 0.12 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 18 0.12 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 18 0.12 (1,264) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 9 0.12 (1,264) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 9 0.12 (1,239) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 9 0.12 (1,239) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:62:ARG:HG3	(1,38)	1:A:58:ILE:HG21	1:A:32:ALA:HA	14	0.12
(1,38) 1:A:47:ILE:HG21 1:A:50:ARG:HA 14 0.12 (1,38) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:50:ARG:HA 14 0.12 (1,38) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:50:ARG:HA 14 0.12 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 2 0.12 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 2 0.12 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 2 0.12 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 18 0.12 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 18 0.12 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 18 0.12 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 18 0.12 (1,239) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 9 0.12 (1,239) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:62:ARG:HG3 9 0.12 (1,239) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 29 0.12 (1,239) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:62:ARG:HG3	(1,38)	1:A:58:ILE:HG22	1:A:32:ALA:HA	14	0.12
(1,38) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:50:ARG:HA 14 0.12 (1,38) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:50:ARG:HA 14 0.12 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 2 0.12 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 2 0.12 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 2 0.12 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 18 0.12 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 18 0.12 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 18 0.12 (1,264) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 9 0.12 (1,239) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 9 0.12 (1,239) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:62:ARG:HG3 9 0.12 (1,239) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 29 0.12 (1,239) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:62:ARG:HG3 29 0.12 (1,239) 1:A:31:EU:HD12 3	(1,38)	1:A:58:ILE:HG23	1:A:32:ALA:HA	14	0.12
(1,38) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:50:ARG:HA 14 0.12 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 2 0.12 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 2 0.12 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 2 0.12 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 18 0.12 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 18 0.12 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 18 0.12 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 18 0.12 (1,264) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 9 0.12 (1,239) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 9 0.12 (1,239) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:62:ARG:HG3 9 0.12 (1,239) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 29 0.12 (1,239) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:62:ARG:HG3 29 0.12 (1,192) 1:A:39:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD21 <td>(1,38)</td> <td>1:A:47:ILE:HG21</td> <td>1:A:50:ARG:HA</td> <td>14</td> <td>0.12</td>	(1,38)	1:A:47:ILE:HG21	1:A:50:ARG:HA	14	0.12
(1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 2 0.12 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 2 0.12 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 2 0.12 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 18 0.12 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 18 0.12 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 18 0.12 (1,239) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 9 0.12 (1,239) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:62:ARG:HG3 9 0.12 (1,239) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:62:ARG:HG3 29 0.12 (1,239) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:62:ARG:HG3 29 0.12 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD21 </td <td>(1,38)</td> <td>1:A:47:ILE:HG22</td> <td>1:A:50:ARG:HA</td> <td>14</td> <td>0.12</td>	(1,38)	1:A:47:ILE:HG22	1:A:50:ARG:HA	14	0.12
(1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 2 0.12 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 2 0.12 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 18 0.12 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 18 0.12 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 18 0.12 (1,239) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 9 0.12 (1,239) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:62:ARG:HG3 9 0.12 (1,239) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:62:ARG:HG3 9 0.12 (1,239) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 29 0.12 (1,239) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:62:ARG:HG3 29 0.12 (1,239) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:62:ARG:HG3 29 0.12 (1,239) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:62:ARG:HG3 29 0.12 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD21 3 0.12 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD2	(1,38)	1:A:47:ILE:HG23	1:A:50:ARG:HA	14	0.12
(1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 2 0.12 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 18 0.12 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 18 0.12 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 18 0.12 (1,239) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 9 0.12 (1,239) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:62:ARG:HG3 9 0.12 (1,239) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:62:ARG:HG3 9 0.12 (1,239) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 29 0.12 (1,239) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:62:ARG:HG3 29 0.12 (1,239) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:62:ARG:HG3 29 0.12 (1,239) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:62:ARG:HG3 29 0.12 (1,292) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD21 3 0.12 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD22 3 0.12 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:74:SER:H <td>(1,264)</td> <td>1:A:32:ALA:HA</td> <td>1:A:34:LEU:HD11</td> <td>2</td> <td>0.12</td>	(1,264)	1:A:32:ALA:HA	1:A:34:LEU:HD11	2	0.12
(1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 18 0.12 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 18 0.12 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 18 0.12 (1,239) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 9 0.12 (1,239) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:62:ARG:HG3 9 0.12 (1,239) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:62:ARG:HG3 29 0.12 (1,239) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 29 0.12 (1,239) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:62:ARG:HG3 29 0.12 (1,239) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:62:ARG:HG3 29 0.12 (1,192) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:62:ARG:HG3 29 0.12 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD21 3 0.12 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD22 3 0.12 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 18 0.12 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:70:GLN:HG3 <td>(1,264)</td> <td>1:A:32:ALA:HA</td> <td>1:A:34:LEU:HD12</td> <td>2</td> <td>0.12</td>	(1,264)	1:A:32:ALA:HA	1:A:34:LEU:HD12	2	0.12
(1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 18 0.12 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 18 0.12 (1,239) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 9 0.12 (1,239) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:62:ARG:HG3 9 0.12 (1,239) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:62:ARG:HG3 29 0.12 (1,239) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:62:ARG:HG3 29 0.12 (1,239) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:62:ARG:HG3 29 0.12 (1,239) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:62:ARG:HG3 29 0.12 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD21 3 0.12 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD22 3 0.12 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:74:SER:H 18 0.12 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 18 0.12 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 7 0.12 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3	(1,264)	1:A:32:ALA:HA	1:A:34:LEU:HD13	2	0.12
(1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 18 0.12 (1,239) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 9 0.12 (1,239) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:62:ARG:HG3 9 0.12 (1,239) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:62:ARG:HG3 9 0.12 (1,239) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 29 0.12 (1,239) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:62:ARG:HG3 29 0.12 (1,239) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:62:ARG:HG3 29 0.12 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD21 3 0.12 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD22 3 0.12 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD23 3 0.12 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:74:SER:H 18 0.12 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 18 0.12 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 7 0.12 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3	(1,264)	1:A:32:ALA:HA	1:A:34:LEU:HD11	18	0.12
(1,239) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 9 0.12 (1,239) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:62:ARG:HG3 9 0.12 (1,239) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:62:ARG:HG3 9 0.12 (1,239) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 29 0.12 (1,239) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:62:ARG:HG3 29 0.12 (1,239) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:62:ARG:HG3 29 0.12 (1,239) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:62:ARG:HG3 29 0.12 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD21 3 0.12 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD22 3 0.12 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD23 3 0.12 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:74:SER:H 18 0.12 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 18 0.12 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 7 0.12 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3	(1,264)	1:A:32:ALA:HA	1:A:34:LEU:HD12	18	0.12
(1,239) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:62:ARG:HG3 9 0.12 (1,239) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:62:ARG:HG3 9 0.12 (1,239) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 29 0.12 (1,239) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:62:ARG:HG3 29 0.12 (1,239) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:62:ARG:HG3 29 0.12 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD21 3 0.12 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD22 3 0.12 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD23 3 0.12 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:74:SER:H 18 0.12 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 18 0.12 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 7 0.12 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 7 0.12 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 7 0.12	(1,264)	1:A:32:ALA:HA	1:A:34:LEU:HD13	18	0.12
(1,239) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:62:ARG:HG3 9 0.12 (1,239) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 29 0.12 (1,239) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:62:ARG:HG3 29 0.12 (1,239) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:62:ARG:HG3 29 0.12 (1,239) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:62:ARG:HG3 29 0.12 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD21 3 0.12 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD22 3 0.12 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD23 3 0.12 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:74:SER:H 18 0.12 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 18 0.12 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 7 0.12 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 7 0.12 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 7 0.12	(1,239)	1:A:31:LEU:HD11	1:A:62:ARG:HG3	9	0.12
(1,239) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 29 0.12 (1,239) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:62:ARG:HG3 29 0.12 (1,239) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:62:ARG:HG3 29 0.12 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD21 3 0.12 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD22 3 0.12 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD23 3 0.12 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:74:SER:H 18 0.12 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 18 0.12 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 7 0.12 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 7 0.12 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 7 0.12	(1,239)	1:A:31:LEU:HD12	1:A:62:ARG:HG3	9	0.12
(1,239) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:62:ARG:HG3 29 0.12 (1,239) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:62:ARG:HG3 29 0.12 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD21 3 0.12 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD22 3 0.12 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD23 3 0.12 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:74:SER:H 18 0.12 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 18 0.12 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 7 0.12 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 7 0.12 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 7 0.12	(1,239)	1:A:31:LEU:HD13	1:A:62:ARG:HG3	9	0.12
(1,239) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:62:ARG:HG3 29 0.12 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD21 3 0.12 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD22 3 0.12 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD23 3 0.12 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:74:SER:H 18 0.12 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 18 0.12 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 7 0.12 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 7 0.12 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 7 0.12	(1,239)	1:A:31:LEU:HD11	1:A:62:ARG:HG3	29	0.12
(1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD21 3 0.12 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD22 3 0.12 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD23 3 0.12 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:74:SER:H 18 0.12 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 18 0.12 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 7 0.12 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 7 0.12 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 7 0.12	(1,239)	1:A:31:LEU:HD12	1:A:62:ARG:HG3	29	0.12
(1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD22 3 0.12 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD23 3 0.12 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:74:SER:H 18 0.12 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 18 0.12 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 7 0.12 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 7 0.12 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 7 0.12	(1,239)	1:A:31:LEU:HD13	1:A:62:ARG:HG3	29	0.12
(1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD23 3 0.12 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:74:SER:H 18 0.12 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 18 0.12 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 7 0.12 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 7 0.12 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 7 0.12	(1,192)	1:A:29:SER:HB3	1:A:34:LEU:HD21	3	0.12
(1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:74:SER:H 18 0.12 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 18 0.12 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 7 0.12 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 7 0.12 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 7 0.12	(1,192)	1:A:29:SER:HB3	1:A:34:LEU:HD22	3	0.12
(1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 18 0.12 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 7 0.12 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 7 0.12 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 7 0.12	(1,192)	1:A:29:SER:HB3	1:A:34:LEU:HD23	3	0.12
(1,1581) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:70:GLN:HG3 7 0.12 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 7 0.12 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 7 0.12	(1,18)	1:A:71:GLU:HA	1:A:74:SER:H	18	0.12
(1,1581) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:70:GLN:HG3 7 0.12 (1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 7 0.12	(1,18)	1:A:71:GLU:HA	1:A:69:LEU:H	18	0.12
(1,1581) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:70:GLN:HG3 7 0.12	(1,1581)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:70:GLN:HG3	7	0.12
	(1,1581)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:70:GLN:HG3	7	0.12
(1.1560) 1. A. 10. VAL. HC21 1. A. 70. CLIN, HD2 2 0.12	(1,1581)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:70:GLN:HG3	7	0.12
$\lfloor (1,1509) \rfloor 1:A:10:VAL:\PiG21 \rfloor 1:A:70:GLN:\PiB2 \rfloor 3 \rfloor 0.12$	(1,1569)	1:A:10:VAL:HG21	1:A:70:GLN:HB2	3	0.12
(1,1569) 1:A:10:VAL:HG21 1:A:70:GLN:HB3 3 0.12	(1,1569)	1:A:10:VAL:HG21	1:A:70:GLN:HB3	3	0.12
(1,1569) 1:A:10:VAL:HG22 1:A:70:GLN:HB2 3 0.12	(1,1569)	1:A:10:VAL:HG22	1:A:70:GLN:HB2	3	0.12
(1,1569) 1:A:10:VAL:HG22 1:A:70:GLN:HB3 3 0.12	(1,1569)	1:A:10:VAL:HG22	1:A:70:GLN:HB3	3	0.12
(1,1569) 1:A:10:VAL:HG23 1:A:70:GLN:HB2 3 0.12	(1,1569)	1:A:10:VAL:HG23	1:A:70:GLN:HB2	3	0.12
(1,1569) 1:A:10:VAL:HG23 1:A:70:GLN:HB3 3 0.12		1:A:10:VAL:HG23	1:A:70:GLN:HB3	3	0.12
(1,1545) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:45:ARG:HE 9 0.12		1:A:44:VAL:HG21	1:A:45:ARG:HE	9	0.12
(1,1545) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:45:ARG:HE 9 0.12	(1,1545)	1:A:44:VAL:HG22	1:A:45:ARG:HE	9	0.12
(1,1545) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:45:ARG:HE 9 0.12	(1,1545)	1:A:44:VAL:HG23	1:A:45:ARG:HE	9	0.12
(1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 21 0.12	(1,1484)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:19:ILE:HB	21	0.12
(1,1484) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:19:ILE:HB 21 0.12	(1,1484)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:19:ILE:HB	21	0.12
(1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 21 0.12	(1,1484)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:19:ILE:HB	21	0.12
(1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 28 0.12	(1,1484)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:19:ILE:HB	28	0.12



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1484)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:19:ILE:HB	28	0.12
(1,1484)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:19:ILE:HB	28	0.12
(1,1400)	1:A:44:VAL:HB	1:A:45:ARG:HE	18	0.12
(1,1369)	1:A:71:GLU:HG2	1:A:72:MET:H	5	0.12
(1,1327)	1:A:68:LYS:HD2	1:A:71:GLU:HB2	8	0.12
(1,1327)	1:A:68:LYS:HD3	1:A:71:GLU:HB2	8	0.12
(1,1276)	1:A:62:ARG:HB3	1:A:32:ALA:HB1	5	0.12
(1,1276)	1:A:62:ARG:HB3	1:A:32:ALA:HB2	5	0.12
(1,1276)	1:A:62:ARG:HB3	1:A:32:ALA:HB3	5	0.12
(1,1263)	1:A:61:VAL:HG11	1:A:62:ARG:HB3	20	0.12
(1,1263)	1:A:61:VAL:HG12	1:A:62:ARG:HB3	20	0.12
(1,1263)	1:A:61:VAL:HG13	1:A:62:ARG:HB3	20	0.12
(1,1091)	1:A:39:LEU:HD11	1:A:39:LEU:HA	27	0.12
(1,1091)	1:A:39:LEU:HD12	1:A:39:LEU:HA	27	0.12
(1,1091)	1:A:39:LEU:HD13	1:A:39:LEU:HA	27	0.12
(1,1037)	1:A:36:LEU:HB3	1:A:40:MET:HA	22	0.12
(1,1018)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:29:SER:HB2	3	0.12
(1,1018)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:29:SER:HB2	3	0.12
(1,1018)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:29:SER:HB2	3	0.12
(1,1017)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:31:LEU:HA	19	0.12
(1,1017)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:31:LEU:HA	19	0.12
(1,1017)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:31:LEU:HA	19	0.12
(1,1017)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:31:LEU:HA	21	0.12
(1,1017)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:31:LEU:HA	21	0.12
(1,1017)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:31:LEU:HA	21	0.12
(1,1017)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:31:LEU:HA	30	0.12
(1,1017)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:31:LEU:HA	30	0.12
(1,1017)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:31:LEU:HA	30	0.12
(1,1012)	1:A:34:LEU:HD11	1:A:31:LEU:H	19	0.12
(1,1012)	1:A:34:LEU:HD12	1:A:31:LEU:H	19	0.12
(1,1012)	1:A:34:LEU:HD13	1:A:31:LEU:H	19	0.12
(1,9)	1:A:16:ILE:HG21	1:A:43:GLU:H	4	0.11
(1,9)	1:A:16:ILE:HG22	1:A:43:GLU:H	4	0.11
(1,9)	1:A:16:ILE:HG23	1:A:43:GLU:H	4	0.11
(1,9)	1:A:16:ILE:HG21	1:A:42:VAL:H	4	0.11
(1,9)	1:A:16:ILE:HG22	1:A:42:VAL:H	4	0.11
(1,9)	1:A:16:ILE:HG23	1:A:42:VAL:H	4	0.11
(1,9)	1:A:47:ILE:HG21	1:A:50:ARG:HE	4	0.11
(1,9)	1:A:47:ILE:HG22	1:A:50:ARG:HE	4	0.11
(1,9)	1:A:47:ILE:HG23	1:A:50:ARG:HE	4	0.11
(1,896)	1:A:47:ILE:HG21	1:A:6:GLN:HE21	6	0.11
(1,896)	1:A:47:ILE:HG22	1:A:6:GLN:HE21	6	0.11



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,896)	1:A:47:ILE:HG23	1:A:6:GLN:HE21	6	0.11
(1,862)	1:A:10:VAL:HA	1:A:9:LEU:HD21	8	0.11
(1,862)	1:A:10:VAL:HA	1:A:9:LEU:HD22	8	0.11
(1,862)	1:A:10:VAL:HA	1:A:9:LEU:HD23	8	0.11
(1,85)	1:A:24:GLY:H	1:A:23:ALA:HA	11	0.11
(1,85)	1:A:24:GLY:H	1:A:25:ILE:HA	11	0.11
(1,85)	1:A:24:GLY:H	1:A:23:ALA:HA	23	0.11
(1,85)	1:A:24:GLY:H	1:A:25:ILE:HA	23	0.11
(1,841)	1:A:8:ASP:HB2	1:A:11:LYS:H	25	0.11
(1,83)	1:A:73:SER:HB3	1:A:69:LEU:HD11	19	0.11
(1,83)	1:A:73:SER:HB3	1:A:69:LEU:HD12	19	0.11
(1,83)	1:A:73:SER:HB3	1:A:69:LEU:HD13	19	0.11
(1,83)	1:A:73:SER:HB3	1:A:69:LEU:HD21	19	0.11
(1,83)	1:A:73:SER:HB3	1:A:69:LEU:HD22	19	0.11
(1,83)	1:A:73:SER:HB3	1:A:69:LEU:HD23	19	0.11
(1,83)	1:A:73:SER:HB3	1:A:54:LEU:HD21	19	0.11
(1,83)	1:A:73:SER:HB3	1:A:54:LEU:HD22	19	0.11
(1,83)	1:A:73:SER:HB3	1:A:54:LEU:HD23	19	0.11
(1,813)	1:A:65:THR:HG21	1:A:69:LEU:H	27	0.11
(1,813)	1:A:65:THR:HG22	1:A:69:LEU:H	27	0.11
(1,813)	1:A:65:THR:HG23	1:A:69:LEU:H	27	0.11
(1,806)	1:A:65:THR:HG21	1:A:67:ARG:HB2	2	0.11
(1,806)	1:A:65:THR:HG21	1:A:67:ARG:HB3	2	0.11
(1,806)	1:A:65:THR:HG22	1:A:67:ARG:HB2	2	0.11
(1,806)	1:A:65:THR:HG22	1:A:67:ARG:HB3	2	0.11
(1,806)	1:A:65:THR:HG23	1:A:67:ARG:HB2	2	0.11
(1,806)	1:A:65:THR:HG23	1:A:67:ARG:HB3	2	0.11
(1,704)	1:A:59:ARG:HB2	1:A:59:ARG:H	7	0.11
(1,704)	1:A:59:ARG:HB2	1:A:59:ARG:H	15	0.11
(1,506)	1:A:19:ILE:HD11	1:A:18:GLY:HA2	28	0.11
(1,506)	1:A:19:ILE:HD12	1:A:18:GLY:HA2	28	0.11
(1,506)	1:A:19:ILE:HD13	1:A:18:GLY:HA2	28	0.11
(1,45)	1:A:22:LEU:HD21	1:A:11:LYS:HE2	28	0.11
(1,45)	1:A:22:LEU:HD21	1:A:11:LYS:HE3	28	0.11
(1,45)	1:A:22:LEU:HD22	1:A:11:LYS:HE2	28	0.11
(1,45)	1:A:22:LEU:HD22	1:A:11:LYS:HE3	28	0.11
(1,45)	1:A:22:LEU:HD23	1:A:11:LYS:HE2	28	0.11
(1,45)	1:A:22:LEU:HD23	1:A:11:LYS:HE3	28	0.11
(1,394)	1:A:19:ILE:HG21	1:A:25:ILE:HG13	3	0.11
(1,394)	1:A:19:ILE:HG22	1:A:25:ILE:HG13	3	0.11
(1,394)	1:A:19:ILE:HG23	1:A:25:ILE:HG13	3	0.11
(1,391) $(1,391)$	1:A:19:ILE:HG21	1:A:21:ASP:HA	17	0.11
(1,001)	2.11.10.111.110.21	1.11.21.1101 .1111		0.11



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

(1,391) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:21:ASP:HA 17 0.11 (1,391) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:21:ASP:HA 17 0.11 (1,291) 1:A:17:LEU:HG 1:A:17:LEU:H 16 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 8 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 8 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 20 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 20 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 20 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 20 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 20 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 22 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 22 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 22 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 25 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 25 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 25 0.11 (1,264) 1:A:32:LEU:HD12 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 25 0.11 (1,264) 1:A:32:LEU:HD12 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 1:A:32:LEU:HD12 1:A:32:LEU:HD12 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 1:A:32:LEU:HD12 1:A:32:LEU:HD12 1:A:	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,291) 1:A:17:LEU:HG 1:A:17:LEU:H 16 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 8 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 8 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 8 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 20 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 20 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 20 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 20 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 20 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 20 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 22 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 22 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 22 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 22 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 25 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 25 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 25 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 25 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 25 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 25 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 25 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 25 0.11 (1,264) 1:A:32:LEU:HA 1:A:34:LEU:HD13 25 0.11 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 12 0.11 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 12 0.11 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 14 0.11 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 14 0.11 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 14 0.11 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG21 17 0.11 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG22 17 0.11 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG22 17 0.11 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG22 17 0.11 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:59:ARG:HD3 20 0.11 (1,1553) 1:A:19:LE:HG12 1:A:59:ARG:HD3 20 0.11 (1,1553) 1:A:19:LE:HG12 1:A:59:ARG:HD3 20 0.11 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:45:ARG:HE 8 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:45:ARG:HE 8 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:45:ARG:HE 8 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:	(1,391)	1:A:19:ILE:HG22	1:A:21:ASP:HA	17	0.11
(1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 8 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 8 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 8 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 8 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 20 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 20 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 20 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 20 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 22 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 22 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 22 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 22 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 22 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 22 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 25 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 25 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 25 0.11 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 26 0.11 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 26 0.11 (1,188) 1:A:71:GLU:HA 1:A:74:SER:H 12 0.11 (1,188) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 12 0.11 (1,188) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 12 0.11 (1,188) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 29 0.11 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 14 0.11 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 14 0.11 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 14 0.11 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG21 17 0.11 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG21 17 0.11 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG21 17 0.11 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG22 17 0.11 (1,1646) 1:A:9:LEU:HG 1:A:9:LEU:H 3 0.11 (1,1653) 1:A:19:LE:HG21 1:A:59:ARG:HD2 20 0.11 (1,1618) 1:A:58:LE:HG12 1:A:59:ARG:HD2 20 0.11 (1,1618) 1:A:58:LE:HG12 1:A:59:ARG:HD3 20 0.11 (1,1553) 1:A:19:LE:HG21 1:A:26:ASN:H 6 0.11 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:26:ASN:H 6 0.11 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:45:ARG:HE 8 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:45:ARG:HE 8 0	(1,391)	1:A:19:ILE:HG23	1:A:21:ASP:HA	17	0.11
(1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 8 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 8 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 20 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 20 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 20 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 20 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 20 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 22 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 22 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 25 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 25 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 25 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 25 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 25 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 25 0.11 (1,186) 1:A:71:GLU:HA 1:A:74:SER:H 12 0.11 (1,188) 1:A:71:GLU:HA 1:A:74:SER:H 12 0.11 (1,188) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 12 0.11 (1,188) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 12 0.11 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 14 0.11 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 14 0.11 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 14 0.11 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG21 17 0.11 (1,154) 1:A:22:LEU:HG 1:A:29:LEU:H 3 0.11 (1,154) 1:A:24:GLY:HA2 14 0.11 (1,154) 1:A:33:ALA:H 1:A:65:THR:HG21 17 0.11 (1,1732) 1:A:33:ALA:H 1:A:65:THR:HG21 17 0.11 (1,154) 1:A:43:ALA:H 1:A:65:THR:HG21 17 0.11 (1,154) 1:A:43:ALA:H 1:A:65:THR:HG21 17 0.11 (1,154) 1:A:43:ALA:H 1:A:65:THR:HG21 17 0.11 (1,154) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:45:ARG:HE 8 0.11 (1,154) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:45:ARG:HE 8 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:	(1,291)	1:A:17:LEU:HG	1:A:17:LEU:H	16	0.11
(1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 8 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 20 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 20 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 20 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 20 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 22 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 22 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 22 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 22 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 22 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 25 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 25 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 25 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 25 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 25 0.11 (1,181) 1:A:71:GLU:HA 1:A:74:SER:H 12 0.11 (1,181) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 12 0.11 (1,181) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 12 0.11 (1,181) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 29 0.11 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 14 0.11 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 14 0.11 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 14 0.11 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG21 17 0.11 (1,1618) 1:A:24:GLY:HG 1:A:24:GLY:HA 3 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG12 1:A:26:ASN:H 6 0.11 (1,1546) 1:A:9:LEU:HG 1:A:29:LEU:H 3 0.11 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD2 20 0.11 (1,1553) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:26:ASN:H 6 0.11 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG11 1:A:42:VAL:HA 11 0.11 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG12 1:A:26:ASN:H 6 0.11 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG12 1:A:26:ASN:H 6 0.11 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG12 1:A:26:ASN:H 6 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:45:ARG:HE 8 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:45:ARG:HE 8	(1,264)	1:A:32:ALA:HA	1:A:34:LEU:HD11	8	0.11
(1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 20 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 20 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 20 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 22 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 22 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 22 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 22 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 22 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 25 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 25 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 25 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 25 0.11 (1,264) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 26 0.11 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 26 0.11 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:74:SER:H 12 0.11 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 12 0.11 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 12 0.11 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 29 0.11 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 14 0.11 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 14 0.11 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 14 0.11 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 14 0.11 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG21 17 0.11 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG23 17 0.11 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG23 17 0.11 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG23 17 0.11 (1,1646) 1:A:9:LEU:HG 1:A:21:ASP:HA 27 0.11 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD2 20 0.11 (1,1553) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:26:ASN:H 6 0.11 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG11 1:A:42:VAL:HA 11 0.11 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG11 1:A:42:VAL:HA 11 0.11 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG11 1:A:42:VAL:HA 11 0.11 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:45:ARG:HE 8 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:45:ARG:HE 8 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:45:ARG:HE 8 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:45:ARG:HE 8 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:45:ARG:H	(1,264)	1:A:32:ALA:HA	1:A:34:LEU:HD12	8	0.11
(1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 20 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 20 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 22 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 22 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 22 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 25 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 25 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 25 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 25 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 25 0.11 (1,264) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 26 0.11 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:74:SER:H 12 0.11 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 12 0.11 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 29 0.11 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 14 0.11 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 14 0.11 (1,177) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG21 17 0.11 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG21 17 0.11 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG22 17 0.11 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG23 17 0.11 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG23 17 0.11 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG23 17 0.11 (1,1646) 1:A:9:LEU:HG 1:A:21:ASP:HA 27 0.11 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD3 20 0.11 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD3 20 0.11 (1,1553) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:26:ASN:H 6 0.11 (1,1553) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:26:ASN:H 6 0.11 (1,1554) 1:A:44:VAL:HG31 1:A:42:VAL:HA 11 0.11 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG31 1:A:42:VAL:HA 11 0.11 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG31 1:A:42:VAL:HA 11 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG31 1:A:42:VAL:HA 11 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG31 1:A:42:VAL:HA 11 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG31 1:A:45:ARG:HE 8 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG31 1:A:45:ARG:HE 8 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG31 1:A:45:ARG:HE 8 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG31 1:A:45:ARG:HE 8 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG32 1:A:45:ARG:HE 8 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG32 1:A:45:ARG:HE 15 0.11	(1,264)	1:A:32:ALA:HA	1:A:34:LEU:HD13	8	0.11
(1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 20 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 22 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 22 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 22 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 22 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 25 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 25 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 25 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 25 0.11 (1,264) 1:A:30:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD13 25 0.11 (1,180) 1:A:71:GLU:HA 1:A:34:LEU:HD13 25 0.11 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:74:SER:H 12 0.11 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 12 0.11 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 12 0.11 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 29 0.11 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 14 0.11 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 14 0.11 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 14 0.11 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG21 17 0.11 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG21 17 0.11 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG21 17 0.11 (1,171) 1:A:22:LEU:HG 1:A:21:ASP:HA 27 0.11 (1,1646) 1:A:9:LEU:HG 1:A:21:ASP:HA 27 0.11 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:25:ARG:HD2 20 0.11 (1,1553) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:59:ARG:HD2 20 0.11 (1,1553) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:26:ASN:H 6 0.11 (1,1553) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:26:ASN:H 6 0.11 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG11 1:A:42:CASN:H 6 0.11 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG12 1:A:42:CASN:H 6 0.11 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG12 1:A:42:CASN:H 6 0.11 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG13 1:A:42:VAL:HA 11 0.11 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG11 1:A:42:CASN:H 6 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG12 1:A:45:ARG:HE 8 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:45:ARG:HE 8 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:45:ARG:HE 8 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:45:ARG:HE 8 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:45:ARG:HE 8 0.11	(1,264)	1:A:32:ALA:HA	1:A:34:LEU:HD11	20	0.11
(1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 22 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 22 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 22 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 25 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 25 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 25 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 25 0.11 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 26 0.11 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:33:ASP:HA 26 0.11 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 12 0.11 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 12 0.11 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 29 0.11 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 14 0.11 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 14 0.11 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 14 0.11 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG21 17 0.11 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG21 17 0.11 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG23 17 0.11 (1,171) 1:A:22:LEU:HG 1:A:21:ASP:HA 27 0.11 (1,1646) 1:A:9:LEU:HG 1:A:21:ASP:HA 27 0.11 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ABC:HD 3 0.11 (1,1553) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:59:ABC:HD 3 0.11 (1,1553) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:26:ASN:H 6 0.11 (1,1553) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:26:ASN:H 6 0.11 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG11 1:A:42:VAL:HA 11 0.11 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG12 1:A:26:ASN:H 6 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:45:ARG:HE 8 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:45:ARG:HE 8 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:45:ARG:HE 15 0.11	(1,264)	1:A:32:ALA:HA	1:A:34:LEU:HD12	20	0.11
(1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 22 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 22 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 25 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 25 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:33:ASP:HA 26 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 25 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 25 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:33:ASP:HA 26 0.11 (1,271) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 26 0.11 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 12 0.11 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 29 0.11 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 29 0.11 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 14 0.11 (1,177) 1:A:32:LEU:HD13 1:A:26:STHR:HG21 <	(1,264)	1:A:32:ALA:HA	1:A:34:LEU:HD13	20	0.11
(1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 22 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 25 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 25 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 25 0.11 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 26 0.11 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:74:SER:H 12 0.11 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:74:SER:H 29 0.11 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 29 0.11 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 29 0.11 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 14 0.11 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 14 0.11 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG21 17 0.11 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG21 17 0.11 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG23 <td< td=""><td>(1,264)</td><td>1:A:32:ALA:HA</td><td>1:A:34:LEU:HD11</td><td>22</td><td>0.11</td></td<>	(1,264)	1:A:32:ALA:HA	1:A:34:LEU:HD11	22	0.11
(1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 25 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 25 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 25 0.11 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 26 0.11 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:74:SER:H 12 0.11 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 12 0.11 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 29 0.11 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 29 0.11 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 29 0.11 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 14 0.11 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 14 0.11 (1,1732) 1:A:33:ALA:H 1:A:65:THR:HG21 17 0.11 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG22 17 0.11 (1,174) 1:A:22:LEU:HG 1:A:21:ASP:HA 27 <td>(1,264)</td> <td>1:A:32:ALA:HA</td> <td>1:A:34:LEU:HD12</td> <td>22</td> <td>0.11</td>	(1,264)	1:A:32:ALA:HA	1:A:34:LEU:HD12	22	0.11
(1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 25 0.11 (1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 25 0.11 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 26 0.11 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:74:SER:H 12 0.11 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 12 0.11 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 29 0.11 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:69:LEU:H 29 0.11 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 14 0.11 (1,177) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG21 17 0.11 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG22 17 0.11 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG23 17	(1,264)	1:A:32:ALA:HA	1:A:34:LEU:HD13	22	0.11
(1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 25 0.11 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 26 0.11 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:74:SER:H 12 0.11 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 12 0.11 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 29 0.11 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 29 0.11 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 29 0.11 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:69:LEU:H 29 0.11 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 14 0.11 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 14 0.11 (1,177) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG21 17 0.11 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG21 17 0.11 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG23 17 0.11 (1,174) 1:A:22:LEU:HG 1:A:21:ASP:HA 27	(1,264)	1:A:32:ALA:HA	1:A:34:LEU:HD11	25	0.11
(1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 26 0.11 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:74:SER:H 12 0.11 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 12 0.11 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:74:SER:H 29 0.11 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 29 0.11 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 14 0.11 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 14 0.11 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 14 0.11 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:65:THR:HG21 17 0.11 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG21 17 0.11 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG22 17 0.11 (1,1732) 1:A:32:LEU:HG 1:A:21:ASP:HA 27 0.11 (1,174) 1:A:25:LEU:HG 1:A:9:LEU:H 3 0.11 (1,1646) 1:A:49:LEHG21 1:A:59:ARG:HD3 20	(1,264)	1:A:32:ALA:HA	1:A:34:LEU:HD12	25	0.11
(1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:74:SER:H 12 0.11 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 12 0.11 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:74:SER:H 29 0.11 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 29 0.11 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 14 0.11 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 14 0.11 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 14 0.11 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 14 0.11 (1,177) 1:A:23:ALA:H 1:A:65:THR:HG21 17 0.11 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG22 17 0.11 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG23 17 0.11 (1,177) 1:A:22:LEU:HG 1:A:21:ASP:HA 27 0.11 (1,171) 1:A:252:LEU:HG 1:A:9:LEU:H 3 0.11 (1,1648) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD3 2	(1,264)	1:A:32:ALA:HA	1:A:34:LEU:HD13	25	0.11
(1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 12 0.11 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:74:SER:H 29 0.11 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 29 0.11 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 14 0.11 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 14 0.11 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 14 0.11 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 14 0.11 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG21 17 0.11 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG22 17 0.11 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG23 17 0.11 (1,171) 1:A:22:LEU:HG 1:A:26:THR:HG23 17 0.11 (1,171) 1:A:22:LEU:HG 1:A:9:LEU:H 3 0.11 (1,1646) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD2 20 0.11 (1,1618) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:26:ASN:H	(1,213)	1:A:30:SER:HB3	1:A:33:ASP:HA	26	0.11
(1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:74:SER:H 29 0.11 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 29 0.11 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 14 0.11 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 14 0.11 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 14 0.11 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 14 0.11 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG21 17 0.11 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG22 17 0.11 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG23 17 0.11 (1,171) 1:A:22:LEU:HG 1:A:21:ASP:HA 27 0.11 (1,1646) 1:A:9:LEU:HG 1:A:9:LEU:H 3 0.11 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD2 20 0.11 (1,1553) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:26:ASN:H 6 0.11 (1,1553) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:26:ASN:H	(1,18)	1:A:71:GLU:HA	1:A:74:SER:H	12	0.11
(1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 29 0.11 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 14 0.11 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 14 0.11 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 14 0.11 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:65:THR:HG21 17 0.11 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG22 17 0.11 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG23 17 0.11 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG23 17 0.11 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG23 17 0.11 (1,171) 1:A:32:LEU:HG 1:A:49:LEU:H 3 0.11 (1,1646) 1:A:9:LEU:HG 1:A:9:LEU:H 3 0.11 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD3 20 0.11 (1,1618) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:26:ASN:H 6 0.11 (1,1553) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:26:ASN:H	· ' /	1:A:71:GLU:HA	1:A:69:LEU:H	12	0.11
(1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 29 0.11 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 14 0.11 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 14 0.11 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 14 0.11 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG21 17 0.11 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG22 17 0.11 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG23 17 0.11 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG23 17 0.11 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG23 17 0.11 (1,171) 1:A:32:LEU:HG 1:A:49:LEU:H 3 0.11 (1,1646) 1:A:9:LEU:HG 1:A:9:LEU:H 3 0.11 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD2 20 0.11 (1,1618) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:26:ASN:H 6 0.11 (1,1553) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:26:ASN:H	(1,18)	1:A:71:GLU:HA	1:A:74:SER:H	29	0.11
(1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 14 0.11 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 14 0.11 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 14 0.11 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG21 17 0.11 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG22 17 0.11 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG23 17 0.11 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG23 17 0.11 (1,171) 1:A:22:LEU:HG 1:A:21:ASP:HA 27 0.11 (1,1646) 1:A:9:LEU:HG 1:A:9:LEU:H 3 0.11 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD2 20 0.11 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD3 20 0.11 (1,1553) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:26:ASN:H 6 0.11 (1,1553) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:26:ASN:H 6 0.11 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG11 1:A:42:VAL:HA <td>· ' /</td> <td>1:A:71:GLU:HA</td> <td>1:A:69:LEU:H</td> <td>29</td> <td>0.11</td>	· ' /	1:A:71:GLU:HA	1:A:69:LEU:H	29	0.11
(1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 14 0.11 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG21 17 0.11 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG22 17 0.11 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG23 17 0.11 (1,171) 1:A:22:LEU:HG 1:A:21:ASP:HA 27 0.11 (1,1646) 1:A:9:LEU:HG 1:A:9:LEU:H 3 0.11 (1,1648) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD2 20 0.11 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD3 20 0.11 (1,1618) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:26:ASN:H 6 0.11 (1,1553) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:26:ASN:H 6 0.11 (1,1553) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:26:ASN:H 6 0.11 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG11 1:A:42:VAL:HA 11 0.11 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG13 1:A:42:VAL:HA 11 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:45:ARG:HE <td>(1,177)</td> <td>1:A:22:LEU:HD11</td> <td>1:A:24:GLY:HA2</td> <td>14</td> <td>0.11</td>	(1,177)	1:A:22:LEU:HD11	1:A:24:GLY:HA2	14	0.11
(1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG21 17 0.11 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG22 17 0.11 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG23 17 0.11 (1,171) 1:A:22:LEU:HG 1:A:21:ASP:HA 27 0.11 (1,1646) 1:A:9:LEU:HG 1:A:9:LEU:H 3 0.11 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD2 20 0.11 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD3 20 0.11 (1,1618) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:26:ASN:H 6 0.11 (1,1553) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:26:ASN:H 6 0.11 (1,1553) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:26:ASN:H 6 0.11 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG11 1:A:42:VAL:HA 11 0.11 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG12 1:A:42:VAL:HA 11 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:45:ARG:HE 8 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:45:ARG:HE	(1,177)	1:A:22:LEU:HD12	1:A:24:GLY:HA2	14	0.11
(1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG22 17 0.11 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG23 17 0.11 (1,171) 1:A:22:LEU:HG 1:A:21:ASP:HA 27 0.11 (1,1646) 1:A:9:LEU:HG 1:A:9:LEU:H 3 0.11 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD2 20 0.11 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD3 20 0.11 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD3 20 0.11 (1,1553) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:26:ASN:H 6 0.11 (1,1553) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:26:ASN:H 6 0.11 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG11 1:A:42:VAL:HA 1 0.11 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG12 1:A:42:VAL:HA 11 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:45:ARG:HE 8 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:45:ARG:HE 8 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:45:ARG:HE <td>(1,177)</td> <td>1:A:22:LEU:HD13</td> <td>1:A:24:GLY:HA2</td> <td>14</td> <td>0.11</td>	(1,177)	1:A:22:LEU:HD13	1:A:24:GLY:HA2	14	0.11
(1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG23 17 0.11 (1,171) 1:A:22:LEU:HG 1:A:21:ASP:HA 27 0.11 (1,1646) 1:A:9:LEU:HG 1:A:9:LEU:H 3 0.11 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD2 20 0.11 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD3 20 0.11 (1,1618) 1:A:19:ILE:HG12 1:A:26:ASN:H 6 0.11 (1,1553) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:26:ASN:H 6 0.11 (1,1553) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:26:ASN:H 6 0.11 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG13 1:A:42:VAL:HA 11 0.11 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG12 1:A:42:VAL:HA 11 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:45:ARG:HE 8 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:45:ARG:HE 8 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:45:ARG:HE 15 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:45:ARG:HE <td>(1,1732)</td> <td>1:A:32:ALA:H</td> <td>1:A:65:THR:HG21</td> <td>17</td> <td>0.11</td>	(1,1732)	1:A:32:ALA:H	1:A:65:THR:HG21	17	0.11
(1,171) 1:A:22:LEU:HG 1:A:21:ASP:HA 27 0.11 (1,1646) 1:A:9:LEU:HG 1:A:9:LEU:H 3 0.11 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD2 20 0.11 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD3 20 0.11 (1,1618) 1:A:49:ILE:HG21 1:A:26:ASN:H 6 0.11 (1,1553) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:26:ASN:H 6 0.11 (1,1553) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:26:ASN:H 6 0.11 (1,1553) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:26:ASN:H 6 0.11 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG13 1:A:42:VAL:HA 11 0.11 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG13 1:A:42:VAL:HA 11 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:45:ARG:HE 8 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:45:ARG:HE 8 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:45:ARG:HE 15 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:45:ARG:HE	(1,1732)	1:A:32:ALA:H	1:A:65:THR:HG22	17	0.11
(1,1646) 1:A:9:LEU:HG 1:A:9:LEU:H 3 0.11 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD2 20 0.11 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD3 20 0.11 (1,1553) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:26:ASN:H 6 0.11 (1,1553) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:26:ASN:H 6 0.11 (1,1553) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:26:ASN:H 6 0.11 (1,1553) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:42:VAL:HA 1 0.11 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG11 1:A:42:VAL:HA 11 0.11 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG12 1:A:42:VAL:HA 11 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:45:ARG:HE 8 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:45:ARG:HE 8 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:45:ARG:HE 15 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:45:ARG:HE 15 0.11	(1,1732)	1:A:32:ALA:H	1:A:65:THR:HG23	17	0.11
(1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD2 20 0.11 (1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD3 20 0.11 (1,1553) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:26:ASN:H 6 0.11 (1,1553) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:26:ASN:H 6 0.11 (1,1553) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:26:ASN:H 6 0.11 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG11 1:A:42:VAL:HA 11 0.11 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG12 1:A:42:VAL:HA 11 0.11 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG13 1:A:45:ARG:HE 8 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:45:ARG:HE 8 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:45:ARG:HE 8 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:45:ARG:HE 15 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:45:ARG:HE 15 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:45:ARG:HE 15 0.11	(1,171)	1:A:22:LEU:HG	1:A:21:ASP:HA	27	0.11
(1,1618) 1:A:58:ILE:HG12 1:A:59:ARG:HD3 20 0.11 (1,1553) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:26:ASN:H 6 0.11 (1,1553) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:26:ASN:H 6 0.11 (1,1553) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:26:ASN:H 6 0.11 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG11 1:A:42:VAL:HA 11 0.11 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG12 1:A:42:VAL:HA 11 0.11 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG13 1:A:42:VAL:HA 11 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:45:ARG:HE 8 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:45:ARG:HE 8 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:45:ARG:HE 8 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:45:ARG:HE 15 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:45:ARG:HE 15 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:45:ARG:HE 15 0.11	(1,1646)	1:A:9:LEU:HG	1:A:9:LEU:H	3	0.11
(1,1553) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:26:ASN:H 6 0.11 (1,1553) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:26:ASN:H 6 0.11 (1,1553) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:26:ASN:H 6 0.11 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG11 1:A:42:VAL:HA 11 0.11 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG12 1:A:42:VAL:HA 11 0.11 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG13 1:A:42:VAL:HA 11 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:45:ARG:HE 8 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:45:ARG:HE 8 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:45:ARG:HE 15 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:45:ARG:HE 15 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:45:ARG:HE 15 0.11	(1,1618)	1:A:58:ILE:HG12	1:A:59:ARG:HD2	20	0.11
(1,1553) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:26:ASN:H 6 0.11 (1,1553) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:26:ASN:H 6 0.11 (1,1553) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:26:ASN:H 6 0.11 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG11 1:A:42:VAL:HA 11 0.11 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG12 1:A:42:VAL:HA 11 0.11 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG13 1:A:42:VAL:HA 11 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:45:ARG:HE 8 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:45:ARG:HE 8 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:45:ARG:HE 8 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:45:ARG:HE 15 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:45:ARG:HE 15 0.11	(1,1618)	1:A:58:ILE:HG12	1:A:59:ARG:HD3	20	0.11
(1,1553) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:26:ASN:H 6 0.11 (1,1553) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:26:ASN:H 6 0.11 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG11 1:A:42:VAL:HA 11 0.11 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG12 1:A:42:VAL:HA 11 0.11 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG13 1:A:42:VAL:HA 11 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:45:ARG:HE 8 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:45:ARG:HE 8 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:45:ARG:HE 8 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:45:ARG:HE 15 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:45:ARG:HE 15 0.11		1:A:19:ILE:HG21	1:A:26:ASN:H	6	0.11
(1,1546) 1:A:44:VAL:HG11 1:A:42:VAL:HA 11 0.11 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG12 1:A:42:VAL:HA 11 0.11 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG13 1:A:42:VAL:HA 11 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:45:ARG:HE 8 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:45:ARG:HE 8 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:45:ARG:HE 8 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:45:ARG:HE 15 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:45:ARG:HE 15 0.11		1:A:19:ILE:HG22	1:A:26:ASN:H	6	0.11
(1,1546) 1:A:44:VAL:HG12 1:A:42:VAL:HA 11 0.11 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG13 1:A:42:VAL:HA 11 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:45:ARG:HE 8 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:45:ARG:HE 8 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:45:ARG:HE 8 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:45:ARG:HE 15 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:45:ARG:HE 15 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:45:ARG:HE 15 0.11	(1,1553)	1:A:19:ILE:HG23	1:A:26:ASN:H	6	0.11
(1,1546) 1:A:44:VAL:HG12 1:A:42:VAL:HA 11 0.11 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG13 1:A:42:VAL:HA 11 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:45:ARG:HE 8 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:45:ARG:HE 8 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:45:ARG:HE 8 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:45:ARG:HE 15 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:45:ARG:HE 15 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:45:ARG:HE 15 0.11	· · /	1:A:44:VAL:HG11	1:A:42:VAL:HA	11	0.11
(1,1546) 1:A:44:VAL:HG13 1:A:42:VAL:HA 11 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:45:ARG:HE 8 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:45:ARG:HE 8 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:45:ARG:HE 8 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:45:ARG:HE 15 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:45:ARG:HE 15 0.11	· · /	1:A:44:VAL:HG12	1:A:42:VAL:HA	11	0.11
(1,1545) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:45:ARG:HE 8 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:45:ARG:HE 8 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:45:ARG:HE 8 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:45:ARG:HE 15 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:45:ARG:HE 15 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:45:ARG:HE 15 0.11	, ,	1:A:44:VAL:HG13	1:A:42:VAL:HA	11	0.11
(1,1545) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:45:ARG:HE 8 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:45:ARG:HE 8 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:45:ARG:HE 15 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:45:ARG:HE 15 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:45:ARG:HE 15 0.11	· · /	1:A:44:VAL:HG21	1:A:45:ARG:HE	8	0.11
(1,1545) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:45:ARG:HE 8 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:45:ARG:HE 15 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:45:ARG:HE 15 0.11	· · /	1:A:44:VAL:HG22	1:A:45:ARG:HE	8	0.11
(1,1545) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:45:ARG:HE 15 0.11 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:45:ARG:HE 15 0.11	· · /	1:A:44:VAL:HG23	1:A:45:ARG:HE	8	0.11
(1,1545) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:45:ARG:HE 15 0.11	· · /		1:A:45:ARG:HE	15	0.11
	· · /	1:A:44:VAL:HG22	1:A:45:ARG:HE		
	(1,1545)				



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1525)	1:A:73:SER:HA	1:A:9:LEU:HD21	13	0.11
(1,1525)	1:A:73:SER:HA	1:A:9:LEU:HD22	13	0.11
(1,1525)	1:A:73:SER:HA	1:A:9:LEU:HD23	13	0.11
(1,1523)	1:A:73:SER:HA	1:A:70:GLN:H	3	0.11
(1,1523)	1:A:73:SER:HA	1:A:70:GLN:H	22	0.11
(1,1505)	1:A:55:VAL:HG11	1:A:59:ARG:HD2	25	0.11
(1,1505)	1:A:55:VAL:HG11	1:A:59:ARG:HD3	25	0.11
(1,1505)	1:A:55:VAL:HG12	1:A:59:ARG:HD2	25	0.11
(1,1505)	1:A:55:VAL:HG12	1:A:59:ARG:HD3	25	0.11
(1,1505)	1:A:55:VAL:HG13	1:A:59:ARG:HD2	25	0.11
(1,1505)	1:A:55:VAL:HG13	1:A:59:ARG:HD3	25	0.11
(1,1402)	1:A:42:VAL:HA	1:A:45:ARG:HB3	15	0.11
(1,1332)	1:A:68:LYS:HE2	1:A:69:LEU:H	20	0.11
(1,1332)	1:A:68:LYS:HE3	1:A:69:LEU:H	20	0.11
(1,1327)	1:A:68:LYS:HD2	1:A:71:GLU:HB2	15	0.11
(1,1327)	1:A:68:LYS:HD3	1:A:71:GLU:HB2	15	0.11
(1,1276)	1:A:62:ARG:HB3	1:A:32:ALA:HB1	4	0.11
(1,1276)	1:A:62:ARG:HB3	1:A:32:ALA:HB2	4	0.11
(1,1276)	1:A:62:ARG:HB3	1:A:32:ALA:HB3	4	0.11
(1,1276)	1:A:62:ARG:HB3	1:A:32:ALA:HB1	6	0.11
(1,1276)	1:A:62:ARG:HB3	1:A:32:ALA:HB2	6	0.11
(1,1276)	1:A:62:ARG:HB3	1:A:32:ALA:HB3	6	0.11
(1,1276)	1:A:62:ARG:HB3	1:A:32:ALA:HB1	22	0.11
(1,1276)	1:A:62:ARG:HB3	1:A:32:ALA:HB2	22	0.11
(1,1276)	1:A:62:ARG:HB3	1:A:32:ALA:HB3	22	0.11
(1,1276)	1:A:62:ARG:HB3	1:A:32:ALA:HB1	23	0.11
(1,1276)	1:A:62:ARG:HB3	1:A:32:ALA:HB2	23	0.11
(1,1276)	1:A:62:ARG:HB3	1:A:32:ALA:HB3	23	0.11
(1,1037)	1:A:36:LEU:HB3	1:A:40:MET:HA	2	0.11
(1,1037)	1:A:36:LEU:HB3	1:A:40:MET:HA	3	0.11
(1,1037)	1:A:36:LEU:HB3	1:A:40:MET:HA	28	0.11
(1,1017)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:31:LEU:HA	2	0.11
(1,1017)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:31:LEU:HA	2	0.11
(1,1017)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:31:LEU:HA	2	0.11
(1,1017)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:31:LEU:HA	15	0.11
(1,1017)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:31:LEU:HA	15	0.11
(1,1017)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:31:LEU:HA	15	0.11
(1,1017)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:31:LEU:HA	16	0.11
(1,1017)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:31:LEU:HA	16	0.11
(1,1017)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:31:LEU:HA	16	0.11
(1,1017)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:31:LEU:HA	17	0.11
(1,1017)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:31:LEU:HA	17	0.11



Continued from previous page...

(1,1017) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:31:LEU:HA 17 0.11 (1,1017) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:31:LEU:HA 26 0.11 (1,1017) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:31:LEU:HA 26 0.11 (1,1017) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:31:LEU:HA 26 0.11 (1,896) 1:A:47:ILE:HG21 1:A:6:GLN:HE21 14 0.1 (1,896) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:6:GLN:HE21 14 0.1 (1,896) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:6:GLN:HE21 14 0.1 (1,894) 1:A:48:ASP:HB3 1:A:6:GLN:HB	
(1,1017) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:31:LEU:HA 26 0.11 (1,1017) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:31:LEU:HA 26 0.11 (1,896) 1:A:47:ILE:HG21 1:A:6:GLN:HE21 14 0.1 (1,896) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:6:GLN:HE21 14 0.1 (1,896) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:6:GLN:HE21 14 0.1 (1,894) 1:A:8:ASP:HB3 1:A:11:LYS:HB2 11 0.1 (1,844) 1:A:8:ASP:HB3 1:A:11:LYS:HB2 11 0.1 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 5 0.1 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 21 0.1 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 21 0.1 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 <t< td=""><td></td></t<>	
(1,1017) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:31:LEU:HA 26 0.11 (1,896) 1:A:47:ILE:HG21 1:A:6:GLN:HE21 14 0.1 (1,896) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:6:GLN:HE21 14 0.1 (1,896) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:6:GLN:HE21 14 0.1 (1,844) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:1:LYS:HB2 11 0.1 (1,844) 1:A:8:ASP:HB3 1:A:11:LYS:HB2 11 0.1 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 5 0.1 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 21 0.1 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 21 0.1 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 21 0.1	
(1,896) 1:A:47:ILE:HG21 1:A:6:GLN:HE21 14 0.1 (1,896) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:6:GLN:HE21 14 0.1 (1,896) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:6:GLN:HE21 14 0.1 (1,896) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:6:GLN:HE21 14 0.1 (1,844) 1:A:8:ASP:HB3 1:A:11:LYS:HB2 11 0.1 (1,844) 1:A:8:ASP:HB3 1:A:11:LYS:HB3 11 0.1 (1,844) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 5 0.1 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 5 0.1 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 5 0.1 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 21 0.1 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 21 0.1 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 21 0.1	
(1,896) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:6:GLN:HE21 14 0.1 (1,896) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:6:GLN:HE21 14 0.1 (1,844) 1:A:8:ASP:HB3 1:A:11:LYS:HB2 11 0.1 (1,844) 1:A:8:ASP:HB3 1:A:11:LYS:HB3 11 0.1 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 5 0.1 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 5 0.1 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 5 0.1 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 21 0.1 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 21 0.1 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 21 0.1 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 21 0.1	
(1,896) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:6:GLN:HE21 14 0.1 (1,844) 1:A:8:ASP:HB3 1:A:11:LYS:HB2 11 0.1 (1,844) 1:A:8:ASP:HB3 1:A:11:LYS:HB3 11 0.1 (1,844) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 5 0.1 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 5 0.1 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 5 0.1 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 21 0.1 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 21 0.1 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 21 0.1 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 21 0.1	
(1,844) 1:A:8:ASP:HB3 1:A:11:LYS:HB2 11 0.1 (1,844) 1:A:8:ASP:HB3 1:A:11:LYS:HB3 11 0.1 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 5 0.1 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 5 0.1 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 5 0.1 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 21 0.1 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 21 0.1 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 21 0.1 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 21 0.1	
(1,844) 1:A:8:ASP:HB3 1:A:11:LYS:HB3 11 0.1 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 5 0.1 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 5 0.1 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 5 0.1 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 21 0.1 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 21 0.1 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 21 0.1 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 21 0.1	
(1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 5 0.1 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 5 0.1 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 5 0.1 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 21 0.1 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 21 0.1 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 21 0.1 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 21 0.1	
(1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 5 0.1 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 5 0.1 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 21 0.1 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 21 0.1 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 21 0.1 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 21 0.1	
(1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 5 0.1 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 21 0.1 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 21 0.1 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 21 0.1 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 21 0.1	
(1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 21 0.1 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 21 0.1 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 21 0.1 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 21 0.1	
(1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 21 0.1 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 21 0.1	
(1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 21 0.1	
(1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 29 0.1	
(1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 29 0.1	
(1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 29 0.1	
(1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 16 0.1	
(1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 16 0.1	
(1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 16 0.1	
(1,704) 1:A:59:ARG:HB2 1:A:59:ARG:H 16 0.1	
(1,704) 1:A:59:ARG:HB2 1:A:59:ARG:H 20 0.1	
(1,704) 1:A:59:ARG:HB2 1:A:59:ARG:H 23 0.1	
(1,704) 1:A:59:ARG:HB2 1:A:59:ARG:H 24 0.1	
(1,704) 1:A:59:ARG:HB2 1:A:59:ARG:H 30 0.1	
(1,549) 1:A:72:MET:HB2 1:A:72:MET:H 1 0.1	
(1,536) 1:A:25:ILE:HD11 1:A:14:ALA:HB1 29 0.1	
(1,536) 1:A:25:ILE:HD11 1:A:14:ALA:HB2 29 0.1	
(1,536) 1:A:25:ILE:HD11 1:A:14:ALA:HB3 29 0.1	
(1,536) 1:A:25:ILE:HD12 1:A:14:ALA:HB1 29 0.1	
(1,536) 1:A:25:ILE:HD12 1:A:14:ALA:HB2 29 0.1	
(1,536) 1:A:25:ILE:HD12 1:A:14:ALA:HB3 29 0.1	
(1,536) 1:A:25:ILE:HD13 1:A:14:ALA:HB1 29 0.1	
(1,536) 1:A:25:ILE:HD13 1:A:14:ALA:HB2 29 0.1	
(1,536) 1:A:25:ILE:HD13 1:A:14:ALA:HB3 29 0.1	
(1,506) 1:A:19:ILE:HD11 1:A:18:GLY:HA2 2 0.1	
(1,506) 1:A:19:ILE:HD12 1:A:18:GLY:HA2 2 0.1	
(1,506) 1:A:19:ILE:HD13 1:A:18:GLY:HA2 2 0.1	
(1,506) 1:A:19:ILE:HD11 1:A:18:GLY:HA2 20 0.1	
(1,506) 1:A:19:ILE:HD12 1:A:18:GLY:HA2 20 0.1	
(1,506) 1:A:19:ILE:HD13 1:A:18:GLY:HA2 20 0.1	



Continued from previous page...

(1,491) 1:A:27:LEU:HA 1:A:66:LEU:H 16 0. (1,479) 1:A:23:ALA:HA 1:A:21:ASP:HA 24 0. (1,475) 1:A:22:LEU:HD21 1:A:20:ARG:HB2 4 0. (1,475) 1:A:22:LEU:HD22 1:A:20:ARG:HB2 4 0. (1,475) 1:A:22:LEU:HD23 1:A:20:ARG:HB2 4 0. (1,394) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:25:ILE:HG13 28 0. (1,394) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:25:ILE:HG13 28 0. (1,394) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:25:ILE:HG13 28 0. (1,391) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:21:ASP:HA 3 0.	.1 .1 .1 .1 .1 .1 .1
(1,475) 1:A:22:LEU:HD21 1:A:20:ARG:HB2 4 0. (1,475) 1:A:22:LEU:HD22 1:A:20:ARG:HB2 4 0. (1,475) 1:A:22:LEU:HD23 1:A:20:ARG:HB2 4 0. (1,394) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:25:ILE:HG13 28 0. (1,394) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:25:ILE:HG13 28 0. (1,394) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:25:ILE:HG13 28 0.	.1 .1 .1 .1 .1 .1
(1,475) 1:A:22:LEU:HD22 1:A:20:ARG:HB2 4 0. (1,475) 1:A:22:LEU:HD23 1:A:20:ARG:HB2 4 0. (1,394) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:25:ILE:HG13 28 0. (1,394) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:25:ILE:HG13 28 0. (1,394) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:25:ILE:HG13 28 0.	.1 .1 .1 .1 .1
(1,475) 1:A:22:LEU:HD23 1:A:20:ARG:HB2 4 0. (1,394) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:25:ILE:HG13 28 0. (1,394) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:25:ILE:HG13 28 0. (1,394) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:25:ILE:HG13 28 0. (1,394) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:25:ILE:HG13 28 0.	.1 .1 .1 .1 .1 .1 .1
(1,394) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:25:ILE:HG13 28 0. (1,394) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:25:ILE:HG13 28 0. (1,394) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:25:ILE:HG13 28 0. (1,394) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:25:ILE:HG13 28 0.	.1 .1 .1 .1 .1
(1,394) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:25:ILE:HG13 28 0. (1,394) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:25:ILE:HG13 28 0.	.1 .1 .1
(1,394) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:25:ILE:HG13 28 0.	.1
() /	.1
(1.391) $1 \cdot A \cdot 19 \cdot II \cdot E \cdot HC21$ $1 \cdot A \cdot 21 \cdot A \cdot SP \cdot HA$ 3	
(1,001) $(1.11.10.110.110.110.110.110.1111.1101.1111.111.1101.1111.111.1101.1011.1101.1101.1101.1101.1101.1101.1101.1101.1101.1101.1101.1101.1101.1101.1101.1101.1101.11$.1
(1,391) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:21:ASP:HA 3 0.	
(1,391) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:21:ASP:HA 3 0.	.1
(1,391) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:21:ASP:HA 5 0.	.1
(1,391) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:21:ASP:HA 5 0.	.1
(1,391) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:21:ASP:HA 5 0.	.1
(1,38) 1:A:58:ILE:HG21 1:A:32:ALA:HA 9 0.	.1
(1,38) 1:A:58:ILE:HG22 1:A:32:ALA:HA 9 0.	.1
(1,38) 1:A:58:ILE:HG23 1:A:32:ALA:HA 9 0.	.1
(1,38) 1:A:47:ILE:HG21 1:A:50:ARG:HA 9 0.	.1
(1,38) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:50:ARG:HA 9 0.	.1
(1,38) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:50:ARG:HA 9 0.	.1
(1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 4 0.	.1
(1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 4 0.	.1
(1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 4 0.	.1
(1,239) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 25 0.	.1
(1,239) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:62:ARG:HG3 25 0.	.1
(1,239) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:62:ARG:HG3 25 0.	.1
(1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 11 0.	.1
(1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 19 0.	.1
(1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 28 0.	.1
(1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 13 0.	.1
(1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 13 0.	.1
(1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 13 0.	.1
(1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 16 0.	.1
(1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 16 0.	.1
(1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 16 0.	.1
(1,171) 1:A:22:LEU:HG 1:A:21:ASP:HA 24 0.	.1
(1,171) 1:A:22:LEU:HG 1:A:21:ASP:HA 28 0.	.1
(1,1701) 1:A:47:ILE:H 1:A:48:LEU:H 14 0.	.1
(1,1566) 1:A:68:LYS:HD2 1:A:64:LEU:H 13 0.	.1
(1,1566) 1:A:68:LYS:HD3 1:A:64:LEU:H 13 0.	.1
(1,1566) 1:A:68:LYS:HD2 1:A:64:LEU:H 13 0.	.1
(1,1566) 1:A:68:LYS:HD3 1:A:64:LEU:H 13 0.	.1



Continued from previous page...

(1,1547) 1:A:44:VAL:HG11 1:A:40:MET:HA 21 0.1 (1,1547) 1:A:44:VAL:HG12 1:A:40:MET:HA 21 0.1 (1,1547) 1:A:44:VAL:HG13 1:A:40:MET:HA 21 0.1 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:45:ARG:HE 11 0.1 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:45:ARG:HE 11 0.1 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:45:ARG:HE 11 0.1 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:45:ARG:HE 11 0.1 (1,1523) 1:A:73:SER:HA 1:A:70:GLN:H 10 0.1 (1,1497) 1:A:65:THR:HG21 1:A:63:GLN:HB2 14 0.1 (1,1497) 1:A:65:THR:HG22 1:A:63:GLN:HB2 14 0.1 (1,1497) 1:A:65:THR:HG23 1:A:63:GLN:HB2 14 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 10 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 15 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 16 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 16 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 16 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:IEU:HD11 1:A:44:VAL:HG21 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:IEU:HD11 1:A:44:VAL:HG21 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:IEU:HD11 1:A:44:VAL:HG22 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:IEU:HD11 1:A:44:VAL:HG23 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:IEU:HD11 1:A:44:VAL:HG23 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:IEU:HD11 1:A:44:VAL:HG23 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:IEU:HD13 1:A:44:VAL:H	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1547) 1:A:44:VAL:HG13 1:A:40:MET:HA 21 0.1 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:45:ARG:HE 11 0.1 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:45:ARG:HE 11 0.1 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:45:ARG:HE 11 0.1 (1,1523) 1:A:33:SER:HA 1:A:70:GLN:H 10 0.1 (1,1497) 1:A:65:THR:HG22 1:A:63:GLN:HB2 14 0.1 (1,1497) 1:A:65:THR:HG23 1:A:63:GLN:HB2 14 0.1 (1,1497) 1:A:65:THR:HG23 1:A:63:GLN:HB2 14 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:A:HB3 1:A:19:ILE:HB 10 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:A:HB3 1:A:19:ILE:HB 10 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:A:HB3 1:A:19:ILE:HB 15 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:A:HB3 1:A:19:ILE:HB 15 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:A:HB3 1:A:19:ILE:HB 16 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE	(1,1547)	1:A:44:VAL:HG11	1:A:40:MET:HA	21	0.1
(1,1545) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:45:ARG:HE 11 0.1 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:45:ARG:HE 11 0.1 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:45:ARG:HE 11 0.1 (1,1523) 1:A:73:SER:HA 1:A:70:GLN:H 10 0.1 (1,1497) 1:A:65:THR:HG21 1:A:63:GLN:HB2 14 0.1 (1,1497) 1:A:65:THR:HG22 1:A:63:GLN:HB2 14 0.1 (1,1497) 1:A:65:THR:HG23 1:A:63:GLN:HB2 14 0.1 (1,1497) 1:A:65:THR:HG23 1:A:63:GLN:HB2 14 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 10 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 10 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 10 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:19:ILE:HB 10 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 15 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 16 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 23 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 27 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 30 0.1 (1,1050) 1:A:36:IEU:HD11 1:A:44:VAL:HG21 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:IEU:HD11 1:A:44:VAL:HG22 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:IEU:HD11 1:A:44:VAL:HG23 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:IEU:HD11 1:A:44:VAL:HG23 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:IEU:HD13 1:A:44:VAL:HG23 23 0	(1,1547)	1:A:44:VAL:HG12	1:A:40:MET:HA	21	0.1
(1,1545) 1:A:44:VAL:HG22 1:A:45:ARG:HE 11 0.1 (1,1545) 1:A:44:VAL:HG23 1:A:45:ARG:HE 11 0.1 (1,1523) 1:A:73:SER:HA 1:A:70:GLN:H 10 0.1 (1,1497) 1:A:65:THR:HG21 1:A:63:GLN:HB2 14 0.1 (1,1497) 1:A:65:THR:HG22 1:A:63:GLN:HB2 14 0.1 (1,1497) 1:A:65:THR:HG23 1:A:63:GLN:HB2 14 0.1 (1,1497) 1:A:65:THR:HG23 1:A:63:GLN:HB2 14 0.1 (1,1497) 1:A:65:THR:HG23 1:A:63:GLN:HB2 14 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 10 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:19:ILE:HB 10 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 10 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 10 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 15 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 15 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 15 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 16 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD1 1:A:44:VAL:HG21 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD1 1:A:44:VAL:HG21 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD1 1:A:44:VAL:HG22 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD1 1:A:44:VAL:HG23 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD1 1:A:44:VAL:HG23 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD1 1:A:44:VAL:HG23 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD1 1:A:44:VAL:HG22 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD1 1:A:44:VAL	(1,1547)	1:A:44:VAL:HG13	1:A:40:MET:HA	21	0.1
(1,1545) 1:A:A4:VAL:HG23 1:A:45:ARG:HE 11 0.1 (1,1523) 1:A:73:SER:HA 1:A:70:GLN:H 10 0.1 (1,1497) 1:A:65:THR:HG21 1:A:63:GLN:HB2 14 0.1 (1,1497) 1:A:65:THR:HG22 1:A:63:GLN:HB2 14 0.1 (1,1497) 1:A:65:THR:HG23 1:A:63:GLN:HB2 14 0.1 (1,1497) 1:A:65:THR:HG23 1:A:63:GLN:HB2 14 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 10 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 10 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 15 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 15 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 15 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 16 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 23 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB	(1,1545)	1:A:44:VAL:HG21	1:A:45:ARG:HE	11	0.1
(1,1523) 1:A:73:SER:HA 1:A:70:GLN:H 10 0.1 (1,1497) 1:A:65:THR:HG21 1:A:63:GLN:HB2 14 0.1 (1,1497) 1:A:65:THR:HG22 1:A:63:GLN:HB2 14 0.1 (1,1497) 1:A:65:THR:HG23 1:A:63:GLN:HB2 14 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 10 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:19:ILE:HB 10 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 10 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 15 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 15 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 15 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 16 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:19:ILE:HB 16 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 23 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB	(1,1545)	1:A:44:VAL:HG22	1:A:45:ARG:HE	11	0.1
(1,1497) 1:A:65:THR:HG21 1:A:63:GLN:HB2 14 0.1 (1,1497) 1:A:65:THR:HG22 1:A:63:GLN:HB2 14 0.1 (1,1497) 1:A:65:THR:HG23 1:A:63:GLN:HB2 14 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 10 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 10 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 15 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 15 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 15 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 15 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 16 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 16 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 16 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 16 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 23 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 23 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 27 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 27 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 27 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 27 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 27 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 30 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD11 1:A:44:VAL:HG21 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD11 1:A:44:VAL:HG21 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD11 1:A:44:VAL:HG21 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD11 1:A:44:VAL:HG22 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG22 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13	(1,1545)	1:A:44:VAL:HG23	1:A:45:ARG:HE	11	0.1
(1,1497) 1:A:65:THR:HG22 1:A:63:GLN:HB2 14 0.1 (1,1497) 1:A:65:THR:HG23 1:A:63:GLN:HB2 14 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 10 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:19:ILE:HB 10 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 10 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 10 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 15 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:19:ILE:HB 15 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:19:ILE:HB 15 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 15 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 16 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 23 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 27 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HB3 1:A:19:ILE:HB 30 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HB1 1:A:14:VAL:HG21 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD11 1:A:44:VAL:HG21 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD11 1:A:44:VAL:HG21 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD11 1:A:44:VAL:HG21 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD11 1:A:44:VAL:HG22 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG21 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG22 23 0.1	(1,1523)	1:A:73:SER:HA	1:A:70:GLN:H	10	0.1
(1,1497) 1:A:65:THR:HG23 1:A:63:GLN:HB2 14 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 10 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:19:ILE:HB 10 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 10 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 10 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 15 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:19:ILE:HB 15 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 15 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 15 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 16 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 16 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 16 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:19:ILE:HB 16 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 23 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 23 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 23 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 23 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 27 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 27 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 27 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 27 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:19:ILE:HB 27 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 27 0.1 (1,1050) 1:A:36:EU:HD11 1:A:44:VAL:HG21 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD11 1:A:44:VAL:HG21 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG21 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG21 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG21 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG22 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:L	(1,1497)	1:A:65:THR:HG21	1:A:63:GLN:HB2	14	0.1
(1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 10 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:19:ILE:HB 10 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 10 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 15 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:19:ILE:HB 15 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 15 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 16 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 16 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 16 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 23 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 23 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 27 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 27 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB <	(1,1497)	1:A:65:THR:HG22	1:A:63:GLN:HB2	14	0.1
(1,1484) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:19:ILE:HB 10 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 10 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 15 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:19:ILE:HB 15 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 16 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 16 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:19:ILE:HB 16 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 16 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 23 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 23 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 23 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 27 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 27 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB <	(1,1497)	1:A:65:THR:HG23	1:A:63:GLN:HB2	14	0.1
(1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 10 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 15 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:19:ILE:HB 15 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 16 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 16 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:19:ILE:HB 16 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 16 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 23 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 23 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 23 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 27 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 27 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 30 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB <	(1,1484)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:19:ILE:HB	10	0.1
(1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 15 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:19:ILE:HB 15 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 15 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 16 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:19:ILE:HB 16 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 16 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 23 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:19:ILE:HB 23 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 23 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 27 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 27 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 30 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 30 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB <	(1,1484)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:19:ILE:HB	10	0.1
(1,1484) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:19:ILE:HB 15 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 15 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 16 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:19:ILE:HB 16 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 16 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 23 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:19:ILE:HB 23 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 23 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 23 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 27 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 27 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 30 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 30 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB <	(1,1484)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:19:ILE:HB	10	0.1
(1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 15 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 16 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:19:ILE:HB 16 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 16 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 23 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:19:ILE:HB 23 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 23 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 27 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:19:ILE:HB 27 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 27 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 30 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 30 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 30 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB <	(1,1484)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:19:ILE:HB	15	0.1
(1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 16 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:19:ILE:HB 16 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 16 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 23 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:19:ILE:HB 23 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 23 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 27 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:19:ILE:HB 27 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 27 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 30 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB <	(1,1484)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:19:ILE:HB	15	0.1
(1,1484) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:19:ILE:HB 16 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 16 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 23 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:19:ILE:HB 23 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 23 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 27 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:19:ILE:HB 27 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 27 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 30 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB <	(1,1484)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:19:ILE:HB	15	0.1
(1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 16 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 23 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:19:ILE:HB 23 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 23 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 27 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:19:ILE:HB 27 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 27 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 30 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:19:ILE:HB 30 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 30 0.1 (1,1484) 1:A:16:ALE:HB 30 0.1	(1,1484)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:19:ILE:HB	16	0.1
(1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 23 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:19:ILE:HB 23 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 23 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 27 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:19:ILE:HB 27 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 27 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 30 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:19:ILE:HB 30 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 30 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 30 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 30 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:19:ILE:HB 30 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 30 0.1 (1,1332) 1:A:68:LYS:HE2 1:A:69:LEU:H <t< td=""><td>(1,1484)</td><td>1:A:14:ALA:HB2</td><td>1:A:19:ILE:HB</td><td>16</td><td>0.1</td></t<>	(1,1484)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:19:ILE:HB	16	0.1
(1,1484) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:19:ILE:HB 23 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 23 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 27 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:19:ILE:HB 27 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 27 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 30 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:19:ILE:HB 30 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 30 0.1 (1,1484) 1:A:68:LYS:HE2 1:A:69:LEU:H 4 0.1 (1,1332) 1:A:68:LYS:HE2 1:A:69:LEU:H 4 0.1 (1,1332) 1:A:68:LYS:HE3 1:A:69:LEU:H 4 0.1 (1,1071) 1:A:36:LEU:HG 1:A:38:SER:H 13 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD11 1:A:44:VAL:HG21 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG23 <td< td=""><td>(1,1484)</td><td>1:A:14:ALA:HB3</td><td>1:A:19:ILE:HB</td><td>16</td><td>0.1</td></td<>	(1,1484)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:19:ILE:HB	16	0.1
(1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 23 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 27 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:19:ILE:HB 27 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 27 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 30 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:19:ILE:HB 30 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 30 0.1 (1,1444) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 30 0.1 (1,1322) 1:A:68:LYS:HE2 1:A:69:LEU:H 4 0.1 (1,13232) 1:A:68:LYS:HE2 1:A:69:LEU:H <td< td=""><td>(1,1484)</td><td>1:A:14:ALA:HB1</td><td>1:A:19:ILE:HB</td><td>23</td><td>0.1</td></td<>	(1,1484)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:19:ILE:HB	23	0.1
(1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 27 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:19:ILE:HB 27 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 27 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 30 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:19:ILE:HB 30 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 30 0.1 (1,1484) 1:A:68:LYS:HE2 1:A:69:LEU:H 4 0.1 (1,1332) 1:A:68:LYS:HE2 1:A:69:LEU:H 4 0.1 (1,1332) 1:A:68:LYS:HE3 1:A:69:LEU:H 4 0.1 (1,1071) 1:A:36:LEU:HG 1:A:38:SER:H 13 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD11 1:A:44:VAL:HG21 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG23 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG21 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG23	(1,1484)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:19:ILE:HB	23	0.1
(1,1484) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:19:ILE:HB 27 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 27 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 30 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:19:ILE:HB 30 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 30 0.1 (1,1484) 1:A:68:LYS:HE2 1:A:69:LEU:H 4 0.1 (1,1332) 1:A:68:LYS:HE2 1:A:69:LEU:H 4 0.1 (1,1332) 1:A:68:LYS:HE3 1:A:69:LEU:H 4 0.1 (1,1071) 1:A:36:LEU:HG 1:A:38:SER:H 13 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD11 1:A:44:VAL:HG21 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG23 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG21 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG21 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG22	(1,1484)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:19:ILE:HB	23	0.1
(1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 27 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 30 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:19:ILE:HB 30 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 30 0.1 (1,1484) 1:A:68:LYS:HE2 1:A:69:LEU:H 4 0.1 (1,1332) 1:A:68:LYS:HE3 1:A:69:LEU:H 4 0.1 (1,1071) 1:A:36:LEU:HG 1:A:38:SER:H 13 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD11 1:A:44:VAL:HG21 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD11 1:A:44:VAL:HG23 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG21 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG22 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG21 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG22 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG23	(1,1484)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:19:ILE:HB	27	0.1
(1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 30 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:19:ILE:HB 30 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 30 0.1 (1,1484) 1:A:68:LYS:HE3 1:A:69:LEU:H 4 0.1 (1,1332) 1:A:68:LYS:HE3 1:A:69:LEU:H 4 0.1 (1,1071) 1:A:36:LEU:HG 1:A:38:SER:H 13 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD11 1:A:44:VAL:HG21 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD11 1:A:44:VAL:HG23 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG21 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG22 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG23 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG21 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG22 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:H	(1,1484)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:19:ILE:HB	27	0.1
(1,1484) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:19:ILE:HB 30 0.1 (1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 30 0.1 (1,1332) 1:A:68:LYS:HE2 1:A:69:LEU:H 4 0.1 (1,1032) 1:A:68:LYS:HE3 1:A:69:LEU:H 4 0.1 (1,1071) 1:A:36:LEU:HG 1:A:38:SER:H 13 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD11 1:A:44:VAL:HG21 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD11 1:A:44:VAL:HG22 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG23 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG22 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG23 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG21 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG22 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG23 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VA	(1,1484)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:19:ILE:HB	27	0.1
(1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 30 0.1 (1,1332) 1:A:68:LYS:HE2 1:A:69:LEU:H 4 0.1 (1,1332) 1:A:68:LYS:HE3 1:A:69:LEU:H 4 0.1 (1,1071) 1:A:36:LEU:HG 1:A:38:SER:H 13 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD11 1:A:44:VAL:HG21 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD11 1:A:44:VAL:HG22 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG21 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG22 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG23 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG21 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG22 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG23 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG23 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD3 1:A:44:	(1,1484)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:19:ILE:HB	30	0.1
(1,1332) 1:A:68:LYS:HE2 1:A:69:LEU:H 4 0.1 (1,1332) 1:A:68:LYS:HE3 1:A:69:LEU:H 4 0.1 (1,1071) 1:A:36:LEU:HG 1:A:38:SER:H 13 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD11 1:A:44:VAL:HG21 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD11 1:A:44:VAL:HG22 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG23 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG22 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG23 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG21 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG22 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG22 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG23 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG23 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A	(1,1484)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:19:ILE:HB	30	0.1
(1,1332) 1:A:68:LYS:HE3 1:A:69:LEU:H 4 0.1 (1,1071) 1:A:36:LEU:HG 1:A:38:SER:H 13 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD11 1:A:44:VAL:HG21 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD11 1:A:44:VAL:HG22 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG21 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG22 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG23 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG21 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG22 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG23 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG23 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG23 23 0.1 (1,1057) 1:A:36:LEU:HB3 1:A:40:MET:HA 1 0.1	(1,1484)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:19:ILE:HB	30	0.1
(1,1071) 1:A:36:LEU:HG 1:A:38:SER:H 13 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD11 1:A:44:VAL:HG21 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD11 1:A:44:VAL:HG22 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD11 1:A:44:VAL:HG23 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG21 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG22 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG23 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG22 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG22 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG23 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG23 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG23 23 0.1 (1,1037) 1:A:36:LEU:HB3 1:A:40:MET:HA 1 0.1	(1,1332)	1:A:68:LYS:HE2	1:A:69:LEU:H	4	0.1
(1,1050) 1:A:36:LEU:HD11 1:A:44:VAL:HG21 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD11 1:A:44:VAL:HG22 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD11 1:A:44:VAL:HG23 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG21 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG22 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG21 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG22 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG23 23 0.1 (1,1037) 1:A:36:LEU:HB3 1:A:40:MET:HA 1 0.1	(1,1332)	1:A:68:LYS:HE3	1:A:69:LEU:H	4	0.1
(1,1050) 1:A:36:LEU:HD11 1:A:44:VAL:HG22 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD11 1:A:44:VAL:HG23 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG21 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG22 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG23 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG21 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG22 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG23 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG23 23 0.1 (1,1037) 1:A:36:LEU:HB3 1:A:40:MET:HA 1 0.1	(1,1071)	1:A:36:LEU:HG	1:A:38:SER:H	13	0.1
(1,1050) 1:A:36:LEU:HD11 1:A:44:VAL:HG22 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD11 1:A:44:VAL:HG23 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG21 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG22 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG23 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG21 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG22 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG23 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG23 23 0.1 (1,1037) 1:A:36:LEU:HB3 1:A:40:MET:HA 1 0.1	(1,1050)	1:A:36:LEU:HD11	1:A:44:VAL:HG21	23	0.1
(1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG21 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG22 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG23 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG21 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG22 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG23 23 0.1 (1,1037) 1:A:36:LEU:HB3 1:A:40:MET:HA 1 0.1		1:A:36:LEU:HD11	1:A:44:VAL:HG22	23	0.1
(1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG21 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG22 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG23 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG21 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG22 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG23 23 0.1 (1,1037) 1:A:36:LEU:HB3 1:A:40:MET:HA 1 0.1	(1,1050)	1:A:36:LEU:HD11	1:A:44:VAL:HG23	23	0.1
(1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG22 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD12 1:A:44:VAL:HG23 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG21 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG22 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG23 23 0.1 (1,1037) 1:A:36:LEU:HB3 1:A:40:MET:HA 1 0.1		1:A:36:LEU:HD12	1:A:44:VAL:HG21	23	0.1
(1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG21 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG22 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG23 23 0.1 (1,1037) 1:A:36:LEU:HB3 1:A:40:MET:HA 1 0.1		1:A:36:LEU:HD12	1:A:44:VAL:HG22	23	0.1
(1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG22 23 0.1 (1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG23 23 0.1 (1,1037) 1:A:36:LEU:HB3 1:A:40:MET:HA 1 0.1	(1,1050)	1:A:36:LEU:HD12	1:A:44:VAL:HG23	23	0.1
(1,1050) 1:A:36:LEU:HD13 1:A:44:VAL:HG23 23 0.1 (1,1037) 1:A:36:LEU:HB3 1:A:40:MET:HA 1 0.1	(1,1050)	1:A:36:LEU:HD13	1:A:44:VAL:HG21	23	0.1
(1,1037) 1:A:36:LEU:HB3 1:A:40:MET:HA 1 0.1	(1,1050)	1:A:36:LEU:HD13	1:A:44:VAL:HG22	23	0.1
	(1,1050)	1:A:36:LEU:HD13	1:A:44:VAL:HG23	23	0.1
	(1,1037)	1:A:36:LEU:HB3	1:A:40:MET:HA	1	0.1
(1,1037) 1:A:36:LEU:HB3 1:A:40:MET:HA 4 0.1	(1,1037)	1:A:36:LEU:HB3	1:A:40:MET:HA	4	0.1



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

(1,1037) 1:A:36:LEU:HB3 1:A:40:MET:HA 10 0.1 (1,1037) 1:A:36:LEU:HB3 1:A:40:MET:HA 12 0.1 (1,1037) 1:A:36:LEU:HB3 1:A:40:MET:HA 25 0.1 (1,1017) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:31:LEU:HA 4 0.1 (1,1017) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:31:LEU:HA 4 0.1 (1,1017) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:31:LEU:HA 4 0.1 (1,1017) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:31:LEU:HA 10 0.1 (1,1017) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:31:LEU:HA 10 0.1 (1,1017) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:31:LEU:HA 29 0.1 (1,1017) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:31:LEU:HA 29 0.1 (1,1017) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:31:LEU:HA 29 0.1 (1,1017) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:34:LEU:HB 29 0.1 (1,9) 1:A:16:ILE:HG22 1:A:43:GLU:H 10 0.09 (1,9) 1:A:16:ILE:HG23 1:A:42:VAL:H	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1037) 1:A:36:LEU:HB3 1:A:40:MET:HA 25 0.1 (1,1017) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:31:LEU:HA 4 0.1 (1,1017) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:31:LEU:HA 4 0.1 (1,1017) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:31:LEU:HA 4 0.1 (1,1017) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:31:LEU:HA 10 0.1 (1,1017) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:31:LEU:HA 10 0.1 (1,1017) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:31:LEU:HA 29 0.1 (1,1017) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:31:LEU:HA 29 0.1 (1,1017) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:31:LEU:HA 29 0.1 (1,1017) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:31:LEU:HA 29 0.1 (1,1017) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:31:LEU:HA 29 0.1 (1,9) 1:A:16:ILE:HG21 1:A:43:GLU:H 10 0.09 (1,9) 1:A:16:ILE:HG22 1:A:43:GLU:H 10 0.09 (1,9) 1:A:16:ILE:HG23 1:A:42:VAL:H <	(1,1037)	1:A:36:LEU:HB3	1:A:40:MET:HA	10	0.1
(1,1017) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:31:LEU:HA 4 0.1 (1,1017) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:31:LEU:HA 4 0.1 (1,1017) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:31:LEU:HA 4 0.1 (1,1017) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:31:LEU:HA 10 0.1 (1,1017) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:31:LEU:HA 10 0.1 (1,1017) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:31:LEU:HA 10 0.1 (1,1017) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:31:LEU:HA 10 0.1 (1,1017) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:31:LEU:HA 29 0.1 (1,1017) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:31:LEU:HA 29 0.1 (1,1017) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:31:LEU:HA 29 0.1 (1,1017) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:31:LEU:HA 29 0.1 (1,1017) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:31:LEU:HA 29 0.1 (1,1017) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:31:LEU:HA 29 0.1 (1,1017) 1:A:16:ILE:HG21 1:A:43:GLU:H 10 0.09 (1,9) 1:A:16:ILE:HG21 1:A:43:GLU:H 10 0.09 (1,9) 1:A:16:ILE:HG22 1:A:43:GLU:H 10 0.09 (1,9) 1:A:16:ILE:HG23 1:A:42:VAL:H 10 0.09 (1,9) 1:A:16:ILE:HG21 1:A:42:VAL:H 10 0.09 (1,9) 1:A:16:ILE:HG22 1:A:42:VAL:H 10 0.09 (1,9) 1:A:47:ILE:HG21 1:A:50:ARG:HE 10 0.09 (1,9) 1:A:47:ILE:HG21 1:A:50:ARG:HE 10 0.09 (1,9) 1:A:47:ILE:HG21 1:A:6:GLN:HE21 17 0.09 (1,896) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:6:GLN:HE21 17 0.09 (1,896) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:6:GLN:HE21 17 0.09 (1,85) 1:A:24:GLY:H 1:A:23:ALA:HA 4 0.09 (1,85) 1:A:24:GLY:H 1:A:23:ALA:HA 4 0.09 (1,85) 1:A:24:GLY:H 1:A:23:ALA:HA 4 0.09 (1,85) 1:A:24:GLY:H 1:A:23:ALA:HA 6 0.09 (1,85) 1:A:24:GLY:H 1:A:23:ALA:HA 6 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 17 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 17 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 19 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 19 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 24 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 25 0.09	(1,1037)	1:A:36:LEU:HB3	1:A:40:MET:HA	12	0.1
(1,1017) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:31:LEU:HA 4 0.1 (1,1017) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:31:LEU:HA 4 0.1 (1,1017) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:31:LEU:HA 10 0.1 (1,1017) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:31:LEU:HA 10 0.1 (1,1017) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:31:LEU:HA 10 0.1 (1,1017) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:31:LEU:HA 29 0.1 (1,1017) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:31:LEU:HA 29 0.1 (1,9) 1:A:16:ILE:HG21 1:A:43:GLU:H 10 0.09 (1,9) 1:A:16:ILE:HG21 1:A:43:GLU:H 10 0.09 (1,9) 1:A:16:ILE:HG22 1:A:43:GLU:H 10 0.09 (1,9) 1:A:16:ILE:HG22 1:A:43:GLU:H 10 0.09 (1,9) 1:A:16:ILE:HG22 1:A:42:VAL:H 10 0.09 (1,9) 1:A:16:ILE:HG22 1:A:42:VAL:H 10 0.09 (1,9) 1:A:46:ILE:HG21 1:A:42:VAL:H 10 0.09 (1,9) 1:A:47:ILE:HG21 1:A:42:VAL:H 10 0.09 (1,9) 1:A:47:ILE:HG21 1:A:50:ARG:HE 10 0.09 (1,9) 1:A:47:ILE:HG21 1:A:50:ARG:HE 10 0.09 (1,9) 1:A:47:ILE:HG21 1:A:50:ARG:HE 10 0.09 (1,9) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:50:ARG:HE 10 0.09 (1,9) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:50:ARG:HE 10 0.09 (1,896) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:6:GLN:HE21 17 0.09 (1,896) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:6:GLN:HE21 17 0.09 (1,896) 1:A:47:ILE:HG21 1:A:6:GLN:HE21 17 0.09 (1,896) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:6:GLN:HE21 17 0.09 (1,896) 1:A:47:ILE:HG21 1:A:6:GLN:HE21 17 0.09 (1,896) 1:A:48:ASP:HB3 1:A:15:ILE:HA 4 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:6:GLN:HE21 17 0.09 (1,896) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:6:GLN:HE21 17 0.09 (1,896) 1:A:48:ASP:HB3 1:A:18:ILYS:HB2 15 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:6:9:LEU:H 17 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:6:9:LEU:H 17 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:6:9:LEU:H 17 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:6:9:LEU:H 19 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:6:9:LEU:H 24 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:6:9:LEU:H 24 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:6:9:LEU:H 24 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:6:9:LEU:H 25 0.09 (1	(1,1037)	1:A:36:LEU:HB3	1:A:40:MET:HA	25	0.1
(1,1017) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:31:LEU:HA 4 0.1 (1,1017) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:31:LEU:HA 10 0.1 (1,1017) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:31:LEU:HA 10 0.1 (1,1017) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:31:LEU:HA 10 0.1 (1,1017) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:31:LEU:HA 29 0.1 (1,1017) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:31:LEU:HA 29 0.1 (1,1017) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:31:LEU:HA 29 0.1 (1,1017) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:31:LEU:HA 29 0.1 (1,1017) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:31:LEU:HA 29 0.1 (1,9) 1:A:16:ILE:HG21 1:A:43:GLU:H 10 0.09 (1,9) 1:A:16:ILE:HG22 1:A:43:GLU:H 10 0.09 (1,9) 1:A:16:ILE:HG23 1:A:43:GLU:H 10 0.09 (1,9) 1:A:16:ILE:HG23 1:A:43:GLU:H 10 0.09 (1,9) 1:A:16:ILE:HG23 1:A:42:VAL:H 10 0.09 (1,9) 1:A:16:ILE:HG22 1:A:42:VAL:H 10 0.09 (1,9) 1:A:16:ILE:HG22 1:A:42:VAL:H 10 0.09 (1,9) 1:A:16:ILE:HG22 1:A:42:VAL:H 10 0.09 (1,9) 1:A:47:ILE:HG21 1:A:50:ARG:HE 10 0.09 (1,9) 1:A:47:ILE:HG21 1:A:50:ARG:HE 10 0.09 (1,9) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:50:ARG:HE 10 0.09 (1,9) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:50:ARG:HE 10 0.09 (1,896) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:6:GLN:HE21 17 0.09 (1,896) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:6:GLN:HE21 17 0.09 (1,896) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:6:GLN:HE21 17 0.09 (1,855) 1:A:24:GLY:H 1:A:23:ALA:HA 4 0.09 (1,855) 1:A:24:GLY:H 1:A:23:ALA:HA 6 0.09 (1,854) 1:A:24:GLY:H 1:A:25:ILE:HA 6 0.09 (1,853) 1:A:24:GLY:H 1:A:25:ILE:HA 6 0.09 (1,853) 1:A:24:GLY:H 1:A:25:ILE:HA 6 0.09 (1,853) 1:A:24:GLY:H 1:A:25:ILE:HA 10 0.09 (1,853) 1:A:25:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 17 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 19 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 19 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 24 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 24 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 24 0.09 (1,813)	(1,1017)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:31:LEU:HA	4	0.1
(1,1017) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:31:LEU:HA 10 0.1 (1,1017) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:31:LEU:HA 10 0.1 (1,1017) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:31:LEU:HA 10 0.1 (1,1017) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:31:LEU:HA 29 0.1 (1,1017) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:31:LEU:HA 29 0.1 (1,1017) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:31:LEU:HA 29 0.1 (1,1017) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:31:LEU:HA 29 0.1 (1,1017) 1:A:36:ILE:HG21 1:A:43:GLU:H 10 0.09 (1,9) 1:A:16:ILE:HG22 1:A:43:GLU:H 10 0.09 (1,9) 1:A:16:ILE:HG22 1:A:43:GLU:H 10 0.09 (1,9) 1:A:16:ILE:HG21 1:A:42:VAL:H 10 0.09 (1,9) 1:A:16:ILE:HG21 1:A:42:VAL:H 10 0.09 (1,9) 1:A:16:ILE:HG22 1:A:42:VAL:H 10 0.09 (1,9) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:42:VAL:H 10 0.09 (1,9) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:50:ARG:HE 10 0.09 (1,9) 1:A:47:ILE:HG21 1:A:50:ARG:HE 10 0.09 (1,9) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:6:GLN:HE21 17 0.09 (1,896) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:6:GLN:HE21 17 0.09 (1,896) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:6:GLN:HE21 17 0.09 (1,856) 1:A:24:GLY:H 1:A:23:ALA:HA 4 0.09 (1,855) 1:A:24:GLY:H 1:A:23:ALA:HA 4 0.09 (1,855) 1:A:24:GLY:H 1:A:23:ALA:HA 4 0.09 (1,855) 1:A:24:GLY:H 1:A:23:ALA:HA 4 0.09 (1,856) 1:A:24:GLY:H 1:A:25:ILE:HA 6 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 17 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 17 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 17 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 19 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 24 0.09	(1,1017)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:31:LEU:HA	4	0.1
(1,1017) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:31:LEU:HA 10 0.1 (1,1017) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:31:LEU:HA 10 0.1 (1,1017) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:31:LEU:HA 29 0.1 (1,1017) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:31:LEU:HA 29 0.1 (1,1017) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:31:LEU:HA 29 0.1 (1,1017) 1:A:46:ILE:HG21 1:A:43:GLU:H 10 0.09 (1,9) 1:A:16:ILE:HG23 1:A:42:VAL:H 10 0.09 (1,9) 1:A:46:ILE:HG23 1:A:42:VAL:H 10 0.09 (1,9) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:45:DARG:HE 10 0.09 (1,9) 1:A:47:ILE:HG21 1:A:50:ARG:HE 10 0.09 (1,896) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:6:GLN:HE21	(1,1017)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:31:LEU:HA	4	0.1
(1,1017) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:31:LEU:HA 10 0.1 (1,1017) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:31:LEU:HA 29 0.1 (1,1017) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:31:LEU:HA 29 0.1 (1,1017) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:31:LEU:HA 29 0.1 (1,1017) 1:A:16:ILE:HG21 1:A:43:GLU:H 10 0.09 (1,109) 1:A:16:ILE:HG22 1:A:43:GLU:H 10 0.09 (1,109) 1:A:16:ILE:HG23 1:A:43:GLU:H 10 0.09 (1,109) 1:A:16:ILE:HG23 1:A:42:VAL:H 10 0.09 (1,109) 1:A:16:ILE:HG22 1:A:42:VAL:H 10 0.09 (1,109) 1:A:16:ILE:HG23 1:A:42:VAL:H 10 0.09 (1,109) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:42:VAL:H 10 0.09 (1,109) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:50:ARG:HE 10 0.09 (1,109) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:50:ARG:HE 10 0.09 (1,109) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:6:GLN:HE21 17 0.09 (1,100) 1:A:10:ILE:HG23 1:A:6:ILE:HG24 10:ILE:HG24 00:ILE:HG24 00:ILE:HG24 00:ILE:HG24 00:ILE:HG24 00:ILE:HG24 00:ILE:HG24 00:ILE:HG24 00:ILE	(1,1017)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:31:LEU:HA	10	0.1
(1,1017) 1:A:34:LEU:HD21 1:A:31:LEU:HA 29 0.1 (1,1017) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:31:LEU:HA 29 0.1 (1,1017) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:31:LEU:HA 29 0.1 (1,9) 1:A:16:ILE:HG21 1:A:43:GLU:H 10 0.09 (1,9) 1:A:16:ILE:HG22 1:A:43:GLU:H 10 0.09 (1,9) 1:A:16:ILE:HG23 1:A:43:GLU:H 10 0.09 (1,9) 1:A:16:ILE:HG21 1:A:42:VAL:H 10 0.09 (1,9) 1:A:16:ILE:HG21 1:A:42:VAL:H 10 0.09 (1,9) 1:A:16:ILE:HG23 1:A:42:VAL:H 10 0.09 (1,9) 1:A:16:ILE:HG23 1:A:42:VAL:H 10 0.09 (1,9) 1:A:16:ILE:HG23 1:A:42:VAL:H 10 0.09 (1,9) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:50:ARG:HE 10 0.09 (1,9) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:50:ARG:HE 10 0.09 (1,9) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:50:ARG:HE 10 0.09 (1,9) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:6:GLN:HE21 17 0.09 (1,896) 1:A:47:ILE:HG21 1:A:6:GLN:HE21 17 0.09 (1,896) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:6:GLN:HE21 17 0.09 (1,85) 1:A:24:GLY:H 1:A:23:ALA:HA 4 0.09 (1,85) 1:A:24:GLY:H 1:A:23:ALA:HA 4 0.09 (1,85) 1:A:24:GLY:H 1:A:25:ILE:HA 4 0.09 (1,85) 1:A:24:GLY:H 1:A:25:ILE:HA 6 0.09 (1,844) 1:A:8:ASP:HB3 1:A:11:LYS:HB3 15 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 17 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 17 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 17 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 19 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 19 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 24 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 24 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 24 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 24 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 24 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 24 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 24 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 24 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 24 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 24 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 24 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 25 0.09	(1,1017)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:31:LEU:HA	10	0.1
(1,1017) 1:A:34:LEU:HD22 1:A:31:LEU:HA 29 0.1 (1,1017) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:31:LEU:HA 29 0.1 (1,9) 1:A:16:ILE:HG21 1:A:43:GLU:H 10 0.09 (1,9) 1:A:16:ILE:HG22 1:A:43:GLU:H 10 0.09 (1,9) 1:A:16:ILE:HG23 1:A:43:GLU:H 10 0.09 (1,9) 1:A:16:ILE:HG21 1:A:43:GLU:H 10 0.09 (1,9) 1:A:16:ILE:HG21 1:A:42:VAL:H 10 0.09 (1,9) 1:A:16:ILE:HG21 1:A:42:VAL:H 10 0.09 (1,9) 1:A:16:ILE:HG22 1:A:42:VAL:H 10 0.09 (1,9) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:42:VAL:H 10 0.09 (1,9) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:50:ARG:HE 10 0.09 (1,9) 1:A:47:ILE:HG21 1:A:50:ARG:HE 10 0.09 (1,9) 1:A:47:ILE:HG21 1:A:6:GLN:HE21 17 0.09 (1,896) 1:A:47:ILE:HG21 1:A:6:GLN:HE21 17 0.09 (1,896) 1:A:47:ILE:HG21 1:A:6:GLN:HE21 17 0.09 (1,896) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:6:GLN:HE21 17 0.09 (1,85) 1:A:24:GLY:H 1:A:23:ALA:HA 4 0.09 (1,85) 1:A:24:GLY:H 1:A:23:ALA:HA 4 0.09 (1,85) 1:A:24:GLY:H 1:A:23:ALA:HA 6 0.09 (1,85) 1:A:24:GLY:H 1:A:25:ILE:HA 6 0.09 (1,844) 1:A:8:ASP:HB3 1:A:11:LYS:HB3 15 0.09 (1,844) 1:A:8:ASP:HB3 1:A:11:LYS:HB3 15 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 17 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 17 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 17 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 19 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 19 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 24 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 24 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 24 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 24 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 24 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 24 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 24 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 24 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 24 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 24 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 25 0.09	(1,1017)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:31:LEU:HA	10	0.1
(1,1017) 1:A:34:LEU:HD23 1:A:31:LEU:HA 29 0.1 (1,9) 1:A:16:ILE:HG21 1:A:43:GLU:H 10 0.09 (1,9) 1:A:16:ILE:HG22 1:A:43:GLU:H 10 0.09 (1,9) 1:A:16:ILE:HG23 1:A:42:VAL:H 10 0.09 (1,9) 1:A:16:ILE:HG21 1:A:42:VAL:H 10 0.09 (1,9) 1:A:16:ILE:HG22 1:A:42:VAL:H 10 0.09 (1,9) 1:A:16:ILE:HG23 1:A:42:VAL:H 10 0.09 (1,9) 1:A:47:ILE:HG21 1:A:50:ARG:HE 10 0.09 (1,9) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:50:ARG:HE 10 0.09 (1,9) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:6:GLN:HE21 17 0.09 (1,896) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:6:GLN:HE21 17 0.09 (1,896) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:6:GLN:HE21 17 0.09 (1,896) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:6:GLN:HE21 17 0.09 (1,895) 1:A:24:GLY:H 1:A:6:GLN:HE21 17 <td>(1,1017)</td> <td>1:A:34:LEU:HD21</td> <td>1:A:31:LEU:HA</td> <td>29</td> <td>0.1</td>	(1,1017)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:31:LEU:HA	29	0.1
(1,9) 1:A:16:ILE:HG21 1:A:43:GLU:H 10 0.09 (1,9) 1:A:16:ILE:HG22 1:A:43:GLU:H 10 0.09 (1,9) 1:A:16:ILE:HG23 1:A:43:GLU:H 10 0.09 (1,9) 1:A:16:ILE:HG21 1:A:42:VAL:H 10 0.09 (1,9) 1:A:16:ILE:HG22 1:A:42:VAL:H 10 0.09 (1,9) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:50:ARG:HE 10 0.09 (1,9) 1:A:47:ILE:HG21 1:A:50:ARG:HE 10 0.09 (1,9) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:50:ARG:HE 10 0.09 (1,9) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:50:ARG:HE 10 0.09 (1,9) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:6:GLN:HE21 17 0.09 (1,896) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:6:GLN:HE21 17 0.09 (1,896) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:6:GLN:HE21 17 0.09 (1,896) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:6:GLN:HE21 17 0.09 (1,896) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:6:GLN:HE21 17 </td <td>(1,1017)</td> <td>1:A:34:LEU:HD22</td> <td>1:A:31:LEU:HA</td> <td>29</td> <td>0.1</td>	(1,1017)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:31:LEU:HA	29	0.1
(1,9) 1:A:16:ILE:HG22 1:A:43:GLU:H 10 0.09 (1,9) 1:A:16:ILE:HG23 1:A:43:GLU:H 10 0.09 (1,9) 1:A:16:ILE:HG21 1:A:42:VAL:H 10 0.09 (1,9) 1:A:16:ILE:HG22 1:A:42:VAL:H 10 0.09 (1,9) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:42:VAL:H 10 0.09 (1,9) 1:A:47:ILE:HG21 1:A:50:ARG:HE 10 0.09 (1,9) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:50:ARG:HE 10 0.09 (1,9) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:6:GLN:HE21 17 0.09 (1,896) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:6:GLN:HE21 17 0.09 (1,896) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:6:GLN:HE21 17 0.09 (1,896) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:6:GLN:HE21 17 0.09 (1,896) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:6:GLN:HE21 17 0.09 (1,896) 1:A:42:GLY:H 1:A:23:ALA:HA 4 0.09 (1,895) 1:A:24:GLY:H 1:A:23:ALA:HA 6	(1,1017)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:31:LEU:HA	29	0.1
(1,9) 1:A:16:ILE:HG23 1:A:43:GLU:H 10 0.09 (1,9) 1:A:16:ILE:HG21 1:A:42:VAL:H 10 0.09 (1,9) 1:A:16:ILE:HG22 1:A:42:VAL:H 10 0.09 (1,9) 1:A:16:ILE:HG23 1:A:42:VAL:H 10 0.09 (1,9) 1:A:47:ILE:HG21 1:A:50:ARG:HE 10 0.09 (1,9) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:50:ARG:HE 10 0.09 (1,9) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:50:ARG:HE 10 0.09 (1,9) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:6:GLN:HE21 17 0.09 (1,896) 1:A:47:ILE:HG21 1:A:6:GLN:HE21 17 0.09 (1,896) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:6:GLN:HE21 17 0.09 (1,896) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:6:GLN:HE21 17 0.09 (1,896) 1:A:42:GLY:H 1:A:2:3:ALA:HA 4 0.09 (1,85) 1:A:24:GLY:H 1:A:25:ILE:HA 4 0.09 (1,85) 1:A:24:GLY:H 1:A:23:ALA:HA 6	(1,9)	1:A:16:ILE:HG21	1:A:43:GLU:H	10	0.09
(1,9) 1:A:16:ILE:HG23 1:A:43:GLU:H 10 0.09 (1,9) 1:A:16:ILE:HG21 1:A:42:VAL:H 10 0.09 (1,9) 1:A:16:ILE:HG22 1:A:42:VAL:H 10 0.09 (1,9) 1:A:16:ILE:HG23 1:A:42:VAL:H 10 0.09 (1,9) 1:A:47:ILE:HG21 1:A:50:ARG:HE 10 0.09 (1,9) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:50:ARG:HE 10 0.09 (1,9) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:50:ARG:HE 10 0.09 (1,896) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:6:GLN:HE21 17 0.09 (1,896) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:6:GLN:HE21 17 0.09 (1,896) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:6:GLN:HE21 17 0.09 (1,896) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:6:GLN:HE21 17 0.09 (1,896) 1:A:42:GLY:H 1:A:23:ALA:HA 4 0.09 (1,885) 1:A:24:GLY:H 1:A:23:ALA:HA 6 0.09 (1,885) 1:A:24:GLY:H 1:A:23:ALA:HA 6	(1,9)	1:A:16:ILE:HG22	1:A:43:GLU:H	10	0.09
(1,9) 1:A:16:ILE:HG21 1:A:42:VAL:H 10 0.09 (1,9) 1:A:16:ILE:HG22 1:A:42:VAL:H 10 0.09 (1,9) 1:A:16:ILE:HG23 1:A:42:VAL:H 10 0.09 (1,9) 1:A:47:ILE:HG21 1:A:50:ARG:HE 10 0.09 (1,9) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:50:ARG:HE 10 0.09 (1,9) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:50:ARG:HE 10 0.09 (1,896) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:6:GLN:HE21 17 0.09 (1,896) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:6:GLN:HE21 17 0.09 (1,896) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:6:GLN:HE21 17 0.09 (1,896) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:6:GLN:HE21 17 0.09 (1,896) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:6:GLN:HE21 17 0.09 (1,896) 1:A:42:GLY:H 1:A:23:ALA:HA 4 0.09 (1,85) 1:A:24:GLY:H 1:A:25:ILE:HA 6 0.09 (1,85) 1:A:46:24:GLY:H 1:A:25:ILE:HA 6 <td>(1,9)</td> <td>1:A:16:ILE:HG23</td> <td>1:A:43:GLU:H</td> <td>10</td> <td>0.09</td>	(1,9)	1:A:16:ILE:HG23	1:A:43:GLU:H	10	0.09
(1,9) 1:A:16:ILE:HG23 1:A:42:VAL:H 10 0.09 (1,9) 1:A:47:ILE:HG21 1:A:50:ARG:HE 10 0.09 (1,9) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:50:ARG:HE 10 0.09 (1,9) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:6:GLN:HE21 17 0.09 (1,896) 1:A:47:ILE:HG21 1:A:6:GLN:HE21 17 0.09 (1,896) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:6:GLN:HE21 17 0.09 (1,896) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:6:GLN:HE21 17 0.09 (1,85) 1:A:24:GLY:H 1:A:225:ILE:HA 4 0.09 (1,85) 1:A:24:GLY:H 1:A:23:ALA:HA 6 0.09 (1,85) 1:A:24:GLY:H 1:A:25:ILE:HA 6 0.09 (1,844) 1:A:8:ASP:HB3 1:A:11:LYS:HB3 1		1:A:16:ILE:HG21	1:A:42:VAL:H	10	0.09
(1,9) 1:A:16:ILE:HG23 1:A:42:VAL:H 10 0.09 (1,9) 1:A:47:ILE:HG21 1:A:50:ARG:HE 10 0.09 (1,9) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:50:ARG:HE 10 0.09 (1,9) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:6:GLN:HE21 17 0.09 (1,896) 1:A:47:ILE:HG21 1:A:6:GLN:HE21 17 0.09 (1,896) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:6:GLN:HE21 17 0.09 (1,85) 1:A:24:GLY:H 1:A:22:ALA:HA 4 0.09 (1,85) 1:A:24:GLY:H 1:A:22:ILE:HA 6 0.09 (1,844) 1:A:8:ASP:HB3 1:A:11:LYS:HB3	(1,9)	1:A:16:ILE:HG22	1:A:42:VAL:H	10	0.09
(1,9) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:50:ARG:HE 10 0.09 (1,9) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:50:ARG:HE 10 0.09 (1,896) 1:A:47:ILE:HG21 1:A:6:GLN:HE21 17 0.09 (1,896) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:6:GLN:HE21 17 0.09 (1,896) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:6:GLN:HE21 17 0.09 (1,896) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:6:GLN:HE21 17 0.09 (1,85) 1:A:24:GLY:H 1:A:23:ALA:HA 4 0.09 (1,85) 1:A:24:GLY:H 1:A:25:ILE:HA 6 0.09 (1,85) 1:A:24:GLY:H 1:A:25:ILE:HA 6 0.09 (1,85) 1:A:24:GLY:H 1:A:25:ILE:HA 6 0.09 (1,84) 1:A:8:ASP:HB3 1:A:11:LYS:HB2 15 0.09 (1,844) 1:A:8:ASP:HB3 1:A:11:LYS:HB3 15 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 17 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 19		1:A:16:ILE:HG23	1:A:42:VAL:H	10	0.09
(1,9) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:50:ARG:HE 10 0.09 (1,9) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:50:ARG:HE 10 0.09 (1,896) 1:A:47:ILE:HG21 1:A:6:GLN:HE21 17 0.09 (1,896) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:6:GLN:HE21 17 0.09 (1,896) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:6:GLN:HE21 17 0.09 (1,896) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:6:GLN:HE21 17 0.09 (1,85) 1:A:24:GLY:H 1:A:23:ALA:HA 4 0.09 (1,85) 1:A:24:GLY:H 1:A:25:ILE:HA 6 0.09 (1,85) 1:A:24:GLY:H 1:A:25:ILE:HA 6 0.09 (1,85) 1:A:24:GLY:H 1:A:25:ILE:HA 6 0.09 (1,84) 1:A:8:ASP:HB3 1:A:11:LYS:HB2 15 0.09 (1,844) 1:A:8:ASP:HB3 1:A:11:LYS:HB3 15 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 17 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 19	(1,9)	1:A:47:ILE:HG21	1:A:50:ARG:HE	10	0.09
(1,9) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:50:ARG:HE 10 0.09 (1,896) 1:A:47:ILE:HG21 1:A:6:GLN:HE21 17 0.09 (1,896) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:6:GLN:HE21 17 0.09 (1,896) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:6:GLN:HE21 17 0.09 (1,85) 1:A:24:GLY:H 1:A:23:ALA:HA 4 0.09 (1,85) 1:A:24:GLY:H 1:A:23:ALA:HA 6 0.09 (1,85) 1:A:24:GLY:H 1:A:25:ILE:HA 6 0.09 (1,85) 1:A:24:GLY:H 1:A:25:ILE:HA 6 0.09 (1,85) 1:A:24:GLY:H 1:A:25:ILE:HA 6 0.09 (1,844) 1:A:8:ASP:HB3 1:A:11:LYS:HB2 15 0.09 (1,844) 1:A:8:ASP:HB3 1:A:11:LYS:HB3 15 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 17 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 17 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 19		1:A:47:ILE:HG22	1:A:50:ARG:HE	10	0.09
(1,896) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:6:GLN:HE21 17 0.09 (1,896) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:6:GLN:HE21 17 0.09 (1,85) 1:A:24:GLY:H 1:A:23:ALA:HA 4 0.09 (1,85) 1:A:24:GLY:H 1:A:23:ALA:HA 6 0.09 (1,85) 1:A:24:GLY:H 1:A:23:ALA:HA 6 0.09 (1,85) 1:A:24:GLY:H 1:A:25:ILE:HA 6 0.09 (1,85) 1:A:24:GLY:H 1:A:25:ILE:HA 6 0.09 (1,84) 1:A:24:GLY:H 1:A:25:ILE:HA 6 0.09 (1,844) 1:A:8:ASP:HB3 1:A:11:LYS:HB2 15 0.09 (1,844) 1:A:8:ASP:HB3 1:A:69:LEU:H 17 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 17 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 19 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 19 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 24		1:A:47:ILE:HG23	1:A:50:ARG:HE	10	0.09
(1,896) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:6:GLN:HE21 17 0.09 (1,85) 1:A:24:GLY:H 1:A:23:ALA:HA 4 0.09 (1,85) 1:A:24:GLY:H 1:A:25:ILE:HA 4 0.09 (1,85) 1:A:24:GLY:H 1:A:23:ALA:HA 6 0.09 (1,85) 1:A:24:GLY:H 1:A:25:ILE:HA 6 0.09 (1,85) 1:A:24:GLY:H 1:A:25:ILE:HA 6 0.09 (1,84) 1:A:8:ASP:HB3 1:A:11:LYS:HB2 15 0.09 (1,844) 1:A:8:ASP:HB3 1:A:11:LYS:HB3 15 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 17 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 17 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 19 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 24 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 24 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 24 <	(1,896)	1:A:47:ILE:HG21	1:A:6:GLN:HE21	17	0.09
(1,85) 1:A:24:GLY:H 1:A:23:ALA:HA 4 0.09 (1,85) 1:A:24:GLY:H 1:A:25:ILE:HA 4 0.09 (1,85) 1:A:24:GLY:H 1:A:23:ALA:HA 6 0.09 (1,85) 1:A:24:GLY:H 1:A:25:ILE:HA 6 0.09 (1,84) 1:A:8:ASP:HB3 1:A:11:LYS:HB2 15 0.09 (1,844) 1:A:8:ASP:HB3 1:A:69:LEU:H 17 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 17 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 17 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 19 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 19 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 24 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 24 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 24 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 25 <	(1,896)	1:A:47:ILE:HG22	1:A:6:GLN:HE21	17	0.09
(1,85) 1:A:24:GLY:H 1:A:25:ILE:HA 4 0.09 (1,85) 1:A:24:GLY:H 1:A:23:ALA:HA 6 0.09 (1,85) 1:A:24:GLY:H 1:A:25:ILE:HA 6 0.09 (1,844) 1:A:8:ASP:HB3 1:A:11:LYS:HB2 15 0.09 (1,844) 1:A:8:ASP:HB3 1:A:11:LYS:HB3 15 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 17 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 17 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 19 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 19 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 24 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 24 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 24 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 24 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 25	(1,896)	1:A:47:ILE:HG23	1:A:6:GLN:HE21	17	0.09
(1,85) 1:A:24:GLY:H 1:A:23:ALA:HA 6 0.09 (1,85) 1:A:24:GLY:H 1:A:25:ILE:HA 6 0.09 (1,844) 1:A:8:ASP:HB3 1:A:11:LYS:HB2 15 0.09 (1,844) 1:A:8:ASP:HB3 1:A:11:LYS:HB3 15 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 17 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 17 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 19 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 19 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 19 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 24 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 24 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 25 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 25 0.09	(1,85)	1:A:24:GLY:H	1:A:23:ALA:HA	4	0.09
(1,85) 1:A:24:GLY:H 1:A:25:ILE:HA 6 0.09 (1,844) 1:A:8:ASP:HB3 1:A:11:LYS:HB2 15 0.09 (1,844) 1:A:8:ASP:HB3 1:A:11:LYS:HB3 15 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 17 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 17 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 19 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 19 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 19 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 24 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 24 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 24 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 25 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 25 0.09	(1,85)	1:A:24:GLY:H	1:A:25:ILE:HA	4	0.09
(1,844) 1:A:8:ASP:HB3 1:A:11:LYS:HB2 15 0.09 (1,844) 1:A:8:ASP:HB3 1:A:11:LYS:HB3 15 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 17 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 17 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 19 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 19 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 19 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 24 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 24 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 24 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 24 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 25 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 25 0.09	(1,85)	1:A:24:GLY:H	1:A:23:ALA:HA	6	0.09
(1,844) 1:A:8:ASP:HB3 1:A:11:LYS:HB3 15 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 17 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 17 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 19 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 19 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 19 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 24 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 24 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 24 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 24 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 25 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 25 0.09	(1,85)	1:A:24:GLY:H	1:A:25:ILE:HA	6	0.09
(1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 17 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 17 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 17 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 19 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 19 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 24 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 24 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 24 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 24 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 25 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 25 0.09	(1,844)	1:A:8:ASP:HB3	1:A:11:LYS:HB2	15	0.09
(1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 17 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 17 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 19 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 19 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 24 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 24 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 24 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 24 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 25 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 25 0.09	(1,844)	1:A:8:ASP:HB3	1:A:11:LYS:HB3	15	0.09
(1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 17 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 19 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 19 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 19 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 24 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 24 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 24 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 25 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 25 0.09	(1,813)	1:A:65:THR:HG21	1:A:69:LEU:H	17	0.09
(1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 19 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 19 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 19 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 24 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 24 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 24 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 25 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 25 0.09	(1,813)	1:A:65:THR:HG22	1:A:69:LEU:H	17	0.09
(1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 19 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 19 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 24 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 24 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 24 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 25 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 25 0.09	(1,813)	1:A:65:THR:HG23	1:A:69:LEU:H	17	0.09
(1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 19 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 19 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 24 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 24 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 24 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 25 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 25 0.09	(1,813)	1:A:65:THR:HG21	1:A:69:LEU:H	19	0.09
(1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 19 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 24 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 24 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 24 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 25 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 25 0.09		1:A:65:THR:HG22	1:A:69:LEU:H	19	0.09
(1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 24 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 24 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 25 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 25 0.09		1:A:65:THR:HG23	1:A:69:LEU:H	19	0.09
(1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 24 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 24 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 25 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 25 0.09		1:A:65:THR:HG21	1:A:69:LEU:H	24	0.09
(1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 25 0.09 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 25 0.09		1:A:65:THR:HG22	1:A:69:LEU:H	24	0.09
(1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 25 0.09	(1,813)	1:A:65:THR:HG23	1:A:69:LEU:H	24	0.09
\ \ \ \ \ \ \ \ \ \ \ \ \ \ \ \ \ \ \	(1,813)	1:A:65:THR:HG21	1:A:69:LEU:H	25	0.09
(1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 25 0.09	(1,813)	1:A:65:THR:HG22	1:A:69:LEU:H	25	0.09
	(1,813)	1:A:65:THR:HG23	1:A:69:LEU:H	25	0.09



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,813)	1:A:65:THR:HG21	1:A:69:LEU:H	30	0.09
(1,813)	1:A:65:THR:HG22	1:A:69:LEU:H	30	0.09
(1,813)	1:A:65:THR:HG23	1:A:69:LEU:H	30	0.09
(1,704)	1:A:59:ARG:HB2	1:A:59:ARG:H	22	0.09
(1,673)	1:A:43:GLU:HA	1:A:39:LEU:HD21	5	0.09
(1,673)	1:A:43:GLU:HA	1:A:39:LEU:HD22	5	0.09
(1,673)	1:A:43:GLU:HA	1:A:39:LEU:HD23	5	0.09
(1,662)	1:A:49:GLU:HA	1:A:46:GLN:HA	27	0.09
(1,568)	1:A:72:MET:HG2	1:A:69:LEU:HD21	11	0.09
(1,568)	1:A:72:MET:HG2	1:A:69:LEU:HD22	11	0.09
(1,568)	1:A:72:MET:HG2	1:A:69:LEU:HD23	11	0.09
(1,536)	1:A:25:ILE:HD11	1:A:14:ALA:HB1	16	0.09
(1,536)	1:A:25:ILE:HD11	1:A:14:ALA:HB2	16	0.09
(1,536)	1:A:25:ILE:HD11	1:A:14:ALA:HB3	16	0.09
(1,536)	1:A:25:ILE:HD12	1:A:14:ALA:HB1	16	0.09
(1,536)	1:A:25:ILE:HD12	1:A:14:ALA:HB2	16	0.09
(1,536)	1:A:25:ILE:HD12	1:A:14:ALA:HB3	16	0.09
(1,536)	1:A:25:ILE:HD13	1:A:14:ALA:HB1	16	0.09
(1,536)	1:A:25:ILE:HD13	1:A:14:ALA:HB2	16	0.09
(1,536)	1:A:25:ILE:HD13	1:A:14:ALA:HB3	16	0.09
(1,506)	1:A:19:ILE:HD11	1:A:18:GLY:HA2	9	0.09
(1,506)	1:A:19:ILE:HD12	1:A:18:GLY:HA2	9	0.09
(1,506)	1:A:19:ILE:HD13	1:A:18:GLY:HA2	9	0.09
(1,479)	1:A:23:ALA:HA	1:A:21:ASP:HA	8	0.09
(1,479)	1:A:23:ALA:HA	1:A:21:ASP:HA	10	0.09
(1,479)	1:A:23:ALA:HA	1:A:21:ASP:HA	27	0.09
(1,45)	1:A:22:LEU:HD21	1:A:11:LYS:HE2	19	0.09
(1,45)	1:A:22:LEU:HD21	1:A:11:LYS:HE3	19	0.09
(1,45)	1:A:22:LEU:HD22	1:A:11:LYS:HE2	19	0.09
(1,45)	1:A:22:LEU:HD22	1:A:11:LYS:HE3	19	0.09
(1,45)	1:A:22:LEU:HD23	1:A:11:LYS:HE2	19	0.09
(1,45)	1:A:22:LEU:HD23	1:A:11:LYS:HE3	19	0.09
(1,394)	1:A:19:ILE:HG21	1:A:25:ILE:HG13	18	0.09
(1,394)	1:A:19:ILE:HG22	1:A:25:ILE:HG13	18	0.09
(1,394)	1:A:19:ILE:HG23	1:A:25:ILE:HG13	18	0.09
(1,391)	1:A:19:ILE:HG21	1:A:21:ASP:HA	2	0.09
(1,391)	1:A:19:ILE:HG22	1:A:21:ASP:HA	2	0.09
(1,391)	1:A:19:ILE:HG23	1:A:21:ASP:HA	2	0.09
(1,391)	1:A:19:ILE:HG21	1:A:21:ASP:HA	26	0.09
(1,391)	1:A:19:ILE:HG22	1:A:21:ASP:HA	26	0.09
(1,391)	1:A:19:ILE:HG23	1:A:21:ASP:HA	26	0.09
(1,38)	1:A:58:ILE:HG21	1:A:32:ALA:HA	17	0.09



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,38)	1:A:58:ILE:HG22	1:A:32:ALA:HA	17	0.09
(1,38)	1:A:58:ILE:HG23	1:A:32:ALA:HA	17	0.09
(1,38)	1:A:47:ILE:HG21	1:A:50:ARG:HA	17	0.09
(1,38)	1:A:47:ILE:HG22	1:A:50:ARG:HA	17	0.09
(1,38)	1:A:47:ILE:HG23	1:A:50:ARG:HA	17	0.09
(1,38)	1:A:58:ILE:HG21	1:A:32:ALA:HA	19	0.09
(1,38)	1:A:58:ILE:HG22	1:A:32:ALA:HA	19	0.09
(1,38)	1:A:58:ILE:HG23	1:A:32:ALA:HA	19	0.09
(1,38)	1:A:47:ILE:HG21	1:A:50:ARG:HA	19	0.09
(1,38)	1:A:47:ILE:HG22	1:A:50:ARG:HA	19	0.09
(1,38)	1:A:47:ILE:HG23	1:A:50:ARG:HA	19	0.09
(1,264)	1:A:32:ALA:HA	1:A:34:LEU:HD11	10	0.09
(1,264)	1:A:32:ALA:HA	1:A:34:LEU:HD12	10	0.09
(1,264)	1:A:32:ALA:HA	1:A:34:LEU:HD13	10	0.09
(1,241)	1:A:31:LEU:HD11	1:A:64:LEU:HG	3	0.09
(1,241)	1:A:31:LEU:HD12	1:A:64:LEU:HG	3	0.09
(1,241)	1:A:31:LEU:HD13	1:A:64:LEU:HG	3	0.09
(1,192)	1:A:29:SER:HB3	1:A:34:LEU:HD21	26	0.09
(1,192)	1:A:29:SER:HB3	1:A:34:LEU:HD22	26	0.09
(1,192)	1:A:29:SER:HB3	1:A:34:LEU:HD23	26	0.09
(1,18)	1:A:71:GLU:HA	1:A:74:SER:H	8	0.09
(1,18)	1:A:71:GLU:HA	1:A:69:LEU:H	8	0.09
(1,18)	1:A:71:GLU:HA	1:A:74:SER:H	25	0.09
(1,18)	1:A:71:GLU:HA	1:A:69:LEU:H	25	0.09
(1,177)	1:A:22:LEU:HD11	1:A:24:GLY:HA2	30	0.09
(1,177)	1:A:22:LEU:HD12	1:A:24:GLY:HA2	30	0.09
(1,177)	1:A:22:LEU:HD13	1:A:24:GLY:HA2	30	0.09
(1,171)	1:A:22:LEU:HG	1:A:21:ASP:HA	11	0.09
(1,1598)	1:A:70:GLN:HB2	1:A:9:LEU:HD21	3	0.09
(1,1598)	1:A:70:GLN:HB2	1:A:9:LEU:HD22	3	0.09
(1,1598)	1:A:70:GLN:HB2	1:A:9:LEU:HD23	3	0.09
(1,1598)	1:A:70:GLN:HB3	1:A:9:LEU:HD21	3	0.09
(1,1598)	1:A:70:GLN:HB3	1:A:9:LEU:HD22	3	0.09
(1,1598)	1:A:70:GLN:HB3	1:A:9:LEU:HD23	3	0.09
(1,1595)	1:A:68:LYS:HB2	1:A:64:LEU:H	11	0.09
(1,1595)	1:A:68:LYS:HB3	1:A:64:LEU:H	11	0.09
(1,1595)	1:A:68:LYS:HB2	1:A:64:LEU:H	11	0.09
(1,1595)	1:A:68:LYS:HB3	1:A:64:LEU:H	11	0.09
(1,1584)	1:A:59:ARG:HG3	1:A:58:ILE:H	9	0.09
(1,1576)	1:A:66:LEU:HD11	1:A:65:THR:HA	13	0.09
(1,1576)	1:A:66:LEU:HD12	1:A:65:THR:HA	13	0.09
(1,1576)	1:A:66:LEU:HD13	1:A:65:THR:HA	13	0.09



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1576)	1:A:66:LEU:HD11	1:A:65:THR:HA	21	0.09
(1,1576)	1:A:66:LEU:HD12	1:A:65:THR:HA	21	0.09
(1,1576)	1:A:66:LEU:HD13	1:A:65:THR:HA	21	0.09
(1,1553)	1:A:19:ILE:HG21	1:A:26:ASN:H	3	0.09
(1,1553)	1:A:19:ILE:HG22	1:A:26:ASN:H	3	0.09
(1,1553)	1:A:19:ILE:HG23	1:A:26:ASN:H	3	0.09
(1,1552)	1:A:19:ILE:HG21	1:A:24:GLY:H	16	0.09
(1,1552)	1:A:19:ILE:HG22	1:A:24:GLY:H	16	0.09
(1,1552)	1:A:19:ILE:HG23	1:A:24:GLY:H	16	0.09
(1,1552)	1:A:19:ILE:HG21	1:A:24:GLY:H	24	0.09
(1,1552)	1:A:19:ILE:HG22	1:A:24:GLY:H	24	0.09
(1,1552)	1:A:19:ILE:HG23	1:A:24:GLY:H	24	0.09
(1,1547)	1:A:44:VAL:HG11	1:A:40:MET:HA	8	0.09
(1,1547)	1:A:44:VAL:HG12	1:A:40:MET:HA	8	0.09
(1,1547)	1:A:44:VAL:HG13	1:A:40:MET:HA	8	0.09
(1,1547)	1:A:44:VAL:HG11	1:A:40:MET:HA	27	0.09
(1,1547)	1:A:44:VAL:HG12	1:A:40:MET:HA	27	0.09
(1,1547)	1:A:44:VAL:HG13	1:A:40:MET:HA	27	0.09
(1,1523)	1:A:73:SER:HA	1:A:70:GLN:H	28	0.09
(1,1494)	1:A:46:GLN:HG2	1:A:50:ARG:HD2	9	0.09
(1,1494)	1:A:46:GLN:HG2	1:A:50:ARG:HD3	9	0.09
(1,1491)	1:A:42:VAL:HG21	1:A:46:GLN:HG2	10	0.09
(1,1491)	1:A:42:VAL:HG22	1:A:46:GLN:HG2	10	0.09
(1,1491)	1:A:42:VAL:HG23	1:A:46:GLN:HG2	10	0.09
(1,1491)	1:A:42:VAL:HG21	1:A:46:GLN:HG2	28	0.09
(1,1491)	1:A:42:VAL:HG22	1:A:46:GLN:HG2	28	0.09
(1,1491)	1:A:42:VAL:HG23	1:A:46:GLN:HG2	28	0.09
(1,1489)	1:A:42:VAL:HA	1:A:45:ARG:HB2	28	0.09
(1,1484)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:19:ILE:HB	11	0.09
(1,1484)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:19:ILE:HB	11	0.09
(1,1484)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:19:ILE:HB	11	0.09
(1,1484)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:19:ILE:HB	29	0.09
(1,1484)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:19:ILE:HB	29	0.09
(1,1484)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:19:ILE:HB	29	0.09
(1,1332)	1:A:68:LYS:HE2	1:A:69:LEU:H	12	0.09
(1,1332)	1:A:68:LYS:HE3	1:A:69:LEU:H	12	0.09
(1,1332)	1:A:68:LYS:HE2	1:A:69:LEU:H	23	0.09
(1,1332)	1:A:68:LYS:HE3	1:A:69:LEU:H	23	0.09
(1,1316)	1:A:64:LEU:HD21	1:A:68:LYS:HB2	21	0.09
(1,1316)	1:A:64:LEU:HD21	1:A:68:LYS:HB3	21	0.09
(1,1316)	1:A:64:LEU:HD22	1:A:68:LYS:HB2	21	0.09
(1,1316)	1:A:64:LEU:HD22	1:A:68:LYS:HB3	21	0.09



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1316)	1:A:64:LEU:HD23	1:A:68:LYS:HB2	21	0.09
(1,1316)	1:A:64:LEU:HD23	1:A:68:LYS:HB3	21	0.09
(1,1221)	1:A:58:ILE:HG21	1:A:57:PRO:HB3	20	0.09
(1,1221)	1:A:58:ILE:HG22	1:A:57:PRO:HB3	20	0.09
(1,1221)	1:A:58:ILE:HG23	1:A:57:PRO:HB3	20	0.09
(1,1163)	1:A:54:LEU:HD11	1:A:51:GLU:HB2	11	0.09
(1,1163)	1:A:54:LEU:HD12	1:A:51:GLU:HB2	11	0.09
(1,1163)	1:A:54:LEU:HD13	1:A:51:GLU:HB2	11	0.09
(1,111)	1:A:55:VAL:HG21	1:A:49:GLU:HG3	1	0.09
(1,111)	1:A:55:VAL:HG22	1:A:49:GLU:HG3	1	0.09
(1,111)	1:A:55:VAL:HG23	1:A:49:GLU:HG3	1	0.09
(1,1028)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:33:ASP:H	13	0.09
(1,1028)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:33:ASP:H	13	0.09
(1,1028)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:33:ASP:H	13	0.09
(1,1017)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:31:LEU:HA	9	0.09
(1,1017)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:31:LEU:HA	9	0.09
(1,1017)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:31:LEU:HA	9	0.09
(1,1017)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:31:LEU:HA	12	0.09
(1,1017)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:31:LEU:HA	12	0.09
(1,1017)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:31:LEU:HA	12	0.09
(1,1017)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:31:LEU:HA	23	0.09
(1,1017)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:31:LEU:HA	23	0.09
(1,1017)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:31:LEU:HA	23	0.09
(1,874)	1:A:10:VAL:HG21	1:A:70:GLN:HG3	3	0.08
(1,874)	1:A:10:VAL:HG22	1:A:70:GLN:HG3	3	0.08
(1,874)	1:A:10:VAL:HG23	1:A:70:GLN:HG3	3	0.08
(1,85)	1:A:24:GLY:H	1:A:23:ALA:HA	15	0.08
(1,85)	1:A:24:GLY:H	1:A:25:ILE:HA	15	0.08
(1,847)	1:A:8:ASP:HB2	1:A:11:LYS:HD2	27	0.08
(1,847)	1:A:8:ASP:HB2	1:A:11:LYS:HD3	27	0.08
(1,813)	1:A:65:THR:HG21	1:A:69:LEU:H	13	0.08
(1,813)	1:A:65:THR:HG22	1:A:69:LEU:H	13	0.08
(1,813)	1:A:65:THR:HG23	1:A:69:LEU:H	13	0.08
(1,813)	1:A:65:THR:HG21	1:A:69:LEU:H	15	0.08
(1,813)	1:A:65:THR:HG22	1:A:69:LEU:H	15	0.08
(1,813)	1:A:65:THR:HG23	1:A:69:LEU:H	15	0.08
(1,813)	1:A:65:THR:HG21	1:A:69:LEU:H	23	0.08
(1,813)	1:A:65:THR:HG22	1:A:69:LEU:H	23	0.08
(1,813)	1:A:65:THR:HG23	1:A:69:LEU:H	23	0.08
(1,801)	1:A:65:THR:HA	1:A:31:LEU:HD11	2	0.08
(1,801)	1:A:65:THR:HA	1:A:31:LEU:HD12	2	0.08
(1,801)	1:A:65:THR:HA	1:A:31:LEU:HD13	2	0.08



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,787)	1:A:51:GLU:HB3	1:A:6:GLN:HE21	25	0.08
(1,783)	1:A:52:HIS:HB3	1:A:54:LEU:HD11	18	0.08
(1,783)	1:A:52:HIS:HB3	1:A:54:LEU:HD12	18	0.08
(1,783)	1:A:52:HIS:HB3	1:A:54:LEU:HD13	18	0.08
(1,783)	1:A:52:HIS:HB3	1:A:54:LEU:HD21	18	0.08
(1,783)	1:A:52:HIS:HB3	1:A:54:LEU:HD22	18	0.08
(1,783)	1:A:52:HIS:HB3	1:A:54:LEU:HD23	18	0.08
(1,704)	1:A:59:ARG:HB2	1:A:59:ARG:H	1	0.08
(1,704)	1:A:59:ARG:HB2	1:A:59:ARG:H	3	0.08
(1,704)	1:A:59:ARG:HB2	1:A:59:ARG:H	13	0.08
(1,704)	1:A:59:ARG:HB2	1:A:59:ARG:H	28	0.08
(1,536)	1:A:25:ILE:HD11	1:A:14:ALA:HB1	5	0.08
(1,536)	1:A:25:ILE:HD11	1:A:14:ALA:HB2	5	0.08
(1,536)	1:A:25:ILE:HD11	1:A:14:ALA:HB3	5	0.08
(1,536)	1:A:25:ILE:HD12	1:A:14:ALA:HB1	5	0.08
(1,536)	1:A:25:ILE:HD12	1:A:14:ALA:HB2	5	0.08
(1,536)	1:A:25:ILE:HD12	1:A:14:ALA:HB3	5	0.08
(1,536)	1:A:25:ILE:HD13	1:A:14:ALA:HB1	5	0.08
(1,536)	1:A:25:ILE:HD13	1:A:14:ALA:HB2	5	0.08
(1,536)	1:A:25:ILE:HD13	1:A:14:ALA:HB3	5	0.08
(1,536)	1:A:25:ILE:HD11	1:A:14:ALA:HB1	11	0.08
(1,536)	1:A:25:ILE:HD11	1:A:14:ALA:HB2	11	0.08
(1,536)	1:A:25:ILE:HD11	1:A:14:ALA:HB3	11	0.08
(1,536)	1:A:25:ILE:HD12	1:A:14:ALA:HB1	11	0.08
(1,536)	1:A:25:ILE:HD12	1:A:14:ALA:HB2	11	0.08
(1,536)	1:A:25:ILE:HD12	1:A:14:ALA:HB3	11	0.08
(1,536)	1:A:25:ILE:HD13	1:A:14:ALA:HB1	11	0.08
(1,536)	1:A:25:ILE:HD13	1:A:14:ALA:HB2	11	0.08
(1,536)	1:A:25:ILE:HD13	1:A:14:ALA:HB3	11	0.08
(1,499)	1:A:47:ILE:HD11	1:A:43:GLU:HG2	30	0.08
(1,499)	1:A:47:ILE:HD12	1:A:43:GLU:HG2	30	0.08
(1,499)	1:A:47:ILE:HD13	1:A:43:GLU:HG2	30	0.08
(1,491)	1:A:27:LEU:HA	1:A:66:LEU:H	30	0.08
(1,479)	1:A:23:ALA:HA	1:A:21:ASP:HA	7	0.08
(1,475)	1:A:22:LEU:HD21	1:A:20:ARG:HB2	24	0.08
(1,475)	1:A:22:LEU:HD22	1:A:20:ARG:HB2	24	0.08
(1,475)	1:A:22:LEU:HD23	1:A:20:ARG:HB2	24	0.08
(1,38)	1:A:58:ILE:HG21	1:A:32:ALA:HA	23	0.08
(1,38)	1:A:58:ILE:HG22	1:A:32:ALA:HA	23	0.08
(1,38)	1:A:58:ILE:HG23	1:A:32:ALA:HA	23	0.08
(1,38)	1:A:47:ILE:HG21	1:A:50:ARG:HA	23	0.08
(1,38)	1:A:47:ILE:HG22	1:A:50:ARG:HA	23	0.08



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,38)	1:A:47:ILE:HG23	1:A:50:ARG:HA	23	0.08
(1,315)	1:A:40:MET:HB3	1:A:39:LEU:HD21	11	0.08
(1,315)	1:A:40:MET:HB3	1:A:39:LEU:HD22	11	0.08
(1,315)	1:A:40:MET:HB3	1:A:39:LEU:HD23	11	0.08
(1,315)	1:A:40:MET:HB3	1:A:39:LEU:HD21	23	0.08
(1,315)	1:A:40:MET:HB3	1:A:39:LEU:HD22	23	0.08
(1,315)	1:A:40:MET:HB3	1:A:39:LEU:HD23	23	0.08
(1,264)	1:A:32:ALA:HA	1:A:34:LEU:HD11	15	0.08
(1,264)	1:A:32:ALA:HA	1:A:34:LEU:HD12	15	0.08
(1,264)	1:A:32:ALA:HA	1:A:34:LEU:HD13	15	0.08
(1,264)	1:A:32:ALA:HA	1:A:34:LEU:HD11	16	0.08
(1,264)	1:A:32:ALA:HA	1:A:34:LEU:HD12	16	0.08
(1,264)	1:A:32:ALA:HA	1:A:34:LEU:HD13	16	0.08
(1,264)	1:A:32:ALA:HA	1:A:34:LEU:HD11	23	0.08
(1,264)	1:A:32:ALA:HA	1:A:34:LEU:HD12	23	0.08
(1,264)	1:A:32:ALA:HA	1:A:34:LEU:HD13	23	0.08
(1,241)	1:A:31:LEU:HD11	1:A:64:LEU:HG	21	0.08
(1,241)	1:A:31:LEU:HD12	1:A:64:LEU:HG	21	0.08
(1,241)	1:A:31:LEU:HD13	1:A:64:LEU:HG	21	0.08
(1,239)	1:A:31:LEU:HD11	1:A:62:ARG:HG3	14	0.08
(1,239)	1:A:31:LEU:HD12	1:A:62:ARG:HG3	14	0.08
(1,239)	1:A:31:LEU:HD13	1:A:62:ARG:HG3	14	0.08
(1,239)	1:A:31:LEU:HD11	1:A:62:ARG:HG3	27	0.08
(1,239)	1:A:31:LEU:HD12	1:A:62:ARG:HG3	27	0.08
(1,239)	1:A:31:LEU:HD13	1:A:62:ARG:HG3	27	0.08
(1,239)	1:A:31:LEU:HD11	1:A:62:ARG:HG3	28	0.08
(1,239)	1:A:31:LEU:HD12	1:A:62:ARG:HG3	28	0.08
(1,239)	1:A:31:LEU:HD13	1:A:62:ARG:HG3	28	0.08
(1,221)	1:A:31:LEU:HB2	1:A:36:LEU:HB2	24	0.08
(1,213)	1:A:30:SER:HB3	1:A:33:ASP:HA	5	0.08
(1,213)	1:A:30:SER:HB3	1:A:33:ASP:HA	6	0.08
(1,213)	1:A:30:SER:HB3	1:A:33:ASP:HA	7	0.08
(1,213)	1:A:30:SER:HB3	1:A:33:ASP:HA	13	0.08
(1,18)	1:A:71:GLU:HA	1:A:74:SER:H	20	0.08
(1,18)	1:A:71:GLU:HA	1:A:69:LEU:H	20	0.08
(1,177)	1:A:22:LEU:HD11	1:A:24:GLY:HA2	12	0.08
(1,177)	1:A:22:LEU:HD12	1:A:24:GLY:HA2	12	0.08
(1,177)	1:A:22:LEU:HD13	1:A:24:GLY:HA2	12	0.08
(1,1710)	1:A:63:GLN:H	1:A:64:LEU:H	29	0.08
(1,171)	1:A:22:LEU:HG	1:A:21:ASP:HA	9	0.08
(1,1597)	1:A:27:LEU:HB2	1:A:27:LEU:H	15	0.08
(1,1584)	1:A:59:ARG:HG3	1:A:58:ILE:H	14	0.08



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1547)	1:A:44:VAL:HG11	1:A:40:MET:HA	24	0.08
	1:A:44:VAL:HG12	1:A:40:MET:HA	24	0.08
(1,1547)	1:A:44:VAL:HG13	1:A:40:MET:HA	24	0.08
(1,1545)	1:A:44:VAL:HG21	1:A:45:ARG:HE	16	0.08
(1,1545)	1:A:44:VAL:HG22	1:A:45:ARG:HE	16	0.08
(1,1545)	1:A:44:VAL:HG23	1:A:45:ARG:HE	16	0.08
(1,1545)	1:A:44:VAL:HG21	1:A:45:ARG:HE	22	0.08
(1,1545)	1:A:44:VAL:HG22	1:A:45:ARG:HE	22	0.08
(1,1545)	1:A:44:VAL:HG23	1:A:45:ARG:HE	22	0.08
(1,1545)	1:A:44:VAL:HG21	1:A:45:ARG:HE	30	0.08
(1,1545)	1:A:44:VAL:HG22	1:A:45:ARG:HE	30	0.08
(1,1545)	1:A:44:VAL:HG23	1:A:45:ARG:HE	30	0.08
(1,1523)	1:A:73:SER:HA	1:A:70:GLN:H	7	0.08
(1,1523)	1:A:73:SER:HA	1:A:70:GLN:H	12	0.08
(1,1498)	1:A:67:ARG:HD2	1:A:69:LEU:H	4	0.08
(1,1498)	1:A:67:ARG:HD2	1:A:69:LEU:H	6	0.08
(1,1484)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:19:ILE:HB	13	0.08
(1,1484)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:19:ILE:HB	13	0.08
(1,1484)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:19:ILE:HB	13	0.08
(1,1407)	1:A:42:VAL:HA	1:A:44:VAL:H	13	0.08
(1,1402)	1:A:42:VAL:HA	1:A:45:ARG:HB3	17	0.08
(1,1402)	1:A:42:VAL:HA	1:A:45:ARG:HB3	18	0.08
(1,1263)	1:A:61:VAL:HG11	1:A:62:ARG:HB3	3	0.08
(1,1263)	1:A:61:VAL:HG12	1:A:62:ARG:HB3	3	0.08
(1,1263)	1:A:61:VAL:HG13	1:A:62:ARG:HB3	3	0.08
(1,1222)	1:A:58:ILE:HG21	1:A:63:GLN:HE22	16	0.08
(1,1222)	1:A:58:ILE:HG22	1:A:63:GLN:HE22	16	0.08
(1,1222)	1:A:58:ILE:HG23	1:A:63:GLN:HE22	16	0.08
(1,1182)	1:A:56:LEU:HB3	1:A:57:PRO:HG2	14	0.08
(1,1182)	1:A:56:LEU:HB3	1:A:57:PRO:HB2	14	0.08
(1,1163)	1:A:54:LEU:HD11	1:A:51:GLU:HB2	13	0.08
(1,1163)	1:A:54:LEU:HD12	1:A:51:GLU:HB2	13	0.08
(1,1163)	1:A:54:LEU:HD13	1:A:51:GLU:HB2	13	0.08
(1,1148)	1:A:54:LEU:HB2	1:A:48:LEU:HG	2	0.08
(1,1147)	1:A:54:LEU:HB2	1:A:48:LEU:HB3	20	0.08
(1,1095)	1:A:39:LEU:HD21	1:A:42:VAL:H	17	0.08
(1,1095)	1:A:39:LEU:HD22	1:A:42:VAL:H	17	0.08
(1,1095)	1:A:39:LEU:HD23	1:A:42:VAL:H	17	0.08
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD11	1:A:44:VAL:HG21	24	0.08
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD11	1:A:44:VAL:HG22	24	0.08
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD11	1:A:44:VAL:HG23	24	0.08
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD12	1:A:44:VAL:HG21	24	0.08



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD12	1:A:44:VAL:HG22	24	0.08
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD12	1:A:44:VAL:HG23	24	0.08
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD13	1:A:44:VAL:HG21	24	0.08
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD13	1:A:44:VAL:HG22	24	0.08
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD13	1:A:44:VAL:HG23	24	0.08
(1,1028)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:33:ASP:H	29	0.08
(1,1028)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:33:ASP:H	29	0.08
(1,1028)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:33:ASP:H	29	0.08
(1,1017)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:31:LEU:HA	1	0.08
(1,1017)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:31:LEU:HA	1	0.08
(1,1017)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:31:LEU:HA	1	0.08
(1,1017)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:31:LEU:HA	5	0.08
(1,1017)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:31:LEU:HA	5	0.08
(1,1017)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:31:LEU:HA	5	0.08
(1,1017)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:31:LEU:HA	6	0.08
	1:A:34:LEU:HD22	1:A:31:LEU:HA	6	0.08
(1,1017)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:31:LEU:HA	6	0.08
(1,1017)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:31:LEU:HA	8	0.08
(1,1017)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:31:LEU:HA	8	0.08
(1,1017)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:31:LEU:HA	8	0.08
(1,1017)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:31:LEU:HA	13	0.08
(1,1017)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:31:LEU:HA	13	0.08
(1,1017)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:31:LEU:HA	13	0.08
(1,1017)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:31:LEU:HA	25	0.08
(1,1017)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:31:LEU:HA	25	0.08
(1,1017)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:31:LEU:HA	25	0.08
(1,85)	1:A:24:GLY:H	1:A:23:ALA:HA	2	0.07
(1,85)	1:A:24:GLY:H	1:A:25:ILE:HA	2	0.07
(1,85)	1:A:24:GLY:H	1:A:23:ALA:HA	21	0.07
(1,85)	1:A:24:GLY:H	1:A:25:ILE:HA	21	0.07
(1,85)	1:A:24:GLY:H	1:A:23:ALA:HA	22	0.07
(1,85)	1:A:24:GLY:H	1:A:25:ILE:HA	22	0.07
(1,844)	1:A:8:ASP:HB3	1:A:11:LYS:HB2	4	0.07
(1,844)	1:A:8:ASP:HB3	1:A:11:LYS:HB3	4	0.07
(1,813)	1:A:65:THR:HG21	1:A:69:LEU:H	11	0.07
(1,813)	1:A:65:THR:HG22	1:A:69:LEU:H	11	0.07
(1,813)	1:A:65:THR:HG23	1:A:69:LEU:H	11	0.07
(1,801)	1:A:65:THR:HA	1:A:31:LEU:HD11	29	0.07
(1,801)	1:A:65:THR:HA	1:A:31:LEU:HD12	29	0.07
(1,801)	1:A:65:THR:HA	1:A:31:LEU:HD13	29	0.07
(1,769)	1:A:82:LEU:HA	1:A:82:LEU:HD11	12	0.07
(1,769)	1:A:82:LEU:HA	1:A:82:LEU:HD12	12	0.07



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,769)	1:A:82:LEU:HA	1:A:82:LEU:HD13	12	0.07
(1,740)	1:A:70:GLN:HA	1:A:10:VAL:HG21	2	0.07
(1,740)	1:A:70:GLN:HA	1:A:10:VAL:HG22	2	0.07
(1,740)	1:A:70:GLN:HA	1:A:10:VAL:HG23	2	0.07
(1,732)	1:A:63:GLN:HG3	1:A:60:GLU:HA	3	0.07
(1,732)	1:A:63:GLN:HG3	1:A:60:GLU:HA	22	0.07
(1,662)	1:A:49:GLU:HA	1:A:46:GLN:HA	6	0.07
(1,662)	1:A:49:GLU:HA	1:A:46:GLN:HA	17	0.07
(1,536)	1:A:25:ILE:HD11	1:A:14:ALA:HB1	6	0.07
(1,536)	1:A:25:ILE:HD11	1:A:14:ALA:HB2	6	0.07
(1,536)	1:A:25:ILE:HD11	1:A:14:ALA:HB3	6	0.07
(1,536)	1:A:25:ILE:HD12	1:A:14:ALA:HB1	6	0.07
(1,536)	1:A:25:ILE:HD12	1:A:14:ALA:HB2	6	0.07
(1,536)	1:A:25:ILE:HD12	1:A:14:ALA:HB3	6	0.07
(1,536)	1:A:25:ILE:HD13	1:A:14:ALA:HB1	6	0.07
(1,536)	1:A:25:ILE:HD13	1:A:14:ALA:HB2	6	0.07
(1,536)	1:A:25:ILE:HD13	1:A:14:ALA:HB3	6	0.07
(1,536)	1:A:25:ILE:HD11	1:A:14:ALA:HB1	17	0.07
(1,536)	1:A:25:ILE:HD11	1:A:14:ALA:HB2	17	0.07
(1,536)	1:A:25:ILE:HD11	1:A:14:ALA:HB3	17	0.07
(1,536)	1:A:25:ILE:HD12	1:A:14:ALA:HB1	17	0.07
(1,536)	1:A:25:ILE:HD12	1:A:14:ALA:HB2	17	0.07
(1,536)	1:A:25:ILE:HD12	1:A:14:ALA:HB3	17	0.07
(1,536)	1:A:25:ILE:HD13	1:A:14:ALA:HB1	17	0.07
(1,536)	1:A:25:ILE:HD13	1:A:14:ALA:HB2	17	0.07
(1,536)	1:A:25:ILE:HD13	1:A:14:ALA:HB3	17	0.07
(1,479)	1:A:23:ALA:HA	1:A:21:ASP:HA	18	0.07
(1,479)	1:A:23:ALA:HA	1:A:21:ASP:HA	29	0.07
(1,475)	1:A:22:LEU:HD21	1:A:20:ARG:HB2	30	0.07
(1,475)	1:A:22:LEU:HD22	1:A:20:ARG:HB2	30	0.07
(1,475)	1:A:22:LEU:HD23	1:A:20:ARG:HB2	30	0.07
(1,45)	1:A:22:LEU:HD21	1:A:11:LYS:HE2	8	0.07
(1,45)	1:A:22:LEU:HD21	1:A:11:LYS:HE3	8	0.07
(1,45)	1:A:22:LEU:HD22	1:A:11:LYS:HE2	8	0.07
(1,45)	1:A:22:LEU:HD22	1:A:11:LYS:HE3	8	0.07
(1,45)	1:A:22:LEU:HD23	1:A:11:LYS:HE2	8	0.07
(1,45)	1:A:22:LEU:HD23	1:A:11:LYS:HE3	8	0.07
(1,45)	1:A:22:LEU:HD21	1:A:11:LYS:HE2	14	0.07
(1,45)	1:A:22:LEU:HD21	1:A:11:LYS:HE3	14	0.07
(1,45)	1:A:22:LEU:HD22	1:A:11:LYS:HE2	14	0.07
(1,45)	1:A:22:LEU:HD22	1:A:11:LYS:HE3	14	0.07
(1,45)	1:A:22:LEU:HD23	1:A:11:LYS:HE2	14	0.07
	I	l .		d on nort nago



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,45)	1:A:22:LEU:HD23	1:A:11:LYS:HE3	14	0.07
(1,391)	1:A:19:ILE:HG21	1:A:21:ASP:HA	7	0.07
(1,391)	1:A:19:ILE:HG22	1:A:21:ASP:HA	7	0.07
(1,391)	1:A:19:ILE:HG23	1:A:21:ASP:HA	7	0.07
(1,391)	1:A:19:ILE:HG21	1:A:21:ASP:HA	14	0.07
(1,391)	1:A:19:ILE:HG22	1:A:21:ASP:HA	14	0.07
(1,391)	1:A:19:ILE:HG23	1:A:21:ASP:HA	14	0.07
(1,391)	1:A:19:ILE:HG21	1:A:21:ASP:HA	30	0.07
(1,391)	1:A:19:ILE:HG22	1:A:21:ASP:HA	30	0.07
(1,391)	1:A:19:ILE:HG23	1:A:21:ASP:HA	30	0.07
(1,38)	1:A:58:ILE:HG21	1:A:32:ALA:HA	30	0.07
(1,38)	1:A:58:ILE:HG22	1:A:32:ALA:HA	30	0.07
(1,38)	1:A:58:ILE:HG23	1:A:32:ALA:HA	30	0.07
(1,38)	1:A:47:ILE:HG21	1:A:50:ARG:HA	30	0.07
(1,38)	1:A:47:ILE:HG22	1:A:50:ARG:HA	30	0.07
(1,38)	1:A:47:ILE:HG23	1:A:50:ARG:HA	30	0.07
(1,363)	1:A:17:LEU:HG	1:A:19:ILE:HG21	2	0.07
(1,363)	1:A:17:LEU:HG	1:A:19:ILE:HG22	2	0.07
(1,363)	1:A:17:LEU:HG	1:A:19:ILE:HG23	2	0.07
(1,264)	1:A:32:ALA:HA	1:A:34:LEU:HD11	1	0.07
(1,264)	1:A:32:ALA:HA	1:A:34:LEU:HD12	1	0.07
(1,264)	1:A:32:ALA:HA	1:A:34:LEU:HD13	1	0.07
(1,25)	1:A:52:HIS:HB2	1:A:48:LEU:HA	2	0.07
(1,25)	1:A:52:HIS:HB2	1:A:74:SER:HB3	2	0.07
(1,241)	1:A:31:LEU:HD11	1:A:64:LEU:HG	12	0.07
(1,241)	1:A:31:LEU:HD12	1:A:64:LEU:HG	12	0.07
(1,241)	1:A:31:LEU:HD13	1:A:64:LEU:HG	12	0.07
(1,221)	1:A:31:LEU:HB2	1:A:36:LEU:HB2	18	0.07
(1,213)	1:A:30:SER:HB3	1:A:33:ASP:HA	29	0.07
(1,213)	1:A:30:SER:HB3	1:A:33:ASP:HA	30	0.07
(1,192)	1:A:29:SER:HB3	1:A:34:LEU:HD21	14	0.07
(1,192)	1:A:29:SER:HB3	1:A:34:LEU:HD22	14	0.07
(1,192)	1:A:29:SER:HB3	1:A:34:LEU:HD23	14	0.07
(1,18)	1:A:71:GLU:HA	1:A:74:SER:H	11	0.07
(1,18)	1:A:71:GLU:HA	1:A:69:LEU:H	11	0.07
(1,1732)	1:A:32:ALA:H	1:A:65:THR:HG21	9	0.07
(1,1732)	1:A:32:ALA:H	1:A:65:THR:HG22	9	0.07
(1,1732)	1:A:32:ALA:H	1:A:65:THR:HG23	9	0.07
(1,1732)	1:A:32:ALA:H	1:A:65:THR:HG21	12	0.07
(1,1732)	1:A:32:ALA:H	1:A:65:THR:HG22	12	0.07
(1,1732)	1:A:32:ALA:H	1:A:65:THR:HG23	12	0.07
(1,1726)	1:A:80:THR:H	1:A:81:GLU:H	14	0.07



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1710)	1:A:63:GLN:H	1:A:64:LEU:H	26	0.07
(1,1710)	1:A:63:GLN:H	1:A:64:LEU:H	30	0.07
(1,171)	1:A:22:LEU:HG	1:A:21:ASP:HA	4	0.07
(1,171)	1:A:22:LEU:HG	1:A:21:ASP:HA	15	0.07
(1,171)	1:A:22:LEU:HG	1:A:21:ASP:HA	29	0.07
(1,1618)	1:A:58:ILE:HG12	1:A:59:ARG:HD2	30	0.07
(1,1618)	1:A:58:ILE:HG12	1:A:59:ARG:HD3	30	0.07
(1,1593)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:29:SER:HA	5	0.07
(1,1593)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:29:SER:HA	5	0.07
(1,1593)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:29:SER:HA	5	0.07
(1,1589)	1:A:20:ARG:HG3	1:A:67:ARG:HE	23	0.07
(1,1587)	1:A:9:LEU:HG	1:A:75:LYS:HE2	8	0.07
(1,1587)	1:A:9:LEU:HG	1:A:75:LYS:HE3	8	0.07
(1,1587)	1:A:9:LEU:HG	1:A:75:LYS:HE2	10	0.07
(1,1587)	1:A:9:LEU:HG	1:A:75:LYS:HE3	10	0.07
(1,1587)	1:A:9:LEU:HG	1:A:75:LYS:HE2	24	0.07
(1,1587)	1:A:9:LEU:HG	1:A:75:LYS:HE3	24	0.07
(1,1586)	1:A:7:ARG:HG2	1:A:75:LYS:HE2	10	0.07
(1,1586)	1:A:7:ARG:HG2	1:A:75:LYS:HE3	10	0.07
(1,1586)	1:A:7:ARG:HG3	1:A:75:LYS:HE2	10	0.07
(1,1586)	1:A:7:ARG:HG3	1:A:75:LYS:HE3	10	0.07
(1,1586)	1:A:7:ARG:HG2	1:A:75:LYS:HE2	14	0.07
(1,1586)	1:A:7:ARG:HG2	1:A:75:LYS:HE3	14	0.07
(1,1586)	1:A:7:ARG:HG3	1:A:75:LYS:HE2	14	0.07
(1,1586)	1:A:7:ARG:HG3	1:A:75:LYS:HE3	14	0.07
(1,1586)	1:A:7:ARG:HG2	1:A:75:LYS:HE2	24	0.07
(1,1586)	1:A:7:ARG:HG2	1:A:75:LYS:HE3	24	0.07
(1,1586)	1:A:7:ARG:HG3	1:A:75:LYS:HE2	24	0.07
(1,1586)	1:A:7:ARG:HG3	1:A:75:LYS:HE3	24	0.07
(1,1584)	1:A:59:ARG:HG3	1:A:58:ILE:H	30	0.07
(1,1576)	1:A:66:LEU:HD11	1:A:65:THR:HA	15	0.07
(1,1576)	1:A:66:LEU:HD12	1:A:65:THR:HA	15	0.07
(1,1576)	1:A:66:LEU:HD13	1:A:65:THR:HA	15	0.07
(1,1575)	1:A:66:LEU:HD11	1:A:13:VAL:H	2	0.07
(1,1575)	1:A:66:LEU:HD12	1:A:13:VAL:H	2	0.07
(1,1575)	1:A:66:LEU:HD13	1:A:13:VAL:H	2	0.07
(1,1553)	1:A:19:ILE:HG21	1:A:26:ASN:H	14	0.07
(1,1553)	1:A:19:ILE:HG22	1:A:26:ASN:H	14	0.07
(1,1553)	1:A:19:ILE:HG23	1:A:26:ASN:H	14	0.07
(1,1553)	1:A:19:ILE:HG21	1:A:26:ASN:H	29	0.07
(1,1553)	1:A:19:ILE:HG22	1:A:26:ASN:H	29	0.07
(1,1553)	1:A:19:ILE:HG23	1:A:26:ASN:H	29	0.07



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1552)	1:A:19:ILE:HG21	1:A:24:GLY:H	7	0.07
(1,1552)	1:A:19:ILE:HG22	1:A:24:GLY:H	7	0.07
(1,1552)	1:A:19:ILE:HG23	1:A:24:GLY:H	7	0.07
(1,1552)	1:A:19:ILE:HG21	1:A:24:GLY:H	13	0.07
(1,1552)	1:A:19:ILE:HG22	1:A:24:GLY:H	13	0.07
(1,1552)	1:A:19:ILE:HG23	1:A:24:GLY:H	13	0.07
(1,1547)	1:A:44:VAL:HG11	1:A:40:MET:HA	9	0.07
(1,1547)	1:A:44:VAL:HG12	1:A:40:MET:HA	9	0.07
(1,1547)	1:A:44:VAL:HG13	1:A:40:MET:HA	9	0.07
(1,1547)	1:A:44:VAL:HG11	1:A:40:MET:HA	13	0.07
(1,1547)	1:A:44:VAL:HG12	1:A:40:MET:HA	13	0.07
(1,1547)	1:A:44:VAL:HG13	1:A:40:MET:HA	13	0.07
(1,1546)	1:A:44:VAL:HG11	1:A:42:VAL:HA	28	0.07
(1,1546)	1:A:44:VAL:HG12	1:A:42:VAL:HA	28	0.07
(1,1546)	1:A:44:VAL:HG13	1:A:42:VAL:HA	28	0.07
(1,1545)	1:A:44:VAL:HG21	1:A:45:ARG:HE	10	0.07
(1,1545)	1:A:44:VAL:HG22	1:A:45:ARG:HE	10	0.07
(1,1545)	1:A:44:VAL:HG23	1:A:45:ARG:HE	10	0.07
(1,1523)	1:A:73:SER:HA	1:A:70:GLN:H	4	0.07
(1,1523)	1:A:73:SER:HA	1:A:70:GLN:H	9	0.07
(1,1523)	1:A:73:SER:HA	1:A:70:GLN:H	15	0.07
(1,1521)	1:A:73:SER:HA	1:A:9:LEU:HD11	28	0.07
(1,1521)	1:A:73:SER:HA	1:A:9:LEU:HD12	28	0.07
(1,1521)	1:A:73:SER:HA	1:A:9:LEU:HD13	28	0.07
(1,1505)	1:A:55:VAL:HG11	1:A:59:ARG:HD2	8	0.07
(1,1505)	1:A:55:VAL:HG11	1:A:59:ARG:HD3	8	0.07
(1,1505)	1:A:55:VAL:HG12	1:A:59:ARG:HD2	8	0.07
(1,1505)	1:A:55:VAL:HG12	1:A:59:ARG:HD3	8	0.07
(1,1505)	1:A:55:VAL:HG13	1:A:59:ARG:HD2	8	0.07
(1,1505)	1:A:55:VAL:HG13	1:A:59:ARG:HD3	8	0.07
(1,1498)	1:A:67:ARG:HD2	1:A:69:LEU:H	23	0.07
(1,1498)	1:A:67:ARG:HD2	1:A:69:LEU:H	27	0.07
(1,1489)	1:A:42:VAL:HA	1:A:45:ARG:HB2	19	0.07
(1,1484)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:19:ILE:HB	2	0.07
(1,1484)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:19:ILE:HB	2	0.07
(1,1484)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:19:ILE:HB	2	0.07
(1,1484)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:19:ILE:HB	14	0.07
(1,1484)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:19:ILE:HB	14	0.07
(1,1484)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:19:ILE:HB	14	0.07
(1,1484)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:19:ILE:HB	19	0.07
(1,1484)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:19:ILE:HB	19	0.07
(1,1484)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:19:ILE:HB	19	0.07



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1484)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:19:ILE:HB	24	0.07
(1,1484)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:19:ILE:HB	24	0.07
(1,1484)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:19:ILE:HB	24	0.07
(1,1429)	1:A:42:VAL:HG21	1:A:39:LEU:H	16	0.07
(1,1429)	1:A:42:VAL:HG22	1:A:39:LEU:H	16	0.07
(1,1429)	1:A:42:VAL:HG23	1:A:39:LEU:H	16	0.07
(1,1407)	1:A:42:VAL:HA	1:A:44:VAL:H	11	0.07
(1,1407)	1:A:42:VAL:HA	1:A:44:VAL:H	21	0.07
(1,1402)	1:A:42:VAL:HA	1:A:45:ARG:HB3	10	0.07
(1,1393)	1:A:44:VAL:HA	1:A:48:LEU:HG	19	0.07
(1,1376)	1:A:12:ALA:HB1	1:A:7:ARG:HD2	20	0.07
(1,1376)	1:A:12:ALA:HB1	1:A:7:ARG:HD3	20	0.07
(1,1376)	1:A:12:ALA:HB2	1:A:7:ARG:HD2	20	0.07
(1,1376)	1:A:12:ALA:HB2	1:A:7:ARG:HD3	20	0.07
(1,1376)	1:A:12:ALA:HB3	1:A:7:ARG:HD2	20	0.07
(1,1376)	1:A:12:ALA:HB3	1:A:7:ARG:HD3	20	0.07
(1,1369)	1:A:71:GLU:HG2	1:A:72:MET:H	26	0.07
(1,1332)	1:A:68:LYS:HE2	1:A:69:LEU:H	17	0.07
(1,1332)	1:A:68:LYS:HE3	1:A:69:LEU:H	17	0.07
(1,1248)	1:A:61:VAL:HA	1:A:62:ARG:HB3	12	0.07
(1,1221)	1:A:58:ILE:HG21	1:A:57:PRO:HB3	24	0.07
(1,1221)	1:A:58:ILE:HG22	1:A:57:PRO:HB3	24	0.07
(1,1221)	1:A:58:ILE:HG23	1:A:57:PRO:HB3	24	0.07
(1,1183)	1:A:56:LEU:HB2	1:A:57:PRO:HB2	13	0.07
(1,1183)	1:A:56:LEU:HB2	1:A:57:PRO:HG2	13	0.07
(1,1183)	1:A:56:LEU:HB2	1:A:57:PRO:HB2	18	0.07
(1,1183)	1:A:56:LEU:HB2	1:A:57:PRO:HG2	18	0.07
(1,1183)	1:A:56:LEU:HB2	1:A:57:PRO:HB2	21	0.07
(1,1183)	1:A:56:LEU:HB2	1:A:57:PRO:HG2	21	0.07
(1,1095)	1:A:39:LEU:HD21	1:A:42:VAL:H	15	0.07
(1,1095)	1:A:39:LEU:HD22	1:A:42:VAL:H	15	0.07
(1,1095)	1:A:39:LEU:HD23	1:A:42:VAL:H	15	0.07
(1,1095)	1:A:39:LEU:HD21	1:A:42:VAL:H	20	0.07
(1,1095)	1:A:39:LEU:HD22	1:A:42:VAL:H	20	0.07
(1,1095)	1:A:39:LEU:HD23	1:A:42:VAL:H	20	0.07
(1,1086)	1:A:39:LEU:HB2	1:A:41:GLY:H	7	0.07
(1,1049)	1:A:36:LEU:HD21	1:A:40:MET:HB3	14	0.07
(1,1049)	1:A:36:LEU:HD22	1:A:40:MET:HB3	14	0.07
(1,1049)	1:A:36:LEU:HD23	1:A:40:MET:HB3	14	0.07
(1,1037)	1:A:36:LEU:HB3	1:A:40:MET:HA	8	0.07
(1,1037)	1:A:36:LEU:HB3	1:A:40:MET:HA	19	0.07
(1,933)	1:A:57:PRO:HG3	1:A:60:GLU:H	20	0.06



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,9)	1:A:16:ILE:HG21	1:A:43:GLU:H	29	0.06
(1,9)	1:A:16:ILE:HG22	1:A:43:GLU:H	29	0.06
(1,9)	1:A:16:ILE:HG23	1:A:43:GLU:H	29	0.06
(1,9)	1:A:16:ILE:HG21	1:A:42:VAL:H	29	0.06
(1,9)	1:A:16:ILE:HG22	1:A:42:VAL:H	29	0.06
(1,9)	1:A:16:ILE:HG23	1:A:42:VAL:H	29	0.06
(1,9)	1:A:47:ILE:HG21	1:A:50:ARG:HE	29	0.06
(1,9)	1:A:47:ILE:HG22	1:A:50:ARG:HE	29	0.06
(1,9)	1:A:47:ILE:HG23	1:A:50:ARG:HE	29	0.06
(1,874)	1:A:10:VAL:HG21	1:A:70:GLN:HG3	7	0.06
(1,874)	1:A:10:VAL:HG22	1:A:70:GLN:HG3	7	0.06
(1,874)	1:A:10:VAL:HG23	1:A:70:GLN:HG3	7	0.06
(1,85)	1:A:24:GLY:H	1:A:23:ALA:HA	27	0.06
(1,85)	1:A:24:GLY:H	1:A:25:ILE:HA	27	0.06
(1,846)	1:A:8:ASP:HB3	1:A:11:LYS:HD2	11	0.06
(1,846)	1:A:8:ASP:HB3	1:A:11:LYS:HD3	11	0.06
(1,83)	1:A:73:SER:HB3	1:A:69:LEU:HD11	14	0.06
(1,83)	1:A:73:SER:HB3	1:A:69:LEU:HD12	14	0.06
(1,83)	1:A:73:SER:HB3	1:A:69:LEU:HD13	14	0.06
(1,83)	1:A:73:SER:HB3	1:A:69:LEU:HD21	14	0.06
(1,83)	1:A:73:SER:HB3	1:A:69:LEU:HD22	14	0.06
(1,83)	1:A:73:SER:HB3	1:A:69:LEU:HD23	14	0.06
(1,83)	1:A:73:SER:HB3	1:A:54:LEU:HD21	14	0.06
(1,83)	1:A:73:SER:HB3	1:A:54:LEU:HD22	14	0.06
(1,83)	1:A:73:SER:HB3	1:A:54:LEU:HD23	14	0.06
(1,82)	1:A:73:SER:HB2	1:A:9:LEU:HB3	11	0.06
(1,82)	1:A:73:SER:HB2	1:A:7:ARG:HG2	11	0.06
(1,82)	1:A:73:SER:HB2	1:A:7:ARG:HG3	11	0.06
(1,813)	1:A:65:THR:HG21	1:A:69:LEU:H	9	0.06
(1,813)	1:A:65:THR:HG22	1:A:69:LEU:H	9	0.06
(1,813)	1:A:65:THR:HG23	1:A:69:LEU:H	9	0.06
(1,806)	1:A:65:THR:HG21	1:A:67:ARG:HB2	22	0.06
(1,806)	1:A:65:THR:HG21	1:A:67:ARG:HB3	22	0.06
(1,806)	1:A:65:THR:HG22	1:A:67:ARG:HB2	22	0.06
(1,806)	1:A:65:THR:HG22	1:A:67:ARG:HB3	22	0.06
(1,806)	1:A:65:THR:HG23	1:A:67:ARG:HB2	22	0.06
(1,806)	1:A:65:THR:HG23	1:A:67:ARG:HB3	22	0.06
(1,801)	1:A:65:THR:HA	1:A:31:LEU:HD11	1	0.06
(1,801)	1:A:65:THR:HA	1:A:31:LEU:HD12	1	0.06
(1,801)	1:A:65:THR:HA	1:A:31:LEU:HD13	1	0.06
(1,769)	1:A:82:LEU:HA	1:A:82:LEU:HD11	26	0.06
(1,769)	1:A:82:LEU:HA	1:A:82:LEU:HD12	26	0.06



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,769)	1:A:82:LEU:HA	1:A:82:LEU:HD13	26	0.06
(1,72)	1:A:48:LEU:HD11	1:A:6:GLN:HE21	24	0.06
(1,72)	1:A:48:LEU:HD12	1:A:6:GLN:HE21	24	0.06
(1,72)	1:A:48:LEU:HD13	1:A:6:GLN:HE21	24	0.06
(1,72)	1:A:9:LEU:HD21	1:A:6:GLN:HE21	24	0.06
(1,72)	1:A:9:LEU:HD22	1:A:6:GLN:HE21	24	0.06
(1,72)	1:A:9:LEU:HD23	1:A:6:GLN:HE21	24	0.06
(1,706)	1:A:59:ARG:HD2	1:A:59:ARG:H	5	0.06
(1,706)	1:A:59:ARG:HD3	1:A:59:ARG:H	5	0.06
(1,706)	1:A:59:ARG:HD2	1:A:59:ARG:H	14	0.06
(1,706)	1:A:59:ARG:HD3	1:A:59:ARG:H	14	0.06
(1,673)	1:A:43:GLU:HA	1:A:39:LEU:HD21	3	0.06
(1,673)	1:A:43:GLU:HA	1:A:39:LEU:HD22	3	0.06
(1,673)	1:A:43:GLU:HA	1:A:39:LEU:HD23	3	0.06
(1,673)	1:A:43:GLU:HA	1:A:39:LEU:HD21	18	0.06
(1,673)	1:A:43:GLU:HA	1:A:39:LEU:HD22	18	0.06
(1,673)	1:A:43:GLU:HA	1:A:39:LEU:HD23	18	0.06
(1,662)	1:A:49:GLU:HA	1:A:46:GLN:HA	26	0.06
(1,593)	1:A:66:LEU:HD11	1:A:66:LEU:HA	12	0.06
(1,593)	1:A:66:LEU:HD12	1:A:66:LEU:HA	12	0.06
(1,593)	1:A:66:LEU:HD13	1:A:66:LEU:HA	12	0.06
(1,536)	1:A:25:ILE:HD11	1:A:14:ALA:HB1	3	0.06
(1,536)	1:A:25:ILE:HD11	1:A:14:ALA:HB2	3	0.06
(1,536)	1:A:25:ILE:HD11	1:A:14:ALA:HB3	3	0.06
(1,536)	1:A:25:ILE:HD12	1:A:14:ALA:HB1	3	0.06
(1,536)	1:A:25:ILE:HD12	1:A:14:ALA:HB2	3	0.06
(1,536)	1:A:25:ILE:HD12	1:A:14:ALA:HB3	3	0.06
(1,536)	1:A:25:ILE:HD13	1:A:14:ALA:HB1	3	0.06
(1,536)	1:A:25:ILE:HD13	1:A:14:ALA:HB2	3	0.06
(1,536)	1:A:25:ILE:HD13	1:A:14:ALA:HB3	3	0.06
(1,506)	1:A:19:ILE:HD11	1:A:18:GLY:HA2	23	0.06
(1,506)	1:A:19:ILE:HD12	1:A:18:GLY:HA2	23	0.06
(1,506)	1:A:19:ILE:HD13	1:A:18:GLY:HA2	23	0.06
(1,491)	1:A:27:LEU:HA	1:A:66:LEU:H	7	0.06
(1,491)	1:A:27:LEU:HA	1:A:66:LEU:H	28	0.06
(1,479)	1:A:23:ALA:HA	1:A:21:ASP:HA	3	0.06
(1,479)	1:A:23:ALA:HA	1:A:21:ASP:HA	6	0.06
(1,479)	1:A:23:ALA:HA	1:A:21:ASP:HA	17	0.06
(1,475)	1:A:22:LEU:HD21	1:A:20:ARG:HB2	27	0.06
(1,475)	1:A:22:LEU:HD22	1:A:20:ARG:HB2	27	0.06
(1,475)	1:A:22:LEU:HD23	1:A:20:ARG:HB2	27	0.06
(1,45)	1:A:22:LEU:HD21	1:A:11:LYS:HE2	23	0.06



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,45)	1:A:22:LEU:HD21	1:A:11:LYS:HE3	23	0.06
(1,45)	1:A:22:LEU:HD22	1:A:11:LYS:HE2	23	0.06
(1,45)	1:A:22:LEU:HD22	1:A:11:LYS:HE3	23	0.06
(1,45)	1:A:22:LEU:HD23	1:A:11:LYS:HE2	23	0.06
(1,45)	1:A:22:LEU:HD23	1:A:11:LYS:HE3	23	0.06
(1,45)	1:A:22:LEU:HD21	1:A:11:LYS:HE2	29	0.06
(1,45)	1:A:22:LEU:HD21	1:A:11:LYS:HE3	29	0.06
(1,45)	1:A:22:LEU:HD22	1:A:11:LYS:HE2	29	0.06
(1,45)	1:A:22:LEU:HD22	1:A:11:LYS:HE3	29	0.06
(1,45)	1:A:22:LEU:HD23	1:A:11:LYS:HE2	29	0.06
(1,45)	1:A:22:LEU:HD23	1:A:11:LYS:HE3	29	0.06
(1,43)	1:A:13:VAL:HG21	1:A:17:LEU:H	15	0.06
(1,43)	1:A:13:VAL:HG22	1:A:17:LEU:H	15	0.06
(1,43)	1:A:13:VAL:HG23	1:A:17:LEU:H	15	0.06
(1,43)	1:A:13:VAL:HG21	1:A:73:SER:H	15	0.06
(1,43)	1:A:13:VAL:HG22	1:A:73:SER:H	15	0.06
(1,43)	1:A:13:VAL:HG23	1:A:73:SER:H	15	0.06
(1,43)	1:A:13:VAL:HG21	1:A:18:GLY:H	15	0.06
(1,43)	1:A:13:VAL:HG22	1:A:18:GLY:H	15	0.06
(1,43)	1:A:13:VAL:HG23	1:A:18:GLY:H	15	0.06
(1,391)	1:A:19:ILE:HG21	1:A:21:ASP:HA	8	0.06
(1,391)	1:A:19:ILE:HG22	1:A:21:ASP:HA	8	0.06
(1,391)	1:A:19:ILE:HG23	1:A:21:ASP:HA	8	0.06
(1,391)	1:A:19:ILE:HG21	1:A:21:ASP:HA	19	0.06
(1,391)	1:A:19:ILE:HG22	1:A:21:ASP:HA	19	0.06
(1,391)	1:A:19:ILE:HG23	1:A:21:ASP:HA	19	0.06
(1,391)	1:A:19:ILE:HG21	1:A:21:ASP:HA	22	0.06
(1,391)	1:A:19:ILE:HG22	1:A:21:ASP:HA	22	0.06
(1,391)	1:A:19:ILE:HG23	1:A:21:ASP:HA	22	0.06
(1,38)	1:A:58:ILE:HG21	1:A:32:ALA:HA	15	0.06
(1,38)	1:A:58:ILE:HG22	1:A:32:ALA:HA	15	0.06
(1,38)	1:A:58:ILE:HG23	1:A:32:ALA:HA	15	0.06
(1,38)	1:A:47:ILE:HG21	1:A:50:ARG:HA	15	0.06
(1,38)	1:A:47:ILE:HG22	1:A:50:ARG:HA	15	0.06
(1,38)	1:A:47:ILE:HG23	1:A:50:ARG:HA	15	0.06
(1,241)	1:A:31:LEU:HD11	1:A:64:LEU:HG	4	0.06
(1,241)	1:A:31:LEU:HD12	1:A:64:LEU:HG	4	0.06
(1,241)	1:A:31:LEU:HD13	1:A:64:LEU:HG	4	0.06
(1,241)	1:A:31:LEU:HD11	1:A:64:LEU:HG	9	0.06
(1,241)	1:A:31:LEU:HD12	1:A:64:LEU:HG	9	0.06
(1,241)	1:A:31:LEU:HD13	1:A:64:LEU:HG	9	0.06
(1,241)	1:A:31:LEU:HD11	1:A:64:LEU:HG	23	0.06



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,241)	1:A:31:LEU:HD12	1:A:64:LEU:HG	23	0.06
(1,241)	1:A:31:LEU:HD13	1:A:64:LEU:HG	23	0.06
(1,241)	1:A:31:LEU:HD11	1:A:64:LEU:HG	27	0.06
(1,241)	1:A:31:LEU:HD12	1:A:64:LEU:HG	27	0.06
(1,241)	1:A:31:LEU:HD13	1:A:64:LEU:HG	27	0.06
(1,224)	1:A:31:LEU:HB2	1:A:36:LEU:HD21	30	0.06
(1,224)	1:A:31:LEU:HB2	1:A:36:LEU:HD22	30	0.06
(1,224)	1:A:31:LEU:HB2	1:A:36:LEU:HD23	30	0.06
(1,221)	1:A:31:LEU:HB2	1:A:36:LEU:HB2	20	0.06
(1,213)	1:A:30:SER:HB3	1:A:33:ASP:HA	18	0.06
(1,213)	1:A:30:SER:HB3	1:A:33:ASP:HA	21	0.06
(1,18)	1:A:71:GLU:HA	1:A:74:SER:H	1	0.06
(1,18)	1:A:71:GLU:HA	1:A:69:LEU:H	1	0.06
(1,18)	1:A:71:GLU:HA	1:A:74:SER:H	4	0.06
(1,18)	1:A:71:GLU:HA	1:A:69:LEU:H	4	0.06
(1,18)	1:A:71:GLU:HA	1:A:74:SER:H	27	0.06
(1,18)	1:A:71:GLU:HA	1:A:69:LEU:H	27	0.06
(1,177)	1:A:22:LEU:HD11	1:A:24:GLY:HA2	19	0.06
(1,177)	1:A:22:LEU:HD12	1:A:24:GLY:HA2	19	0.06
(1,177)	1:A:22:LEU:HD13	1:A:24:GLY:HA2	19	0.06
(1,177)	1:A:22:LEU:HD11	1:A:24:GLY:HA2	25	0.06
(1,177)	1:A:22:LEU:HD12	1:A:24:GLY:HA2	25	0.06
(1,177)	1:A:22:LEU:HD13	1:A:24:GLY:HA2	25	0.06
(1,177)	1:A:22:LEU:HD11	1:A:24:GLY:HA2	28	0.06
(1,177)	1:A:22:LEU:HD12	1:A:24:GLY:HA2	28	0.06
(1,177)	1:A:22:LEU:HD13	1:A:24:GLY:HA2	28	0.06
(1,1732)	1:A:32:ALA:H	1:A:65:THR:HG21	10	0.06
(1,1732)	1:A:32:ALA:H	1:A:65:THR:HG22	10	0.06
(1,1732)	1:A:32:ALA:H	1:A:65:THR:HG23	10	0.06
(1,1732)	1:A:32:ALA:H	1:A:65:THR:HG21	27	0.06
(1,1732)	1:A:32:ALA:H	1:A:65:THR:HG22	27	0.06
(1,1732)	1:A:32:ALA:H	1:A:65:THR:HG23	27	0.06
(1,1726)	1:A:80:THR:H	1:A:81:GLU:H	15	0.06
(1,1710)	1:A:63:GLN:H	1:A:64:LEU:H	4	0.06
(1,1710)	1:A:63:GLN:H	1:A:64:LEU:H	11	0.06
(1,171)	1:A:22:LEU:HG	1:A:21:ASP:HA	13	0.06
(1,171)	1:A:22:LEU:HG	1:A:21:ASP:HA	14	0.06
(1,171)	1:A:22:LEU:HG	1:A:21:ASP:HA	16	0.06
(1,171)	1:A:22:LEU:HG	1:A:21:ASP:HA	20	0.06
(1,171)	1:A:22:LEU:HG	1:A:21:ASP:HA	21	0.06
(1,1701)	1:A:47:ILE:H	1:A:48:LEU:H	23	0.06
(1,1598)	1:A:70:GLN:HB2	1:A:9:LEU:HD21	14	0.06



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1598)	1:A:70:GLN:HB2	1:A:9:LEU:HD22	14	0.06
(1,1598)	1:A:70:GLN:HB2	1:A:9:LEU:HD23	14	0.06
(1,1598)	1:A:70:GLN:HB3	1:A:9:LEU:HD21	14	0.06
(1,1598)	1:A:70:GLN:HB3	1:A:9:LEU:HD22	14	0.06
(1,1598)	1:A:70:GLN:HB3	1:A:9:LEU:HD23	14	0.06
(1,1584)	1:A:59:ARG:HG3	1:A:58:ILE:H	19	0.06
(1,1555)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:33:ASP:HB3	24	0.06
(1,1555)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:33:ASP:HB3	24	0.06
(1,1555)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:33:ASP:HB3	24	0.06
(1,1553)	1:A:19:ILE:HG21	1:A:26:ASN:H	17	0.06
(1,1553)	1:A:19:ILE:HG22	1:A:26:ASN:H	17	0.06
(1,1553)	1:A:19:ILE:HG23	1:A:26:ASN:H	17	0.06
(1,1553)	1:A:19:ILE:HG21	1:A:26:ASN:H	19	0.06
(1,1553)	1:A:19:ILE:HG22	1:A:26:ASN:H	19	0.06
(1,1553)	1:A:19:ILE:HG23	1:A:26:ASN:H	19	0.06
(1,1546)	1:A:44:VAL:HG11	1:A:42:VAL:HA	9	0.06
(1,1546)	1:A:44:VAL:HG12	1:A:42:VAL:HA	9	0.06
(1,1546)	1:A:44:VAL:HG13	1:A:42:VAL:HA	9	0.06
(1,1546)	1:A:44:VAL:HG11	1:A:42:VAL:HA	19	0.06
(1,1546)	1:A:44:VAL:HG12	1:A:42:VAL:HA	19	0.06
(1,1546)	1:A:44:VAL:HG13	1:A:42:VAL:HA	19	0.06
(1,1545)	1:A:44:VAL:HG21	1:A:45:ARG:HE	19	0.06
(1,1545)	1:A:44:VAL:HG22	1:A:45:ARG:HE	19	0.06
(1,1545)	1:A:44:VAL:HG23	1:A:45:ARG:HE	19	0.06
(1,1523)	1:A:73:SER:HA	1:A:70:GLN:H	17	0.06
(1,1523)	1:A:73:SER:HA	1:A:70:GLN:H	21	0.06
(1,1523)	1:A:73:SER:HA	1:A:70:GLN:H	30	0.06
(1,1509)	1:A:72:MET:HG2	1:A:9:LEU:HD11	23	0.06
(1,1509)	1:A:72:MET:HG2	1:A:9:LEU:HD12	23	0.06
(1,1509)	1:A:72:MET:HG2	1:A:9:LEU:HD13	23	0.06
(1,1505)	1:A:55:VAL:HG11	1:A:59:ARG:HD2	4	0.06
(1,1505)	1:A:55:VAL:HG11	1:A:59:ARG:HD3	4	0.06
(1,1505)	1:A:55:VAL:HG12	1:A:59:ARG:HD2	4	0.06
(1,1505)	1:A:55:VAL:HG12	1:A:59:ARG:HD3	4	0.06
(1,1505)	1:A:55:VAL:HG13	1:A:59:ARG:HD2	4	0.06
(1,1505)	1:A:55:VAL:HG13	1:A:59:ARG:HD3	4	0.06
(1,1505)	1:A:55:VAL:HG11	1:A:59:ARG:HD2	11	0.06
(1,1505)	1:A:55:VAL:HG11	1:A:59:ARG:HD3	11	0.06
(1,1505)	1:A:55:VAL:HG12	1:A:59:ARG:HD2	11	0.06
(1,1505)	1:A:55:VAL:HG12	1:A:59:ARG:HD3	11	0.06
(1,1505)	1:A:55:VAL:HG13	1:A:59:ARG:HD2	11	0.06
(1,1505)	1:A:55:VAL:HG13	1:A:59:ARG:HD3	11	0.06



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1498)	1:A:67:ARG:HD2	1:A:69:LEU:H	1	0.06
(1,1498)	1:A:67:ARG:HD2	1:A:69:LEU:H	2	0.06
(1,1498)	1:A:67:ARG:HD2	1:A:69:LEU:H	12	0.06
(1,1498)	1:A:67:ARG:HD2	1:A:69:LEU:H	16	0.06
(1,1498)	1:A:67:ARG:HD2	1:A:69:LEU:H	17	0.06
(1,1498)	1:A:67:ARG:HD2	1:A:69:LEU:H	29	0.06
(1,1484)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:19:ILE:HB	6	0.06
(1,1484)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:19:ILE:HB	6	0.06
(1,1484)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:19:ILE:HB	6	0.06
(1,1484)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:19:ILE:HB	8	0.06
(1,1484)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:19:ILE:HB	8	0.06
(1,1484)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:19:ILE:HB	8	0.06
(1,1484)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:19:ILE:HB	20	0.06
(1,1484)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:19:ILE:HB	20	0.06
(1,1484)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:19:ILE:HB	20	0.06
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:13:VAL:HG11	21	0.06
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:13:VAL:HG12	21	0.06
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:13:VAL:HG13	21	0.06
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:13:VAL:HG11	21	0.06
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:13:VAL:HG12	21	0.06
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:13:VAL:HG13	21	0.06
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:13:VAL:HG11	21	0.06
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:13:VAL:HG12	21	0.06
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:13:VAL:HG13	21	0.06
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:13:VAL:HG11	25	0.06
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:13:VAL:HG12	25	0.06
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:13:VAL:HG13	25	0.06
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:13:VAL:HG11	25	0.06
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:13:VAL:HG12	25	0.06
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:13:VAL:HG13	25	0.06
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:13:VAL:HG11	25	0.06
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:13:VAL:HG12	25	0.06
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:13:VAL:HG13	25	0.06
(1,1445)	1:A:44:VAL:HG11	1:A:47:ILE:HG13	28	0.06
(1,1445)	1:A:44:VAL:HG12	1:A:47:ILE:HG13	28	0.06
(1,1445)	1:A:44:VAL:HG13	1:A:47:ILE:HG13	28	0.06
(1,1435)	1:A:13:VAL:HG11	1:A:9:LEU:HA	3	0.06
(1,1435)	1:A:13:VAL:HG12	1:A:9:LEU:HA	3	0.06
(1,1435)	1:A:13:VAL:HG13	1:A:9:LEU:HA	3	0.06
(1,1411)	1:A:42:VAL:HG11	1:A:43:GLU:HG3	25	0.06
(1,1411)	1:A:42:VAL:HG12	1:A:43:GLU:HG3	25	0.06
(1,1411)	1:A:42:VAL:HG13	1:A:43:GLU:HG3	25	0.06



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1407)	1:A:42:VAL:HA	1:A:44:VAL:H	24	0.06
(1,1393)	1:A:44:VAL:HA	1:A:48:LEU:HG	9	0.06
(1,1332)	1:A:68:LYS:HE2	1:A:69:LEU:H	1	0.06
(1,1332)	1:A:68:LYS:HE3	1:A:69:LEU:H	1	0.06
(1,1332)	1:A:68:LYS:HE2	1:A:69:LEU:H	7	0.06
(1,1332)	1:A:68:LYS:HE3	1:A:69:LEU:H	7	0.06
(1,1332)	1:A:68:LYS:HE2	1:A:69:LEU:H	13	0.06
(1,1332)	1:A:68:LYS:HE3	1:A:69:LEU:H	13	0.06
(1,1332)	1:A:68:LYS:HE2	1:A:69:LEU:H	27	0.06
(1,1332)	1:A:68:LYS:HE3	1:A:69:LEU:H	27	0.06
(1,1327)	1:A:68:LYS:HD2	1:A:71:GLU:HB2	21	0.06
(1,1327)	1:A:68:LYS:HD3	1:A:71:GLU:HB2	21	0.06
(1,1263)	1:A:61:VAL:HG11	1:A:62:ARG:HB3	1	0.06
(1,1263)	1:A:61:VAL:HG12	1:A:62:ARG:HB3	1	0.06
(1,1263)	1:A:61:VAL:HG13	1:A:62:ARG:HB3	1	0.06
(1,1220)	1:A:58:ILE:HG21	1:A:62:ARG:HD2	19	0.06
(1,1220)	1:A:58:ILE:HG22	1:A:62:ARG:HD2	19	0.06
(1,1220)	1:A:58:ILE:HG23	1:A:62:ARG:HD2	19	0.06
(1,1183)	1:A:56:LEU:HB2	1:A:57:PRO:HB2	22	0.06
(1,1183)	1:A:56:LEU:HB2	1:A:57:PRO:HG2	22	0.06
(1,1160)	1:A:54:LEU:HD11	1:A:54:LEU:HA	26	0.06
(1,1160)	1:A:54:LEU:HD12	1:A:54:LEU:HA	26	0.06
(1,1160)	1:A:54:LEU:HD13	1:A:54:LEU:HA	26	0.06
(1,1140)	1:A:54:LEU:HB2	1:A:54:LEU:H	24	0.06
(1,1095)	1:A:39:LEU:HD21	1:A:42:VAL:H	2	0.06
(1,1095)	1:A:39:LEU:HD22	1:A:42:VAL:H	2	0.06
(1,1095)	1:A:39:LEU:HD23	1:A:42:VAL:H	2	0.06
(1,1095)	1:A:39:LEU:HD21	1:A:42:VAL:H	14	0.06
(1,1095)	1:A:39:LEU:HD22	1:A:42:VAL:H	14	0.06
(1,1095)	1:A:39:LEU:HD23	1:A:42:VAL:H	14	0.06
(1,1095)	1:A:39:LEU:HD21	1:A:42:VAL:H	30	0.06
(1,1095)	1:A:39:LEU:HD22	1:A:42:VAL:H	30	0.06
(1,1095)	1:A:39:LEU:HD23	1:A:42:VAL:H	30	0.06
(1,1091)	1:A:39:LEU:HD11	1:A:39:LEU:HA	24	0.06
(1,1091)	1:A:39:LEU:HD12	1:A:39:LEU:HA	24	0.06
(1,1091)	1:A:39:LEU:HD13	1:A:39:LEU:HA	24	0.06
(1,1061)	1:A:36:LEU:HD21	1:A:38:SER:H	6	0.06
(1,1061)	1:A:36:LEU:HD22	1:A:38:SER:H	6	0.06
(1,1061)	1:A:36:LEU:HD23	1:A:38:SER:H	6	0.06
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD11	1:A:44:VAL:HG21	14	0.06
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD11	1:A:44:VAL:HG22	14	0.06
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD11	1:A:44:VAL:HG23	14	0.06



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD12	1:A:44:VAL:HG21	14	0.06
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD12	1:A:44:VAL:HG22	14	0.06
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD12	1:A:44:VAL:HG23	14	0.06
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD13	1:A:44:VAL:HG21	14	0.06
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD13	1:A:44:VAL:HG22	14	0.06
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD13	1:A:44:VAL:HG23	14	0.06
(1,1017)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:31:LEU:HA	11	0.06
(1,1017)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:31:LEU:HA	11	0.06
(1,1017)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:31:LEU:HA	11	0.06
(1,1016)	1:A:34:LEU:HD11	1:A:29:SER:H	16	0.06
(1,1016)	1:A:34:LEU:HD12	1:A:29:SER:H	16	0.06
(1,1016)	1:A:34:LEU:HD13	1:A:29:SER:H	16	0.06
(1,1009)	1:A:34:LEU:HD11	1:A:29:SER:HB2	9	0.06
(1,1009)	1:A:34:LEU:HD12	1:A:29:SER:HB2	9	0.06
(1,1009)	1:A:34:LEU:HD13	1:A:29:SER:HB2	9	0.06
(1,1008)	1:A:34:LEU:HD11	1:A:31:LEU:HA	11	0.06
(1,1008)	1:A:34:LEU:HD12	1:A:31:LEU:HA	11	0.06
(1,1008)	1:A:34:LEU:HD13	1:A:31:LEU:HA	11	0.06
(1,989)	1:A:31:LEU:HB3	1:A:36:LEU:HB3	28	0.05
(1,972)	1:A:27:LEU:HD21	1:A:70:GLN:HE21	1	0.05
(1,972)	1:A:27:LEU:HD22	1:A:70:GLN:HE21	1	0.05
(1,972)	1:A:27:LEU:HD23	1:A:70:GLN:HE21	1	0.05
(1,971)	1:A:27:LEU:HD11	1:A:25:ILE:H	6	0.05
(1,971)	1:A:27:LEU:HD12	1:A:25:ILE:H	6	0.05
(1,971)	1:A:27:LEU:HD13	1:A:25:ILE:H	6	0.05
(1,971)	1:A:27:LEU:HD11	1:A:25:ILE:H	18	0.05
(1,971)	1:A:27:LEU:HD12	1:A:25:ILE:H	18	0.05
(1,971)	1:A:27:LEU:HD13	1:A:25:ILE:H	18	0.05
(1,943)	1:A:57:PRO:HD2	1:A:56:LEU:HD21	20	0.05
(1,943)	1:A:57:PRO:HD2	1:A:56:LEU:HD22	20	0.05
(1,943)	1:A:57:PRO:HD2	1:A:56:LEU:HD23	20	0.05
(1,896)	1:A:47:ILE:HG21	1:A:6:GLN:HE21	27	0.05
(1,896)	1:A:47:ILE:HG22	1:A:6:GLN:HE21	27	0.05
(1,896)	1:A:47:ILE:HG23	1:A:6:GLN:HE21	27	0.05
(1,862)	1:A:10:VAL:HA	1:A:9:LEU:HD21	2	0.05
(1,862)	1:A:10:VAL:HA	1:A:9:LEU:HD22	2	0.05
(1,862)	1:A:10:VAL:HA	1:A:9:LEU:HD23	2	0.05
(1,862)	1:A:10:VAL:HA	1:A:9:LEU:HD21	27	0.05
(1,862)	1:A:10:VAL:HA	1:A:9:LEU:HD22	27	0.05
(1,862)	1:A:10:VAL:HA	1:A:9:LEU:HD23	27	0.05
(1,85)	1:A:24:GLY:H	1:A:23:ALA:HA	3	0.05
(1,85)	1:A:24:GLY:H	1:A:25:ILE:HA	3	0.05



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,847)	1:A:8:ASP:HB2	1:A:11:LYS:HD2	5	0.05
(1,847)	1:A:8:ASP:HB2	1:A:11:LYS:HD3	5	0.05
(1,846)	1:A:8:ASP:HB3	1:A:11:LYS:HD2	28	0.05
(1,846)	1:A:8:ASP:HB3	1:A:11:LYS:HD3	28	0.05
(1,82)	1:A:73:SER:HB2	1:A:9:LEU:HB3	6	0.05
(1,82)	1:A:73:SER:HB2	1:A:7:ARG:HG2	6	0.05
(1,82)	1:A:73:SER:HB2	1:A:7:ARG:HG3	6	0.05
(1,82)	1:A:73:SER:HB2	1:A:9:LEU:HB3	12	0.05
(1,82)	1:A:73:SER:HB2	1:A:7:ARG:HG2	12	0.05
(1,82)	1:A:73:SER:HB2	1:A:7:ARG:HG3	12	0.05
(1,813)	1:A:65:THR:HG21	1:A:69:LEU:H	18	0.05
(1,813)	1:A:65:THR:HG22	1:A:69:LEU:H	18	0.05
(1,813)	1:A:65:THR:HG23	1:A:69:LEU:H	18	0.05
(1,811)	1:A:65:THR:HG21	1:A:28:ASP:HA	13	0.05
(1,811)	1:A:65:THR:HG22	1:A:28:ASP:HA	13	0.05
(1,811)	1:A:65:THR:HG23	1:A:28:ASP:HA	13	0.05
(1,811)	1:A:65:THR:HG21	1:A:28:ASP:HA	27	0.05
(1,811)	1:A:65:THR:HG22	1:A:28:ASP:HA	27	0.05
(1,811)	1:A:65:THR:HG23	1:A:28:ASP:HA	27	0.05
(1,801)	1:A:65:THR:HA	1:A:31:LEU:HD11	6	0.05
(1,801)	1:A:65:THR:HA	1:A:31:LEU:HD12	6	0.05
(1,801)	1:A:65:THR:HA	1:A:31:LEU:HD13	6	0.05
(1,799)	1:A:51:GLU:HG2	1:A:47:ILE:HG21	1	0.05
(1,799)	1:A:51:GLU:HG2	1:A:47:ILE:HG22	1	0.05
(1,799)	1:A:51:GLU:HG2	1:A:47:ILE:HG23	1	0.05
(1,799)	1:A:51:GLU:HG3	1:A:47:ILE:HG21	1	0.05
(1,799)	1:A:51:GLU:HG3	1:A:47:ILE:HG22	1	0.05
(1,799)	1:A:51:GLU:HG3	1:A:47:ILE:HG23	1	0.05
(1,783)	1:A:52:HIS:HB3	1:A:54:LEU:HD11	13	0.05
(1,783)	1:A:52:HIS:HB3	1:A:54:LEU:HD12	13	0.05
(1,783)	1:A:52:HIS:HB3	1:A:54:LEU:HD13	13	0.05
(1,783)	1:A:52:HIS:HB3	1:A:54:LEU:HD21	13	0.05
(1,783)	1:A:52:HIS:HB3	1:A:54:LEU:HD22	13	0.05
(1,783)	1:A:52:HIS:HB3	1:A:54:LEU:HD23	13	0.05
(1,746)	1:A:70:GLN:HG2	1:A:67:ARG:HA	7	0.05
(1,732)	1:A:63:GLN:HG3	1:A:60:GLU:HA	19	0.05
(1,732)	1:A:63:GLN:HG3	1:A:60:GLU:HA	20	0.05
(1,732)	1:A:63:GLN:HG3	1:A:60:GLU:HA	23	0.05
(1,720)	1:A:63:GLN:HB3	1:A:63:GLN:HE21	15	0.05
(1,715)	1:A:63:GLN:HB3	1:A:60:GLU:HA	20	0.05
(1,711)	1:A:63:GLN:HA	1:A:30:SER:HB2	27	0.05
(1,706)	1:A:59:ARG:HD2	1:A:59:ARG:H	18	0.05



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,706)	1:A:59:ARG:HD3	1:A:59:ARG:H	18	0.05
(1,684)	1:A:43:GLU:HG3	1:A:39:LEU:HD21	13	0.05
(1,684)	1:A:43:GLU:HG3	1:A:39:LEU:HD22	13	0.05
(1,684)	1:A:43:GLU:HG3	1:A:39:LEU:HD23	13	0.05
(1,673)	1:A:43:GLU:HA	1:A:39:LEU:HD21	6	0.05
(1,673)	1:A:43:GLU:HA	1:A:39:LEU:HD22	6	0.05
(1,673)	1:A:43:GLU:HA	1:A:39:LEU:HD23	6	0.05
(1,673)	1:A:43:GLU:HA	1:A:39:LEU:HD21	10	0.05
(1,673)	1:A:43:GLU:HA	1:A:39:LEU:HD22	10	0.05
(1,673)	1:A:43:GLU:HA	1:A:39:LEU:HD23	10	0.05
(1,673)	1:A:43:GLU:HA	1:A:39:LEU:HD21	12	0.05
(1,673)	1:A:43:GLU:HA	1:A:39:LEU:HD22	12	0.05
(1,673)	1:A:43:GLU:HA	1:A:39:LEU:HD23	12	0.05
(1,673)	1:A:43:GLU:HA	1:A:39:LEU:HD21	21	0.05
(1,673)	1:A:43:GLU:HA	1:A:39:LEU:HD22	21	0.05
(1,673)	1:A:43:GLU:HA	1:A:39:LEU:HD23	21	0.05
(1,662)	1:A:49:GLU:HA	1:A:46:GLN:HA	4	0.05
(1,536)	1:A:25:ILE:HD11	1:A:14:ALA:HB1	13	0.05
(1,536)	1:A:25:ILE:HD11	1:A:14:ALA:HB2	13	0.05
(1,536)	1:A:25:ILE:HD11	1:A:14:ALA:HB3	13	0.05
(1,536)	1:A:25:ILE:HD12	1:A:14:ALA:HB1	13	0.05
(1,536)	1:A:25:ILE:HD12	1:A:14:ALA:HB2	13	0.05
(1,536)	1:A:25:ILE:HD12	1:A:14:ALA:HB3	13	0.05
(1,536)	1:A:25:ILE:HD13	1:A:14:ALA:HB1	13	0.05
(1,536)	1:A:25:ILE:HD13	1:A:14:ALA:HB2	13	0.05
(1,536)	1:A:25:ILE:HD13	1:A:14:ALA:HB3	13	0.05
(1,536)	1:A:25:ILE:HD11	1:A:14:ALA:HB1	18	0.05
(1,536)	1:A:25:ILE:HD11	1:A:14:ALA:HB2	18	0.05
(1,536)	1:A:25:ILE:HD11	1:A:14:ALA:HB3	18	0.05
(1,536)	1:A:25:ILE:HD12	1:A:14:ALA:HB1	18	0.05
(1,536)	1:A:25:ILE:HD12	1:A:14:ALA:HB2	18	0.05
(1,536)	1:A:25:ILE:HD12	1:A:14:ALA:HB3	18	0.05
(1,536)	1:A:25:ILE:HD13	1:A:14:ALA:HB1	18	0.05
(1,536)	1:A:25:ILE:HD13	1:A:14:ALA:HB2	18	0.05
(1,536)	1:A:25:ILE:HD13	1:A:14:ALA:HB3	18	0.05
(1,513)	1:A:25:ILE:HB	1:A:22:LEU:HD11	12	0.05
(1,513)	1:A:25:ILE:HB	1:A:22:LEU:HD12	12	0.05
(1,513)	1:A:25:ILE:HB	1:A:22:LEU:HD13	12	0.05
(1,513)	1:A:25:ILE:HB	1:A:22:LEU:HD11	30	0.05
(1,513)	1:A:25:ILE:HB	1:A:22:LEU:HD12	30	0.05
(1,513)	1:A:25:ILE:HB	1:A:22:LEU:HD13	30	0.05
(1,506)	1:A:19:ILE:HD11	1:A:18:GLY:HA2	14	0.05



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

(1,506) 1:A:19:ILE:HD12 1:A:18:GLY:HA2 14 0.05 (1,506) 1:A:19:ILE:HD13 1:A:18:GLY:HA2 14 0.05 (1,499) 1:A:47:ILE:HD11 1:A:43:GLU:HG2 8 0.05 (1,499) 1:A:47:ILE:HD13 1:A:43:GLU:HG2 8 0.05 (1,499) 1:A:47:ILE:HD13 1:A:43:GLU:HG2 17 0.05 (1,499) 1:A:47:ILE:HD12 1:A:43:GLU:HG2 17 0.05 (1,499) 1:A:47:ILE:HD13 1:A:43:GLU:HG2 17 0.05 (1,491) 1:A:47:ILE:HD12 1:A:43:GLU:HG2 17 0.05 (1,491) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD11 13 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD11 13 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD11 19 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD11 29 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD12 19 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 <td< th=""><th>Key</th><th>Atom-1</th><th>Atom-2</th><th>Model</th><th>Violation (Å)</th></td<>	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,499) 1:A:47:ILE:HD11 1:A:43:GLU:HG2 8 0.05 (1,499) 1:A:47:ILE:HD12 1:A:43:GLU:HG2 8 0.05 (1,499) 1:A:47:ILE:HD13 1:A:43:GLU:HG2 8 0.05 (1,499) 1:A:47:ILE:HD11 1:A:43:GLU:HG2 17 0.05 (1,499) 1:A:47:ILE:HD11 1:A:43:GLU:HG2 17 0.05 (1,499) 1:A:47:ILE:HD12 1:A:43:GLU:HG2 17 0.05 (1,499) 1:A:47:ILE:HD13 1:A:43:GLU:HG2 17 0.05 (1,491) 1:A:27:LEU:HA 1:A:66:LEU:H 29 0.05 (1,491) 1:A:27:LEU:HA 1:A:66:LEU:H 29 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD11 13 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD11 13 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 13 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 13 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD11 19 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD11 19 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD12 19 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD11 23 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 19 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 23 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD11 23 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD11 26 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 23 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 26 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 26 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 26 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 30 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG13 1:A:48:LEU:HD13 30 0.05 (1	(1,506)	1:A:19:ILE:HD12	1:A:18:GLY:HA2	14	0.05
(1,499) 1:A:47:ILE:HD12 1:A:43:GLU:HG2 8 0.05 (1,499) 1:A:47:ILE:HD13 1:A:43:GLU:HG2 17 0.05 (1,499) 1:A:47:ILE:HD11 1:A:43:GLU:HG2 17 0.05 (1,499) 1:A:47:ILE:HD12 1:A:43:GLU:HG2 17 0.05 (1,499) 1:A:47:ILE:HD12 1:A:43:GLU:HG2 17 0.05 (1,499) 1:A:47:ILE:HD13 1:A:43:GLU:HG2 17 0.05 (1,491) 1:A:47:ILE:HD13 1:A:43:GLU:HG2 17 0.05 (1,491) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD11 13 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD11 13 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 13 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 13 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 19 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 19 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 19 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 19 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 23 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 23 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 23 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 23 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 26 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 30 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 5 0.05 (1,460) 1:A:47:ILE:HG13 1:A:48:LEU:HD13 30 0.05 (1,460) 1:A:47:ILE:HG13 1:A:48:LEU:HD13 5 0.05 (1,460) 1:A:47:ILE:HG3 1:A:48:LEU:HD13 5 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG3 1:A:48:LEU:HD13 5 0.05 (1,431) 1:A:13:VAL:HG23 1:A:48:LEU:HD13 5 0.05 (1,432) 1:A:13:VAL:HG21 1:A:48:LEU:HD13 5 0.05 (1,433) 1:A:13:VAL:HG23 1:A:48:LEU:HD13 5 0.05 (1,431) 1:A:13:VAL:HG23 1:A:48:LEU:HD13 5 0.05 (1,431) 1:A:13:VAL:HG23 1:A:48:LEU:HD14 5 0.05 (1,431) 1:A:13:VAL:HG23 1:A:17:LEU:H 21 0.05 (1,431) 1:A:13:VAL:HG23 1:A:17:LEU:H 21 0.05 (1,431) 1:A:13:VAL:HG23 1:A:17:LEU:H 21 0.05 (1,431) 1:A:13:VAL:HG23 1:A:17:LEU:H 21 0.05 (1,431) 1:A:13:VAL:HG23 1:A:17:LEU:H 24 0.05 (1,431) 1:A:13:VAL:HG23 1:A:17:LEU:H 24 0.05 (1,431) 1:A:13:VAL:HG23 1	(1,506)	1:A:19:ILE:HD13	1:A:18:GLY:HA2	14	0.05
(1,499) 1:A:47:ILE:HD13 1:A:43:GLU:HG2 8 0.05 (1,499) 1:A:47:ILE:HD11 1:A:43:GLU:HG2 17 0.05 (1,499) 1:A:47:ILE:HD12 1:A:43:GLU:HG2 17 0.05 (1,491) 1:A:47:ILE:HD13 1:A:43:GLU:HG2 17 0.05 (1,491) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD11 13 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD12 13 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 13 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD11 19 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD11 19 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 19 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD11 23 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD11 23 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 23 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG13	(1,499)	1:A:47:ILE:HD11	1:A:43:GLU:HG2	8	0.05
(1,499) 1:A:47:ILE:HD11 1:A:43:GLU:HG2 17 0.05 (1,499) 1:A:47:ILE:HD12 1:A:43:GLU:HG2 17 0.05 (1,499) 1:A:47:ILE:HD13 1:A:43:GLU:HG2 17 0.05 (1,491) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD11 13 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD12 13 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 13 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD11 19 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD12 19 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 19 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 19 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 23 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 23 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 23 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG13	(1,499)	1:A:47:ILE:HD12	1:A:43:GLU:HG2	8	0.05
(1,499) 1:A:47:ILE:HD12 1:A:43:GLU:HG2 17 0.05 (1,499) 1:A:47:ILE:HD13 1:A:43:GLU:HG2 17 0.05 (1,491) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:46:LEU:HD12 13 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD11 13 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 13 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD11 19 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD12 19 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD12 19 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 19 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD12 23 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 23 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 23 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 26 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG13	(1,499)	1:A:47:ILE:HD13	1:A:43:GLU:HG2	8	0.05
(1,49) 1:A:47:ILE:HD13 1:A:43:GLU:HG2 17 0.05 (1,491) 1:A:27:LEU:HA 1:A:66:LEU:H 29 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD11 13 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD12 13 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 13 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 19 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD11 19 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD12 19 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 23 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD11 23 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD12 23 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 23 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 26 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 5 0.05 (1,460) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD11 30 0.05 (1,460) 1:A:47:ILE:HG13 1:A:48:LEU:HD13 30 0.05 (1,460) 1:A:47:ILE:HG13 1:A:48:LEU:HD13 5 0.05 (1,460) 1:A:47:ILE:HG3 1:A:48:LEU:HD13 5 0.05 (1,460) 1:A:47:ILE:HG3 1:A:48:LEU:HD14 5 0.05 (1,444) 1:A:47:ILE:HG3 1:A:48:LEU:HD14 5 0.05 (1,443) 1:A:13:VAL:HG22 1:A:17:LEU:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG22 1:A:18:GLY:H 21 0.05	(1,499)	1:A:47:ILE:HD11	1:A:43:GLU:HG2	17	0.05
(1,491) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD11 13 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD12 13 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 13 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 13 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD11 19 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD12 19 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 19 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD11 23 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD11 23 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD12 23 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 23 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 23 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 26 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD11 26 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD11 26 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 26 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 30 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 30 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 30 0.05 (1,460) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 30 0.05 (1,460) 1:A:47:ILE:HG13 1:A:48:LEU:HD13 30 0.05 (1,460) 1:A:47:ILE:HG13 1:A:48:LEU:HD13 30 0.05 (1,460) 1:A:47:ILE:HG13 1:A:48:LEU:HD13 5 0.05 (1,460) 1:A:47:ILE:HG13 1:A:48:LEU:HD13 5 0.05 (1,460) 1:A:47:ILE:HG13 1:A:48:LEU:HD13 5 0.05 (1,460) 1:A:47:ILE:HG13 1:A:48:LEU:HD12 5 0.05 (1,460) 1:A:47:ILE:HG13 1:A:48:LEU:HD14 5 0.05 (1,460) 1:A:47:ILE:HG3 1:A:48:LEU:HD14 5 0.05 (1,460) 1:A:48:IRE:HG3 1:A:48:IRE:HG3 1 1:A:48:IRE:HG3 1 0.05 (1,460) 1:A:48:IRE:HG3 1 1:A:48:IRE:HG3 1 1:A:48:IRE:HG3 1 0.05 (1,460) 1:A:48:IRE:HG3 1	(1,499)	1:A:47:ILE:HD12	1:A:43:GLU:HG2	17	0.05
(1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD11 13 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD12 13 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 13 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD11 19 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD12 19 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD12 19 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 19 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD11 23 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD11 23 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD12 23 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 26 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 30 0.05 (1,460) 1:A:47:ILE:HG13 1:A:48:LEU:HD13 30 0.05 (1,460) 1:A:47:ILE:HG13 1:A:48:LEU:HD13 30 0.05 (1,460) 1:A:47:ILE:HG13 1:A:48:LEU:HD13 5 0.05 (1,460) 1:A:47:ILE:HG13 1:A:48:LEU:HD13 5 0.05 (1,460) 1:A:47:ILE:HG13 1:A:48:LEU:HD13 5 0.05 (1,461) 1:A:48:ILEU:HD13 5 0.05 (1,461) 1:A:48:ILEU:HD13 5 0.05 (1,461) 1:A:48:ILEU:HD13 5 0.05 (1,461) 1:A:48:ILEU:HD14 21 0.05 (1,461) 1:A:48:ILEU:HD14 21 0.05 (1,461) 1:A:48:ILEU:HD14 21	(1,499)	1:A:47:ILE:HD13	1:A:43:GLU:HG2	17	0.05
(1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD12 13 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 13 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD11 19 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD12 19 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 19 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD11 23 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 23 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 23 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD11 26 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 26 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 30 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 30 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG13 1:A:48:LEU:HD13 30 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG13	(1,491)	1:A:27:LEU:HA	1:A:66:LEU:H	29	0.05
(1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 13 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD11 19 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD12 19 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 19 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD11 23 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD12 23 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 23 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD11 26 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 26 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 30 0.05 (1,460) 1:A:47:ILE:HG13	(1,461)	1:A:47:ILE:HG12	1:A:48:LEU:HD11	13	0.05
(1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD11 19 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD12 19 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 19 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD11 23 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD12 23 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 23 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD12 26 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 26 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 30 0.05 (1,460) 1:A:47:ILE:HG13 1:A:48:LEU:HD13 30 0.05 (1,460) 1:A:47:ILE:HG3	(1,461)	1:A:47:ILE:HG12	1:A:48:LEU:HD12	13	0.05
(1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD12 19 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 19 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD11 23 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD12 23 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 23 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD11 26 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD12 26 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 26 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD11 30 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD12 30 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG13 1:A:48:LEU:HD13 30 0.05 (1,460) 1:A:47:ILE:HG13 1:A:48:LEU:HD13 5 0.05 (1,460) 1:A:47:ILE:HG13 1:A:48:LEU:HD13 5 0.05 (1,460) 1:A:47:ILE:HG13	(1,461)	1:A:47:ILE:HG12	1:A:48:LEU:HD13	13	0.05
(1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 19 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD11 23 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD12 23 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 23 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD11 26 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD12 26 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 26 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD11 30 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD12 30 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 30 0.05 (1,460) 1:A:47:ILE:HG13 1:A:48:LEU:HD13 5 0.05 (1,460) 1:A:47:ILE:HG13 1:A:48:LEU:HD13 5 0.05 (1,460) 1:A:47:ILE:HG13 1:A:48:LEU:HD13 5 0.05 (1,460) 1:A:47:ILE:HG13	(1,461)	1:A:47:ILE:HG12	1:A:48:LEU:HD11	19	0.05
(1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD11 23 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD12 23 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 23 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD11 26 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD12 26 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 26 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD11 30 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD12 30 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 30 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG13 1:A:48:LEU:HD13 30 0.05 (1,460) 1:A:47:ILE:HG13 1:A:48:LEU:HD13 5 0.05 (1,460) 1:A:47:ILE:HG13 1:A:48:LEU:HD13 5 0.05 (1,460) 1:A:47:ILE:HG13 1:A:48:LEU:HD13 5 0.05 (1,440) 1:A:413:VAL:HG21	(1,461)	1:A:47:ILE:HG12	1:A:48:LEU:HD12	19	0.05
(1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD12 23 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 23 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD11 26 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD12 26 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 26 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD11 30 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD12 30 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 30 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG13 1:A:48:LEU:HD13 30 0.05 (1,460) 1:A:47:ILE:HG13 1:A:48:LEU:HD13 5 0.05 (1,440) 1:A:413:VAL:HG21	(1,461)	1:A:47:ILE:HG12	1:A:48:LEU:HD13	19	0.05
(1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 23 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD11 26 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD12 26 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 26 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD11 30 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD12 30 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG13 1:A:48:LEU:HD13 30 0.05 (1,460) 1:A:47:ILE:HG13 1:A:48:LEU:HD11 5 0.05 (1,460) 1:A:47:ILE:HG13 1:A:48:LEU:HD12 5 0.05 (1,460) 1:A:47:ILE:HG13 1:A:48:LEU:HD13 5 0.05 (1,460) 1:A:47:ILE:HG13 1:A:48:LEU:HD13 5 0.05 (1,460) 1:A:47:ILE:HG13 1:A:48:LEU:HD13 5 0.05 (1,444) 1:A:47:ILE:HG13 1:A:48:LEU:HD13 5 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG21	(1,461)	1:A:47:ILE:HG12	1:A:48:LEU:HD11	23	0.05
(1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD11 26 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD12 26 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 26 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD11 30 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD12 30 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 30 0.05 (1,460) 1:A:47:ILE:HG13 1:A:48:LEU:HD13 30 0.05 (1,460) 1:A:47:ILE:HG13 1:A:48:LEU:HD12 5 0.05 (1,460) 1:A:47:ILE:HG13 1:A:48:LEU:HD13 5 0.05 (1,460) 1:A:47:ILE:HG13 1:A:48:LEU:HD13 5 0.05 (1,460) 1:A:47:ILE:HG13 1:A:48:LEU:HD13 5 0.05 (1,444) 1:A:47:ILE:HG13 1:A:48:LEU:HD13 5 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG21 1:A:17:LEU:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG23 <td< td=""><td>(1,461)</td><td>1:A:47:ILE:HG12</td><td>1:A:48:LEU:HD12</td><td>23</td><td>0.05</td></td<>	(1,461)	1:A:47:ILE:HG12	1:A:48:LEU:HD12	23	0.05
(1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD12 26 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 26 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD11 30 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD12 30 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 30 0.05 (1,460) 1:A:47:ILE:HG13 1:A:48:LEU:HD11 5 0.05 (1,460) 1:A:47:ILE:HG13 1:A:48:LEU:HD12 5 0.05 (1,460) 1:A:47:ILE:HG13 1:A:48:LEU:HD13 5 0.05 (1,440) 1:A:47:ILE:HG13 1:A:48:LEU:HD13 5 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG21 1:A:17:LEU:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG23 1	(1,461)	1:A:47:ILE:HG12	1:A:48:LEU:HD13	23	0.05
(1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD12 26 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 26 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD11 30 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD12 30 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 30 0.05 (1,460) 1:A:47:ILE:HG13 1:A:48:LEU:HD11 5 0.05 (1,460) 1:A:47:ILE:HG13 1:A:48:LEU:HD12 5 0.05 (1,460) 1:A:47:ILE:HG13 1:A:48:LEU:HD13 5 0.05 (1,460) 1:A:47:ILE:HG13 1:A:48:LEU:HD13 5 0.05 (1,460) 1:A:47:ILE:HG13 1:A:48:LEU:HD13 5 0.05 (1,440) 1:A:47:ILE:HG13 1:A:48:LEU:HD13 5 0.05 (1,441) 1:A:47:ILE:HG13 1:A:48:LEU:HD13 5 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG21 1:A:17:LEU:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG23 1	(1,461)	1:A:47:ILE:HG12	1:A:48:LEU:HD11	26	0.05
(1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD11 30 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD12 30 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 30 0.05 (1,460) 1:A:47:ILE:HG13 1:A:48:LEU:HD11 5 0.05 (1,460) 1:A:47:ILE:HG13 1:A:48:LEU:HD12 5 0.05 (1,460) 1:A:47:ILE:HG13 1:A:48:LEU:HD13 5 0.05 (1,460) 1:A:47:ILE:HG13 1:A:48:LEU:HD13 5 0.05 (1,440) 1:A:47:ILE:HG13 1:A:48:LEU:HD13 5 0.05 (1,441) 1:A:47:ILE:HG13 1:A:48:LEU:HD13 5 0.05 (1,442) 1:A:47:ILE:HG13 1:A:48:LEU:HD13 5 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG22 1:A:17:LEU:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG23 1:A:73:SER:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG23 1:A:18:GLY:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG23 1:A:18:GL	, ,	1:A:47:ILE:HG12	1:A:48:LEU:HD12	26	0.05
(1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD12 30 0.05 (1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 30 0.05 (1,460) 1:A:47:ILE:HG13 1:A:48:LEU:HD11 5 0.05 (1,460) 1:A:47:ILE:HG13 1:A:48:LEU:HD12 5 0.05 (1,460) 1:A:47:ILE:HG13 1:A:48:LEU:HD13 5 0.05 (1,440) 1:A:47:ILE:HA 1:A:50:ARG:HB3 5 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG21 1:A:17:LEU:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG22 1:A:17:LEU:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG23 1:A:73:SER:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG21 1:A:73:SER:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG23 1:A:18:GLY:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG21 1:A:18:GLY:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG23 1:A:18:GLY:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG23 1:A:17:LEU:H	(1,461)	1:A:47:ILE:HG12	1:A:48:LEU:HD13	26	0.05
(1,461) 1:A:47:ILE:HG12 1:A:48:LEU:HD13 30 0.05 (1,460) 1:A:47:ILE:HG13 1:A:48:LEU:HD11 5 0.05 (1,460) 1:A:47:ILE:HG13 1:A:48:LEU:HD12 5 0.05 (1,460) 1:A:47:ILE:HG13 1:A:48:LEU:HD13 5 0.05 (1,460) 1:A:47:ILE:HG13 1:A:48:LEU:HD13 5 0.05 (1,444) 1:A:47:ILE:HA 1:A:50:ARG:HB3 5 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG21 1:A:17:LEU:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG22 1:A:17:LEU:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG23 1:A:73:SER:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG22 1:A:73:SER:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG23 1:A:18:GLY:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG21 1:A:18:GLY:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG23 1:A:18:GLY:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG23 1:A:17:LEU:H 24 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG22 1:A:17:LEU:H </td <td>(1,461)</td> <td>1:A:47:ILE:HG12</td> <td>1:A:48:LEU:HD11</td> <td>30</td> <td>0.05</td>	(1,461)	1:A:47:ILE:HG12	1:A:48:LEU:HD11	30	0.05
(1,460) 1:A:47:ILE:HG13 1:A:48:LEU:HD11 5 0.05 (1,460) 1:A:47:ILE:HG13 1:A:48:LEU:HD12 5 0.05 (1,460) 1:A:47:ILE:HG13 1:A:48:LEU:HD13 5 0.05 (1,440) 1:A:47:ILE:HA 1:A:50:ARG:HB3 5 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG21 1:A:17:LEU:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG22 1:A:17:LEU:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG23 1:A:73:SER:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG21 1:A:73:SER:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG22 1:A:18:GLY:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG23 1:A:18:GLY:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG21 1:A:18:GLY:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG23 1:A:18:GLY:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG23 1:A:17:LEU:H 24 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG21 1:A:17:LEU:H 24 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG23 1:A:17:LEU:H	(1,461)	1:A:47:ILE:HG12	1:A:48:LEU:HD12	30	0.05
(1,460) 1:A:47:ILE:HG13 1:A:48:LEU:HD12 5 0.05 (1,460) 1:A:47:ILE:HG13 1:A:48:LEU:HD13 5 0.05 (1,444) 1:A:47:ILE:HA 1:A:50:ARG:HB3 5 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG21 1:A:17:LEU:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG22 1:A:17:LEU:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG23 1:A:73:SER:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG21 1:A:73:SER:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG22 1:A:73:SER:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG23 1:A:18:GLY:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG21 1:A:18:GLY:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG23 1:A:18:GLY:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG21 1:A:17:LEU:H 24 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG22 1:A:17:LEU:H 24 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG23 1:A:17:LEU:H 24 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG23 1:A:17:LEU:H	(1,461)	1:A:47:ILE:HG12	1:A:48:LEU:HD13	30	0.05
(1,460) 1:A:47:ILE:HG13 1:A:48:LEU:HD13 5 0.05 (1,444) 1:A:47:ILE:HA 1:A:50:ARG:HB3 5 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG21 1:A:17:LEU:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG22 1:A:17:LEU:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG23 1:A:73:SER:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG21 1:A:73:SER:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG22 1:A:73:SER:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG23 1:A:18:GLY:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG21 1:A:18:GLY:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG22 1:A:18:GLY:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG23 1:A:18:GLY:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG21 1:A:17:LEU:H 24 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG22 1:A:17:LEU:H 24 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG23 1:A:17:LEU:H 24 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG23 1:A:17:LEU:H <td< td=""><td>(1,460)</td><td>1:A:47:ILE:HG13</td><td>1:A:48:LEU:HD11</td><td>5</td><td>0.05</td></td<>	(1,460)	1:A:47:ILE:HG13	1:A:48:LEU:HD11	5	0.05
(1,444) 1:A:47:ILE:HA 1:A:50:ARG:HB3 5 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG21 1:A:17:LEU:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG22 1:A:17:LEU:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG23 1:A:73:SER:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG21 1:A:73:SER:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG22 1:A:73:SER:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG23 1:A:18:GLY:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG21 1:A:18:GLY:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG22 1:A:18:GLY:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG23 1:A:17:LEU:H 24 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG21 1:A:17:LEU:H 24 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG23 1:A:17:LEU:H 24 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG23 1:A:17:LEU:H 24 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG23 1:A:17:LEU:H 24	(1,460)	1:A:47:ILE:HG13	1:A:48:LEU:HD12	5	0.05
(1,43) 1:A:13:VAL:HG21 1:A:17:LEU:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG22 1:A:17:LEU:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG23 1:A:17:LEU:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG21 1:A:73:SER:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG22 1:A:73:SER:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG23 1:A:18:GLY:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG21 1:A:18:GLY:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG22 1:A:18:GLY:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG23 1:A:18:GLY:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG21 1:A:17:LEU:H 24 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG22 1:A:17:LEU:H 24 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG23 1:A:17:LEU:H 24 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG21 1:A:73:SER:H 24 0.05	(1,460)	1:A:47:ILE:HG13	1:A:48:LEU:HD13	5	0.05
(1,43) 1:A:13:VAL:HG22 1:A:17:LEU:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG23 1:A:17:LEU:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG21 1:A:73:SER:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG22 1:A:73:SER:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG23 1:A:18:GLY:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG21 1:A:18:GLY:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG22 1:A:18:GLY:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG23 1:A:18:GLY:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG21 1:A:17:LEU:H 24 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG22 1:A:17:LEU:H 24 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG23 1:A:17:LEU:H 24 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG23 1:A:17:LEU:H 24 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG21 1:A:73:SER:H 24 0.05	(1,444)	1:A:47:ILE:HA	1:A:50:ARG:HB3	5	0.05
(1,43) 1:A:13:VAL:HG23 1:A:17:LEU:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG21 1:A:73:SER:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG22 1:A:73:SER:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG23 1:A:73:SER:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG21 1:A:18:GLY:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG22 1:A:18:GLY:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG23 1:A:18:GLY:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG21 1:A:17:LEU:H 24 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG22 1:A:17:LEU:H 24 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG23 1:A:17:LEU:H 24 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG23 1:A:73:SER:H 24 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG21 1:A:73:SER:H 24 0.05	(1,43)	1:A:13:VAL:HG21	1:A:17:LEU:H	21	0.05
(1,43) 1:A:13:VAL:HG21 1:A:73:SER:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG22 1:A:73:SER:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG23 1:A:73:SER:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG21 1:A:18:GLY:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG22 1:A:18:GLY:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG23 1:A:18:GLY:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG21 1:A:17:LEU:H 24 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG22 1:A:17:LEU:H 24 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG23 1:A:17:LEU:H 24 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG23 1:A:17:LEU:H 24 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG21 1:A:73:SER:H 24 0.05	(1,43)	1:A:13:VAL:HG22	1:A:17:LEU:H	21	0.05
(1,43) 1:A:13:VAL:HG22 1:A:73:SER:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG23 1:A:73:SER:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG21 1:A:18:GLY:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG22 1:A:18:GLY:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG23 1:A:18:GLY:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG21 1:A:17:LEU:H 24 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG22 1:A:17:LEU:H 24 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG23 1:A:17:LEU:H 24 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG23 1:A:73:SER:H 24 0.05	(1,43)	1:A:13:VAL:HG23	1:A:17:LEU:H	21	0.05
(1,43) 1:A:13:VAL:HG22 1:A:73:SER:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG23 1:A:73:SER:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG21 1:A:18:GLY:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG22 1:A:18:GLY:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG23 1:A:18:GLY:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG21 1:A:17:LEU:H 24 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG23 1:A:17:LEU:H 24 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG23 1:A:17:LEU:H 24 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG21 1:A:73:SER:H 24 0.05	(1,43)	1:A:13:VAL:HG21	1:A:73:SER:H	21	0.05
(1,43) 1:A:13:VAL:HG23 1:A:73:SER:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG21 1:A:18:GLY:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG22 1:A:18:GLY:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG23 1:A:18:GLY:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG21 1:A:17:LEU:H 24 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG22 1:A:17:LEU:H 24 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG23 1:A:17:LEU:H 24 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG21 1:A:73:SER:H 24 0.05		1:A:13:VAL:HG22	1:A:73:SER:H	21	0.05
(1,43) 1:A:13:VAL:HG21 1:A:18:GLY:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG22 1:A:18:GLY:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG23 1:A:18:GLY:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG21 1:A:17:LEU:H 24 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG22 1:A:17:LEU:H 24 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG23 1:A:17:LEU:H 24 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG21 1:A:73:SER:H 24 0.05	_ ` ′	1:A:13:VAL:HG23	1:A:73:SER:H	21	0.05
(1,43) 1:A:13:VAL:HG22 1:A:18:GLY:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG23 1:A:18:GLY:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG21 1:A:17:LEU:H 24 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG22 1:A:17:LEU:H 24 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG23 1:A:17:LEU:H 24 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG21 1:A:73:SER:H 24 0.05	· · /	1:A:13:VAL:HG21	1:A:18:GLY:H	21	0.05
(1,43) 1:A:13:VAL:HG23 1:A:18:GLY:H 21 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG21 1:A:17:LEU:H 24 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG22 1:A:17:LEU:H 24 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG23 1:A:17:LEU:H 24 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG21 1:A:73:SER:H 24 0.05	, ,	1:A:13:VAL:HG22	1:A:18:GLY:H	21	0.05
(1,43) 1:A:13:VAL:HG21 1:A:17:LEU:H 24 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG22 1:A:17:LEU:H 24 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG23 1:A:17:LEU:H 24 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG21 1:A:73:SER:H 24 0.05	_ ` /	1:A:13:VAL:HG23	1:A:18:GLY:H	21	0.05
(1,43) 1:A:13:VAL:HG22 1:A:17:LEU:H 24 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG23 1:A:17:LEU:H 24 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG21 1:A:73:SER:H 24 0.05	, ,	1:A:13:VAL:HG21	1:A:17:LEU:H	24	0.05
(1,43) 1:A:13:VAL:HG23 1:A:17:LEU:H 24 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG21 1:A:73:SER:H 24 0.05		1:A:13:VAL:HG22	1:A:17:LEU:H	24	0.05
(1,43) 1:A:13:VAL:HG21 1:A:73:SER:H 24 0.05		1:A:13:VAL:HG23	1:A:17:LEU:H	24	0.05
	· · · /	1:A:13:VAL:HG21	1:A:73:SER:H	24	0.05
	(1,43)		1:A:73:SER:H	24	



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

(1,43) 1:A:13:VAL:HG23 1:A:73:SER:H 24 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG21 1:A:18:GLY:H 24 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG22 1:A:18:GLY:H 24 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG23 1:A:18:GLY:H 24 0.05 (1,412) 1:A:45:ARG:HD23 1:A:58:ILE:HA 11 0.05 (1,412) 1:A:45:ARG:HD3 1:A:58:ILE:HA 11 0.05 (1,412) 1:A:45:ARG:HD3 1:A:58:ILE:HG3 19 0.05 (1,394) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:25:ILE:HG13 19 0.05 (1,394) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:21:ASP:HA 20 0.05 (1,391) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:21:ASP:HA 20 0.05 (1,391) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:21:ASP:HA <th></th>	
(1,43) 1:A:13:VAL:HG22 1:A:18:GLY:H 24 0.05 (1,43) 1:A:13:VAL:HG23 1:A:18:GLY:H 24 0.05 (1,412) 1:A:45:ARG:HD2 1:A:58:ILE:HA 11 0.05 (1,412) 1:A:45:ARG:HD3 1:A:58:ILE:HA 11 0.05 (1,412) 1:A:45:ARG:HD2 1:A:58:ILE:HA 11 0.05 (1,412) 1:A:45:ARG:HD3 1:A:58:ILE:HA 11 0.05 (1,412) 1:A:45:ARG:HD3 1:A:58:ILE:HA 11 0.05 (1,394) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:25:ILE:HG13 19 0.05 (1,394) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:25:ILE:HG13 19 0.05 (1,394) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:21:ASP:HA 20 0.05 (1,391) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:21:ASP:HA 20 0.05 (1,391) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:21:ASP:HA 20 0.05 (1,38) 1:A:58:ILE:HG21 1:A:32:ALA:HA 29 0.05 (1,38) 1:A:58:ILE:HG23 1:A:32:ALA:HA	
(1,43) 1:A:13:VAL:HG23 1:A:18:GLY:H 24 0.05 (1,412) 1:A:45:ARG:HD2 1:A:58:ILE:HA 11 0.05 (1,412) 1:A:45:ARG:HD3 1:A:58:ILE:HA 11 0.05 (1,412) 1:A:45:ARG:HD2 1:A:58:ILE:HA 11 0.05 (1,412) 1:A:45:ARG:HD3 1:A:58:ILE:HA 11 0.05 (1,412) 1:A:45:ARG:HD3 1:A:58:ILE:HA 11 0.05 (1,394) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:25:ILE:HG13 19 0.05 (1,394) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:25:ILE:HG13 19 0.05 (1,394) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:21:ASP:HA 20 0.05 (1,391) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:21:ASP:HA 20 0.05 (1,391) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:21:ASP:HA 20 0.05 (1,38) 1:A:58:ILE:HG21 1:A:32:ALA:HA 29 0.05 (1,38) 1:A:58:ILE:HG23 1:A:32:ALA:HA 29 0.05 (1,38) 1:A:58:ILE:HG23 1:A:32:ALA:HA	
(1,412) 1:A:45:ARG:HD2 1:A:58:ILE:HA 11 0.05 (1,412) 1:A:45:ARG:HD3 1:A:58:ILE:HA 11 0.05 (1,412) 1:A:45:ARG:HD2 1:A:58:ILE:HA 11 0.05 (1,412) 1:A:45:ARG:HD3 1:A:58:ILE:HA 11 0.05 (1,394) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:25:ILE:HG13 19 0.05 (1,394) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:25:ILE:HG13 19 0.05 (1,394) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:25:ILE:HG13 19 0.05 (1,394) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:21:ASP:HA 20 0.05 (1,391) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:21:ASP:HA 20 0.05 (1,391) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:21:ASP:HA 20 0.05 (1,38) 1:A:58:ILE:HG21 1:A:32:ALA:HA 29 0.05 (1,38) 1:A:58:ILE:HG23 1:A:32:ALA:HA 29 0.05 (1,38) 1:A:58:ILE:HG23 1:A:32:ALA:HA 29 0.05	
(1,412) 1:A:45:ARG:HD3 1:A:58:ILE:HA 11 0.05 (1,412) 1:A:45:ARG:HD2 1:A:58:ILE:HA 11 0.05 (1,412) 1:A:45:ARG:HD3 1:A:58:ILE:HA 11 0.05 (1,394) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:25:ILE:HG13 19 0.05 (1,394) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:25:ILE:HG13 19 0.05 (1,394) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:25:ILE:HG13 19 0.05 (1,394) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:21:ASP:HA 20 0.05 (1,391) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:21:ASP:HA 20 0.05 (1,391) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:21:ASP:HA 20 0.05 (1,38) 1:A:58:ILE:HG21 1:A:32:ALA:HA 29 0.05 (1,38) 1:A:58:ILE:HG22 1:A:32:ALA:HA 29 0.05 (1,38) 1:A:58:ILE:HG23 1:A:32:ALA:HA 29 0.05	
(1,412) 1:A:45:ARG:HD2 1:A:58:ILE:HA 11 0.05 (1,412) 1:A:45:ARG:HD3 1:A:58:ILE:HA 11 0.05 (1,394) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:25:ILE:HG13 19 0.05 (1,394) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:25:ILE:HG13 19 0.05 (1,394) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:25:ILE:HG13 19 0.05 (1,394) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:21:ASP:HA 20 0.05 (1,391) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:21:ASP:HA 20 0.05 (1,391) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:21:ASP:HA 20 0.05 (1,38) 1:A:58:ILE:HG21 1:A:32:ALA:HA 29 0.05 (1,38) 1:A:58:ILE:HG22 1:A:32:ALA:HA 29 0.05 (1,38) 1:A:58:ILE:HG23 1:A:32:ALA:HA 29 0.05	
(1,412) 1:A:45:ARG:HD3 1:A:58:ILE:HA 11 0.05 (1,394) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:25:ILE:HG13 19 0.05 (1,394) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:25:ILE:HG13 19 0.05 (1,394) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:25:ILE:HG13 19 0.05 (1,394) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:21:ASP:HA 20 0.05 (1,391) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:21:ASP:HA 20 0.05 (1,391) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:21:ASP:HA 20 0.05 (1,38) 1:A:58:ILE:HG21 1:A:32:ALA:HA 29 0.05 (1,38) 1:A:58:ILE:HG22 1:A:32:ALA:HA 29 0.05 (1,38) 1:A:58:ILE:HG23 1:A:32:ALA:HA 29 0.05	
(1,394) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:25:ILE:HG13 19 0.05 (1,394) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:25:ILE:HG13 19 0.05 (1,394) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:25:ILE:HG13 19 0.05 (1,391) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:21:ASP:HA 20 0.05 (1,391) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:21:ASP:HA 20 0.05 (1,391) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:21:ASP:HA 20 0.05 (1,38) 1:A:58:ILE:HG21 1:A:32:ALA:HA 29 0.05 (1,38) 1:A:58:ILE:HG22 1:A:32:ALA:HA 29 0.05 (1,38) 1:A:58:ILE:HG23 1:A:32:ALA:HA 29 0.05	
(1,394) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:25:ILE:HG13 19 0.05 (1,394) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:25:ILE:HG13 19 0.05 (1,391) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:21:ASP:HA 20 0.05 (1,391) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:21:ASP:HA 20 0.05 (1,391) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:21:ASP:HA 20 0.05 (1,38) 1:A:58:ILE:HG21 1:A:32:ALA:HA 29 0.05 (1,38) 1:A:58:ILE:HG22 1:A:32:ALA:HA 29 0.05 (1,38) 1:A:58:ILE:HG23 1:A:32:ALA:HA 29 0.05	
(1,394) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:25:ILE:HG13 19 0.05 (1,391) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:21:ASP:HA 20 0.05 (1,391) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:21:ASP:HA 20 0.05 (1,391) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:21:ASP:HA 20 0.05 (1,38) 1:A:58:ILE:HG21 1:A:32:ALA:HA 29 0.05 (1,38) 1:A:58:ILE:HG22 1:A:32:ALA:HA 29 0.05 (1,38) 1:A:58:ILE:HG23 1:A:32:ALA:HA 29 0.05	
(1,391) 1:A:19:ILE:HG21 1:A:21:ASP:HA 20 0.05 (1,391) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:21:ASP:HA 20 0.05 (1,391) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:21:ASP:HA 20 0.05 (1,38) 1:A:58:ILE:HG21 1:A:32:ALA:HA 29 0.05 (1,38) 1:A:58:ILE:HG22 1:A:32:ALA:HA 29 0.05 (1,38) 1:A:58:ILE:HG23 1:A:32:ALA:HA 29 0.05	
(1,391) 1:A:19:ILE:HG22 1:A:21:ASP:HA 20 0.05 (1,391) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:21:ASP:HA 20 0.05 (1,38) 1:A:58:ILE:HG21 1:A:32:ALA:HA 29 0.05 (1,38) 1:A:58:ILE:HG22 1:A:32:ALA:HA 29 0.05 (1,38) 1:A:58:ILE:HG23 1:A:32:ALA:HA 29 0.05	
(1,391) 1:A:19:ILE:HG23 1:A:21:ASP:HA 20 0.05 (1,38) 1:A:58:ILE:HG21 1:A:32:ALA:HA 29 0.05 (1,38) 1:A:58:ILE:HG22 1:A:32:ALA:HA 29 0.05 (1,38) 1:A:58:ILE:HG23 1:A:32:ALA:HA 29 0.05	
(1,38) 1:A:58:ILE:HG21 1:A:32:ALA:HA 29 0.05 (1,38) 1:A:58:ILE:HG22 1:A:32:ALA:HA 29 0.05 (1,38) 1:A:58:ILE:HG23 1:A:32:ALA:HA 29 0.05	
(1,38) 1:A:58:ILE:HG22 1:A:32:ALA:HA 29 0.05 (1,38) 1:A:58:ILE:HG23 1:A:32:ALA:HA 29 0.05	
(1,38) 1:A:58:ILE:HG23 1:A:32:ALA:HA 29 0.05	
(1.00) 1.4 APTI P. HOO1 1.4 APO APO TIA	
(1,38) 1:A:47:ILE:HG21 1:A:50:ARG:HA 29 0.05	
(1,38) 1:A:47:ILE:HG22 1:A:50:ARG:HA 29 0.05	
(1,38) 1:A:47:ILE:HG23 1:A:50:ARG:HA 29 0.05	
(1,373) 1:A:19:ILE:HB 1:A:19:ILE:H 21 0.05	
(1,363) 1:A:17:LEU:HG 1:A:19:ILE:HG21 3 0.05	
(1,363) 1:A:17:LEU:HG 1:A:19:ILE:HG22 3 0.05	
(1,363) 1:A:17:LEU:HG 1:A:19:ILE:HG23 3 0.05	
(1,363) 1:A:17:LEU:HG 1:A:19:ILE:HG21 22 0.05	
(1,363) 1:A:17:LEU:HG 1:A:19:ILE:HG22 22 0.05	
(1,363) 1:A:17:LEU:HG 1:A:19:ILE:HG23 22 0.05	
(1,315) 1:A:40:MET:HB3 1:A:39:LEU:HD21 16 0.05	
(1,315) 1:A:40:MET:HB3 1:A:39:LEU:HD22 16 0.05	
(1,315) 1:A:40:MET:HB3 1:A:39:LEU:HD23 16 0.05	
(1,315) 1:A:40:MET:HB3 1:A:39:LEU:HD21 22 0.05	
(1,315) 1:A:40:MET:HB3 1:A:39:LEU:HD22 22 0.05	
(1,315) 1:A:40:MET:HB3 1:A:39:LEU:HD23 22 0.05	
(1,306) 1:A:40:MET:HB3 1:A:38:SER:H 18 0.05	
(1,306) 1:A:40:MET:HB3 1:A:38:SER:H 30 0.05	
(1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD11 14 0.05	
(1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD12 14 0.05	
(1,264) 1:A:32:ALA:HA 1:A:34:LEU:HD13 14 0.05	
(1,241) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:64:LEU:HG 14 0.05	
(1,241) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:64:LEU:HG 14 0.05	
(1,241) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:64:LEU:HG 14 0.05	
(1,241) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:64:LEU:HG 20 0.05	



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,241)	1:A:31:LEU:HD12	1:A:64:LEU:HG	20	0.05
(1,241)	1:A:31:LEU:HD13	1:A:64:LEU:HG	20	0.05
(1,229)	1:A:31:LEU:HA	1:A:36:LEU:HD21	6	0.05
(1,229)	1:A:31:LEU:HA	1:A:36:LEU:HD22	6	0.05
(1,229)	1:A:31:LEU:HA	1:A:36:LEU:HD23	6	0.05
(1,221)	1:A:31:LEU:HB2	1:A:36:LEU:HB2	14	0.05
(1,221)	1:A:31:LEU:HB2	1:A:36:LEU:HB2	23	0.05
(1,213)	1:A:30:SER:HB3	1:A:33:ASP:HA	2	0.05
(1,213)	1:A:30:SER:HB3	1:A:33:ASP:HA	3	0.05
(1,213)	1:A:30:SER:HB3	1:A:33:ASP:HA	9	0.05
(1,213)	1:A:30:SER:HB3	1:A:33:ASP:HA	22	0.05
(1,177)	1:A:22:LEU:HD11	1:A:24:GLY:HA2	15	0.05
(1,177)	1:A:22:LEU:HD12	1:A:24:GLY:HA2	15	0.05
(1,177)	1:A:22:LEU:HD13	1:A:24:GLY:HA2	15	0.05
(1,177)	1:A:22:LEU:HD11	1:A:24:GLY:HA2	22	0.05
(1,177)	1:A:22:LEU:HD12	1:A:24:GLY:HA2	22	0.05
(1,177)	1:A:22:LEU:HD13	1:A:24:GLY:HA2	22	0.05
(1,177)	1:A:22:LEU:HD11	1:A:24:GLY:HA2	23	0.05
(1,177)	1:A:22:LEU:HD12	1:A:24:GLY:HA2	23	0.05
(1,177)	1:A:22:LEU:HD13	1:A:24:GLY:HA2	23	0.05
(1,1732)	1:A:32:ALA:H	1:A:65:THR:HG21	3	0.05
(1,1732)	1:A:32:ALA:H	1:A:65:THR:HG22	3	0.05
(1,1732)	1:A:32:ALA:H	1:A:65:THR:HG23	3	0.05
(1,1732)	1:A:32:ALA:H	1:A:65:THR:HG21	7	0.05
(1,1732)	1:A:32:ALA:H	1:A:65:THR:HG22	7	0.05
(1,1732)	1:A:32:ALA:H	1:A:65:THR:HG23	7	0.05
(1,1732)	1:A:32:ALA:H	1:A:65:THR:HG21	15	0.05
(1,1732)	1:A:32:ALA:H	1:A:65:THR:HG22	15	0.05
(1,1732)	1:A:32:ALA:H	1:A:65:THR:HG23	15	0.05
(1,1710)	1:A:63:GLN:H	1:A:64:LEU:H	5	0.05
(1,1710)	1:A:63:GLN:H	1:A:64:LEU:H	7	0.05
(1,1710)	1:A:63:GLN:H	1:A:64:LEU:H	8	0.05
(1,1710)	1:A:63:GLN:H	1:A:64:LEU:H	18	0.05
(1,1710)	1:A:63:GLN:H	1:A:64:LEU:H	21	0.05
(1,1710)	1:A:63:GLN:H	1:A:64:LEU:H	22	0.05
(1,1710)	1:A:63:GLN:H	1:A:64:LEU:H	25	0.05
(1,171)	1:A:22:LEU:HG	1:A:21:ASP:HA	22	0.05
(1,1701)	1:A:47:ILE:H	1:A:48:LEU:H	1	0.05
(1,1701)	1:A:47:ILE:H	1:A:48:LEU:H	15	0.05
(1,1701)	1:A:47:ILE:H	1:A:48:LEU:H	28	0.05
(1,1692)	1:A:33:ASP:H	1:A:36:LEU:H	17	0.05
(1,1631)	1:A:73:SER:HB2	1:A:10:VAL:HG21	1	0.05



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1631)	1:A:73:SER:HB2	1:A:10:VAL:HG22	1	0.05
(1,1631)	1:A:73:SER:HB2	1:A:10:VAL:HG23	1	0.05
(1,1631)	1:A:73:SER:HB2	1:A:10:VAL:HG21	2	0.05
(1,1631)	1:A:73:SER:HB2	1:A:10:VAL:HG22	2	0.05
(1,1631)	1:A:73:SER:HB2	1:A:10:VAL:HG23	2	0.05
(1,1631)	1:A:73:SER:HB2	1:A:10:VAL:HG21	26	0.05
(1,1631)	1:A:73:SER:HB2	1:A:10:VAL:HG22	26	0.05
(1,1631)	1:A:73:SER:HB2	1:A:10:VAL:HG23	26	0.05
(1,1631)	1:A:73:SER:HB2	1:A:10:VAL:HG21	28	0.05
(1,1631)	1:A:73:SER:HB2	1:A:10:VAL:HG22	28	0.05
(1,1631)	1:A:73:SER:HB2	1:A:10:VAL:HG23	28	0.05
(1,1628)	1:A:73:SER:HB2	1:A:9:LEU:HD11	13	0.05
(1,1628)	1:A:73:SER:HB2	1:A:9:LEU:HD12	13	0.05
(1,1628)	1:A:73:SER:HB2	1:A:9:LEU:HD13	13	0.05
(1,1618)	1:A:58:ILE:HG12	1:A:59:ARG:HD2	24	0.05
(1,1618)	1:A:58:ILE:HG12	1:A:59:ARG:HD3	24	0.05
(1,1599)	1:A:36:LEU:HD11	1:A:40:MET:HG2	11	0.05
(1,1599)	1:A:36:LEU:HD12	1:A:40:MET:HG2	11	0.05
(1,1599)	1:A:36:LEU:HD13	1:A:40:MET:HG2	11	0.05
(1,1593)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:29:SER:HA	18	0.05
(1,1593)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:29:SER:HA	18	0.05
(1,1593)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:29:SER:HA	18	0.05
(1,1586)	1:A:7:ARG:HG2	1:A:75:LYS:HE2	23	0.05
(1,1586)	1:A:7:ARG:HG2	1:A:75:LYS:HE3	23	0.05
(1,1586)	1:A:7:ARG:HG3	1:A:75:LYS:HE2	23	0.05
(1,1586)	1:A:7:ARG:HG3	1:A:75:LYS:HE3	23	0.05
(1,1579)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:11:LYS:HE2	19	0.05
(1,1579)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:11:LYS:HE3	19	0.05
(1,1579)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:11:LYS:HE2	19	0.05
(1,1579)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:11:LYS:HE3	19	0.05
(1,1579)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:11:LYS:HE2	19	0.05
(1,1579)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:11:LYS:HE3	19	0.05
(1,1576)	1:A:66:LEU:HD11	1:A:65:THR:HA	5	0.05
(1,1576)	1:A:66:LEU:HD12	1:A:65:THR:HA	5	0.05
(1,1576)	1:A:66:LEU:HD13	1:A:65:THR:HA	5	0.05
(1,1576)	1:A:66:LEU:HD11	1:A:65:THR:HA	10	0.05
(1,1576)	1:A:66:LEU:HD12	1:A:65:THR:HA	10	0.05
(1,1576)	1:A:66:LEU:HD13	1:A:65:THR:HA	10	0.05
(1,1576)	1:A:66:LEU:HD11	1:A:65:THR:HA	16	0.05
(1,1576)	1:A:66:LEU:HD12	1:A:65:THR:HA	16	0.05
(1,1576)	1:A:66:LEU:HD13	1:A:65:THR:HA	16	0.05
(1,1576)	1:A:66:LEU:HD11	1:A:65:THR:HA	19 Continue	0.05



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1576)	1:A:66:LEU:HD12	1:A:65:THR:HA	19	0.05
(1,1576)	1:A:66:LEU:HD13	1:A:65:THR:HA	19	0.05
(1,1576)	1:A:66:LEU:HD11	1:A:65:THR:HA	23	0.05
(1,1576)	1:A:66:LEU:HD12	1:A:65:THR:HA	23	0.05
(1,1576)	1:A:66:LEU:HD13	1:A:65:THR:HA	23	0.05
(1,1576)	1:A:66:LEU:HD11	1:A:65:THR:HA	24	0.05
(1,1576)	1:A:66:LEU:HD12	1:A:65:THR:HA	24	0.05
(1,1576)	1:A:66:LEU:HD13	1:A:65:THR:HA	24	0.05
(1,1576)	1:A:66:LEU:HD11	1:A:65:THR:HA	25	0.05
(1,1576)	1:A:66:LEU:HD12	1:A:65:THR:HA	25	0.05
(1,1576)	1:A:66:LEU:HD13	1:A:65:THR:HA	25	0.05
(1,1576)	1:A:66:LEU:HD11	1:A:65:THR:HA	26	0.05
(1,1576)	1:A:66:LEU:HD12	1:A:65:THR:HA	26	0.05
(1,1576)	1:A:66:LEU:HD13	1:A:65:THR:HA	26	0.05
(1,1576)	1:A:66:LEU:HD11	1:A:65:THR:HA	27	0.05
(1,1576)	1:A:66:LEU:HD12	1:A:65:THR:HA	27	0.05
(1,1576)	1:A:66:LEU:HD13	1:A:65:THR:HA	27	0.05
(1,1575)	1:A:66:LEU:HD11	1:A:13:VAL:H	10	0.05
(1,1575)	1:A:66:LEU:HD12	1:A:13:VAL:H	10	0.05
(1,1575)	1:A:66:LEU:HD13	1:A:13:VAL:H	10	0.05
(1,1553)	1:A:19:ILE:HG21	1:A:26:ASN:H	2	0.05
(1,1553)	1:A:19:ILE:HG22	1:A:26:ASN:H	2	0.05
(1,1553)	1:A:19:ILE:HG23	1:A:26:ASN:H	2	0.05
(1,1552)	1:A:19:ILE:HG21	1:A:24:GLY:H	10	0.05
(1,1552)	1:A:19:ILE:HG22	1:A:24:GLY:H	10	0.05
(1,1552)	1:A:19:ILE:HG23	1:A:24:GLY:H	10	0.05
(1,1552)	1:A:19:ILE:HG21	1:A:24:GLY:H	17	0.05
(1,1552)	1:A:19:ILE:HG22	1:A:24:GLY:H	17	0.05
(1,1552)	1:A:19:ILE:HG23	1:A:24:GLY:H	17	0.05
(1,1551)	1:A:19:ILE:HG21	1:A:17:LEU:H	7	0.05
(1,1551)	1:A:19:ILE:HG22	1:A:17:LEU:H	7	0.05
(1,1551)	1:A:19:ILE:HG23	1:A:17:LEU:H	7	0.05
(1,1547)	1:A:44:VAL:HG11	1:A:40:MET:HA	7	0.05
(1,1547)	1:A:44:VAL:HG12	1:A:40:MET:HA	7	0.05
(1,1547)	1:A:44:VAL:HG13	1:A:40:MET:HA	7	0.05
(1,1547)	1:A:44:VAL:HG11	1:A:40:MET:HA	16	0.05
(1,1547)	1:A:44:VAL:HG12	1:A:40:MET:HA	16	0.05
(1,1547)	1:A:44:VAL:HG13	1:A:40:MET:HA	16	0.05
(1,1546)	1:A:44:VAL:HG11	1:A:42:VAL:HA	14	0.05
(1,1546)	1:A:44:VAL:HG12	1:A:42:VAL:HA	14	0.05
(1,1546)	1:A:44:VAL:HG13	1:A:42:VAL:HA	14	0.05
(1,1546)	1:A:44:VAL:HG11	1:A:42:VAL:HA	15	0.05



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1546)	1:A:44:VAL:HG12	1:A:42:VAL:HA	15	0.05
(1,1546)	1:A:44:VAL:HG13	1:A:42:VAL:HA	15	0.05
(1,1546)	1:A:44:VAL:HG11	1:A:42:VAL:HA	24	0.05
(1,1546)	1:A:44:VAL:HG12	1:A:42:VAL:HA	24	0.05
(1,1546)	1:A:44:VAL:HG13	1:A:42:VAL:HA	24	0.05
(1,1546)	1:A:44:VAL:HG11	1:A:42:VAL:HA	30	0.05
(1,1546)	1:A:44:VAL:HG12	1:A:42:VAL:HA	30	0.05
(1,1546)	1:A:44:VAL:HG13	1:A:42:VAL:HA	30	0.05
(1,1545)	1:A:44:VAL:HG21	1:A:45:ARG:HE	5	0.05
(1,1545)	1:A:44:VAL:HG22	1:A:45:ARG:HE	5	0.05
(1,1545)	1:A:44:VAL:HG23	1:A:45:ARG:HE	5	0.05
(1,1545)	1:A:44:VAL:HG21	1:A:45:ARG:HE	17	0.05
(1,1545)	1:A:44:VAL:HG22	1:A:45:ARG:HE	17	0.05
(1,1545)	1:A:44:VAL:HG23	1:A:45:ARG:HE	17	0.05
(1,1545)	1:A:44:VAL:HG21	1:A:45:ARG:HE	21	0.05
(1,1545)	1:A:44:VAL:HG22	1:A:45:ARG:HE	21	0.05
(1,1545)	1:A:44:VAL:HG23	1:A:45:ARG:HE	21	0.05
(1,1545)	1:A:44:VAL:HG21	1:A:45:ARG:HE	28	0.05
(1,1545)	1:A:44:VAL:HG22	1:A:45:ARG:HE	28	0.05
(1,1545)	1:A:44:VAL:HG23	1:A:45:ARG:HE	28	0.05
(1,1523)	1:A:73:SER:HA	1:A:70:GLN:H	14	0.05
(1,1523)	1:A:73:SER:HA	1:A:70:GLN:H	23	0.05
(1,1523)	1:A:73:SER:HA	1:A:70:GLN:H	27	0.05
(1,1505)	1:A:55:VAL:HG11	1:A:59:ARG:HD2	5	0.05
(1,1505)	1:A:55:VAL:HG11	1:A:59:ARG:HD3	5	0.05
(1,1505)	1:A:55:VAL:HG12	1:A:59:ARG:HD2	5	0.05
(1,1505)	1:A:55:VAL:HG12	1:A:59:ARG:HD3	5	0.05
(1,1505)	1:A:55:VAL:HG13	1:A:59:ARG:HD2	5	0.05
(1,1505)	1:A:55:VAL:HG13	1:A:59:ARG:HD3	5	0.05
(1,1498)	1:A:67:ARG:HD2	1:A:69:LEU:H	8	0.05
(1,1498)	1:A:67:ARG:HD2	1:A:69:LEU:H	13	0.05
(1,1498)	1:A:67:ARG:HD2	1:A:69:LEU:H	22	0.05
(1,1498)	1:A:67:ARG:HD2	1:A:69:LEU:H	28	0.05
(1,1497)	1:A:65:THR:HG21	1:A:63:GLN:HB2	19	0.05
(1,1497)	1:A:65:THR:HG22	1:A:63:GLN:HB2	19	0.05
(1,1497)	1:A:65:THR:HG23	1:A:63:GLN:HB2	19	0.05
(1,1494)	1:A:46:GLN:HG2	1:A:50:ARG:HD2	30	0.05
(1,1494)	1:A:46:GLN:HG2	1:A:50:ARG:HD3	30	0.05
(1,1493)	1:A:46:GLN:HG3	1:A:50:ARG:HD2	4	0.05
(1,1493)	1:A:46:GLN:HG3	1:A:50:ARG:HD3	4	0.05
(1,1493)	1:A:46:GLN:HG3	1:A:50:ARG:HD2	29	0.05
(1,1493)	1:A:46:GLN:HG3	1:A:50:ARG:HD3	29	0.05



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1491)	1:A:42:VAL:HG21	1:A:46:GLN:HG2	17	0.05
(1,1491)	1:A:42:VAL:HG22	1:A:46:GLN:HG2	17	0.05
(1,1491)	1:A:42:VAL:HG23	1:A:46:GLN:HG2	17	0.05
(1,1484)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:19:ILE:HB	3	0.05
(1,1484)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:19:ILE:HB	3	0.05
(1,1484)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:19:ILE:HB	3	0.05
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:13:VAL:HG11	2	0.05
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:13:VAL:HG12	2	0.05
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:13:VAL:HG13	2	0.05
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:13:VAL:HG11	2	0.05
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:13:VAL:HG12	2	0.05
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:13:VAL:HG13	2	0.05
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:13:VAL:HG11	2	0.05
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:13:VAL:HG12	2	0.05
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:13:VAL:HG13	2	0.05
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:13:VAL:HG11	6	0.05
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:13:VAL:HG12	6	0.05
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:13:VAL:HG13	6	0.05
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:13:VAL:HG11	6	0.05
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:13:VAL:HG12	6	0.05
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:13:VAL:HG13	6	0.05
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:13:VAL:HG11	6	0.05
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:13:VAL:HG12	6	0.05
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:13:VAL:HG13	6	0.05
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:13:VAL:HG11	12	0.05
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:13:VAL:HG12	12	0.05
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:13:VAL:HG13	12	0.05
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:13:VAL:HG11	12	0.05
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:13:VAL:HG12	12	0.05
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:13:VAL:HG13	12	0.05
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:13:VAL:HG11	12	0.05
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:13:VAL:HG12	12	0.05
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:13:VAL:HG13	12	0.05
(1,1447)	1:A:13:VAL:HG11	1:A:17:LEU:HG	16	0.05
(1,1447)	1:A:13:VAL:HG12	1:A:17:LEU:HG	16	0.05
(1,1447)	1:A:13:VAL:HG13	1:A:17:LEU:HG	16	0.05
(1,1402)	1:A:42:VAL:HA	1:A:45:ARG:HB3	2	0.05
(1,1402)	1:A:42:VAL:HA	1:A:45:ARG:HB3	7	0.05
(1,1402)	1:A:42:VAL:HA	1:A:45:ARG:HB3	8	0.05
(1,1402)	1:A:42:VAL:HA	1:A:45:ARG:HB3	16	0.05
(1,1402)	1:A:42:VAL:HA	1:A:45:ARG:HB3	23	0.05
(1,1393)	1:A:44:VAL:HA	1:A:48:LEU:HG	28	0.05



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1354)	1:A:69:LEU:HD21	1:A:67:ARG:HD3	15	0.05
, ,	1:A:69:LEU:HD22	1:A:67:ARG:HD3	15	0.05
(1,1354)	1:A:69:LEU:HD23	1:A:67:ARG:HD3	15	0.05
(1,1303)	1:A:64:LEU:HB2	1:A:31:LEU:HB3	11	0.05
(1,1296)	1:A:63:GLN:HA	1:A:32:ALA:HB1	27	0.05
(1,1296)	1:A:63:GLN:HA	1:A:32:ALA:HB2	27	0.05
(1,1296)	1:A:63:GLN:HA	1:A:32:ALA:HB3	27	0.05
(1,1221)	1:A:58:ILE:HG21	1:A:57:PRO:HB3	9	0.05
(1,1221)	1:A:58:ILE:HG22	1:A:57:PRO:HB3	9	0.05
(1,1221)	1:A:58:ILE:HG23	1:A:57:PRO:HB3	9	0.05
(1,1204)	1:A:58:ILE:HA	1:A:61:VAL:HB	28	0.05
(1,1195)	1:A:56:LEU:HG	1:A:56:LEU:H	14	0.05
(1,1183)	1:A:56:LEU:HB2	1:A:57:PRO:HB2	7	0.05
(1,1183)	1:A:56:LEU:HB2	1:A:57:PRO:HG2	7	0.05
(1,1183)	1:A:56:LEU:HB2	1:A:57:PRO:HB2	28	0.05
(1,1183)	1:A:56:LEU:HB2	1:A:57:PRO:HG2	28	0.05
(1,1183)	1:A:56:LEU:HB2	1:A:57:PRO:HB2	29	0.05
(1,1183)	1:A:56:LEU:HB2	1:A:57:PRO:HG2	29	0.05
(1,1172)	1:A:55:VAL:HA	1:A:57:PRO:HG3	1	0.05
(1,1163)	1:A:54:LEU:HD11	1:A:51:GLU:HB2	8	0.05
(1,1163)	1:A:54:LEU:HD12	1:A:51:GLU:HB2	8	0.05
(1,1163)	1:A:54:LEU:HD13	1:A:51:GLU:HB2	8	0.05
(1,1163)	1:A:54:LEU:HD11	1:A:51:GLU:HB2	30	0.05
(1,1163)	1:A:54:LEU:HD12	1:A:51:GLU:HB2	30	0.05
(1,1163)	1:A:54:LEU:HD13	1:A:51:GLU:HB2	30	0.05
(1,1161)	1:A:54:LEU:HD11	1:A:52:HIS:HB3	13	0.05
(1,1161)	1:A:54:LEU:HD12	1:A:52:HIS:HB3	13	0.05
(1,1161)	1:A:54:LEU:HD13	1:A:52:HIS:HB3	13	0.05
(1,1161)	1:A:54:LEU:HD11	1:A:52:HIS:HB3	18	0.05
(1,1161)	1:A:54:LEU:HD12	1:A:52:HIS:HB3	18	0.05
(1,1161)	1:A:54:LEU:HD13	1:A:52:HIS:HB3	18	0.05
(1,1160)	1:A:54:LEU:HD11	1:A:54:LEU:HA	17	0.05
(1,1160)	1:A:54:LEU:HD12	1:A:54:LEU:HA	17	0.05
(1,1160)	1:A:54:LEU:HD13	1:A:54:LEU:HA	17	0.05
(1,1158)	1:A:54:LEU:HB3	1:A:48:LEU:HB3	4	0.05
(1,1158)	1:A:54:LEU:HB3	1:A:48:LEU:HB3	21	0.05
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD11	1:A:44:VAL:HG21	15	0.05
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD11	1:A:44:VAL:HG22	15	0.05
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD11	1:A:44:VAL:HG23	15	0.05
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD12	1:A:44:VAL:HG21	15	0.05
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD12	1:A:44:VAL:HG22	15	0.05
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD12	1:A:44:VAL:HG23	15	0.05



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD13	1:A:44:VAL:HG21	15	0.05
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD13	1:A:44:VAL:HG22	15	0.05
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD13	1:A:44:VAL:HG23	15	0.05
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD11	1:A:44:VAL:HG21	25	0.05
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD11	1:A:44:VAL:HG22	25	0.05
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD11	1:A:44:VAL:HG23	25	0.05
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD12	1:A:44:VAL:HG21	25	0.05
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD12	1:A:44:VAL:HG22	25	0.05
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD12	1:A:44:VAL:HG23	25	0.05
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD13	1:A:44:VAL:HG21	25	0.05
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD13	1:A:44:VAL:HG22	25	0.05
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD13	1:A:44:VAL:HG23	25	0.05
(1,1037)	1:A:36:LEU:HB3	1:A:40:MET:HA	24	0.05
(1,1017)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:31:LEU:HA	22	0.05
(1,1017)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:31:LEU:HA	22	0.05
(1,1017)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:31:LEU:HA	22	0.05
(1,1016)	1:A:34:LEU:HD11	1:A:29:SER:H	11	0.05
(1,1016)	1:A:34:LEU:HD12	1:A:29:SER:H	11	0.05
(1,1016)	1:A:34:LEU:HD13	1:A:29:SER:H	11	0.05
(1,1016)	1:A:34:LEU:HD11	1:A:29:SER:H	30	0.05
(1,1016)	1:A:34:LEU:HD12	1:A:29:SER:H	30	0.05
(1,1016)	1:A:34:LEU:HD13	1:A:29:SER:H	30	0.05
(1,999)	1:A:33:ASP:HB3	1:A:35:GLY:H	6	0.04
(1,996)	1:A:33:ASP:HB2	1:A:29:SER:HB2	16	0.04
(1,972)	1:A:27:LEU:HD21	1:A:70:GLN:HE21	6	0.04
(1,972)	1:A:27:LEU:HD22	1:A:70:GLN:HE21	6	0.04
(1,972)	1:A:27:LEU:HD23	1:A:70:GLN:HE21	6	0.04
(1,972)	1:A:27:LEU:HD21	1:A:70:GLN:HE21	10	0.04
(1,972)	1:A:27:LEU:HD22	1:A:70:GLN:HE21	10	0.04
(1,972)	1:A:27:LEU:HD23	1:A:70:GLN:HE21	10	0.04
(1,972)	1:A:27:LEU:HD21	1:A:70:GLN:HE21	18	0.04
(1,972)	1:A:27:LEU:HD22	1:A:70:GLN:HE21	18	0.04
(1,972)	1:A:27:LEU:HD23	1:A:70:GLN:HE21	18	0.04
(1,971)	1:A:27:LEU:HD11	1:A:25:ILE:H	22	0.04
(1,971)	1:A:27:LEU:HD12	1:A:25:ILE:H	22	0.04
(1,971)	1:A:27:LEU:HD13	1:A:25:ILE:H	22	0.04
(1,971)	1:A:27:LEU:HD11	1:A:25:ILE:H	29	0.04
(1,971)	1:A:27:LEU:HD12	1:A:25:ILE:H	29	0.04
(1,971)	1:A:27:LEU:HD13	1:A:25:ILE:H	29	0.04
(1,97)	1:A:52:HIS:HB2	1:A:54:LEU:HB3	8	0.04
(1,939)	1:A:57:PRO:HD2	1:A:60:GLU:HG2	15	0.04
(1,939)	1:A:57:PRO:HD2	1:A:60:GLU:HG3	15	0.04



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

(1,862) 1:A:10:VAL:HA 1:A:9:LEU:HD21 1 0.04 (1,862) 1:A:10:VAL:HA 1:A:9:LEU:HD22 1 0.04 (1,862) 1:A:10:VAL:HA 1:A:9:LEU:HD23 1 0.04 (1,862) 1:A:10:VAL:HA 1:A:9:LEU:HD21 23 0.04 (1,862) 1:A:10:VAL:HA 1:A:9:LEU:HD22 23 0.04 (1,862) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HD23 23 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 20 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 20 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 20 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 20 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 23 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 23 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 23 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 24	
(1,862) 1:A:10:VAL:HA 1:A:9:LEU:HD23 1 0.04 (1,862) 1:A:10:VAL:HA 1:A:9:LEU:HD21 23 0.04 (1,862) 1:A:10:VAL:HA 1:A:9:LEU:HD22 23 0.04 (1,862) 1:A:10:VAL:HA 1:A:9:LEU:HD23 23 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 20 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 20 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 20 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 20 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 23 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 23 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 23 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 24 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 24 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 28	
(1,862) 1:A:10:VAL:HA 1:A:9:LEU:HD21 23 0.04 (1,862) 1:A:10:VAL:HA 1:A:9:LEU:HD22 23 0.04 (1,862) 1:A:10:VAL:HA 1:A:9:LEU:HD23 23 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 20 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 20 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 20 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 20 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 23 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 23 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 23 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 24 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 24 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 28 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 28	
(1,862) 1:A:10:VAL:HA 1:A:9:LEU:HD22 23 0.04 (1,862) 1:A:10:VAL:HA 1:A:9:LEU:HD23 23 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 20 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 20 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 20 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:73:LEU:HB3 23 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 23 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 23 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:73:ARG:HG3 23 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:73-RG:HG3 24 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:73-RG:HG3 24 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:73-RG:HG3 28 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:73-RG:HG3 28 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:73-RG:HG3 28	
(1,862) 1:A:10:VAL:HA 1:A:9:LEU:HD23 23 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 20 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 20 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 20 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 20 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 23 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 23 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 23 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 24 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 24 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 24 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 28 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 28 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 30	
(1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 20 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 20 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 20 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 23 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 23 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 23 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 23 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 24 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 24 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 24 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 28 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 28 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 30 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 30	
(1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 20 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 20 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 23 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 23 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 23 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 24 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 24 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 24 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 24 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 28 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 28 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 30 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 30 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 30	
(1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 20 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 23 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 23 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 23 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 24 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 24 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 24 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 24 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 28 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 28 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 28 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 30 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 30 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 30	
(1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 23 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 23 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 23 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 24 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 24 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 24 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 28 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 28 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 28 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 28 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 30 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 30 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 30 0.04 (1,82) 1:A:65:THR:HA 1:A:7:ARG:HG3 30	
(1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 23 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 23 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 24 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 24 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 24 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 28 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 28 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 28 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 30 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 30 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 30 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 30 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 25 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 26	
(1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 23 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 24 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 24 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 24 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 28 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 28 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 28 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 30 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 30 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 30 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 30 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 25 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 25 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 26 <td></td>	
(1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 24 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 24 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 24 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 28 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 28 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 30 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 30 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 30 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 30 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 30 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 25 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 25 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 26 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 26 </td <td></td>	
(1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 24 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 24 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 28 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 28 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 28 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 30 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 30 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 30 0.04 (1,82) 1:A:65:THR:HA 1:A:7:ARG:HG3 30 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 25 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 25 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 26 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 26 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 26<	
(1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 24 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 28 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 28 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 28 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 30 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 30 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 30 0.04 (1,82) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 25 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 25 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 26 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 26 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 26 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 26 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 <td< td=""><td></td></td<>	
(1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 28 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 28 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 28 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 30 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 30 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 30 0.04 (1,80) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 25 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 25 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 26 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 26 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 <	
(1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 28 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 28 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 30 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 30 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 30 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 25 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 25 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 25 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 26 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 26 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 26 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 26 0.04 (1,755) 1:A:70:GLN:HG2 1:A:10:VAL:HG21 3 0.04	
(1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 28 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 30 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 30 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 30 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 25 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 25 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 25 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 26 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 26 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 26 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 26 0.04 (1,755) 1:A:70:GLN:HG2 1:A:10:VAL:HG21 3 0.04	
(1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 30 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 30 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 30 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 25 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 25 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 25 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 26 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 26 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 26 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 26 0.04 (1,755) 1:A:70:GLN:HG2 1:A:10:VAL:HG21 3 0.04	
(1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 30 0.04 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 30 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 25 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 25 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 25 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 26 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 26 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 26 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 26 0.04 (1,755) 1:A:70:GLN:HG2 1:A:10:VAL:HG21 3 0.04	
(1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 30 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 25 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 25 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 25 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 26 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 26 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 26 0.04 (1,755) 1:A:70:GLN:HG2 1:A:10:VAL:HG21 3 0.04	
(1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 25 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 25 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 25 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 26 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 26 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 26 0.04 (1,755) 1:A:70:GLN:HG2 1:A:10:VAL:HG21 3 0.04	
(1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 25 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 25 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 26 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 26 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 26 0.04 (1,755) 1:A:70:GLN:HG2 1:A:10:VAL:HG21 3 0.04	
(1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 25 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 26 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 26 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 26 0.04 (1,801) 1:A:70:GLN:HG2 1:A:10:VAL:HG21 3 0.04	
(1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 26 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 26 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 26 0.04 (1,755) 1:A:70:GLN:HG2 1:A:10:VAL:HG21 3 0.04	
(1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 26 0.04 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 26 0.04 (1,755) 1:A:70:GLN:HG2 1:A:10:VAL:HG21 3 0.04	
(1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 26 0.04 (1,755) 1:A:70:GLN:HG2 1:A:10:VAL:HG21 3 0.04	
(1,755) 1:A:70:GLN:HG2 1:A:10:VAL:HG21 3 0.04	
(1,755) 1:A:70:GLN:HG2 1:A:10:VAL:HG22 3 0.04	
(1,755) 1:A:70:GLN:HG2 1:A:10:VAL:HG23 3 0.04	
(1,754) 1:A:70:GLN:HG3 1:A:72:MET:H 7 0.04	
(1,740) 1:A:70:GLN:HA 1:A:10:VAL:HG21 21 0.04	
(1,740) 1:A:70:GLN:HA 1:A:10:VAL:HG22 21 0.04	
(1,740) 1:A:70:GLN:HA 1:A:10:VAL:HG23 21 0.04	
(1,732) 1:A:63:GLN:HG3 1:A:60:GLU:HA 12 0.04	
(1,732) 1:A:63:GLN:HG3 1:A:60:GLU:HA 14 0.04	
(1,732) 1:A:63:GLN:HG3 1:A:60:GLU:HA 25 0.04	
(1,715) 1:A:63:GLN:HB3 1:A:60:GLU:HA 16 0.04	
(1,715) 1:A:63:GLN:HB3 1:A:60:GLU:HA 27 0.04	
(1,706) 1:A:59:ARG:HD2 1:A:59:ARG:H 3 0.04	
(1,706) 1:A:59:ARG:HD3 1:A:59:ARG:H 3 0.04	
(1,706) 1:A:59:ARG:HD2 1:A:59:ARG:H 11 0.04	



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,706)	1:A:59:ARG:HD3	1:A:59:ARG:H	11	0.04
(1,706)	1:A:59:ARG:HD2	1:A:59:ARG:H	12	0.04
(1,706)	1:A:59:ARG:HD3	1:A:59:ARG:H	12	0.04
(1,706)	1:A:59:ARG:HD2	1:A:59:ARG:H	15	0.04
(1,706)	1:A:59:ARG:HD3	1:A:59:ARG:H	15	0.04
(1,706)	1:A:59:ARG:HD2	1:A:59:ARG:H	17	0.04
(1,706)	1:A:59:ARG:HD3	1:A:59:ARG:H	17	0.04
(1,706)	1:A:59:ARG:HD2	1:A:59:ARG:H	26	0.04
(1,706)	1:A:59:ARG:HD3	1:A:59:ARG:H	26	0.04
(1,70)	1:A:9:LEU:HD21	1:A:72:MET:H	28	0.04
(1,70)	1:A:9:LEU:HD22	1:A:72:MET:H	28	0.04
(1,70)	1:A:9:LEU:HD23	1:A:72:MET:H	28	0.04
(1,70)	1:A:9:LEU:HD21	1:A:71:GLU:H	28	0.04
(1,70)	1:A:9:LEU:HD22	1:A:71:GLU:H	28	0.04
(1,70)	1:A:9:LEU:HD23	1:A:71:GLU:H	28	0.04
(1,691)	1:A:43:GLU:HB2	1:A:47:ILE:HD11	26	0.04
(1,691)	1:A:43:GLU:HB2	1:A:47:ILE:HD12	26	0.04
(1,691)	1:A:43:GLU:HB2	1:A:47:ILE:HD13	26	0.04
(1,673)	1:A:43:GLU:HA	1:A:39:LEU:HD21	26	0.04
(1,673)	1:A:43:GLU:HA	1:A:39:LEU:HD22	26	0.04
(1,673)	1:A:43:GLU:HA	1:A:39:LEU:HD23	26	0.04
(1,662)	1:A:49:GLU:HA	1:A:46:GLN:HA	1	0.04
(1,662)	1:A:49:GLU:HA	1:A:46:GLN:HA	3	0.04
(1,662)	1:A:49:GLU:HA	1:A:46:GLN:HA	29	0.04
(1,607)	1:A:67:ARG:HA	1:A:67:ARG:HD3	12	0.04
(1,593)	1:A:66:LEU:HD11	1:A:66:LEU:HA	16	0.04
(1,593)	1:A:66:LEU:HD12	1:A:66:LEU:HA	16	0.04
(1,593)	1:A:66:LEU:HD13	1:A:66:LEU:HA	16	0.04
(1,593)	1:A:66:LEU:HD11	1:A:66:LEU:HA	28	0.04
(1,593)	1:A:66:LEU:HD12	1:A:66:LEU:HA	28	0.04
(1,593)	1:A:66:LEU:HD13	1:A:66:LEU:HA	28	0.04
(1,59)	1:A:36:LEU:HD11	1:A:64:LEU:HB2	26	0.04
(1,59)	1:A:36:LEU:HD12	1:A:64:LEU:HB2	26	0.04
(1,59)	1:A:36:LEU:HD13	1:A:64:LEU:HB2	26	0.04
(1,59)	1:A:66:LEU:HD21	1:A:64:LEU:HB2	26	0.04
(1,59)	1:A:66:LEU:HD22	1:A:64:LEU:HB2	26	0.04
(1,59)	1:A:66:LEU:HD23	1:A:64:LEU:HB2	26	0.04
(1,58)	1:A:66:LEU:HD21	1:A:10:VAL:HB	14	0.04
(1,58)	1:A:66:LEU:HD22	1:A:10:VAL:HB	14	0.04
(1,58)	1:A:66:LEU:HD23	1:A:10:VAL:HB	14	0.04
(1,58)	1:A:36:LEU:HD11	1:A:43:GLU:HB2	14	0.04
(1,58)	1:A:36:LEU:HD12	1:A:43:GLU:HB2	14	0.04



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,58)	1:A:36:LEU:HD13	1:A:43:GLU:HB2	14	0.04
(1,58)	1:A:66:LEU:HD21	1:A:10:VAL:HB	16	0.04
(1,58)	1:A:66:LEU:HD22	1:A:10:VAL:HB	16	0.04
(1,58)	1:A:66:LEU:HD23	1:A:10:VAL:HB	16	0.04
(1,58)	1:A:36:LEU:HD11	1:A:43:GLU:HB2	16	0.04
(1,58)	1:A:36:LEU:HD12	1:A:43:GLU:HB2	16	0.04
(1,58)	1:A:36:LEU:HD13	1:A:43:GLU:HB2	16	0.04
(1,536)	1:A:25:ILE:HD11	1:A:14:ALA:HB1	8	0.04
(1,536)	1:A:25:ILE:HD11	1:A:14:ALA:HB2	8	0.04
(1,536)	1:A:25:ILE:HD11	1:A:14:ALA:HB3	8	0.04
(1,536)	1:A:25:ILE:HD12	1:A:14:ALA:HB1	8	0.04
(1,536)	1:A:25:ILE:HD12	1:A:14:ALA:HB2	8	0.04
(1,536)	1:A:25:ILE:HD12	1:A:14:ALA:HB3	8	0.04
(1,536)	1:A:25:ILE:HD13	1:A:14:ALA:HB1	8	0.04
(1,536)	1:A:25:ILE:HD13	1:A:14:ALA:HB2	8	0.04
(1,536)	1:A:25:ILE:HD13	1:A:14:ALA:HB3	8	0.04
(1,536)	1:A:25:ILE:HD11	1:A:14:ALA:HB1	15	0.04
(1,536)	1:A:25:ILE:HD11	1:A:14:ALA:HB2	15	0.04
(1,536)	1:A:25:ILE:HD11	1:A:14:ALA:HB3	15	0.04
(1,536)	1:A:25:ILE:HD12	1:A:14:ALA:HB1	15	0.04
(1,536)	1:A:25:ILE:HD12	1:A:14:ALA:HB2	15	0.04
(1,536)	1:A:25:ILE:HD12	1:A:14:ALA:HB3	15	0.04
(1,536)	1:A:25:ILE:HD13	1:A:14:ALA:HB1	15	0.04
(1,536)	1:A:25:ILE:HD13	1:A:14:ALA:HB2	15	0.04
(1,536)	1:A:25:ILE:HD13	1:A:14:ALA:HB3	15	0.04
(1,513)	1:A:25:ILE:HB	1:A:22:LEU:HD11	18	0.04
(1,513)	1:A:25:ILE:HB	1:A:22:LEU:HD12	18	0.04
(1,513)	1:A:25:ILE:HB	1:A:22:LEU:HD13	18	0.04
(1,499)	1:A:47:ILE:HD11	1:A:43:GLU:HG2	13	0.04
(1,499)	1:A:47:ILE:HD12	1:A:43:GLU:HG2	13	0.04
(1,499)	1:A:47:ILE:HD13	1:A:43:GLU:HG2	13	0.04
(1,499)	1:A:47:ILE:HD11	1:A:43:GLU:HG2	25	0.04
(1,499)	1:A:47:ILE:HD12	1:A:43:GLU:HG2	25	0.04
(1,499)	1:A:47:ILE:HD13	1:A:43:GLU:HG2	25	0.04
(1,491)	1:A:27:LEU:HA	1:A:66:LEU:H	25	0.04
(1,479)	1:A:23:ALA:HA	1:A:21:ASP:HA	2	0.04
(1,479)	1:A:23:ALA:HA	1:A:21:ASP:HA	13	0.04
(1,479)	1:A:23:ALA:HA	1:A:21:ASP:HA	14	0.04
(1,479)	1:A:23:ALA:HA	1:A:21:ASP:HA	25	0.04
(1,475)	1:A:22:LEU:HD21	1:A:20:ARG:HB2	20	0.04
(1,475)	1:A:22:LEU:HD22	1:A:20:ARG:HB2	20	0.04
(1,475)	1:A:22:LEU:HD23	1:A:20:ARG:HB2	20	0.04
() . ~ /	= 9			ord 2



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,475)	1:A:22:LEU:HD21	1:A:20:ARG:HB2	21	0.04
(1,475)	1:A:22:LEU:HD22	1:A:20:ARG:HB2	21	0.04
(1,475)	1:A:22:LEU:HD23	1:A:20:ARG:HB2	21	0.04
(1,461)	1:A:47:ILE:HG12	1:A:48:LEU:HD11	11	0.04
(1,461)	1:A:47:ILE:HG12	1:A:48:LEU:HD12	11	0.04
(1,461)	1:A:47:ILE:HG12	1:A:48:LEU:HD13	11	0.04
(1,461)	1:A:47:ILE:HG12	1:A:48:LEU:HD11	28	0.04
(1,461)	1:A:47:ILE:HG12	1:A:48:LEU:HD12	28	0.04
(1,461)	1:A:47:ILE:HG12	1:A:48:LEU:HD13	28	0.04
(1,461)	1:A:47:ILE:HG12	1:A:48:LEU:HD11	29	0.04
(1,461)	1:A:47:ILE:HG12	1:A:48:LEU:HD12	29	0.04
(1,461)	1:A:47:ILE:HG12	1:A:48:LEU:HD13	29	0.04
(1,456)	1:A:47:ILE:HB	1:A:50:ARG:H	13	0.04
(1,45)	1:A:22:LEU:HD21	1:A:11:LYS:HE2	15	0.04
(1,45)	1:A:22:LEU:HD21	1:A:11:LYS:HE3	15	0.04
(1,45)	1:A:22:LEU:HD22	1:A:11:LYS:HE2	15	0.04
(1,45)	1:A:22:LEU:HD22	1:A:11:LYS:HE3	15	0.04
(1,45)	1:A:22:LEU:HD23	1:A:11:LYS:HE2	15	0.04
(1,45)	1:A:22:LEU:HD23	1:A:11:LYS:HE3	15	0.04
(1,43)	1:A:13:VAL:HG21	1:A:17:LEU:H	14	0.04
(1,43)	1:A:13:VAL:HG22	1:A:17:LEU:H	14	0.04
(1,43)	1:A:13:VAL:HG23	1:A:17:LEU:H	14	0.04
(1,43)	1:A:13:VAL:HG21	1:A:73:SER:H	14	0.04
(1,43)	1:A:13:VAL:HG22	1:A:73:SER:H	14	0.04
(1,43)	1:A:13:VAL:HG23	1:A:73:SER:H	14	0.04
(1,43)	1:A:13:VAL:HG21	1:A:18:GLY:H	14	0.04
(1,43)	1:A:13:VAL:HG22	1:A:18:GLY:H	14	0.04
(1,43)	1:A:13:VAL:HG23	1:A:18:GLY:H	14	0.04
(1,412)	1:A:45:ARG:HD2	1:A:58:ILE:HA	30	0.04
(1,412)	1:A:45:ARG:HD3	1:A:58:ILE:HA	30	0.04
(1,412)	1:A:45:ARG:HD2	1:A:58:ILE:HA	30	0.04
(1,412)	1:A:45:ARG:HD3	1:A:58:ILE:HA	30	0.04
(1,38)	1:A:58:ILE:HG21	1:A:32:ALA:HA	12	0.04
(1,38)	1:A:58:ILE:HG22	1:A:32:ALA:HA	12	0.04
(1,38)	1:A:58:ILE:HG23	1:A:32:ALA:HA	12	0.04
(1,38)	1:A:47:ILE:HG21	1:A:50:ARG:HA	12	0.04
(1,38)	1:A:47:ILE:HG22	1:A:50:ARG:HA	12	0.04
(1,38)	1:A:47:ILE:HG23	1:A:50:ARG:HA	12	0.04
(1,38)	1:A:58:ILE:HG21	1:A:32:ALA:HA	13	0.04
(1,38)	1:A:58:ILE:HG22	1:A:32:ALA:HA	13	0.04
(1,38)	1:A:58:ILE:HG23	1:A:32:ALA:HA	13	0.04
(1,38)	1:A:47:ILE:HG21	1:A:50:ARG:HA	13	0.04



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,38)	1:A:47:ILE:HG22	1:A:50:ARG:HA	13	0.04
(1,38)	1:A:47:ILE:HG23	1:A:50:ARG:HA	13	0.04
(1,38)	1:A:58:ILE:HG21	1:A:32:ALA:HA	28	0.04
(1,38)	1:A:58:ILE:HG22	1:A:32:ALA:HA	28	0.04
(1,38)	1:A:58:ILE:HG23	1:A:32:ALA:HA	28	0.04
(1,38)	1:A:47:ILE:HG21	1:A:50:ARG:HA	28	0.04
(1,38)	1:A:47:ILE:HG22	1:A:50:ARG:HA	28	0.04
(1,38)	1:A:47:ILE:HG23	1:A:50:ARG:HA	28	0.04
(1,373)	1:A:19:ILE:HB	1:A:19:ILE:H	12	0.04
(1,373)	1:A:19:ILE:HB	1:A:19:ILE:H	17	0.04
(1,373)	1:A:19:ILE:HB	1:A:19:ILE:H	29	0.04
(1,316)	1:A:40:MET:HB2	1:A:39:LEU:HD21	6	0.04
(1,316)	1:A:40:MET:HB2	1:A:39:LEU:HD22	6	0.04
(1,316)	1:A:40:MET:HB2	1:A:39:LEU:HD23	6	0.04
(1,315)	1:A:40:MET:HB3	1:A:39:LEU:HD21	7	0.04
(1,315)	1:A:40:MET:HB3	1:A:39:LEU:HD22	7	0.04
(1,315)	1:A:40:MET:HB3	1:A:39:LEU:HD23	7	0.04
(1,315)	1:A:40:MET:HB3	1:A:39:LEU:HD21	10	0.04
(1,315)	1:A:40:MET:HB3	1:A:39:LEU:HD22	10	0.04
(1,315)	1:A:40:MET:HB3	1:A:39:LEU:HD23	10	0.04
(1,315)	1:A:40:MET:HB3	1:A:39:LEU:HD21	14	0.04
(1,315)	1:A:40:MET:HB3	1:A:39:LEU:HD22	14	0.04
(1,315)	1:A:40:MET:HB3	1:A:39:LEU:HD23	14	0.04
(1,315)	1:A:40:MET:HB3	1:A:39:LEU:HD21	15	0.04
(1,315)	1:A:40:MET:HB3	1:A:39:LEU:HD22	15	0.04
(1,315)	1:A:40:MET:HB3	1:A:39:LEU:HD23	15	0.04
(1,306)	1:A:40:MET:HB3	1:A:38:SER:H	11	0.04
(1,297)	1:A:17:LEU:HD11	1:A:16:ILE:HA	1	0.04
(1,297)	1:A:17:LEU:HD12	1:A:16:ILE:HA	1	0.04
(1,297)	1:A:17:LEU:HD13	1:A:16:ILE:HA	1	0.04
(1,297)	1:A:17:LEU:HD21	1:A:16:ILE:HA	1	0.04
(1,297)	1:A:17:LEU:HD22	1:A:16:ILE:HA	1	0.04
(1,297)	1:A:17:LEU:HD23	1:A:16:ILE:HA	1	0.04
(1,241)	1:A:31:LEU:HD11	1:A:64:LEU:HG	10	0.04
(1,241)	1:A:31:LEU:HD12	1:A:64:LEU:HG	10	0.04
(1,241)	1:A:31:LEU:HD13	1:A:64:LEU:HG	10	0.04
(1,241)	1:A:31:LEU:HD11	1:A:64:LEU:HG	25	0.04
(1,241)	1:A:31:LEU:HD12	1:A:64:LEU:HG	25	0.04
(1,241)	1:A:31:LEU:HD13	1:A:64:LEU:HG	25	0.04
(1,241)	1:A:31:LEU:HD11	1:A:64:LEU:HG	26	0.04
(1,241)	1:A:31:LEU:HD12	1:A:64:LEU:HG	26	0.04
(1,241)	1:A:31:LEU:HD13	1:A:64:LEU:HG	26	0.04



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

(1,239) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 26 0.04 (1,239) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:62:ARG:HG3 26 0.04 (1,236) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:62:ARG:HG3 26 0.04 (1,236) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:66:LEU:H 14 0.04 (1,236) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:66:LEU:H 14 0.04 (1,236) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:66:LEU:H 14 0.04 (1,236) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:66:LEU:H 14 0.04 (1,229) 1:A:31:LEU:HA 1:A:36:LEU:HD21 24 0.04 (1,229) 1:A:31:LEU:HA 1:A:36:LEU:HD22 24 0.04 (1,229) 1:A:31:LEU:HA 1:A:36:LEU:HD22 24 0.04 (1,229) 1:A:31:LEU:HA 1:A:36:LEU:HD23 24 0.04 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 4 0.04 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 10 0.04 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 15 0.04 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 15 0.04 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 17 0.04 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 20 0.04 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 20 0.04 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 20 0.04 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD21 29 0.04 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD22 29 0.04 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD23 29 0.04 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 10 0.04 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 10 0.04 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 10 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 1 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 1 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 1 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 1 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 1 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 1 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD14 1:A:64:LEU:H 1 0.04 (1,1710) 1:A:63:GLN:H 1:A:66:LEU:H 1 0.04 (Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,239) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:62:ARG:HG3 26 0.04 (1,236) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:66:LEU:H 14 0.04 (1,236) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:66:LEU:H 14 0.04 (1,236) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:66:LEU:H 14 0.04 (1,229) 1:A:31:LEU:HA 1:A:36:LEU:HD21 24 0.04 (1,229) 1:A:31:LEU:HA 1:A:36:LEU:HD22 24 0.04 (1,229) 1:A:31:LEU:HA 1:A:36:LEU:HD23 24 0.04 (1,229) 1:A:31:LEU:HA 1:A:36:LEU:HD23 24 0.04 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 4 0.04 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 15 0.04 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 17 0.04 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 20 0.04 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 20 0.04 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD22	(1,239)	1:A:31:LEU:HD11	1:A:62:ARG:HG3	26	0.04
(1,236) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:66:LEU:H 14 0.04 (1,236) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:66:LEU:H 14 0.04 (1,236) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:66:LEU:H 14 0.04 (1,229) 1:A:31:LEU:HA 1:A:36:LEU:HD21 24 0.04 (1,229) 1:A:31:LEU:HA 1:A:36:LEU:HD22 24 0.04 (1,229) 1:A:31:LEU:HA 1:A:36:LEU:HD23 24 0.04 (1,229) 1:A:31:LEU:HA 1:A:36:LEU:HD23 24 0.04 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 4 0.04 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 15 0.04 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 17 0.04 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 17 0.04 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 17 0.04 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 20 0.04 (1,213) 1:A:32:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA	(1,239)	1:A:31:LEU:HD12	1:A:62:ARG:HG3	26	0.04
(1,236) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:66:LEU:H 14 0.04 (1,236) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:66:LEU:H 14 0.04 (1,229) 1:A:31:LEU:HA 1:A:36:LEU:HD21 24 0.04 (1,229) 1:A:31:LEU:HA 1:A:36:LEU:HD22 24 0.04 (1,229) 1:A:31:LEU:HA 1:A:36:LEU:HD23 24 0.04 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 4 0.04 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 10 0.04 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 17 0.04 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 17 0.04 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 20 0.04 (1,191) 1:A:4:29:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA	(1,239)	1:A:31:LEU:HD13	1:A:62:ARG:HG3	26	0.04
(1,236) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:66:LEU:H 14 0.04 (1,229) 1:A:31:LEU:HA 1:A:36:LEU:HD21 24 0.04 (1,229) 1:A:31:LEU:HA 1:A:36:LEU:HD22 24 0.04 (1,229) 1:A:31:LEU:HA 1:A:36:LEU:HD23 24 0.04 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 4 0.04 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 15 0.04 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 15 0.04 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 17 0.04 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 17 0.04 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 20 0.04 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 20 0.04 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 20 0.04 (1,213) 1:A:32:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD21 29 0.04 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD22	(1,236)	1:A:31:LEU:HD11	1:A:66:LEU:H	14	0.04
(1,229) 1:A:31:LEU:HA 1:A:36:LEU:HD21 24 0.04 (1,229) 1:A:31:LEU:HA 1:A:36:LEU:HD22 24 0.04 (1,229) 1:A:31:LEU:HA 1:A:36:LEU:HD23 24 0.04 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 4 0.04 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 10 0.04 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 15 0.04 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 17 0.04 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 20 0.04 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 20 0.04 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:LEU:HD21 29 0.04 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 20 0.04 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 20 0.04 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD21 29 0.04 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD23	(1,236)	1:A:31:LEU:HD12	1:A:66:LEU:H	14	0.04
(1,229) 1:A:31:LEU:HA 1:A:36:LEU:HD22 24 0.04 (1,229) 1:A:31:LEU:HA 1:A:36:LEU:HD23 24 0.04 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 4 0.04 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 10 0.04 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 15 0.04 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 17 0.04 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 20 0.04 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 20 0.04 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 20 0.04 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 24 0.04 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 20 0.04 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 20 0.04 (1,192) 1:A:2:29:SER:HB3 1:A:34:EU:HD21 29 0.04 (1,192) 1:A:32:SER:HB3 1:A:34:EU:HD22	(1,236)	1:A:31:LEU:HD13	1:A:66:LEU:H	14	0.04
(1,229) 1:A:31:LEU:HA 1:A:36:LEU:HD23 24 0.04 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 4 0.04 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 10 0.04 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 15 0.04 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 17 0.04 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 20 0.04 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 20 0.04 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 24 0.04 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 24 0.04 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD21 29 0.04 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD21 29 0.04 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD22 29 0.04 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD23 29 0.04 (1,18) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:GEU:H	(1,229)	1:A:31:LEU:HA	1:A:36:LEU:HD21	24	0.04
(1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 4 0.04 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 10 0.04 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 15 0.04 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 17 0.04 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 20 0.04 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 24 0.04 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD21 29 0.04 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD22 29 0.04 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD23 29 0.04 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD23 29 0.04 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:74:SER:H 10 0.04 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 10 0.04 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 17 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 <t< td=""><td>(1,229)</td><td>1:A:31:LEU:HA</td><td>1:A:36:LEU:HD22</td><td>24</td><td>0.04</td></t<>	(1,229)	1:A:31:LEU:HA	1:A:36:LEU:HD22	24	0.04
(1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 10 0.04 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 15 0.04 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 17 0.04 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 20 0.04 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 24 0.04 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD21 29 0.04 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD22 29 0.04 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD23 29 0.04 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD23 29 0.04 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:74:SER:H 10 0.04 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 10 0.04 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 17 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:64:GLY:HA2 1 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2	(1,229)	1:A:31:LEU:HA	1:A:36:LEU:HD23	24	0.04
(1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 15 0.04 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 17 0.04 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 20 0.04 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 24 0.04 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD21 29 0.04 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD22 29 0.04 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD23 29 0.04 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:46:GEU:H 10 0.04 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:46:GEU:H	(1,213)	1:A:30:SER:HB3	1:A:33:ASP:HA	4	0.04
(1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 17 0.04 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 20 0.04 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 24 0.04 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD21 29 0.04 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD22 29 0.04 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD23 29 0.04 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD23 29 0.04 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:74:SER:H 10 0.04 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 10 0.04 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 17 0.04 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 17 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 1 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 1 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 <t< td=""><td>(1,213)</td><td>1:A:30:SER:HB3</td><td>1:A:33:ASP:HA</td><td>10</td><td>0.04</td></t<>	(1,213)	1:A:30:SER:HB3	1:A:33:ASP:HA	10	0.04
(1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 20 0.04 (1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 24 0.04 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD21 29 0.04 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD22 29 0.04 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD23 29 0.04 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:74:SER:H 10 0.04 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 10 0.04 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 17 0.04 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 17 0.04 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 17 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 1 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 1 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 26 0.04 (1,177) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG21 8 </td <td>(1,213)</td> <td>1:A:30:SER:HB3</td> <td>1:A:33:ASP:HA</td> <td>15</td> <td>0.04</td>	(1,213)	1:A:30:SER:HB3	1:A:33:ASP:HA	15	0.04
(1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 24 0.04 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD21 29 0.04 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD22 29 0.04 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD23 29 0.04 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:74:SER:H 10 0.04 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 10 0.04 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 17 0.04 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 17 0.04 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 17 0.04 (1,17) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 1 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 1 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 26 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 26 0.04 (1,177) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG21 8<	(1,213)	1:A:30:SER:HB3	1:A:33:ASP:HA	17	0.04
(1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD21 29 0.04 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD22 29 0.04 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD23 29 0.04 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:74:SER:H 10 0.04 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 10 0.04 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 17 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 1 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 1 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 26 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 26 0.04 (1,177) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG21 8 <td>(1,213)</td> <td>1:A:30:SER:HB3</td> <td>1:A:33:ASP:HA</td> <td>20</td> <td>0.04</td>	(1,213)	1:A:30:SER:HB3	1:A:33:ASP:HA	20	0.04
(1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD21 29 0.04 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD22 29 0.04 (1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD23 29 0.04 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:74:SER:H 10 0.04 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 10 0.04 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 17 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 1 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 1 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 26 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 26 0.04 (1,177) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG21 8 <td>(1,213)</td> <td>1:A:30:SER:HB3</td> <td>1:A:33:ASP:HA</td> <td>24</td> <td>0.04</td>	(1,213)	1:A:30:SER:HB3	1:A:33:ASP:HA	24	0.04
(1,192) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD23 29 0.04 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:74:SER:H 10 0.04 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 10 0.04 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:74:SER:H 17 0.04 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 17 0.04 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 17 0.04 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 17 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 1 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 1 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 26 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 26 0.04 (1,177) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG21 8 0.04 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG22 8 0.04 (1,1710) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 1		1:A:29:SER:HB3	1:A:34:LEU:HD21	29	0.04
(1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:74:SER:H 10 0.04 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 10 0.04 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:74:SER:H 17 0.04 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 17 0.04 (1,17) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 1 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 1 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 1 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 26 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 26 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 26 0.04 (1,177) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG21 8 0.04 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG23 8 0.04 (1,1710) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 1 0.04 (1,1710) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 6	(1,192)	1:A:29:SER:HB3	1:A:34:LEU:HD22	29	0.04
(1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 10 0.04 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:74:SER:H 17 0.04 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 17 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 1 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 1 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 1 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 26 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 26 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 26 0.04 (1,177) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG21 8 0.04 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG22 8 0.04 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG23 8 0.04 (1,1710) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 1 0.04 (1,1710) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 6 <td>(1,192)</td> <td>1:A:29:SER:HB3</td> <td>1:A:34:LEU:HD23</td> <td>29</td> <td>0.04</td>	(1,192)	1:A:29:SER:HB3	1:A:34:LEU:HD23	29	0.04
(1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:74:SER:H 17 0.04 (1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 17 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 1 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 1 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 26 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 26 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 26 0.04 (1,177) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG21 8 0.04 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG21 8 0.04 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG22 8 0.04 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG23 8 0.04 (1,1710) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 1 0.04 (1,1710) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 6 0.04 (1,1710) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 9 <td>(1,18)</td> <td>1:A:71:GLU:HA</td> <td>1:A:74:SER:H</td> <td>10</td> <td>0.04</td>	(1,18)	1:A:71:GLU:HA	1:A:74:SER:H	10	0.04
(1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:69:LEU:H 17 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 1 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 1 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 1 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 26 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 26 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 26 0.04 (1,177) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG21 8 0.04 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG22 8 0.04 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG23 8 0.04 (1,1710) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 1 0.04 (1,1710) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 6 0.04 (1,1710) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 9 0.04	(1,18)	1:A:71:GLU:HA	1:A:69:LEU:H	10	0.04
(1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 1 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 1 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 1 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 26 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 26 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 26 0.04 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG21 8 0.04 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG22 8 0.04 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG23 8 0.04 (1,1710) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 1 0.04 (1,1710) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 6 0.04 (1,1710) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 9 0.04	(1,18)	1:A:71:GLU:HA	1:A:74:SER:H	17	0.04
(1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 1 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 1 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 26 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 26 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 26 0.04 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG21 8 0.04 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG22 8 0.04 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG23 8 0.04 (1,1710) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 1 0.04 (1,1710) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 6 0.04 (1,1710) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 9 0.04	(1,18)	1:A:71:GLU:HA	1:A:69:LEU:H	17	0.04
(1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 1 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 26 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 26 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 26 0.04 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG21 8 0.04 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG22 8 0.04 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG23 8 0.04 (1,1732) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 1 0.04 (1,1710) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 3 0.04 (1,1710) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 6 0.04 (1,1710) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 6 0.04 (1,1710) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 9 0.04	(1,177)	1:A:22:LEU:HD11	1:A:24:GLY:HA2	1	0.04
(1,177) 1:A:22:LEU:HD11 1:A:24:GLY:HA2 26 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 26 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 26 0.04 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG21 8 0.04 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG22 8 0.04 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG23 8 0.04 (1,1710) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 1 0.04 (1,1710) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 3 0.04 (1,1710) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 6 0.04 (1,1710) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 9 0.04	(1,177)	1:A:22:LEU:HD12	1:A:24:GLY:HA2	1	0.04
(1,177) 1:A:22:LEU:HD12 1:A:24:GLY:HA2 26 0.04 (1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 26 0.04 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG21 8 0.04 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG22 8 0.04 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG23 8 0.04 (1,1710) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 1 0.04 (1,1710) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 3 0.04 (1,1710) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 6 0.04 (1,1710) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 9 0.04	(1,177)	1:A:22:LEU:HD13	1:A:24:GLY:HA2	1	0.04
(1,177) 1:A:22:LEU:HD13 1:A:24:GLY:HA2 26 0.04 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG21 8 0.04 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG22 8 0.04 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG23 8 0.04 (1,1710) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 1 0.04 (1,1710) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 3 0.04 (1,1710) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 6 0.04 (1,1710) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 9 0.04	(1,177)	1:A:22:LEU:HD11	1:A:24:GLY:HA2	26	0.04
(1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG21 8 0.04 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG22 8 0.04 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG23 8 0.04 (1,1710) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 1 0.04 (1,1710) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 3 0.04 (1,1710) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 6 0.04 (1,1710) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 9 0.04	(1,177)	1:A:22:LEU:HD12	1:A:24:GLY:HA2	26	0.04
(1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG22 8 0.04 (1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG23 8 0.04 (1,1710) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 1 0.04 (1,1710) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 3 0.04 (1,1710) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 6 0.04 (1,1710) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 9 0.04	(1,177)	1:A:22:LEU:HD13	1:A:24:GLY:HA2	26	0.04
(1,1732) 1:A:32:ALA:H 1:A:65:THR:HG23 8 0.04 (1,1710) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 1 0.04 (1,1710) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 3 0.04 (1,1710) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 6 0.04 (1,1710) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 9 0.04	(1,1732)	1:A:32:ALA:H	1:A:65:THR:HG21	8	0.04
(1,1710) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 1 0.04 (1,1710) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 3 0.04 (1,1710) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 6 0.04 (1,1710) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 9 0.04	(1,1732)	1:A:32:ALA:H	1:A:65:THR:HG22	8	0.04
(1,1710) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 3 0.04 (1,1710) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 6 0.04 (1,1710) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 9 0.04	(1,1732)	1:A:32:ALA:H	1:A:65:THR:HG23	8	0.04
(1,1710) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 6 0.04 (1,1710) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 9 0.04	(1,1710)	1:A:63:GLN:H	1:A:64:LEU:H	1	0.04
(1,1710) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 9 0.04	(1,1710)	1:A:63:GLN:H	1:A:64:LEU:H	3	0.04
(1,1710) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 9 0.04	(1,1710)	1:A:63:GLN:H	1:A:64:LEU:H	6	0.04
(1,1710) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 13 0.04		1:A:63:GLN:H	1:A:64:LEU:H	9	0.04
	(1,1710)	1:A:63:GLN:H	1:A:64:LEU:H	13	0.04
(1,1710) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 16 0.04	(1,1710)	1:A:63:GLN:H	1:A:64:LEU:H	16	0.04
(1,1710) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 19 0.04	(1,1710)	1:A:63:GLN:H	1:A:64:LEU:H	19	0.04
(1,1710) 1:A:63:GLN:H 1:A:64:LEU:H 27 0.04	(1,1710)	1:A:63:GLN:H	1:A:64:LEU:H	27	0.04
(1,171) 1:A:22:LEU:HG 1:A:21:ASP:HA 17 0.04	(1,171)	1:A:22:LEU:HG	1:A:21:ASP:HA	17	0.04
(1,171) 1:A:22:LEU:HG 1:A:21:ASP:HA 26 0.04	(1,171)	1:A:22:LEU:HG	1:A:21:ASP:HA	26	0.04
(1,171) 1:A:22:LEU:HG 1:A:21:ASP:HA 30 0.04	(1,171)	1:A:22:LEU:HG	1:A:21:ASP:HA	30	0.04



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1701)	1:A:47:ILE:H	1:A:48:LEU:H	22	0.04
(1,1692)	1:A:33:ASP:H	1:A:36:LEU:H	18	0.04
(1,1628)	1:A:73:SER:HB2	1:A:9:LEU:HD11	6	0.04
(1,1628)	1:A:73:SER:HB2	1:A:9:LEU:HD12	6	0.04
(1,1628)	1:A:73:SER:HB2	1:A:9:LEU:HD13	6	0.04
(1,1599)	1:A:36:LEU:HD11	1:A:40:MET:HG2	16	0.04
(1,1599)	1:A:36:LEU:HD12	1:A:40:MET:HG2	16	0.04
(1,1599)	1:A:36:LEU:HD13	1:A:40:MET:HG2	16	0.04
(1,1588)	1:A:7:ARG:HG2	1:A:12:ALA:H	15	0.04
(1,1588)	1:A:7:ARG:HG3	1:A:12:ALA:H	15	0.04
(1,1587)	1:A:9:LEU:HG	1:A:75:LYS:HE2	22	0.04
(1,1587)	1:A:9:LEU:HG	1:A:75:LYS:HE3	22	0.04
(1,1587)	1:A:9:LEU:HG	1:A:75:LYS:HE2	27	0.04
(1,1587)	1:A:9:LEU:HG	1:A:75:LYS:HE3	27	0.04
(1,1576)	1:A:66:LEU:HD11	1:A:65:THR:HA	3	0.04
(1,1576)	1:A:66:LEU:HD12	1:A:65:THR:HA	3	0.04
(1,1576)	1:A:66:LEU:HD13	1:A:65:THR:HA	3	0.04
(1,1576)	1:A:66:LEU:HD11	1:A:65:THR:HA	6	0.04
(1,1576)	1:A:66:LEU:HD12	1:A:65:THR:HA	6	0.04
(1,1576)	1:A:66:LEU:HD13	1:A:65:THR:HA	6	0.04
(1,1576)	1:A:66:LEU:HD11	1:A:65:THR:HA	7	0.04
(1,1576)	1:A:66:LEU:HD12	1:A:65:THR:HA	7	0.04
(1,1576)	1:A:66:LEU:HD13	1:A:65:THR:HA	7	0.04
(1,1576)	1:A:66:LEU:HD11	1:A:65:THR:HA	9	0.04
(1,1576)	1:A:66:LEU:HD12	1:A:65:THR:HA	9	0.04
(1,1576)	1:A:66:LEU:HD13	1:A:65:THR:HA	9	0.04
(1,1576)	1:A:66:LEU:HD11	1:A:65:THR:HA	17	0.04
(1,1576)	1:A:66:LEU:HD12	1:A:65:THR:HA	17	0.04
(1,1576)	1:A:66:LEU:HD13	1:A:65:THR:HA	17	0.04
(1,1576)	1:A:66:LEU:HD11	1:A:65:THR:HA	20	0.04
(1,1576)	1:A:66:LEU:HD12	1:A:65:THR:HA	20	0.04
(1,1576)	1:A:66:LEU:HD13	1:A:65:THR:HA	20	0.04
(1,1576)	1:A:66:LEU:HD11	1:A:65:THR:HA	29	0.04
(1,1576)	1:A:66:LEU:HD12	1:A:65:THR:HA	29	0.04
(1,1576)	1:A:66:LEU:HD13	1:A:65:THR:HA	29	0.04
(1,1575)	1:A:66:LEU:HD11	1:A:13:VAL:H	19	0.04
(1,1575)	1:A:66:LEU:HD12	1:A:13:VAL:H	19	0.04
(1,1575)	1:A:66:LEU:HD13	1:A:13:VAL:H	19	0.04
(1,1553)	1:A:19:ILE:HG21	1:A:26:ASN:H	8	0.04
(1,1553)	1:A:19:ILE:HG22	1:A:26:ASN:H	8	0.04
(1,1553)	1:A:19:ILE:HG23	1:A:26:ASN:H	8	0.04
(1,1553)	1:A:19:ILE:HG21	1:A:26:ASN:H	25	0.04
	<u>I</u>	<u> </u>	Continue	ed on nert nage



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1553)	1:A:19:ILE:HG22	1:A:26:ASN:H	25	0.04
(1,1553)	1:A:19:ILE:HG23	1:A:26:ASN:H	25	0.04
(1,1552)	1:A:19:ILE:HG21	1:A:24:GLY:H	8	0.04
(1,1552)	1:A:19:ILE:HG22	1:A:24:GLY:H	8	0.04
(1,1552)	1:A:19:ILE:HG23	1:A:24:GLY:H	8	0.04
(1,1547)	1:A:44:VAL:HG11	1:A:40:MET:HA	10	0.04
(1,1547)	1:A:44:VAL:HG12	1:A:40:MET:HA	10	0.04
(1,1547)	1:A:44:VAL:HG13	1:A:40:MET:HA	10	0.04
(1,1547)	1:A:44:VAL:HG11	1:A:40:MET:HA	17	0.04
(1,1547)	1:A:44:VAL:HG12	1:A:40:MET:HA	17	0.04
(1,1547)	1:A:44:VAL:HG13	1:A:40:MET:HA	17	0.04
(1,1547)	1:A:44:VAL:HG11	1:A:40:MET:HA	19	0.04
(1,1547)	1:A:44:VAL:HG12	1:A:40:MET:HA	19	0.04
(1,1547)	1:A:44:VAL:HG13	1:A:40:MET:HA	19	0.04
(1,1547)	1:A:44:VAL:HG11	1:A:40:MET:HA	25	0.04
(1,1547)	1:A:44:VAL:HG12	1:A:40:MET:HA	25	0.04
(1,1547)	1:A:44:VAL:HG13	1:A:40:MET:HA	25	0.04
(1,1546)	1:A:44:VAL:HG11	1:A:42:VAL:HA	8	0.04
(1,1546)	1:A:44:VAL:HG12	1:A:42:VAL:HA	8	0.04
(1,1546)	1:A:44:VAL:HG13	1:A:42:VAL:HA	8	0.04
(1,1546)	1:A:44:VAL:HG11	1:A:42:VAL:HA	25	0.04
(1,1546)	1:A:44:VAL:HG12	1:A:42:VAL:HA	25	0.04
(1,1546)	1:A:44:VAL:HG13	1:A:42:VAL:HA	25	0.04
(1,1545)	1:A:44:VAL:HG21	1:A:45:ARG:HE	2	0.04
(1,1545)	1:A:44:VAL:HG22	1:A:45:ARG:HE	2	0.04
(1,1545)	1:A:44:VAL:HG23	1:A:45:ARG:HE	2	0.04
(1,1545)	1:A:44:VAL:HG21	1:A:45:ARG:HE	4	0.04
(1,1545)	1:A:44:VAL:HG22	1:A:45:ARG:HE	4	0.04
(1,1545)	1:A:44:VAL:HG23	1:A:45:ARG:HE	4	0.04
(1,1545)	1:A:44:VAL:HG21	1:A:45:ARG:HE	25	0.04
(1,1545)	1:A:44:VAL:HG22	1:A:45:ARG:HE	25	0.04
(1,1545)	1:A:44:VAL:HG23	1:A:45:ARG:HE	25	0.04
(1,1539)	1:A:44:VAL:HB	1:A:48:LEU:H	18	0.04
(1,1531)	1:A:10:VAL:HG21	1:A:72:MET:H	6	0.04
(1,1531)	1:A:10:VAL:HG22	1:A:72:MET:H	6	0.04
(1,1531)	1:A:10:VAL:HG23	1:A:72:MET:H	6	0.04
(1,1531)	1:A:10:VAL:HG21	1:A:72:MET:H	24	0.04
(1,1531)	1:A:10:VAL:HG22	1:A:72:MET:H	24	0.04
(1,1531)	1:A:10:VAL:HG23	1:A:72:MET:H	24	0.04
(1,1523)	1:A:73:SER:HA	1:A:70:GLN:H	18	0.04
(1,1523)	1:A:73:SER:HA	1:A:70:GLN:H	25	0.04
(1,1517)	1:A:8:ASP:HB3	1:A:7:ARG:HA	12	0.04



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1503)	1:A:55:VAL:HG11	1:A:49:GLU:H	12	0.04
(1,1503)	1:A:55:VAL:HG12	1:A:49:GLU:H	12	0.04
(1,1503)	1:A:55:VAL:HG13	1:A:49:GLU:H	12	0.04
(1,1498)	1:A:67:ARG:HD2	1:A:69:LEU:H	5	0.04
(1,1498)	1:A:67:ARG:HD2	1:A:69:LEU:H	14	0.04
(1,1498)	1:A:67:ARG:HD2	1:A:69:LEU:H	18	0.04
(1,1498)	1:A:67:ARG:HD2	1:A:69:LEU:H	19	0.04
(1,1498)	1:A:67:ARG:HD2	1:A:69:LEU:H	20	0.04
(1,1498)	1:A:67:ARG:HD2	1:A:69:LEU:H	25	0.04
(1,1497)	1:A:65:THR:HG21	1:A:63:GLN:HB2	18	0.04
(1,1497)	1:A:65:THR:HG22	1:A:63:GLN:HB2	18	0.04
(1,1497)	1:A:65:THR:HG23	1:A:63:GLN:HB2	18	0.04
(1,1497)	1:A:65:THR:HG21	1:A:63:GLN:HB2	21	0.04
(1,1497)	1:A:65:THR:HG22	1:A:63:GLN:HB2	21	0.04
(1,1497)	1:A:65:THR:HG23	1:A:63:GLN:HB2	21	0.04
(1,1497)	1:A:65:THR:HG21	1:A:63:GLN:HB2	26	0.04
(1,1497)	1:A:65:THR:HG22	1:A:63:GLN:HB2	26	0.04
(1,1497)	1:A:65:THR:HG23	1:A:63:GLN:HB2	26	0.04
(1,1494)	1:A:46:GLN:HG2	1:A:50:ARG:HD2	26	0.04
(1,1494)	1:A:46:GLN:HG2	1:A:50:ARG:HD3	26	0.04
(1,1491)	1:A:42:VAL:HG21	1:A:46:GLN:HG2	18	0.04
(1,1491)	1:A:42:VAL:HG22	1:A:46:GLN:HG2	18	0.04
(1,1491)	1:A:42:VAL:HG23	1:A:46:GLN:HG2	18	0.04
(1,1484)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:19:ILE:HB	5	0.04
(1,1484)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:19:ILE:HB	5	0.04
(1,1484)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:19:ILE:HB	5	0.04
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:13:VAL:HG11	1	0.04
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:13:VAL:HG12	1	0.04
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:13:VAL:HG13	1	0.04
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:13:VAL:HG11	1	0.04
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:13:VAL:HG12	1	0.04
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:13:VAL:HG13	1	0.04
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:13:VAL:HG11	1	0.04
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:13:VAL:HG12	1	0.04
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:13:VAL:HG13	1	0.04
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:13:VAL:HG11	11	0.04
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:13:VAL:HG12	11	0.04
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:13:VAL:HG13	11	0.04
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:13:VAL:HG11	11	0.04
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:13:VAL:HG12	11	0.04
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:13:VAL:HG13	11	0.04
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:13:VAL:HG11	11	0.04



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:13:VAL:HG12	11	0.04
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:13:VAL:HG13	11	0.04
(1,1445)	1:A:44:VAL:HG11	1:A:47:ILE:HG13	23	0.04
(1,1445)	1:A:44:VAL:HG12	1:A:47:ILE:HG13	23	0.04
(1,1445)	1:A:44:VAL:HG13	1:A:47:ILE:HG13	23	0.04
(1,1435)	1:A:13:VAL:HG11	1:A:9:LEU:HA	13	0.04
(1,1435)	1:A:13:VAL:HG12	1:A:9:LEU:HA	13	0.04
(1,1435)	1:A:13:VAL:HG13	1:A:9:LEU:HA	13	0.04
(1,1429)	1:A:42:VAL:HG21	1:A:39:LEU:H	11	0.04
(1,1429)	1:A:42:VAL:HG22	1:A:39:LEU:H	11	0.04
(1,1429)	1:A:42:VAL:HG23	1:A:39:LEU:H	11	0.04
(1,1423)	1:A:42:VAL:HG21	1:A:39:LEU:HG	14	0.04
(1,1423)	1:A:42:VAL:HG22	1:A:39:LEU:HG	14	0.04
(1,1423)	1:A:42:VAL:HG23	1:A:39:LEU:HG	14	0.04
(1,1411)	1:A:42:VAL:HG11	1:A:43:GLU:HG3	17	0.04
(1,1411)	1:A:42:VAL:HG12	1:A:43:GLU:HG3	17	0.04
(1,1411)	1:A:42:VAL:HG13	1:A:43:GLU:HG3	17	0.04
(1,1407)	1:A:42:VAL:HA	1:A:44:VAL:H	1	0.04
(1,1407)	1:A:42:VAL:HA	1:A:44:VAL:H	5	0.04
(1,1407)	1:A:42:VAL:HA	1:A:44:VAL:H	16	0.04
(1,1402)	1:A:42:VAL:HA	1:A:45:ARG:HB3	1	0.04
(1,1402)	1:A:42:VAL:HA	1:A:45:ARG:HB3	4	0.04
(1,1402)	1:A:42:VAL:HA	1:A:45:ARG:HB3	5	0.04
(1,1402)	1:A:42:VAL:HA	1:A:45:ARG:HB3	6	0.04
(1,1402)	1:A:42:VAL:HA	1:A:45:ARG:HB3	14	0.04
(1,1402)	1:A:42:VAL:HA	1:A:45:ARG:HB3	20	0.04
(1,1402)	1:A:42:VAL:HA	1:A:45:ARG:HB3	25	0.04
(1,1402)	1:A:42:VAL:HA	1:A:45:ARG:HB3	27	0.04
(1,1402)	1:A:42:VAL:HA	1:A:45:ARG:HB3	29	0.04
(1,1378)	1:A:12:ALA:HB1	1:A:9:LEU:HA	8	0.04
(1,1378)	1:A:12:ALA:HB2	1:A:9:LEU:HA	8	0.04
(1,1378)	1:A:12:ALA:HB3	1:A:9:LEU:HA	8	0.04
(1,1367)	1:A:71:GLU:HA	1:A:68:LYS:HG2	13	0.04
(1,1367)	1:A:71:GLU:HA	1:A:68:LYS:HG3	13	0.04
(1,1332)	1:A:68:LYS:HE2	1:A:69:LEU:H	30	0.04
(1,1332)	1:A:68:LYS:HE3	1:A:69:LEU:H	30	0.04
(1,1331)	1:A:68:LYS:HG2	1:A:64:LEU:HD21	2	0.04
(1,1331)	1:A:68:LYS:HG2	1:A:64:LEU:HD22	2	0.04
(1,1331)	1:A:68:LYS:HG2	1:A:64:LEU:HD23	2	0.04
(1,1331)	1:A:68:LYS:HG3	1:A:64:LEU:HD21	2	0.04
(1,1331)	1:A:68:LYS:HG3	1:A:64:LEU:HD22	2	0.04
(1,1331)	1:A:68:LYS:HG3	1:A:64:LEU:HD23	2	0.04



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

(1,1296) 1:A:63:GLN:HA 1:A:32:ALA:HB1 3 0.04 (1,1296) 1:A:63:GLN:HA 1:A:32:ALA:HB2 3 0.04 (1,1252) 1:A:61:VAL:HA 1:A:63:GLN:HE22 2 0.04 (1,1252) 1:A:61:VAL:HA 1:A:63:GLN:HE22 5 0.04 (1,1252) 1:A:61:VAL:HA 1:A:63:GLN:HE22 7 0.04 (1,1252) 1:A:61:VAL:HA 1:A:63:GLN:HE22 7 0.04 (1,1252) 1:A:61:VAL:HA 1:A:63:GLN:HE22 9 0.04 (1,1252) 1:A:66:VAL:HA 1:A:63:GLN:HE22 9 0.04 (1,1232) 1:A:66:GLU:HB3 1:A:56:LEU:HB2 9 0.04 (1,1221) 1:A:58:ILE:HG22 1:A:57:PRO:HB3 17 0.04 (1,1221) 1:A:56:LEU:HB3 1:A:57:PRO:HB3 17 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB3 1:A:57:PRO:HB3 17 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HB2 2 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HB	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1296) 1:A:63:GLN:HA 1:A:32:ALA:HB3 3 0.04 (1,1252) 1:A:61:VAL:HA 1:A:63:GLN:HE22 2 0.04 (1,1252) 1:A:61:VAL:HA 1:A:63:GLN:HE22 5 0.04 (1,1252) 1:A:61:VAL:HA 1:A:63:GLN:HE22 7 0.04 (1,1252) 1:A:61:VAL:HA 1:A:63:GLN:HE22 9 0.04 (1,1252) 1:A:61:VAL:HA 1:A:63:GLN:HE22 9 0.04 (1,1252) 1:A:61:VAL:HA 1:A:63:GLN:HE22 9 0.04 (1,1252) 1:A:61:VAL:HA 1:A:63:GLD:HB22 1:A:63:GLD:HB2 9 0.04 (1,1239) 1:A:60:GLU:HB3 1:A:57:PRO:HB3 17 0.04 (1,1221) 1:A:58:ILE:HG22 1:A:57:PRO:HB3 17 0.04 (1,1221) 1:A:58:ILE:HG23 1:A:57:PRO:HB3 17 0.04 (1,1221) 1:A:56:LEU:HB3 1:A:57:PRO:HB3 17 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HB2 2 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU	(1,1296)	1:A:63:GLN:HA	1:A:32:ALA:HB1	3	0.04
(1,1252) 1:A:61:VAL:HA 1:A:63:GLN:HE22 2 0.04 (1,1252) 1:A:61:VAL:HA 1:A:63:GLN:HE22 5 0.04 (1,1252) 1:A:61:VAL:HA 1:A:63:GLN:HE22 7 0.04 (1,1252) 1:A:61:VAL:HA 1:A:63:GLN:HE22 9 0.04 (1,1252) 1:A:66:CLU:HB3 1:A:63:GLN:HE22 24 0.04 (1,1239) 1:A:60:GLU:HB3 1:A:56:LEU:HB2 9 0.04 (1,1221) 1:A:58:ILE:HG21 1:A:57:PRO:HB3 17 0.04 (1,1221) 1:A:58:ILE:HG22 1:A:57:PRO:HB3 17 0.04 (1,1221) 1:A:58:ILE:HG23 1:A:57:PRO:HB3 17 0.04 (1,1221) 1:A:56:LEU:HB3 1:A:57:PRO:HB3 17 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB3 1:A:57:PRO:HG3 14 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HB2 2 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HB2 12 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:	(1,1296)	1:A:63:GLN:HA	1:A:32:ALA:HB2	3	0.04
(1,1252) 1:A:61:VAL:HA 1:A:63:GLN:HE22 5 0.04 (1,1252) 1:A:61:VAL:HA 1:A:63:GLN:HE22 7 0.04 (1,1252) 1:A:61:VAL:HA 1:A:63:GLN:HE22 9 0.04 (1,1252) 1:A:61:VAL:HA 1:A:63:GLN:HE22 24 0.04 (1,1239) 1:A:60:GLU:HB3 1:A:56:LEU:HB2 9 0.04 (1,1221) 1:A:58:ILE:HG21 1:A:57:PRO:HB3 17 0.04 (1,1221) 1:A:58:ILE:HG22 1:A:57:PRO:HB3 17 0.04 (1,1221) 1:A:58:ILE:HG23 1:A:57:PRO:HB3 17 0.04 (1,1221) 1:A:58:ILE:HG23 1:A:57:PRO:HB3 17 0.04 (1,1221) 1:A:58:ILE:HG23 1:A:57:PRO:HB3 17 0.04 (1,1221) 1:A:56:ILEU:HB3 1:A:57:PRO:HB3 17 0.04 (1,1183) 1:A:56:ILEU:HB2 1:A:57:PRO:HB2 2 0.04 (1,1183) 1:A:56:ILEU:HB2 1:A:57:PRO:HB2 6 0.04 (1,1183) 1:A:56:ILEU:HB2 <td< td=""><td>(1,1296)</td><td>1:A:63:GLN:HA</td><td>1:A:32:ALA:HB3</td><td>3</td><td>0.04</td></td<>	(1,1296)	1:A:63:GLN:HA	1:A:32:ALA:HB3	3	0.04
(1,1252) 1:A:61:VAL:HA 1:A:63:GLN:HE22 7 0.04 (1,1252) 1:A:61:VAL:HA 1:A:63:GLN:HE22 9 0.04 (1,1252) 1:A:61:VAL:HA 1:A:63:GLN:HE22 24 0.04 (1,1239) 1:A:60:GLU:HB3 1:A:56:LEU:HB2 9 0.04 (1,1221) 1:A:58:ILE:HG21 1:A:57:PRO:HB3 17 0.04 (1,1221) 1:A:58:ILE:HG23 1:A:57:PRO:HB3 17 0.04 (1,1221) 1:A:58:ILE:HG23 1:A:57:PRO:HB3 17 0.04 (1,1184) 1:A:56:LEU:HB23 1:A:57:PRO:HB3 17 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB21 1:A:57:PRO:HB22 2 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB21 1:A:57:PRO:HB22 2 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB21 1:A:57:PRO:HB21 6 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB21 1:A:57:PRO:HB21 12 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB21 1:A:57:PRO:HB21 15 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB21	(1,1252)	1:A:61:VAL:HA	1:A:63:GLN:HE22	2	0.04
(1,1252) 1:A:61:VAL:HA 1:A:63:GLN:HE22 9 0.04 (1,1252) 1:A:61:VAL:HA 1:A:63:GLN:HE22 24 0.04 (1,1239) 1:A:60:GLU:HB3 1:A:56:LEU:HB2 9 0.04 (1,1221) 1:A:58:ILE:HG21 1:A:57:PRO:HB3 17 0.04 (1,1221) 1:A:58:ILE:HG23 1:A:57:PRO:HB3 17 0.04 (1,1221) 1:A:58:ILE:HG23 1:A:57:PRO:HB3 17 0.04 (1,1221) 1:A:58:ILE:HG23 1:A:57:PRO:HB3 17 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB3 1:A:57:PRO:HB3 17 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HB2 2 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HB2 6 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HB2 12 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HB2 12 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HB2 15 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:	(1,1252)	1:A:61:VAL:HA	1:A:63:GLN:HE22	5	0.04
(1,1252) 1:A:61:VAL:HA 1:A:63:GLN:HE22 24 0.04 (1,1239) 1:A:60:GLU:HB3 1:A:56:LEU:HB2 9 0.04 (1,1221) 1:A:58:ILE:HG21 1:A:57:PRO:HB3 17 0.04 (1,1221) 1:A:58:ILE:HG22 1:A:57:PRO:HB3 17 0.04 (1,1221) 1:A:58:ILE:HG23 1:A:57:PRO:HB3 17 0.04 (1,1184) 1:A:56:LEU:HB3 1:A:57:PRO:HG3 14 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HG2 2 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HG2 2 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HB2 6 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HB2 12 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HB2 12 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HG2 12 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HG2 15 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A	(1,1252)	1:A:61:VAL:HA	1:A:63:GLN:HE22	7	0.04
(1,1239) 1:A:60:GLU:HB3 1:A:56:LEU:HB2 9 0.04 (1,1221) 1:A:58:ILE:HG21 1:A:57:PRO:HB3 17 0.04 (1,1221) 1:A:58:ILE:HG22 1:A:57:PRO:HB3 17 0.04 (1,1221) 1:A:58:ILE:HG23 1:A:57:PRO:HB3 17 0.04 (1,1184) 1:A:56:LEU:HB3 1:A:57:PRO:HG3 14 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HB2 2 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HG2 2 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HB2 6 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HB2 12 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HB2 12 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HB2 12 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HB2 15 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HG2 24 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A	(1,1252)	1:A:61:VAL:HA	1:A:63:GLN:HE22	9	0.04
(1,1221) 1:A:58:ILE:HG21 1:A:57:PRO:HB3 17 0.04 (1,1221) 1:A:58:ILE:HG22 1:A:57:PRO:HB3 17 0.04 (1,1221) 1:A:58:ILE:HG23 1:A:57:PRO:HB3 17 0.04 (1,1184) 1:A:56:LEU:HB3 1:A:57:PRO:HG3 14 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HB2 2 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HG2 2 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HB2 6 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HB2 6 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HB2 12 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HG2 12 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HG2 12 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HG2 15 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HG3 3 0.04 (1,1183) 1:A:55:VAL:HA 1:A:5	(1,1252)	1:A:61:VAL:HA	1:A:63:GLN:HE22	24	0.04
(1,1221) 1:A:58:ILE:HG22 1:A:57:PRO:HB3 17 0.04 (1,1221) 1:A:58:ILE:HG23 1:A:57:PRO:HB3 17 0.04 (1,1184) 1:A:56:LEU:HB3 1:A:57:PRO:HG3 14 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HB2 2 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HG2 2 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HB2 6 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HG2 6 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HG2 12 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HG2 12 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HG2 15 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HG2 15 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HG3 3 0.04 (1,1183) 1:A:55:VAL:HA 1:A:57:PRO:HG3 3 0.04 (1,1172) 1:A:55:VAL:HA 1:A:57:P	(1,1239)	1:A:60:GLU:HB3	1:A:56:LEU:HB2	9	0.04
(1,1221) 1:A:58:ILE:HG23 1:A:57:PRO:HB3 17 0.04 (1,1184) 1:A:56:LEU:HB3 1:A:57:PRO:HG3 14 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HB2 2 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HG2 2 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HG2 6 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HG2 6 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HG2 12 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HG2 12 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HG2 15 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HG2 24 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HG2 24 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HG3 3 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HG3 3 0.04 (1,1172) 1:A:55:VAL:HA 1:A:57:P	(1,1221)	1:A:58:ILE:HG21	1:A:57:PRO:HB3	17	0.04
(1,1184) 1:A:56:LEU:HB3 1:A:57:PRO:HG3 14 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HB2 2 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HG2 2 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HB2 6 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HB2 12 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HB2 12 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HB2 15 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HB2 15 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HB2 24 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HB2 24 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HG3 3 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HG3 3 0.04 (1,1172) 1:A:55:VAL:HA 1:A:57:PRO:HG3 4 0.04 (1,1172) 1:A:55:VAL:HA 1:A:51:GLU	(1,1221)	1:A:58:ILE:HG22	1:A:57:PRO:HB3	17	0.04
(1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HB2 2 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HG2 2 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HB2 6 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HB2 12 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HB2 12 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HB2 15 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HB2 15 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HB2 15 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HB2 24 0.04 (1,1183) 1:A:55:VAL:HA 1:A:57:PRO:HG3 3 0.04 (1,1172) 1:A:55:VAL:HA 1:A:57:P	(1,1221)	1:A:58:ILE:HG23	1:A:57:PRO:HB3	17	0.04
(1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HG2 2 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HB2 6 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HG2 6 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HB2 12 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HG2 12 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HB2 15 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HB2 15 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HB2 24 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HB2 24 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HB2 24 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HB3 3 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HB2 24 0.04 (1,1172) 1:A:55:VAL:HA 1:A:57:PRO:HG3 3 0.04 (1,1172) 1:A:55:VAL:HA 1:A:57:PR	(1,1184)	1:A:56:LEU:HB3	1:A:57:PRO:HG3	14	0.04
(1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HB2 6 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HG2 6 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HB2 12 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HB2 12 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HB2 15 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HG2 15 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HG2 24 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HG3 3 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HG3 3 0.04 (1,1183) 1:A:55:VAL:HA 1:A:57:PRO:HG3 4 0.04 (1,1172) 1:A:55:VAL:HA 1:A:57:PRO:HG3 9 0.04 (1,1172) 1:A:55:VAL:HA 1:A:57:PRO:HG3 9 0.04 (1,1163) 1:A:54:LEU:HD11 1:A:51:GLU:HB2 10 0.04 (1,1163) 1:A:54:LEU:HD13 1:A:48:LEU	(1,1183)	1:A:56:LEU:HB2	1:A:57:PRO:HB2	2	0.04
(1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HG2 6 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HB2 12 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HG2 12 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HB2 15 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HG2 15 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HG2 24 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HG2 24 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HG3 3 0.04 (1,1183) 1:A:55:VAL:HA 1:A:57:PRO:HG3 3 0.04 (1,1172) 1:A:55:VAL:HA 1:A:57:PRO:HG3 4 0.04 (1,1172) 1:A:55:VAL:HA 1:A:57:PRO:HG3 9 0.04 (1,1163) 1:A:54:LEU:HD11 1:A:51:GLU:HB2 10 0.04 (1,1163) 1:A:54:LEU:HD13 1:A:48:LEU:HB3 17 0.04 (1,1147) 1:A:54:LEU:HB2 1:A:48:L	(1,1183)	1:A:56:LEU:HB2	1:A:57:PRO:HG2	2	0.04
(1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HB2 12 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HG2 12 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HB2 15 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HG2 15 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HB2 24 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HB2 24 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HG3 3 0.04 (1,1183) 1:A:55:VAL:HA 1:A:57:PRO:HG3 3 0.04 (1,1172) 1:A:55:VAL:HA 1:A:57:PRO:HG3 4 0.04 (1,1172) 1:A:55:VAL:HA 1:A:57:PRO:HG3 9 0.04 (1,1172) 1:A:55:VAL:HA 1:A:51:GLU:HB2 10 0.04 (1,1163) 1:A:54:LEU:HD11 1:A:51:GLU:HB2 10 0.04 (1,1163) 1:A:54:LEU:HD13 1:A:45:LU:HB2 10 0.04 (1,1147) 1:A:54:LEU:HB2 1:A:48:LE	(1,1183)	1:A:56:LEU:HB2	1:A:57:PRO:HB2	6	0.04
(1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HG2 12 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HB2 15 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HG2 15 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HB2 24 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HG2 24 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HG3 3 0.04 (1,1172) 1:A:55:VAL:HA 1:A:57:PRO:HG3 4 0.04 (1,1172) 1:A:55:VAL:HA 1:A:57:PRO:HG3 9 0.04 (1,1172) 1:A:55:VAL:HA 1:A:57:PRO:HG3 9 0.04 (1,1163) 1:A:55:VAL:HA 1:A:57:PRO:HG3 9 0.04 (1,1163) 1:A:54:LEU:HD11 1:A:51:GLU:HB2 10 0.04 (1,1163) 1:A:54:LEU:HD12 1:A:48:LEU:HB2 10 0.04 (1,1147) 1:A:54:LEU:HB2 1:A:48:LEU:HB3 17 0.04 (1,1147) 1:A:54:LEU:HB2 1:A:48:LE	(1,1183)	1:A:56:LEU:HB2	1:A:57:PRO:HG2	6	0.04
(1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HB2 15 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HG2 15 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HB2 24 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HG2 24 0.04 (1,1172) 1:A:55:VAL:HA 1:A:57:PRO:HG3 3 0.04 (1,1172) 1:A:55:VAL:HA 1:A:57:PRO:HG3 9 0.04 (1,1163) 1:A:55:VAL:HA 1:A:51:GLU:HB2 10 0.04 (1,1163) 1:A:54:LEU:HD12 1:A:51:GLU:HB2 10 0.04 (1,1163) 1:A:54:LEU:HB2 1:A:48:LEU:HB3 17 0.04 (1,1147) 1:A:54:LEU:HB2 1:A:48:LEU:HB3 23 0.04 (1,1147) 1:A:39:LEU:HD21 1:A:42:VAL:	(1,1183)	1:A:56:LEU:HB2	1:A:57:PRO:HB2	12	0.04
(1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HG2 15 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HB2 24 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HG2 24 0.04 (1,1172) 1:A:55:VAL:HA 1:A:57:PRO:HG3 3 0.04 (1,1172) 1:A:55:VAL:HA 1:A:57:PRO:HG3 4 0.04 (1,1172) 1:A:55:VAL:HA 1:A:57:PRO:HG3 9 0.04 (1,1163) 1:A:54:LEU:HD11 1:A:51:GLU:HB2 10 0.04 (1,1163) 1:A:54:LEU:HD12 1:A:51:GLU:HB2 10 0.04 (1,1163) 1:A:54:LEU:HD13 1:A:51:GLU:HB2 10 0.04 (1,1147) 1:A:54:LEU:HB2 1:A:48:LEU:HB3 17 0.04 (1,1147) 1:A:54:LEU:HB2 1:A:48:LEU:HB3 23 0.04 (1,1147) 1:A:54:LEU:HB2 1:A:48:LEU:HB3 30 0.04 (1,1095) 1:A:39:LEU:HD21 1:A:42:VAL:H 6 0.04 (1,1095) 1:A:39:LEU:HD23 1:A:41	(1,1183)	1:A:56:LEU:HB2	1:A:57:PRO:HG2	12	0.04
(1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HB2 24 0.04 (1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HG2 24 0.04 (1,1172) 1:A:55:VAL:HA 1:A:57:PRO:HG3 3 0.04 (1,1172) 1:A:55:VAL:HA 1:A:57:PRO:HG3 4 0.04 (1,1172) 1:A:55:VAL:HA 1:A:57:PRO:HG3 9 0.04 (1,1163) 1:A:55:VAL:HA 1:A:57:PRO:HG3 9 0.04 (1,1163) 1:A:54:LEU:HD11 1:A:51:GLU:HB2 10 0.04 (1,1163) 1:A:54:LEU:HD12 1:A:51:GLU:HB2 10 0.04 (1,1163) 1:A:54:LEU:HD13 1:A:45:LEU:HB2 10 0.04 (1,1147) 1:A:54:LEU:HB2 1:A:48:LEU:HB3 17 0.04 (1,1147) 1:A:54:LEU:HB2 1:A:48:LEU:HB3 23 0.04 (1,1095) 1:A:39:LEU:HD21 1:A:42:VAL:H 6 0.04 (1,1095) 1:A:39:LEU:HD22 1:A:42:VAL:H 6 0.04 (1,1061) 1:A:36:LEU:HD21 1:A:41:GLY	(1,1183)	1:A:56:LEU:HB2	1:A:57:PRO:HB2	15	0.04
(1,1183) 1:A:56:LEU:HB2 1:A:57:PRO:HG2 24 0.04 (1,1172) 1:A:55:VAL:HA 1:A:57:PRO:HG3 3 0.04 (1,1172) 1:A:55:VAL:HA 1:A:57:PRO:HG3 4 0.04 (1,1172) 1:A:55:VAL:HA 1:A:57:PRO:HG3 9 0.04 (1,1163) 1:A:54:LEU:HD11 1:A:51:GLU:HB2 10 0.04 (1,1163) 1:A:54:LEU:HD12 1:A:51:GLU:HB2 10 0.04 (1,1163) 1:A:54:LEU:HD13 1:A:51:GLU:HB2 10 0.04 (1,1163) 1:A:54:LEU:HD13 1:A:48:LEU:HB3 17 0.04 (1,1147) 1:A:54:LEU:HB2 1:A:48:LEU:HB3 23 0.04 (1,1147) 1:A:54:LEU:HB2 1:A:48:LEU:HB3 30 0.04 (1,1095) 1:A:39:LEU:HD21 1:A:42:VAL:H 6 0.04 (1,1095) 1:A:39:LEU:HD22 1:A:42:VAL:H 6 0.04 (1,1086) 1:A:39:LEU:HD21 1:A:41:GLY:H 16 0.04 (1,1061) 1:A:66:LEU:HD21 1:A:38:S	(1,1183)	1:A:56:LEU:HB2	1:A:57:PRO:HG2	15	0.04
(1,1172) 1:A:55:VAL:HA 1:A:57:PRO:HG3 3 0.04 (1,1172) 1:A:55:VAL:HA 1:A:57:PRO:HG3 4 0.04 (1,1172) 1:A:55:VAL:HA 1:A:57:PRO:HG3 9 0.04 (1,1163) 1:A:54:LEU:HD11 1:A:51:GLU:HB2 10 0.04 (1,1163) 1:A:54:LEU:HD12 1:A:51:GLU:HB2 10 0.04 (1,1163) 1:A:54:LEU:HD13 1:A:51:GLU:HB2 10 0.04 (1,1163) 1:A:54:LEU:HD13 1:A:48:LEU:HB3 17 0.04 (1,1147) 1:A:54:LEU:HB2 1:A:48:LEU:HB3 23 0.04 (1,1147) 1:A:54:LEU:HB2 1:A:48:LEU:HB3 30 0.04 (1,1095) 1:A:39:LEU:HD21 1:A:42:VAL:H 6 0.04 (1,1095) 1:A:39:LEU:HD23 1:A:42:VAL:H 6 0.04 (1,1086) 1:A:39:LEU:HB2 1:A:41:GLY:H 16 0.04 (1,1061) 1:A:36:LEU:HD21 1:A:38:SER:H 20 0.04	(1,1183)	1:A:56:LEU:HB2	1:A:57:PRO:HB2	24	0.04
(1,1172) 1:A:55:VAL:HA 1:A:57:PRO:HG3 4 0.04 (1,1172) 1:A:55:VAL:HA 1:A:57:PRO:HG3 9 0.04 (1,1163) 1:A:54:LEU:HD11 1:A:51:GLU:HB2 10 0.04 (1,1163) 1:A:54:LEU:HD12 1:A:51:GLU:HB2 10 0.04 (1,1163) 1:A:54:LEU:HD13 1:A:51:GLU:HB2 10 0.04 (1,1147) 1:A:54:LEU:HB2 1:A:48:LEU:HB3 17 0.04 (1,1147) 1:A:54:LEU:HB2 1:A:48:LEU:HB3 23 0.04 (1,1147) 1:A:54:LEU:HB2 1:A:48:LEU:HB3 30 0.04 (1,1095) 1:A:39:LEU:HD21 1:A:42:VAL:H 6 0.04 (1,1095) 1:A:39:LEU:HD23 1:A:42:VAL:H 6 0.04 (1,1086) 1:A:39:LEU:HB2 1:A:41:GLY:H 16 0.04 (1,1061) 1:A:36:LEU:HD21 1:A:38:SER:H 20 0.04	(1,1183)	1:A:56:LEU:HB2	1:A:57:PRO:HG2	24	0.04
(1,1172) 1:A:55:VAL:HA 1:A:57:PRO:HG3 9 0.04 (1,1163) 1:A:54:LEU:HD11 1:A:51:GLU:HB2 10 0.04 (1,1163) 1:A:54:LEU:HD12 1:A:51:GLU:HB2 10 0.04 (1,1163) 1:A:54:LEU:HD13 1:A:51:GLU:HB2 10 0.04 (1,1147) 1:A:54:LEU:HB2 1:A:48:LEU:HB3 17 0.04 (1,1147) 1:A:54:LEU:HB2 1:A:48:LEU:HB3 23 0.04 (1,1147) 1:A:54:LEU:HB2 1:A:48:LEU:HB3 30 0.04 (1,1095) 1:A:39:LEU:HD21 1:A:42:VAL:H 6 0.04 (1,1095) 1:A:39:LEU:HD22 1:A:42:VAL:H 6 0.04 (1,1095) 1:A:39:LEU:HD23 1:A:42:VAL:H 6 0.04 (1,1086) 1:A:39:LEU:HB2 1:A:41:GLY:H 16 0.04 (1,1061) 1:A:36:LEU:HD21 1:A:38:SER:H 20 0.04	(1,1172)	1:A:55:VAL:HA	1:A:57:PRO:HG3	3	0.04
(1,1163) 1:A:54:LEU:HD11 1:A:51:GLU:HB2 10 0.04 (1,1163) 1:A:54:LEU:HD12 1:A:51:GLU:HB2 10 0.04 (1,1163) 1:A:54:LEU:HD13 1:A:51:GLU:HB2 10 0.04 (1,1147) 1:A:54:LEU:HB2 1:A:48:LEU:HB3 17 0.04 (1,1147) 1:A:54:LEU:HB2 1:A:48:LEU:HB3 23 0.04 (1,1147) 1:A:54:LEU:HB2 1:A:48:LEU:HB3 30 0.04 (1,1095) 1:A:39:LEU:HD21 1:A:42:VAL:H 6 0.04 (1,1095) 1:A:39:LEU:HD22 1:A:42:VAL:H 6 0.04 (1,1095) 1:A:39:LEU:HD23 1:A:42:VAL:H 6 0.04 (1,1086) 1:A:39:LEU:HB2 1:A:41:GLY:H 16 0.04 (1,1061) 1:A:36:LEU:HD21 1:A:38:SER:H 20 0.04	(1,1172)	1:A:55:VAL:HA	1:A:57:PRO:HG3	4	0.04
(1,1163) 1:A:54:LEU:HD12 1:A:51:GLU:HB2 10 0.04 (1,1163) 1:A:54:LEU:HD13 1:A:51:GLU:HB2 10 0.04 (1,1147) 1:A:54:LEU:HB2 1:A:48:LEU:HB3 17 0.04 (1,1147) 1:A:54:LEU:HB2 1:A:48:LEU:HB3 23 0.04 (1,1147) 1:A:54:LEU:HB2 1:A:48:LEU:HB3 30 0.04 (1,1095) 1:A:39:LEU:HD21 1:A:42:VAL:H 6 0.04 (1,1095) 1:A:39:LEU:HD22 1:A:42:VAL:H 6 0.04 (1,1095) 1:A:39:LEU:HD23 1:A:42:VAL:H 6 0.04 (1,1086) 1:A:39:LEU:HB2 1:A:41:GLY:H 16 0.04 (1,1061) 1:A:36:LEU:HD21 1:A:38:SER:H 20 0.04	(1,1172)	1:A:55:VAL:HA	1:A:57:PRO:HG3	9	0.04
(1,1163) 1:A:54:LEU:HD13 1:A:51:GLU:HB2 10 0.04 (1,1147) 1:A:54:LEU:HB2 1:A:48:LEU:HB3 17 0.04 (1,1147) 1:A:54:LEU:HB2 1:A:48:LEU:HB3 23 0.04 (1,1147) 1:A:54:LEU:HB2 1:A:48:LEU:HB3 30 0.04 (1,1095) 1:A:39:LEU:HD21 1:A:42:VAL:H 6 0.04 (1,1095) 1:A:39:LEU:HD22 1:A:42:VAL:H 6 0.04 (1,1095) 1:A:39:LEU:HD23 1:A:42:VAL:H 6 0.04 (1,1095) 1:A:39:LEU:HD23 1:A:41:GLY:H 16 0.04 (1,1086) 1:A:39:LEU:HB2 1:A:41:GLY:H 16 0.04 (1,1061) 1:A:36:LEU:HD21 1:A:38:SER:H 20 0.04	(1,1163)	1:A:54:LEU:HD11	1:A:51:GLU:HB2	10	0.04
(1,1147) 1:A:54:LEU:HB2 1:A:48:LEU:HB3 17 0.04 (1,1147) 1:A:54:LEU:HB2 1:A:48:LEU:HB3 23 0.04 (1,1147) 1:A:54:LEU:HB2 1:A:48:LEU:HB3 30 0.04 (1,1095) 1:A:39:LEU:HD21 1:A:42:VAL:H 6 0.04 (1,1095) 1:A:39:LEU:HD22 1:A:42:VAL:H 6 0.04 (1,1095) 1:A:39:LEU:HD23 1:A:42:VAL:H 6 0.04 (1,1086) 1:A:39:LEU:HB2 1:A:41:GLY:H 16 0.04 (1,1061) 1:A:36:LEU:HD21 1:A:38:SER:H 20 0.04	(1,1163)	1:A:54:LEU:HD12	1:A:51:GLU:HB2	10	0.04
(1,1147) 1:A:54:LEU:HB2 1:A:48:LEU:HB3 23 0.04 (1,1147) 1:A:54:LEU:HB2 1:A:48:LEU:HB3 30 0.04 (1,1095) 1:A:39:LEU:HD21 1:A:42:VAL:H 6 0.04 (1,1095) 1:A:39:LEU:HD22 1:A:42:VAL:H 6 0.04 (1,1095) 1:A:39:LEU:HD23 1:A:42:VAL:H 6 0.04 (1,1095) 1:A:39:LEU:HD23 1:A:41:GLY:H 16 0.04 (1,1086) 1:A:39:LEU:HB2 1:A:41:GLY:H 16 0.04 (1,1061) 1:A:36:LEU:HD21 1:A:38:SER:H 20 0.04	(1,1163)	1:A:54:LEU:HD13	1:A:51:GLU:HB2	10	0.04
(1,1147) 1:A:54:LEU:HB2 1:A:48:LEU:HB3 30 0.04 (1,1095) 1:A:39:LEU:HD21 1:A:42:VAL:H 6 0.04 (1,1095) 1:A:39:LEU:HD22 1:A:42:VAL:H 6 0.04 (1,1095) 1:A:39:LEU:HD23 1:A:42:VAL:H 6 0.04 (1,1086) 1:A:39:LEU:HB2 1:A:41:GLY:H 16 0.04 (1,1061) 1:A:36:LEU:HD21 1:A:38:SER:H 20 0.04	(1,1147)	1:A:54:LEU:HB2	1:A:48:LEU:HB3	17	0.04
(1,1095) 1:A:39:LEU:HD21 1:A:42:VAL:H 6 0.04 (1,1095) 1:A:39:LEU:HD22 1:A:42:VAL:H 6 0.04 (1,1095) 1:A:39:LEU:HD23 1:A:42:VAL:H 6 0.04 (1,1086) 1:A:39:LEU:HB2 1:A:41:GLY:H 16 0.04 (1,1061) 1:A:36:LEU:HD21 1:A:38:SER:H 20 0.04	(1,1147)	1:A:54:LEU:HB2	1:A:48:LEU:HB3	23	0.04
(1,1095) 1:A:39:LEU:HD22 1:A:42:VAL:H 6 0.04 (1,1095) 1:A:39:LEU:HD23 1:A:42:VAL:H 6 0.04 (1,1086) 1:A:39:LEU:HB2 1:A:41:GLY:H 16 0.04 (1,1061) 1:A:36:LEU:HD21 1:A:38:SER:H 20 0.04	(1,1147)	1:A:54:LEU:HB2	1:A:48:LEU:HB3	30	0.04
(1,1095) 1:A:39:LEU:HD23 1:A:42:VAL:H 6 0.04 (1,1086) 1:A:39:LEU:HB2 1:A:41:GLY:H 16 0.04 (1,1061) 1:A:36:LEU:HD21 1:A:38:SER:H 20 0.04	(1,1095)	1:A:39:LEU:HD21	1:A:42:VAL:H	6	0.04
(1,1095) 1:A:39:LEU:HD23 1:A:42:VAL:H 6 0.04 (1,1086) 1:A:39:LEU:HB2 1:A:41:GLY:H 16 0.04 (1,1061) 1:A:36:LEU:HD21 1:A:38:SER:H 20 0.04	· · /	1:A:39:LEU:HD22	1:A:42:VAL:H	6	0.04
(1,1086) 1:A:39:LEU:HB2 1:A:41:GLY:H 16 0.04 (1,1061) 1:A:36:LEU:HD21 1:A:38:SER:H 20 0.04		1:A:39:LEU:HD23	1:A:42:VAL:H	6	0.04
		1:A:39:LEU:HB2	1:A:41:GLY:H	16	0.04
(1,1061) 1:A:36:LEU:HD22 1:A:38:SER:H 20 0.04	(1,1061)	1:A:36:LEU:HD21	1:A:38:SER:H	20	0.04
	(1,1061)	1:A:36:LEU:HD22	1:A:38:SER:H	20	0.04
(1,1061) 1:A:36:LEU:HD23 1:A:38:SER:H 20 0.04	(1,1061)	1:A:36:LEU:HD23	1:A:38:SER:H	20	0.04
(1,1056) 1:A:36:LEU:HD21 1:A:62:ARG:HA 18 0.04	(1,1056)	1:A:36:LEU:HD21	1:A:62:ARG:HA	18	0.04
(1,1056) 1:A:36:LEU:HD22 1:A:62:ARG:HA 18 0.04	(1,1056)	1:A:36:LEU:HD22	1:A:62:ARG:HA	18	0.04
(1,1056) 1:A:36:LEU:HD23 1:A:62:ARG:HA 18 0.04	(1,1056)	1:A:36:LEU:HD23	1:A:62:ARG:HA	18	0.04



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD11	1:A:44:VAL:HG21	7	0.04
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD11	1:A:44:VAL:HG22	7	0.04
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD11	1:A:44:VAL:HG23	7	0.04
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD12	1:A:44:VAL:HG21	7	0.04
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD12	1:A:44:VAL:HG22	7	0.04
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD12	1:A:44:VAL:HG23	7	0.04
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD13	1:A:44:VAL:HG21	7	0.04
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD13	1:A:44:VAL:HG22	7	0.04
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD13	1:A:44:VAL:HG23	7	0.04
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD11	1:A:44:VAL:HG21	30	0.04
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD11	1:A:44:VAL:HG22	30	0.04
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD11	1:A:44:VAL:HG23	30	0.04
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD12	1:A:44:VAL:HG21	30	0.04
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD12	1:A:44:VAL:HG22	30	0.04
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD12	1:A:44:VAL:HG23	30	0.04
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD13	1:A:44:VAL:HG21	30	0.04
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD13	1:A:44:VAL:HG22	30	0.04
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD13	1:A:44:VAL:HG23	30	0.04
(1,1028)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:33:ASP:H	1	0.04
(1,1028)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:33:ASP:H	1	0.04
(1,1028)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:33:ASP:H	1	0.04
(1,1017)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:31:LEU:HA	7	0.04
(1,1017)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:31:LEU:HA	7	0.04
(1,1017)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:31:LEU:HA	7	0.04
(1,1017)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:31:LEU:HA	24	0.04
(1,1017)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:31:LEU:HA	24	0.04
(1,1017)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:31:LEU:HA	24	0.04
(1,1016)	1:A:34:LEU:HD11	1:A:29:SER:H	7	0.04
(1,1016)	1:A:34:LEU:HD12	1:A:29:SER:H	7	0.04
(1,1016)	1:A:34:LEU:HD13	1:A:29:SER:H	7	0.04
(1,1008)	1:A:34:LEU:HD11	1:A:31:LEU:HA	2	0.04
(1,1008)	1:A:34:LEU:HD12	1:A:31:LEU:HA	2	0.04
(1,1008)	1:A:34:LEU:HD13	1:A:31:LEU:HA	2	0.04
(1,1008)	1:A:34:LEU:HD11	1:A:31:LEU:HA	21	0.04
(1,1008)	1:A:34:LEU:HD12	1:A:31:LEU:HA	21	0.04
(1,1008)	1:A:34:LEU:HD13	1:A:31:LEU:HA	21	0.04
(1,972)	1:A:27:LEU:HD21	1:A:70:GLN:HE21	4	0.03
(1,972)	1:A:27:LEU:HD22	1:A:70:GLN:HE21	4	0.03
(1,972)	1:A:27:LEU:HD23	1:A:70:GLN:HE21	4	0.03
(1,972)	1:A:27:LEU:HD21	1:A:70:GLN:HE21	26	0.03
(1,972)	1:A:27:LEU:HD22	1:A:70:GLN:HE21	26	0.03
(1,972)	1:A:27:LEU:HD23	1:A:70:GLN:HE21	26	0.03



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,971)	1:A:27:LEU:HD11	1:A:25:ILE:H	12	0.03
(1,971)	1:A:27:LEU:HD12	1:A:25:ILE:H	12	0.03
(1,971)	1:A:27:LEU:HD13	1:A:25:ILE:H	12	0.03
(1,97)	1:A:52:HIS:HB2	1:A:54:LEU:HB3	26	0.03
(1,968)	1:A:27:LEU:HD11	1:A:67:ARG:HA	15	0.03
(1,968)	1:A:27:LEU:HD12	1:A:67:ARG:HA	15	0.03
(1,968)	1:A:27:LEU:HD13	1:A:67:ARG:HA	15	0.03
(1,899)	1:A:47:ILE:HG21	1:A:9:LEU:HD11	14	0.03
(1,899)	1:A:47:ILE:HG21	1:A:9:LEU:HD12	14	0.03
(1,899)	1:A:47:ILE:HG21	1:A:9:LEU:HD13	14	0.03
(1,899)	1:A:47:ILE:HG22	1:A:9:LEU:HD11	14	0.03
(1,899)	1:A:47:ILE:HG22	1:A:9:LEU:HD12	14	0.03
(1,899)	1:A:47:ILE:HG22	1:A:9:LEU:HD13	14	0.03
(1,899)	1:A:47:ILE:HG23	1:A:9:LEU:HD11	14	0.03
(1,899)	1:A:47:ILE:HG23	1:A:9:LEU:HD12	14	0.03
(1,899)	1:A:47:ILE:HG23	1:A:9:LEU:HD13	14	0.03
(1,880)	1:A:10:VAL:HG21	1:A:10:VAL:H	4	0.03
(1,880)	1:A:10:VAL:HG22	1:A:10:VAL:H	4	0.03
(1,880)	1:A:10:VAL:HG23	1:A:10:VAL:H	4	0.03
(1,876)	1:A:10:VAL:HG21	1:A:68:LYS:HB2	6	0.03
(1,876)	1:A:10:VAL:HG21	1:A:68:LYS:HB3	6	0.03
(1,876)	1:A:10:VAL:HG22	1:A:68:LYS:HB2	6	0.03
(1,876)	1:A:10:VAL:HG22	1:A:68:LYS:HB3	6	0.03
(1,876)	1:A:10:VAL:HG23	1:A:68:LYS:HB2	6	0.03
(1,876)	1:A:10:VAL:HG23	1:A:68:LYS:HB3	6	0.03
(1,876)	1:A:10:VAL:HG21	1:A:68:LYS:HB2	16	0.03
(1,876)	1:A:10:VAL:HG21	1:A:68:LYS:HB3	16	0.03
(1,876)	1:A:10:VAL:HG22	1:A:68:LYS:HB2	16	0.03
(1,876)	1:A:10:VAL:HG22	1:A:68:LYS:HB3	16	0.03
(1,876)	1:A:10:VAL:HG23	1:A:68:LYS:HB2	16	0.03
(1,876)	1:A:10:VAL:HG23	1:A:68:LYS:HB3	16	0.03
(1,847)	1:A:8:ASP:HB2	1:A:11:LYS:HD2	1	0.03
(1,847)	1:A:8:ASP:HB2	1:A:11:LYS:HD3	1	0.03
(1,847)	1:A:8:ASP:HB2	1:A:11:LYS:HD2	23	0.03
(1,847)	1:A:8:ASP:HB2	1:A:11:LYS:HD3	23	0.03
(1,846)	1:A:8:ASP:HB3	1:A:11:LYS:HD2	22	0.03
(1,846)	1:A:8:ASP:HB3	1:A:11:LYS:HD3	22	0.03
(1,83)	1:A:73:SER:HB3	1:A:69:LEU:HD11	27	0.03
(1,83)	1:A:73:SER:HB3	1:A:69:LEU:HD12	27	0.03
(1,83)	1:A:73:SER:HB3	1:A:69:LEU:HD13	27	0.03
(1,83)	1:A:73:SER:HB3	1:A:69:LEU:HD21	27	0.03
(1,83)	1:A:73:SER:HB3	1:A:69:LEU:HD22	27	0.03



Continued from previous page...

(1,83) 1:A:73:SER:HB3 1:A:69:LEU:HD23 27 0.03 (1,83) 1:A:73:SER:HB3 1:A:54:LEU:HD21 27 0.03 (1,83) 1:A:73:SER:HB3 1:A:54:LEU:HD22 27 0.03 (1,83) 1:A:73:SER:HB3 1:A:54:LEU:HB3 27 0.03 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 10 0.03 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 10 0.03 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 10 0.03 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 26 0.03 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 26 0.03 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:69:LEU:H 26 0.03 (1,83) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 26 0.03 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 26 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 26 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG21 1:A:30:SER:HA 10	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,83) 1:A:73:SER:HB3 1:A:54:LEU:HD22 27 0.03 (1,83) 1:A:73:SER:HB3 1:A:54:LEU:HD23 27 0.03 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 10 0.03 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 10 0.03 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 10 0.03 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 26 0.03 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 26 0.03 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 26 0.03 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:69:LEU:HB3 26 0.03 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:69:LEU:HB3 26 0.03 (1,82) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 26 0.03 (1,83) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 26 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG23 1:A:30:SER:HA 10 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG23 1:A:30:SER:HA 27	(1,83)	1:A:73:SER:HB3	1:A:69:LEU:HD23	27	0.03
(1,83) 1:A:73:SER:HB3 1:A:54:LEU:HD23 27 0.03 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 10 0.03 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 10 0.03 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 10 0.03 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 26 0.03 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 26 0.03 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 26 0.03 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 26 0.03 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 26 0.03 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 26 0.03 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 26 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG21 1:A:30:SER:HA 10 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG22 1:A:30:SER:HA 27 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG23 1:A:30:SER:HA	(1,83)	1:A:73:SER:HB3	1:A:54:LEU:HD21	27	0.03
(1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 10 0.03 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 10 0.03 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 10 0.03 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 26 0.03 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 26 0.03 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 26 0.03 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 26 0.03 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 26 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 26 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 26 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG23 1:A:30:SER:HA 10 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG21 1:A:30:SER:HA 10 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG22 1:A:30:SER:HA 27 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG23 1:A:30:SER:HA	(1,83)	1:A:73:SER:HB3	1:A:54:LEU:HD22	27	0.03
(1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 10 0.03 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 10 0.03 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 26 0.03 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 26 0.03 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 26 0.03 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 26 0.03 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 26 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 26 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG22 1:A:30:SER:HA 10 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG23 1:A:30:SER:HA 27 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG21 1:A:30:SER:HA	(1,83)	1:A:73:SER:HB3	1:A:54:LEU:HD23	27	0.03
(1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 10 0.03 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 26 0.03 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 26 0.03 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 26 0.03 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 26 0.03 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 26 0.03 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 26 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 26 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG21 1:A:30:SER:HA 10 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG22 1:A:30:SER:HA 10 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG23 1:A:30:SER:HA 27 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG21 1:A:30:SER:HA 27 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG23 1:A:30:SER:HA 27 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG23 1:A:30:SER:HA	(1,82)	1:A:73:SER:HB2	1:A:9:LEU:HB3	10	0.03
(1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:9:LEU:HB3 26 0.03 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 26 0.03 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 26 0.03 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 26 0.03 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 26 0.03 (1,803) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 26 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG21 1:A:30:SER:HA 10 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG22 1:A:30:SER:HA 10 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG23 1:A:30:SER:HA 27 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG22 1:A:30:SER:HA 27 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG23 1:A:30:SER:HA 27 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG21 1:A:30:SER:HA 28 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG23 1:A:30:SER:HA 28 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG23 1:A:30:SER:HA	(1,82)	1:A:73:SER:HB2	1:A:7:ARG:HG2	10	0.03
(1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG2 26 0.03 (1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 26 0.03 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 26 0.03 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 26 0.03 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 26 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG21 1:A:30:SER:HA 10 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG22 1:A:30:SER:HA 10 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG23 1:A:30:SER:HA 10 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG21 1:A:30:SER:HA 27 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG22 1:A:30:SER:HA 27 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG23 1:A:30:SER:HA 27 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG21 1:A:30:SER:HA 28 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG21 1:A:30:SER:HA 28 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG22 1:A:30:SER:HA	(1,82)	1:A:73:SER:HB2	1:A:7:ARG:HG3	10	0.03
(1,82) 1:A:73:SER:HB2 1:A:7:ARG:HG3 26 0.03 (1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 26 0.03 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 26 0.03 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 26 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG21 1:A:30:SER:HA 10 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG22 1:A:30:SER:HA 10 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG23 1:A:30:SER:HA 10 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG21 1:A:30:SER:HA 27 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG22 1:A:30:SER:HA 27 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG22 1:A:30:SER:HA 27 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG23 1:A:30:SER:HA 28 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG23 1:A:30:SER:HA 28 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG23 1:A:30:SER:HA 28 0.03 (1,801) 1:A:65:THR:HG23 1:A:30:SER:HA	(1,82)	1:A:73:SER:HB2	1:A:9:LEU:HB3	26	0.03
(1,813) 1:A:65:THR:HG21 1:A:69:LEU:H 26 0.03 (1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 26 0.03 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 26 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG21 1:A:30:SER:HA 10 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG22 1:A:30:SER:HA 10 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG23 1:A:30:SER:HA 10 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG21 1:A:30:SER:HA 27 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG22 1:A:30:SER:HA 27 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG23 1:A:30:SER:HA 27 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG21 1:A:30:SER:HA 28 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG21 1:A:30:SER:HA 28 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG22 1:A:30:SER:HA 28 0.03 (1,801) 1:A:65:THR:HG23 1:A:30:SER:HA 28 0.03 (1,801) 1:A:65:THR:HG23 1:A:30:SER:HA	(1,82)	1:A:73:SER:HB2	1:A:7:ARG:HG2	26	0.03
(1,813) 1:A:65:THR:HG22 1:A:69:LEU:H 26 0.03 (1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 26 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG21 1:A:30:SER:HA 10 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG22 1:A:30:SER:HA 10 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG23 1:A:30:SER:HA 10 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG21 1:A:30:SER:HA 27 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG22 1:A:30:SER:HA 27 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG23 1:A:30:SER:HA 28 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG21 1:A:30:SER:HA 28 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG22 1:A:30:SER:HA 28 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG23 1:A:30:SER:HA 28 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG23 1:A:31:LEU:HD11 20 0.03 (1,801) 1:A:65:THR:HG23 1:A:31:LEU:HD11 20 0.03 (1,801) 1:A:65:THR:HG23 1:A:73:MET:H<	(1,82)	1:A:73:SER:HB2	1:A:7:ARG:HG3	26	0.03
(1,813) 1:A:65:THR:HG23 1:A:69:LEU:H 26 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG21 1:A:30:SER:HA 10 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG22 1:A:30:SER:HA 10 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG23 1:A:30:SER:HA 10 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG21 1:A:30:SER:HA 27 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG22 1:A:30:SER:HA 27 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG23 1:A:30:SER:HA 28 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG21 1:A:30:SER:HA 28 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG22 1:A:30:SER:HA 28 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG23 1:A:30:SER:HA 28 0.03 (1,801) 1:A:65:THR:HG23 1:A:31:LEU:HD11 20 0.03 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 20 0.03 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 20 0.03 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:72:MET:H <td>(1,813)</td> <td>1:A:65:THR:HG21</td> <td>1:A:69:LEU:H</td> <td>26</td> <td>0.03</td>	(1,813)	1:A:65:THR:HG21	1:A:69:LEU:H	26	0.03
(1,808) 1:A:65:THR:HG21 1:A:30:SER:HA 10 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG22 1:A:30:SER:HA 10 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG23 1:A:30:SER:HA 10 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG21 1:A:30:SER:HA 27 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG22 1:A:30:SER:HA 27 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG23 1:A:30:SER:HA 27 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG21 1:A:30:SER:HA 28 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG22 1:A:30:SER:HA 28 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG23 1:A:30:SER:HA 28 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG23 1:A:30:SER:HA 28 0.03 (1,801) 1:A:65:THR:HG23 1:A:31:LEU:HD11 20 0.03 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 20 0.03 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:72:MET:H 3 0.03 (1,753) 1:A:70:GLN:HB2 1:A:72:MET:H	(1,813)	1:A:65:THR:HG22	1:A:69:LEU:H	26	0.03
(1,808) 1:A:65:THR:HG22 1:A:30:SER:HA 10 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG23 1:A:30:SER:HA 10 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG21 1:A:30:SER:HA 27 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG22 1:A:30:SER:HA 27 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG23 1:A:30:SER:HA 28 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG21 1:A:30:SER:HA 28 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG22 1:A:30:SER:HA 28 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG23 1:A:30:SER:HA 28 0.03 (1,801) 1:A:65:THR:HG23 1:A:31:LEU:HD11 20 0.03 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 20 0.03 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 20 0.03 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:72:MET:H 3 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB2 1:A:72:MET:H 2 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H	(1,813)	1:A:65:THR:HG23	1:A:69:LEU:H	26	0.03
(1,808) 1:A:65:THR:HG23 1:A:30:SER:HA 10 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG21 1:A:30:SER:HA 27 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG22 1:A:30:SER:HA 27 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG23 1:A:30:SER:HA 28 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG21 1:A:30:SER:HA 28 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG22 1:A:30:SER:HA 28 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG23 1:A:30:SER:HA 28 0.03 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 20 0.03 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 20 0.03 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 20 0.03 (1,783) 1:A:70:GLN:HG2 1:A:72:MET:H 3 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 5 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 5 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H	(1,808)	1:A:65:THR:HG21	1:A:30:SER:HA	10	0.03
(1,808) 1:A:65:THR:HG21 1:A:30:SER:HA 27 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG22 1:A:30:SER:HA 27 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG23 1:A:30:SER:HA 27 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG21 1:A:30:SER:HA 28 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG22 1:A:30:SER:HA 28 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG23 1:A:30:SER:HA 28 0.03 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 20 0.03 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 20 0.03 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 20 0.03 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:72:MET:H 3 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB2 1:A:72:MET:H 2 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB2 1:A:72:MET:H 5 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 5 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H <td< td=""><td>(1,808)</td><td>1:A:65:THR:HG22</td><td>1:A:30:SER:HA</td><td>10</td><td>0.03</td></td<>	(1,808)	1:A:65:THR:HG22	1:A:30:SER:HA	10	0.03
(1,808) 1:A:65:THR:HG22 1:A:30:SER:HA 27 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG23 1:A:30:SER:HA 27 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG21 1:A:30:SER:HA 28 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG22 1:A:30:SER:HA 28 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG23 1:A:30:SER:HA 28 0.03 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 20 0.03 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 20 0.03 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 20 0.03 (1,753) 1:A:70:GLN:HG2 1:A:72:MET:H 3 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB2 1:A:72:MET:H 2 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB2 1:A:72:MET:H 5 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 5 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 5 0.03	(1,808)	1:A:65:THR:HG23	1:A:30:SER:HA	10	0.03
(1,808) 1:A:65:THR:HG23 1:A:30:SER:HA 27 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG21 1:A:30:SER:HA 28 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG22 1:A:30:SER:HA 28 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG23 1:A:30:SER:HA 28 0.03 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 20 0.03 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 20 0.03 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 20 0.03 (1,753) 1:A:70:GLN:HG2 1:A:72:MET:H 3 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB2 1:A:72:MET:H 2 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 5 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 5 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 5 0.03	(1,808)	1:A:65:THR:HG21	1:A:30:SER:HA	27	0.03
(1,808) 1:A:65:THR:HG21 1:A:30:SER:HA 28 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG22 1:A:30:SER:HA 28 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG23 1:A:30:SER:HA 28 0.03 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 20 0.03 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 20 0.03 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 20 0.03 (1,753) 1:A:70:GLN:HG2 1:A:72:MET:H 3 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB2 1:A:72:MET:H 2 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 5 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 5 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 5 0.03	(1,808)	1:A:65:THR:HG22	1:A:30:SER:HA	27	0.03
(1,808) 1:A:65:THR:HG22 1:A:30:SER:HA 28 0.03 (1,808) 1:A:65:THR:HG23 1:A:30:SER:HA 28 0.03 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 20 0.03 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 20 0.03 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 20 0.03 (1,753) 1:A:70:GLN:HG2 1:A:72:MET:H 3 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB2 1:A:72:MET:H 2 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 2 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB2 1:A:72:MET:H 5 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 5 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 5 0.03	(1,808)	1:A:65:THR:HG23	1:A:30:SER:HA	27	0.03
(1,808) 1:A:65:THR:HG23 1:A:30:SER:HA 28 0.03 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 20 0.03 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 20 0.03 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 20 0.03 (1,753) 1:A:70:GLN:HG2 1:A:72:MET:H 3 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB2 1:A:72:MET:H 2 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 5 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB2 1:A:72:MET:H 5 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 5 0.03	(1,808)	1:A:65:THR:HG21	1:A:30:SER:HA	28	0.03
(1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD11 20 0.03 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 20 0.03 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 20 0.03 (1,753) 1:A:70:GLN:HG2 1:A:72:MET:H 3 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB2 1:A:72:MET:H 2 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 2 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB2 1:A:72:MET:H 5 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 5 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 5 0.03	(1,808)	1:A:65:THR:HG22	1:A:30:SER:HA	28	0.03
(1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD12 20 0.03 (1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 20 0.03 (1,753) 1:A:70:GLN:HG2 1:A:72:MET:H 3 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB2 1:A:72:MET:H 2 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 2 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB2 1:A:72:MET:H 5 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 5 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 5 0.03	(1,808)	1:A:65:THR:HG23	1:A:30:SER:HA	28	0.03
(1,801) 1:A:65:THR:HA 1:A:31:LEU:HD13 20 0.03 (1,753) 1:A:70:GLN:HG2 1:A:72:MET:H 3 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB2 1:A:72:MET:H 2 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 2 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB2 1:A:72:MET:H 5 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 5 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 5 0.03	(1,801)	1:A:65:THR:HA	1:A:31:LEU:HD11	20	0.03
(1,753) 1:A:70:GLN:HG2 1:A:72:MET:H 3 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB2 1:A:72:MET:H 2 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 2 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB2 1:A:72:MET:H 5 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 5 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 5 0.03	(1,801)	1:A:65:THR:HA	1:A:31:LEU:HD12	20	0.03
(1,743) 1:A:70:GLN:HB2 1:A:72:MET:H 2 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 2 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB2 1:A:72:MET:H 5 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 5 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 5 0.03	(1,801)	1:A:65:THR:HA	1:A:31:LEU:HD13	20	0.03
(1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 2 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB2 1:A:72:MET:H 5 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 5 0.03	(1,753)	1:A:70:GLN:HG2	1:A:72:MET:H	3	0.03
(1,743) 1:A:70:GLN:HB2 1:A:72:MET:H 5 0.03 (1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 5 0.03	(1,743)	1:A:70:GLN:HB2	1:A:72:MET:H	2	0.03
(1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 5 0.03	(1,743)	1:A:70:GLN:HB3	1:A:72:MET:H	2	0.03
	(1,743)	1:A:70:GLN:HB2	1:A:72:MET:H	5	0.03
(1.743) $1 \cdot \Delta \cdot 70 \cdot \text{CLN} \cdot \text{HR2}$ $1 \cdot \Delta \cdot 72 \cdot \text{MFT} \cdot \text{H}$ 0 0.02	(1,743)	1:A:70:GLN:HB3	1:A:72:MET:H	5	0.03
(1,170) $[1.A.10.GDIV.IID2 1.A.12.WIE1.II 9 0.00$	(1,743)	1:A:70:GLN:HB2	1:A:72:MET:H	9	0.03
(1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 9 0.03	(1,743)	1:A:70:GLN:HB3	1:A:72:MET:H	9	0.03
(1,743) 1:A:70:GLN:HB2 1:A:72:MET:H 26 0.03	(1,743)	1:A:70:GLN:HB2	1:A:72:MET:H	26	0.03
(1,743) 1:A:70:GLN:HB3 1:A:72:MET:H 26 0.03	(1,743)	1:A:70:GLN:HB3	1:A:72:MET:H	26	0.03
(1,740) 1:A:70:GLN:HA 1:A:10:VAL:HG21 13 0.03	_ `	1:A:70:GLN:HA	1:A:10:VAL:HG21	13	0.03
(1,740) 1:A:70:GLN:HA 1:A:10:VAL:HG22 13 0.03	(1,740)	1:A:70:GLN:HA	1:A:10:VAL:HG22	13	0.03
(1,740) 1:A:70:GLN:HA 1:A:10:VAL:HG23 13 0.03	(1,740)	1:A:70:GLN:HA	1:A:10:VAL:HG23	13	0.03
(1,732) 1:A:63:GLN:HG3 1:A:60:GLU:HA 9 0.03		1:A:63:GLN:HG3	1:A:60:GLU:HA	9	0.03
(1,732) 1:A:63:GLN:HG3 1:A:60:GLU:HA 27 0.03	(1,732)	1:A:63:GLN:HG3	1:A:60:GLU:HA	27	0.03
(1,710) 1:A:63:GLN:HA 1:A:30:SER:HB3 23 0.03	(1,710)	1:A:63:GLN:HA	1:A:30:SER:HB3	23	0.03
(1,710) 1:A:63:GLN:HA 1:A:30:SER:HB3 26 0.03	(1,710)	1:A:63:GLN:HA	1:A:30:SER:HB3	26	0.03
(1,706) 1:A:59:ARG:HD2 1:A:59:ARG:H 19 0.03	(1,706)	1:A:59:ARG:HD2	1:A:59:ARG:H	19	0.03



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,706)	1:A:59:ARG:HD3	1:A:59:ARG:H	19	0.03
(1,706)	1:A:59:ARG:HD2	1:A:59:ARG:H	24	0.03
(1,706)	1:A:59:ARG:HD3	1:A:59:ARG:H	24	0.03
(1,70)	1:A:9:LEU:HD21	1:A:72:MET:H	2	0.03
(1,70)	1:A:9:LEU:HD22	1:A:72:MET:H	2	0.03
(1,70)	1:A:9:LEU:HD23	1:A:72:MET:H	2	0.03
(1,70)	1:A:9:LEU:HD21	1:A:71:GLU:H	2	0.03
(1,70)	1:A:9:LEU:HD22	1:A:71:GLU:H	2	0.03
(1,70)	1:A:9:LEU:HD23	1:A:71:GLU:H	2	0.03
(1,673)	1:A:43:GLU:HA	1:A:39:LEU:HD21	2	0.03
(1,673)	1:A:43:GLU:HA	1:A:39:LEU:HD22	2	0.03
(1,673)	1:A:43:GLU:HA	1:A:39:LEU:HD23	2	0.03
(1,673)	1:A:43:GLU:HA	1:A:39:LEU:HD21	4	0.03
(1,673)	1:A:43:GLU:HA	1:A:39:LEU:HD22	4	0.03
(1,673)	1:A:43:GLU:HA	1:A:39:LEU:HD23	4	0.03
(1,673)	1:A:43:GLU:HA	1:A:39:LEU:HD21	20	0.03
(1,673)	1:A:43:GLU:HA	1:A:39:LEU:HD22	20	0.03
(1,673)	1:A:43:GLU:HA	1:A:39:LEU:HD23	20	0.03
(1,662)	1:A:49:GLU:HA	1:A:46:GLN:HA	16	0.03
(1,662)	1:A:49:GLU:HA	1:A:46:GLN:HA	24	0.03
(1,607)	1:A:67:ARG:HA	1:A:67:ARG:HD3	2	0.03
(1,607)	1:A:67:ARG:HA	1:A:67:ARG:HD3	5	0.03
(1,599)	1:A:66:LEU:HA	1:A:69:LEU:H	13	0.03
(1,593)	1:A:66:LEU:HD11	1:A:66:LEU:HA	7	0.03
(1,593)	1:A:66:LEU:HD12	1:A:66:LEU:HA	7	0.03
(1,593)	1:A:66:LEU:HD13	1:A:66:LEU:HA	7	0.03
(1,593)	1:A:66:LEU:HD11	1:A:66:LEU:HA	24	0.03
(1,593)	1:A:66:LEU:HD12	1:A:66:LEU:HA	24	0.03
(1,593)	1:A:66:LEU:HD13	1:A:66:LEU:HA	24	0.03
(1,593)	1:A:66:LEU:HD11	1:A:66:LEU:HA	26	0.03
(1,593)	1:A:66:LEU:HD12	1:A:66:LEU:HA	26	0.03
(1,593)	1:A:66:LEU:HD13	1:A:66:LEU:HA	26	0.03
(1,58)	1:A:66:LEU:HD21	1:A:10:VAL:HB	28	0.03
(1,58)	1:A:66:LEU:HD22	1:A:10:VAL:HB	28	0.03
(1,58)	1:A:66:LEU:HD23	1:A:10:VAL:HB	28	0.03
(1,58)	1:A:36:LEU:HD11	1:A:43:GLU:HB2	28	0.03
(1,58)	1:A:36:LEU:HD12	1:A:43:GLU:HB2	28	0.03
(1,58)	1:A:36:LEU:HD13	1:A:43:GLU:HB2	28	0.03
(1,536)	1:A:25:ILE:HD11	1:A:14:ALA:HB1	12	0.03
(1,536)	1:A:25:ILE:HD11	1:A:14:ALA:HB2	12	0.03
(1,536)	1:A:25:ILE:HD11	1:A:14:ALA:HB3	12	0.03
(1,536)	1:A:25:ILE:HD12	1:A:14:ALA:HB1	12	0.03



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,536)	1:A:25:ILE:HD12	1:A:14:ALA:HB2	12	0.03
(1,536)	1:A:25:ILE:HD12	1:A:14:ALA:HB3	12	0.03
(1,536)	1:A:25:ILE:HD13	1:A:14:ALA:HB1	12	0.03
(1,536)	1:A:25:ILE:HD13	1:A:14:ALA:HB2	12	0.03
(1,536)	1:A:25:ILE:HD13	1:A:14:ALA:HB3	12	0.03
(1,536)	1:A:25:ILE:HD11	1:A:14:ALA:HB1	14	0.03
(1,536)	1:A:25:ILE:HD11	1:A:14:ALA:HB2	14	0.03
(1,536)	1:A:25:ILE:HD11	1:A:14:ALA:HB3	14	0.03
(1,536)	1:A:25:ILE:HD12	1:A:14:ALA:HB1	14	0.03
(1,536)	1:A:25:ILE:HD12	1:A:14:ALA:HB2	14	0.03
(1,536)	1:A:25:ILE:HD12	1:A:14:ALA:HB3	14	0.03
(1,536)	1:A:25:ILE:HD13	1:A:14:ALA:HB1	14	0.03
(1,536)	1:A:25:ILE:HD13	1:A:14:ALA:HB2	14	0.03
(1,536)	1:A:25:ILE:HD13	1:A:14:ALA:HB3	14	0.03
(1,536)	1:A:25:ILE:HD11	1:A:14:ALA:HB1	21	0.03
(1,536)	1:A:25:ILE:HD11	1:A:14:ALA:HB2	21	0.03
(1,536)	1:A:25:ILE:HD11	1:A:14:ALA:HB3	21	0.03
(1,536)	1:A:25:ILE:HD12	1:A:14:ALA:HB1	21	0.03
(1,536)	1:A:25:ILE:HD12	1:A:14:ALA:HB2	21	0.03
(1,536)	1:A:25:ILE:HD12	1:A:14:ALA:HB3	21	0.03
(1,536)	1:A:25:ILE:HD13	1:A:14:ALA:HB1	21	0.03
(1,536)	1:A:25:ILE:HD13	1:A:14:ALA:HB2	21	0.03
(1,536)	1:A:25:ILE:HD13	1:A:14:ALA:HB3	21	0.03
(1,536)	1:A:25:ILE:HD11	1:A:14:ALA:HB1	25	0.03
(1,536)	1:A:25:ILE:HD11	1:A:14:ALA:HB2	25	0.03
(1,536)	1:A:25:ILE:HD11	1:A:14:ALA:HB3	25	0.03
(1,536)	1:A:25:ILE:HD12	1:A:14:ALA:HB1	25	0.03
(1,536)	1:A:25:ILE:HD12	1:A:14:ALA:HB2	25	0.03
(1,536)	1:A:25:ILE:HD12	1:A:14:ALA:HB3	25	0.03
(1,536)	1:A:25:ILE:HD13	1:A:14:ALA:HB1	25	0.03
(1,536)	1:A:25:ILE:HD13	1:A:14:ALA:HB2	25	0.03
(1,536)	1:A:25:ILE:HD13	1:A:14:ALA:HB3	25	0.03
(1,536)	1:A:25:ILE:HD11	1:A:14:ALA:HB1	26	0.03
(1,536)	1:A:25:ILE:HD11	1:A:14:ALA:HB2	26	0.03
(1,536)	1:A:25:ILE:HD11	1:A:14:ALA:HB3	26	0.03
(1,536)	1:A:25:ILE:HD12	1:A:14:ALA:HB1	26	0.03
(1,536)	1:A:25:ILE:HD12	1:A:14:ALA:HB2	26	0.03
(1,536)	1:A:25:ILE:HD12	1:A:14:ALA:HB3	26	0.03
(1,536)	1:A:25:ILE:HD13	1:A:14:ALA:HB1	26	0.03
(1,536)	1:A:25:ILE:HD13	1:A:14:ALA:HB2	26	0.03
(1,536)	1:A:25:ILE:HD13	1:A:14:ALA:HB3	26	0.03
(1,536)	1:A:25:ILE:HD11	1:A:14:ALA:HB1	27	0.03



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,536)	1:A:25:ILE:HD11	1:A:14:ALA:HB2	27	0.03
(1,536)	1:A:25:ILE:HD11	1:A:14:ALA:HB3	27	0.03
(1,536)	1:A:25:ILE:HD12	1:A:14:ALA:HB1	27	0.03
(1,536)	1:A:25:ILE:HD12	1:A:14:ALA:HB2	27	0.03
(1,536)	1:A:25:ILE:HD12	1:A:14:ALA:HB3	27	0.03
(1,536)	1:A:25:ILE:HD13	1:A:14:ALA:HB1	27	0.03
(1,536)	1:A:25:ILE:HD13	1:A:14:ALA:HB2	27	0.03
(1,536)	1:A:25:ILE:HD13	1:A:14:ALA:HB3	27	0.03
(1,536)	1:A:25:ILE:HD11	1:A:14:ALA:HB1	30	0.03
(1,536)	1:A:25:ILE:HD11	1:A:14:ALA:HB2	30	0.03
(1,536)	1:A:25:ILE:HD11	1:A:14:ALA:HB3	30	0.03
(1,536)	1:A:25:ILE:HD12	1:A:14:ALA:HB1	30	0.03
(1,536)	1:A:25:ILE:HD12	1:A:14:ALA:HB2	30	0.03
(1,536)	1:A:25:ILE:HD12	1:A:14:ALA:HB3	30	0.03
(1,536)	1:A:25:ILE:HD13	1:A:14:ALA:HB1	30	0.03
(1,536)	1:A:25:ILE:HD13	1:A:14:ALA:HB2	30	0.03
(1,536)	1:A:25:ILE:HD13	1:A:14:ALA:HB3	30	0.03
(1,533)	1:A:25:ILE:HD11	1:A:25:ILE:HA	22	0.03
(1,533)	1:A:25:ILE:HD12	1:A:25:ILE:HA	22	0.03
(1,533)	1:A:25:ILE:HD13	1:A:25:ILE:HA	22	0.03
(1,513)	1:A:25:ILE:HB	1:A:22:LEU:HD11	4	0.03
(1,513)	1:A:25:ILE:HB	1:A:22:LEU:HD12	4	0.03
(1,513)	1:A:25:ILE:HB	1:A:22:LEU:HD13	4	0.03
(1,506)	1:A:19:ILE:HD11	1:A:18:GLY:HA2	11	0.03
(1,506)	1:A:19:ILE:HD12	1:A:18:GLY:HA2	11	0.03
(1,506)	1:A:19:ILE:HD13	1:A:18:GLY:HA2	11	0.03
(1,506)	1:A:19:ILE:HD11	1:A:18:GLY:HA2	22	0.03
(1,506)	1:A:19:ILE:HD12	1:A:18:GLY:HA2	22	0.03
(1,506)	1:A:19:ILE:HD13	1:A:18:GLY:HA2	22	0.03
(1,499)	1:A:47:ILE:HD11	1:A:43:GLU:HG2	9	0.03
(1,499)	1:A:47:ILE:HD12	1:A:43:GLU:HG2	9	0.03
(1,499)	1:A:47:ILE:HD13	1:A:43:GLU:HG2	9	0.03
(1,499)	1:A:47:ILE:HD11	1:A:43:GLU:HG2	29	0.03
(1,499)	1:A:47:ILE:HD12	1:A:43:GLU:HG2	29	0.03
(1,499)	1:A:47:ILE:HD13	1:A:43:GLU:HG2	29	0.03
(1,491)	1:A:27:LEU:HA	1:A:66:LEU:H	5	0.03
(1,491)	1:A:27:LEU:HA	1:A:66:LEU:H	8	0.03
(1,491)	1:A:27:LEU:HA	1:A:66:LEU:H	24	0.03
(1,479)	1:A:23:ALA:HA	1:A:21:ASP:HA	5	0.03
(1,479)	1:A:23:ALA:HA	1:A:21:ASP:HA	20	0.03
(1,479)	1:A:23:ALA:HA	1:A:21:ASP:HA	23	0.03
(1,461)	1:A:47:ILE:HG12	1:A:48:LEU:HD11	14	0.03



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,461)	1:A:47:ILE:HG12	1:A:48:LEU:HD12	14	0.03
(1,461)	1:A:47:ILE:HG12	1:A:48:LEU:HD13	14	0.03
(1,461)	1:A:47:ILE:HG12	1:A:48:LEU:HD11	20	0.03
(1,461)	1:A:47:ILE:HG12	1:A:48:LEU:HD12	20	0.03
(1,461)	1:A:47:ILE:HG12	1:A:48:LEU:HD13	20	0.03
(1,461)	1:A:47:ILE:HG12	1:A:48:LEU:HD11	27	0.03
(1,461)	1:A:47:ILE:HG12	1:A:48:LEU:HD12	27	0.03
(1,461)	1:A:47:ILE:HG12	1:A:48:LEU:HD13	27	0.03
(1,460)	1:A:47:ILE:HG13	1:A:48:LEU:HD11	29	0.03
(1,460)	1:A:47:ILE:HG13	1:A:48:LEU:HD12	29	0.03
(1,460)	1:A:47:ILE:HG13	1:A:48:LEU:HD13	29	0.03
(1,456)	1:A:47:ILE:HB	1:A:50:ARG:H	2	0.03
(1,456)	1:A:47:ILE:HB	1:A:50:ARG:H	11	0.03
(1,43)	1:A:13:VAL:HG21	1:A:17:LEU:H	26	0.03
(1,43)	1:A:13:VAL:HG22	1:A:17:LEU:H	26	0.03
(1,43)	1:A:13:VAL:HG23	1:A:17:LEU:H	26	0.03
(1,43)	1:A:13:VAL:HG21	1:A:73:SER:H	26	0.03
(1,43)	1:A:13:VAL:HG22	1:A:73:SER:H	26	0.03
(1,43)	1:A:13:VAL:HG23	1:A:73:SER:H	26	0.03
(1,43)	1:A:13:VAL:HG21	1:A:18:GLY:H	26	0.03
(1,43)	1:A:13:VAL:HG22	1:A:18:GLY:H	26	0.03
(1,43)	1:A:13:VAL:HG23	1:A:18:GLY:H	26	0.03
(1,417)	1:A:45:ARG:HD2	1:A:61:VAL:HG11	30	0.03
(1,417)	1:A:45:ARG:HD2	1:A:61:VAL:HG12	30	0.03
(1,417)	1:A:45:ARG:HD2	1:A:61:VAL:HG13	30	0.03
(1,417)	1:A:45:ARG:HD3	1:A:61:VAL:HG11	30	0.03
(1,417)	1:A:45:ARG:HD3	1:A:61:VAL:HG12	30	0.03
(1,417)	1:A:45:ARG:HD3	1:A:61:VAL:HG13	30	0.03
(1,391)	1:A:19:ILE:HG21	1:A:21:ASP:HA	1	0.03
(1,391)	1:A:19:ILE:HG22	1:A:21:ASP:HA	1	0.03
(1,391)	1:A:19:ILE:HG23	1:A:21:ASP:HA	1	0.03
(1,391)	1:A:19:ILE:HG21	1:A:21:ASP:HA	6	0.03
(1,391)	1:A:19:ILE:HG22	1:A:21:ASP:HA	6	0.03
(1,391)	1:A:19:ILE:HG23	1:A:21:ASP:HA	6	0.03
(1,391)	1:A:19:ILE:HG21	1:A:21:ASP:HA	11	0.03
(1,391)	1:A:19:ILE:HG22	1:A:21:ASP:HA	11	0.03
(1,391)	1:A:19:ILE:HG23	1:A:21:ASP:HA	11	0.03
(1,391)	1:A:19:ILE:HG21	1:A:21:ASP:HA	28	0.03
(1,391)	1:A:19:ILE:HG22	1:A:21:ASP:HA	28	0.03
(1,391)	1:A:19:ILE:HG23	1:A:21:ASP:HA	28	0.03
(1,38)	1:A:58:ILE:HG21	1:A:32:ALA:HA	2	0.03
(1,38)	1:A:58:ILE:HG22	1:A:32:ALA:HA	2	0.03



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,38)	1:A:58:ILE:HG23	1:A:32:ALA:HA	2	0.03
(1,38)	1:A:47:ILE:HG21	1:A:50:ARG:HA	2	0.03
(1,38)	1:A:47:ILE:HG22	1:A:50:ARG:HA	2	0.03
(1,38)	1:A:47:ILE:HG23	1:A:50:ARG:HA	2	0.03
(1,373)	1:A:19:ILE:HB	1:A:19:ILE:H	4	0.03
(1,373)	1:A:19:ILE:HB	1:A:19:ILE:H	5	0.03
(1,373)	1:A:19:ILE:HB	1:A:19:ILE:H	11	0.03
(1,373)	1:A:19:ILE:HB	1:A:19:ILE:H	27	0.03
(1,366)	1:A:17:LEU:HG	1:A:16:ILE:HG21	16	0.03
(1,366)	1:A:17:LEU:HG	1:A:16:ILE:HG22	16	0.03
(1,366)	1:A:17:LEU:HG	1:A:16:ILE:HG23	16	0.03
(1,363)	1:A:17:LEU:HG	1:A:19:ILE:HG21	5	0.03
(1,363)	1:A:17:LEU:HG	1:A:19:ILE:HG22	5	0.03
(1,363)	1:A:17:LEU:HG	1:A:19:ILE:HG23	5	0.03
(1,363)	1:A:17:LEU:HG	1:A:19:ILE:HG21	11	0.03
(1,363)	1:A:17:LEU:HG	1:A:19:ILE:HG22	11	0.03
(1,363)	1:A:17:LEU:HG	1:A:19:ILE:HG23	11	0.03
(1,363)	1:A:17:LEU:HG	1:A:19:ILE:HG21	13	0.03
(1,363)	1:A:17:LEU:HG	1:A:19:ILE:HG22	13	0.03
(1,363)	1:A:17:LEU:HG	1:A:19:ILE:HG23	13	0.03
(1,363)	1:A:17:LEU:HG	1:A:19:ILE:HG21	20	0.03
(1,363)	1:A:17:LEU:HG	1:A:19:ILE:HG22	20	0.03
(1,363)	1:A:17:LEU:HG	1:A:19:ILE:HG23	20	0.03
(1,363)	1:A:17:LEU:HG	1:A:19:ILE:HG21	25	0.03
(1,363)	1:A:17:LEU:HG	1:A:19:ILE:HG22	25	0.03
(1,363)	1:A:17:LEU:HG	1:A:19:ILE:HG23	25	0.03
(1,360)	1:A:17:LEU:HA	1:A:19:ILE:HG21	3	0.03
(1,360)	1:A:17:LEU:HA	1:A:19:ILE:HG22	3	0.03
(1,360)	1:A:17:LEU:HA	1:A:19:ILE:HG23	3	0.03
(1,360)	1:A:17:LEU:HA	1:A:19:ILE:HG21	17	0.03
(1,360)	1:A:17:LEU:HA	1:A:19:ILE:HG22	17	0.03
(1,360)	1:A:17:LEU:HA	1:A:19:ILE:HG23	17	0.03
(1,316)	1:A:40:MET:HB2	1:A:39:LEU:HD21	7	0.03
(1,316)	1:A:40:MET:HB2	1:A:39:LEU:HD22	7	0.03
(1,316)	1:A:40:MET:HB2	1:A:39:LEU:HD23	7	0.03
(1,316)	1:A:40:MET:HB2	1:A:39:LEU:HD21	19	0.03
(1,316)	1:A:40:MET:HB2	1:A:39:LEU:HD22	19	0.03
(1,316)	1:A:40:MET:HB2	1:A:39:LEU:HD23	19	0.03
(1,315)	1:A:40:MET:HB3	1:A:39:LEU:HD21	1	0.03
(1,315)	1:A:40:MET:HB3	1:A:39:LEU:HD22	1	0.03
(1,315)	1:A:40:MET:HB3	1:A:39:LEU:HD23	1	0.03
(1,315)	1:A:40:MET:HB3	1:A:39:LEU:HD21	4	0.03



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

Key	Atom-1	$\mathbf{Atom} extbf{-2}$	Model	Violation (Å)
(1,315)	1:A:40:MET:HB3	1:A:39:LEU:HD22	4	0.03
(1,315)	1:A:40:MET:HB3	1:A:39:LEU:HD23	4	0.03
(1,315)	1:A:40:MET:HB3	1:A:39:LEU:HD21	5	0.03
(1,315)	1:A:40:MET:HB3	1:A:39:LEU:HD22	5	0.03
(1,315)	1:A:40:MET:HB3	1:A:39:LEU:HD23	5	0.03
(1,315)	1:A:40:MET:HB3	1:A:39:LEU:HD21	6	0.03
(1,315)	1:A:40:MET:HB3	1:A:39:LEU:HD22	6	0.03
(1,315)	1:A:40:MET:HB3	1:A:39:LEU:HD23	6	0.03
(1,315)	1:A:40:MET:HB3	1:A:39:LEU:HD21	9	0.03
(1,315)	1:A:40:MET:HB3	1:A:39:LEU:HD22	9	0.03
(1,315)	1:A:40:MET:HB3	1:A:39:LEU:HD23	9	0.03
(1,315)	1:A:40:MET:HB3	1:A:39:LEU:HD21	30	0.03
(1,315)	1:A:40:MET:HB3	1:A:39:LEU:HD22	30	0.03
(1,315)	1:A:40:MET:HB3	1:A:39:LEU:HD23	30	0.03
(1,306)	1:A:40:MET:HB3	1:A:38:SER:H	13	0.03
(1,297)	1:A:17:LEU:HD11	1:A:16:ILE:HA	25	0.03
(1,297)	1:A:17:LEU:HD12	1:A:16:ILE:HA	25	0.03
(1,297)	1:A:17:LEU:HD13	1:A:16:ILE:HA	25	0.03
(1,297)	1:A:17:LEU:HD21	1:A:16:ILE:HA	25	0.03
(1,297)	1:A:17:LEU:HD22	1:A:16:ILE:HA	25	0.03
(1,297)	1:A:17:LEU:HD23	1:A:16:ILE:HA	25	0.03
(1,294)	1:A:17:LEU:HD11	1:A:36:LEU:HB2	26	0.03
(1,294)	1:A:17:LEU:HD12	1:A:36:LEU:HB2	26	0.03
(1,294)	1:A:17:LEU:HD13	1:A:36:LEU:HB2	26	0.03
(1,294)	1:A:17:LEU:HD21	1:A:36:LEU:HB2	26	0.03
(1,294)	1:A:17:LEU:HD22	1:A:36:LEU:HB2	26	0.03
(1,294)	1:A:17:LEU:HD23	1:A:36:LEU:HB2	26	0.03
(1,294)	1:A:17:LEU:HD21	1:A:36:LEU:HB2	26	0.03
(1,294)	1:A:17:LEU:HD22	1:A:36:LEU:HB2	26	0.03
(1,294)	1:A:17:LEU:HD23	1:A:36:LEU:HB2	26	0.03
(1,241)	1:A:31:LEU:HD11	1:A:64:LEU:HG	6	0.03
(1,241)	1:A:31:LEU:HD12	1:A:64:LEU:HG	6	0.03
(1,241)	1:A:31:LEU:HD13	1:A:64:LEU:HG	6	0.03
(1,241)	1:A:31:LEU:HD11	1:A:64:LEU:HG	8	0.03
(1,241)	1:A:31:LEU:HD12	1:A:64:LEU:HG	8	0.03
(1,241)	1:A:31:LEU:HD13	1:A:64:LEU:HG	8	0.03
(1,239)	1:A:31:LEU:HD11	1:A:62:ARG:HG3	2	0.03
(1,239)	1:A:31:LEU:HD12	1:A:62:ARG:HG3	2	0.03
(1,239)	1:A:31:LEU:HD13	1:A:62:ARG:HG3	2	0.03
(1,239)	1:A:31:LEU:HD11	1:A:62:ARG:HG3	10	0.03
(1,239)	1:A:31:LEU:HD12	1:A:62:ARG:HG3	10	0.03
(1,239)	1:A:31:LEU:HD13	1:A:62:ARG:HG3	10	0.03



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,229)	1:A:31:LEU:HA	1:A:36:LEU:HD21	4	0.03
(1,229)	1:A:31:LEU:HA	1:A:36:LEU:HD22	4	0.03
(1,229)	1:A:31:LEU:HA	1:A:36:LEU:HD23	4	0.03
(1,229)	1:A:31:LEU:HA	1:A:36:LEU:HD21	12	0.03
(1,229)	1:A:31:LEU:HA	1:A:36:LEU:HD22	12	0.03
(1,229)	1:A:31:LEU:HA	1:A:36:LEU:HD23	12	0.03
(1,229)	1:A:31:LEU:HA	1:A:36:LEU:HD21	21	0.03
(1,229)	1:A:31:LEU:HA	1:A:36:LEU:HD22	21	0.03
(1,229)	1:A:31:LEU:HA	1:A:36:LEU:HD23	21	0.03
(1,228)	1:A:31:LEU:HA	1:A:31:LEU:HD21	19	0.03
(1,228)	1:A:31:LEU:HA	1:A:31:LEU:HD22	19	0.03
(1,228)	1:A:31:LEU:HA	1:A:31:LEU:HD23	19	0.03
(1,221)	1:A:31:LEU:HB2	1:A:36:LEU:HB2	13	0.03
(1,213)	1:A:30:SER:HB3	1:A:33:ASP:HA	8	0.03
(1,213)	1:A:30:SER:HB3	1:A:33:ASP:HA	25	0.03
(1,194)	1:A:29:SER:HB3	1:A:34:LEU:HG	20	0.03
(1,194)	1:A:29:SER:HB3	1:A:34:LEU:HG	29	0.03
(1,18)	1:A:71:GLU:HA	1:A:74:SER:H	15	0.03
(1,18)	1:A:71:GLU:HA	1:A:69:LEU:H	15	0.03
(1,177)	1:A:22:LEU:HD11	1:A:24:GLY:HA2	5	0.03
(1,177)	1:A:22:LEU:HD12	1:A:24:GLY:HA2	5	0.03
(1,177)	1:A:22:LEU:HD13	1:A:24:GLY:HA2	5	0.03
(1,177)	1:A:22:LEU:HD11	1:A:24:GLY:HA2	18	0.03
(1,177)	1:A:22:LEU:HD12	1:A:24:GLY:HA2	18	0.03
(1,177)	1:A:22:LEU:HD13	1:A:24:GLY:HA2	18	0.03
(1,177)	1:A:22:LEU:HD11	1:A:24:GLY:HA2	21	0.03
(1,177)	1:A:22:LEU:HD12	1:A:24:GLY:HA2	21	0.03
(1,177)	1:A:22:LEU:HD13	1:A:24:GLY:HA2	21	0.03
(1,1732)	1:A:32:ALA:H	1:A:65:THR:HG21	1	0.03
(1,1732)	1:A:32:ALA:H	1:A:65:THR:HG22	1	0.03
(1,1732)	1:A:32:ALA:H	1:A:65:THR:HG23	1	0.03
(1,1732)	1:A:32:ALA:H	1:A:65:THR:HG21	6	0.03
(1,1732)	1:A:32:ALA:H	1:A:65:THR:HG22	6	0.03
(1,1732)	1:A:32:ALA:H	1:A:65:THR:HG23	6	0.03
(1,1732)	1:A:32:ALA:H	1:A:65:THR:HG21	23	0.03
(1,1732)	1:A:32:ALA:H	1:A:65:THR:HG22	23	0.03
(1,1732)	1:A:32:ALA:H	1:A:65:THR:HG23	23	0.03
(1,1731)	1:A:4:GLU:H	1:A:3:GLY:H	13	0.03
(1,1726)	1:A:80:THR:H	1:A:81:GLU:H	20	0.03
(1,1726)	1:A:80:THR:H	1:A:81:GLU:H	26	0.03
(1,1710)	1:A:63:GLN:H	1:A:64:LEU:H	20	0.03
(1,1710)	1:A:63:GLN:H	1:A:64:LEU:H	23	0.03



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,171)	1:A:22:LEU:HG	1:A:21:ASP:HA	25	0.03
(1,1701)	1:A:47:ILE:H	1:A:48:LEU:H	25	0.03
(1,17)	1:A:72:MET:HB3	1:A:9:LEU:HD21	26	0.03
(1,17)	1:A:72:MET:HB3	1:A:9:LEU:HD22	26	0.03
(1,17)	1:A:72:MET:HB3	1:A:9:LEU:HD23	26	0.03
(1,17)	1:A:72:MET:HB3	1:A:48:LEU:HD11	26	0.03
(1,17)	1:A:72:MET:HB3	1:A:48:LEU:HD12	26	0.03
(1,17)	1:A:72:MET:HB3	1:A:48:LEU:HD13	26	0.03
(1,1692)	1:A:33:ASP:H	1:A:36:LEU:H	16	0.03
(1,1646)	1:A:9:LEU:HG	1:A:9:LEU:H	7	0.03
(1,1642)	1:A:9:LEU:HD11	1:A:6:GLN:HE21	4	0.03
(1,1642)	1:A:9:LEU:HD12	1:A:6:GLN:HE21	4	0.03
(1,1642)	1:A:9:LEU:HD13	1:A:6:GLN:HE21	4	0.03
(1,1642)	1:A:9:LEU:HD11	1:A:6:GLN:HE21	21	0.03
(1,1642)	1:A:9:LEU:HD12	1:A:6:GLN:HE21	21	0.03
(1,1642)	1:A:9:LEU:HD13	1:A:6:GLN:HE21	21	0.03
(1,1631)	1:A:73:SER:HB2	1:A:10:VAL:HG21	8	0.03
(1,1631)	1:A:73:SER:HB2	1:A:10:VAL:HG22	8	0.03
(1,1631)	1:A:73:SER:HB2	1:A:10:VAL:HG23	8	0.03
(1,1598)	1:A:70:GLN:HB2	1:A:9:LEU:HD21	18	0.03
(1,1598)	1:A:70:GLN:HB2	1:A:9:LEU:HD22	18	0.03
(1,1598)	1:A:70:GLN:HB2	1:A:9:LEU:HD23	18	0.03
(1,1598)	1:A:70:GLN:HB3	1:A:9:LEU:HD21	18	0.03
(1,1598)	1:A:70:GLN:HB3	1:A:9:LEU:HD22	18	0.03
(1,1598)	1:A:70:GLN:HB3	1:A:9:LEU:HD23	18	0.03
(1,1598)	1:A:70:GLN:HB2	1:A:9:LEU:HD21	21	0.03
(1,1598)	1:A:70:GLN:HB2	1:A:9:LEU:HD22	21	0.03
(1,1598)	1:A:70:GLN:HB2	1:A:9:LEU:HD23	21	0.03
(1,1598)	1:A:70:GLN:HB3	1:A:9:LEU:HD21	21	0.03
(1,1598)	1:A:70:GLN:HB3	1:A:9:LEU:HD22	21	0.03
(1,1598)	1:A:70:GLN:HB3	1:A:9:LEU:HD23	21	0.03
(1,1598)	1:A:70:GLN:HB2	1:A:9:LEU:HD21	22	0.03
(1,1598)	1:A:70:GLN:HB2	1:A:9:LEU:HD22	22	0.03
(1,1598)	1:A:70:GLN:HB2	1:A:9:LEU:HD23	22	0.03
(1,1598)	1:A:70:GLN:HB3	1:A:9:LEU:HD21	22	0.03
(1,1598)	1:A:70:GLN:HB3	1:A:9:LEU:HD22	22	0.03
(1,1598)	1:A:70:GLN:HB3	1:A:9:LEU:HD23	22	0.03
(1,1595)	1:A:68:LYS:HB2	1:A:64:LEU:H	21	0.03
(1,1595)	1:A:68:LYS:HB3	1:A:64:LEU:H	21	0.03
(1,1595)	1:A:68:LYS:HB2	1:A:64:LEU:H	21	0.03
(1,1595)	1:A:68:LYS:HB3	1:A:64:LEU:H	21	0.03
(1,1589)	1:A:20:ARG:HG3	1:A:67:ARG:HE	20	0.03



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1589)	1:A:20:ARG:HG3	1:A:67:ARG:HE	24	0.03
(1,1588)	1:A:7:ARG:HG2	1:A:12:ALA:H	24	0.03
(1,1588)	1:A:7:ARG:HG3	1:A:12:ALA:H	24	0.03
(1,1587)	1:A:9:LEU:HG	1:A:75:LYS:HE2	17	0.03
(1,1587)	1:A:9:LEU:HG	1:A:75:LYS:HE3	17	0.03
(1,1587)	1:A:9:LEU:HG	1:A:75:LYS:HE2	19	0.03
(1,1587)	1:A:9:LEU:HG	1:A:75:LYS:HE3	19	0.03
(1,1585)	1:A:59:ARG:HG3	1:A:57:PRO:HB3	14	0.03
(1,1580)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:20:ARG:HD2	2	0.03
(1,1580)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:20:ARG:HD3	2	0.03
(1,1580)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:20:ARG:HD2	2	0.03
(1,1580)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:20:ARG:HD3	2	0.03
(1,1580)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:20:ARG:HD2	2	0.03
(1,1580)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:20:ARG:HD3	2	0.03
(1,1578)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:22:LEU:HA	9	0.03
(1,1578)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:22:LEU:HA	9	0.03
(1,1578)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:22:LEU:HA	9	0.03
(1,1576)	1:A:66:LEU:HD11	1:A:65:THR:HA	1	0.03
(1,1576)	1:A:66:LEU:HD12	1:A:65:THR:HA	1	0.03
(1,1576)	1:A:66:LEU:HD13	1:A:65:THR:HA	1	0.03
(1,1576)	1:A:66:LEU:HD11	1:A:65:THR:HA	8	0.03
(1,1576)	1:A:66:LEU:HD12	1:A:65:THR:HA	8	0.03
(1,1576)	1:A:66:LEU:HD13	1:A:65:THR:HA	8	0.03
(1,1576)	1:A:66:LEU:HD11	1:A:65:THR:HA	12	0.03
(1,1576)	1:A:66:LEU:HD12	1:A:65:THR:HA	12	0.03
(1,1576)	1:A:66:LEU:HD13	1:A:65:THR:HA	12	0.03
(1,1575)	1:A:66:LEU:HD11	1:A:13:VAL:H	1	0.03
(1,1575)	1:A:66:LEU:HD12	1:A:13:VAL:H	1	0.03
(1,1575)	1:A:66:LEU:HD13	1:A:13:VAL:H	1	0.03
(1,1575)	1:A:66:LEU:HD11	1:A:13:VAL:H	14	0.03
(1,1575)	1:A:66:LEU:HD12	1:A:13:VAL:H	14	0.03
(1,1575)	1:A:66:LEU:HD13	1:A:13:VAL:H	14	0.03
(1,1574)	1:A:16:ILE:HG21	1:A:40:MET:HG2	6	0.03
(1,1574)	1:A:16:ILE:HG22	1:A:40:MET:HG2	6	0.03
(1,1574)	1:A:16:ILE:HG23	1:A:40:MET:HG2	6	0.03
(1,1574)	1:A:16:ILE:HG21	1:A:40:MET:HG2	19	0.03
(1,1574)	1:A:16:ILE:HG22	1:A:40:MET:HG2	19	0.03
(1,1574)	1:A:16:ILE:HG23	1:A:40:MET:HG2	19	0.03
(1,1573)	1:A:16:ILE:HG21	1:A:40:MET:HG3	27	0.03
(1,1573)	1:A:16:ILE:HG22	1:A:40:MET:HG3	27	0.03
(1,1573)	1:A:16:ILE:HG23	1:A:40:MET:HG3	27	0.03
(1,1553)	1:A:19:ILE:HG21	1:A:26:ASN:H	7	0.03



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1553)	1:A:19:ILE:HG22	1:A:26:ASN:H	7	0.03
(1,1553)	1:A:19:ILE:HG23	1:A:26:ASN:H	7	0.03
(1,1553)	1:A:19:ILE:HG21	1:A:26:ASN:H	20	0.03
(1,1553)	1:A:19:ILE:HG22	1:A:26:ASN:H	20	0.03
(1,1553)	1:A:19:ILE:HG23	1:A:26:ASN:H	20	0.03
(1,1553)	1:A:19:ILE:HG21	1:A:26:ASN:H	21	0.03
(1,1553)	1:A:19:ILE:HG22	1:A:26:ASN:H	21	0.03
(1,1553)	1:A:19:ILE:HG23	1:A:26:ASN:H	21	0.03
(1,1553)	1:A:19:ILE:HG21	1:A:26:ASN:H	26	0.03
(1,1553)	1:A:19:ILE:HG22	1:A:26:ASN:H	26	0.03
(1,1553)	1:A:19:ILE:HG23	1:A:26:ASN:H	26	0.03
(1,1553)	1:A:19:ILE:HG21	1:A:26:ASN:H	27	0.03
(1,1553)	1:A:19:ILE:HG22	1:A:26:ASN:H	27	0.03
	1:A:19:ILE:HG23	1:A:26:ASN:H	27	0.03
(1,1546)	1:A:44:VAL:HG11	1:A:42:VAL:HA	1	0.03
(1,1546)	1:A:44:VAL:HG12	1:A:42:VAL:HA	1	0.03
(1,1546)	1:A:44:VAL:HG13	1:A:42:VAL:HA	1	0.03
(1,1546)	1:A:44:VAL:HG11	1:A:42:VAL:HA	5	0.03
(1,1546)	1:A:44:VAL:HG12	1:A:42:VAL:HA	5	0.03
(1,1546)	1:A:44:VAL:HG13	1:A:42:VAL:HA	5	0.03
(1,1546)	1:A:44:VAL:HG11	1:A:42:VAL:HA	12	0.03
(1,1546)	1:A:44:VAL:HG12	1:A:42:VAL:HA	12	0.03
(1,1546)	1:A:44:VAL:HG13	1:A:42:VAL:HA	12	0.03
(1,1546)	1:A:44:VAL:HG11	1:A:42:VAL:HA	16	0.03
(1,1546)	1:A:44:VAL:HG12	1:A:42:VAL:HA	16	0.03
(1,1546)	1:A:44:VAL:HG13	1:A:42:VAL:HA	16	0.03
(1,1546)	1:A:44:VAL:HG11	1:A:42:VAL:HA	22	0.03
(1,1546)	1:A:44:VAL:HG12	1:A:42:VAL:HA	22	0.03
(1,1546)	1:A:44:VAL:HG13	1:A:42:VAL:HA	22	0.03
(1,1546)	1:A:44:VAL:HG11	1:A:42:VAL:HA	23	0.03
(1,1546)	1:A:44:VAL:HG12	1:A:42:VAL:HA	23	0.03
(1,1546)	1:A:44:VAL:HG13	1:A:42:VAL:HA	23	0.03
(1,1546)	1:A:44:VAL:HG11	1:A:42:VAL:HA	27	0.03
(1,1546)	1:A:44:VAL:HG12	1:A:42:VAL:HA	27	0.03
(1,1546)	1:A:44:VAL:HG13	1:A:42:VAL:HA	27	0.03
(1,1545)	1:A:44:VAL:HG21	1:A:45:ARG:HE	14	0.03
(1,1545)	1:A:44:VAL:HG22	1:A:45:ARG:HE	14	0.03
(1,1545)	1:A:44:VAL:HG23	1:A:45:ARG:HE	14	0.03
(1,1534)	1:A:10:VAL:HG11	1:A:70:GLN:HE21	23	0.03
(1,1534)	1:A:10:VAL:HG12	1:A:70:GLN:HE21	23	0.03
(1,1534)	1:A:10:VAL:HG13	1:A:70:GLN:HE21	23	0.03
(1,1531)	1:A:10:VAL:HG21	1:A:72:MET:H	8	0.03



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1531)	1:A:10:VAL:HG22	1:A:72:MET:H	8	0.03
(1,1531)	1:A:10:VAL:HG23	1:A:72:MET:H	8	0.03
(1,1523)	1:A:73:SER:HA	1:A:70:GLN:H	16	0.03
(1,1523)	1:A:73:SER:HA	1:A:70:GLN:H	19	0.03
(1,1521)	1:A:73:SER:HA	1:A:9:LEU:HD11	3	0.03
(1,1521)	1:A:73:SER:HA	1:A:9:LEU:HD12	3	0.03
(1,1521)	1:A:73:SER:HA	1:A:9:LEU:HD13	3	0.03
(1,1509)	1:A:72:MET:HG2	1:A:9:LEU:HD11	7	0.03
(1,1509)	1:A:72:MET:HG2	1:A:9:LEU:HD12	7	0.03
(1,1509)	1:A:72:MET:HG2	1:A:9:LEU:HD13	7	0.03
(1,1509)	1:A:72:MET:HG2	1:A:9:LEU:HD11	16	0.03
(1,1509)	1:A:72:MET:HG2	1:A:9:LEU:HD12	16	0.03
(1,1509)	1:A:72:MET:HG2	1:A:9:LEU:HD13	16	0.03
(1,1505)	1:A:55:VAL:HG11	1:A:59:ARG:HD2	6	0.03
(1,1505)	1:A:55:VAL:HG11	1:A:59:ARG:HD3	6	0.03
(1,1505)	1:A:55:VAL:HG12	1:A:59:ARG:HD2	6	0.03
(1,1505)	1:A:55:VAL:HG12	1:A:59:ARG:HD3	6	0.03
(1,1505)	1:A:55:VAL:HG13	1:A:59:ARG:HD2	6	0.03
(1,1505)	1:A:55:VAL:HG13	1:A:59:ARG:HD3	6	0.03
(1,1505)	1:A:55:VAL:HG11	1:A:59:ARG:HD2	15	0.03
(1,1505)	1:A:55:VAL:HG11	1:A:59:ARG:HD3	15	0.03
(1,1505)	1:A:55:VAL:HG12	1:A:59:ARG:HD2	15	0.03
(1,1505)	1:A:55:VAL:HG12	1:A:59:ARG:HD3	15	0.03
(1,1505)	1:A:55:VAL:HG13	1:A:59:ARG:HD2	15	0.03
(1,1505)	1:A:55:VAL:HG13	1:A:59:ARG:HD3	15	0.03
(1,1505)	1:A:55:VAL:HG11	1:A:59:ARG:HD2	19	0.03
(1,1505)	1:A:55:VAL:HG11	1:A:59:ARG:HD3	19	0.03
(1,1505)	1:A:55:VAL:HG12	1:A:59:ARG:HD2	19	0.03
(1,1505)	1:A:55:VAL:HG12	1:A:59:ARG:HD3	19	0.03
(1,1505)	1:A:55:VAL:HG13	1:A:59:ARG:HD2	19	0.03
(1,1505)	1:A:55:VAL:HG13	1:A:59:ARG:HD3	19	0.03
(1,1505)	1:A:55:VAL:HG11	1:A:59:ARG:HD2	21	0.03
(1,1505)	1:A:55:VAL:HG11	1:A:59:ARG:HD3	21	0.03
(1,1505)	1:A:55:VAL:HG12	1:A:59:ARG:HD2	21	0.03
(1,1505)	1:A:55:VAL:HG12	1:A:59:ARG:HD3	21	0.03
(1,1505)	1:A:55:VAL:HG13	1:A:59:ARG:HD2	21	0.03
(1,1505)	1:A:55:VAL:HG13	1:A:59:ARG:HD3	21	0.03
(1,1505)	1:A:55:VAL:HG11	1:A:59:ARG:HD2	29	0.03
(1,1505)	1:A:55:VAL:HG11	1:A:59:ARG:HD3	29	0.03
(1,1505)	1:A:55:VAL:HG12	1:A:59:ARG:HD2	29	0.03
(1,1505)	1:A:55:VAL:HG12	1:A:59:ARG:HD3	29	0.03
(1,1505)	1:A:55:VAL:HG13	1:A:59:ARG:HD2	29	0.03



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1505)	1:A:55:VAL:HG13	1:A:59:ARG:HD3	29	0.03
(1,1503)	1:A:55:VAL:HG11	1:A:49:GLU:H	2	0.03
(1,1503)	1:A:55:VAL:HG12	1:A:49:GLU:H	2	0.03
(1,1503)	1:A:55:VAL:HG13	1:A:49:GLU:H	2	0.03
	1:A:67:ARG:HD2	1:A:69:LEU:H	7	0.03
(1,1498)	1:A:67:ARG:HD2	1:A:69:LEU:H	15	0.03
(1,1497)	1:A:65:THR:HG21	1:A:63:GLN:HB2	11	0.03
(1,1497)	1:A:65:THR:HG22	1:A:63:GLN:HB2	11	0.03
(1,1497)	1:A:65:THR:HG23	1:A:63:GLN:HB2	11	0.03
(1,1494)	1:A:46:GLN:HG2	1:A:50:ARG:HD2	19	0.03
(1,1494)	1:A:46:GLN:HG2	1:A:50:ARG:HD3	19	0.03
(1,1491)	1:A:42:VAL:HG21	1:A:46:GLN:HG2	11	0.03
(1,1491)	1:A:42:VAL:HG22	1:A:46:GLN:HG2	11	0.03
(1,1491)	1:A:42:VAL:HG23	1:A:46:GLN:HG2	11	0.03
(1,1484)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:19:ILE:HB	22	0.03
(1,1484)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:19:ILE:HB	22	0.03
(1,1484)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:19:ILE:HB	22	0.03
(1,1484)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:19:ILE:HB	26	0.03
(1,1484)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:19:ILE:HB	26	0.03
(1,1484)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:19:ILE:HB	26	0.03
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:13:VAL:HG11	3	0.03
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:13:VAL:HG12	3	0.03
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:13:VAL:HG13	3	0.03
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:13:VAL:HG11	3	0.03
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:13:VAL:HG12	3	0.03
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:13:VAL:HG13	3	0.03
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:13:VAL:HG11	3	0.03
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:13:VAL:HG12	3	0.03
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:13:VAL:HG13	3	0.03
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:13:VAL:HG11	4	0.03
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:13:VAL:HG12	4	0.03
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:13:VAL:HG13	4	0.03
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:13:VAL:HG11	4	0.03
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:13:VAL:HG12	4	0.03
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:13:VAL:HG13	4	0.03
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:13:VAL:HG11	4	0.03
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:13:VAL:HG12	4	0.03
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:13:VAL:HG13	4	0.03
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:13:VAL:HG11	5	0.03
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:13:VAL:HG12	5	0.03
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:13:VAL:HG13	5	0.03
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:13:VAL:HG11	5	0.03



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

Key	$egin{aligned} Atom-1 \end{aligned}$	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:13:VAL:HG12	5	0.03
	1:A:14:ALA:HB2	1:A:13:VAL:HG13	5	0.03
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:13:VAL:HG11	5	0.03
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:13:VAL:HG12	5	0.03
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:13:VAL:HG13	5	0.03
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:13:VAL:HG11	9	0.03
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:13:VAL:HG12	9	0.03
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:13:VAL:HG13	9	0.03
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:13:VAL:HG11	9	0.03
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:13:VAL:HG12	9	0.03
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:13:VAL:HG13	9	0.03
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:13:VAL:HG11	9	0.03
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:13:VAL:HG12	9	0.03
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:13:VAL:HG13	9	0.03
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:13:VAL:HG11	10	0.03
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:13:VAL:HG12	10	0.03
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:13:VAL:HG13	10	0.03
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:13:VAL:HG11	10	0.03
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:13:VAL:HG12	10	0.03
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:13:VAL:HG13	10	0.03
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:13:VAL:HG11	10	0.03
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:13:VAL:HG12	10	0.03
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:13:VAL:HG13	10	0.03
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:13:VAL:HG11	15	0.03
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:13:VAL:HG12	15	0.03
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:13:VAL:HG13	15	0.03
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:13:VAL:HG11	15	0.03
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:13:VAL:HG12	15	0.03
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:13:VAL:HG13	15	0.03
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:13:VAL:HG11	15	0.03
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:13:VAL:HG12	15	0.03
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:13:VAL:HG13	15	0.03
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:13:VAL:HG11	17	0.03
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:13:VAL:HG12	17	0.03
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:13:VAL:HG13	17	0.03
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:13:VAL:HG11	17	0.03
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:13:VAL:HG12	17	0.03
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:13:VAL:HG13	17	0.03
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:13:VAL:HG11	17	0.03
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:13:VAL:HG12	17	0.03
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:13:VAL:HG13	17	0.03
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:13:VAL:HG11	19	0.03



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:13:VAL:HG12	19	0.03
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:13:VAL:HG13	19	0.03
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:13:VAL:HG11	19	0.03
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:13:VAL:HG12	19	0.03
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:13:VAL:HG13	19	0.03
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:13:VAL:HG11	19	0.03
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:13:VAL:HG12	19	0.03
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:13:VAL:HG13	19	0.03
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:13:VAL:HG11	29	0.03
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:13:VAL:HG12	29	0.03
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:13:VAL:HG13	29	0.03
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:13:VAL:HG11	29	0.03
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:13:VAL:HG12	29	0.03
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:13:VAL:HG13	29	0.03
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:13:VAL:HG11	29	0.03
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:13:VAL:HG12	29	0.03
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:13:VAL:HG13	29	0.03
(1,1465)	1:A:14:ALA:HA	1:A:13:VAL:HG11	10	0.03
(1,1465)	1:A:14:ALA:HA	1:A:13:VAL:HG12	10	0.03
(1,1465)	1:A:14:ALA:HA	1:A:13:VAL:HG13	10	0.03
(1,1447)	1:A:13:VAL:HG11	1:A:17:LEU:HG	21	0.03
(1,1447)	1:A:13:VAL:HG12	1:A:17:LEU:HG	21	0.03
(1,1447)	1:A:13:VAL:HG13	1:A:17:LEU:HG	21	0.03
(1,1445)	1:A:44:VAL:HG11	1:A:47:ILE:HG13	1	0.03
(1,1445)	1:A:44:VAL:HG12	1:A:47:ILE:HG13	1	0.03
(1,1445)	1:A:44:VAL:HG13	1:A:47:ILE:HG13	1	0.03
(1,1429)	1:A:42:VAL:HG21	1:A:39:LEU:H	18	0.03
(1,1429)	1:A:42:VAL:HG22	1:A:39:LEU:H	18	0.03
(1,1429)	1:A:42:VAL:HG23	1:A:39:LEU:H	18	0.03
(1,1423)	1:A:42:VAL:HG21	1:A:39:LEU:HG	15	0.03
(1,1423)	1:A:42:VAL:HG22	1:A:39:LEU:HG	15	0.03
(1,1423)	1:A:42:VAL:HG23	1:A:39:LEU:HG	15	0.03
(1,1411)	1:A:42:VAL:HG11	1:A:43:GLU:HG3	8	0.03
(1,1411)	1:A:42:VAL:HG12	1:A:43:GLU:HG3	8	0.03
(1,1411)	1:A:42:VAL:HG13	1:A:43:GLU:HG3	8	0.03
(1,1411)	1:A:42:VAL:HG11	1:A:43:GLU:HG3	9	0.03
(1,1411)	1:A:42:VAL:HG12	1:A:43:GLU:HG3	9	0.03
(1,1411)	1:A:42:VAL:HG13	1:A:43:GLU:HG3	9	0.03
(1,1407)	1:A:42:VAL:HA	1:A:44:VAL:H	3	0.03
(1,1407)	1:A:42:VAL:HA	1:A:44:VAL:H	7	0.03
(1,1407)	1:A:42:VAL:HA	1:A:44:VAL:H	27	0.03
(1,1407)	1:A:42:VAL:HA	1:A:44:VAL:H	29	0.03



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1407)	1:A:42:VAL:HA	1:A:44:VAL:H	30	0.03
(1,1404)	1:A:42:VAL:HB	1:A:42:VAL:H	18	0.03
(1,1402)	1:A:42:VAL:HA	1:A:45:ARG:HB3	3	0.03
(1,1402)	1:A:42:VAL:HA	1:A:45:ARG:HB3	21	0.03
(1,1393)	1:A:44:VAL:HA	1:A:48:LEU:HG	5	0.03
(1,1393)	1:A:44:VAL:HA	1:A:48:LEU:HG	6	0.03
(1,1393)	1:A:44:VAL:HA	1:A:48:LEU:HG	7	0.03
(1,1393)	1:A:44:VAL:HA	1:A:48:LEU:HG	10	0.03
(1,1393)	1:A:44:VAL:HA	1:A:48:LEU:HG	12	0.03
(1,1393)	1:A:44:VAL:HA	1:A:48:LEU:HG	26	0.03
(1,1376)	1:A:12:ALA:HB1	1:A:7:ARG:HD2	9	0.03
(1,1376)	1:A:12:ALA:HB1	1:A:7:ARG:HD3	9	0.03
(1,1376)	1:A:12:ALA:HB2	1:A:7:ARG:HD2	9	0.03
(1,1376)	1:A:12:ALA:HB2	1:A:7:ARG:HD3	9	0.03
(1,1376)	1:A:12:ALA:HB3	1:A:7:ARG:HD2	9	0.03
(1,1376)	1:A:12:ALA:HB3	1:A:7:ARG:HD3	9	0.03
(1,1334)	1:A:68:LYS:HE2	1:A:68:LYS:HB2	5	0.03
(1,1334)	1:A:68:LYS:HE2	1:A:68:LYS:HB3	5	0.03
(1,1334)	1:A:68:LYS:HE3	1:A:68:LYS:HB2	5	0.03
(1,1334)	1:A:68:LYS:HE3	1:A:68:LYS:HB3	5	0.03
(1,1334)	1:A:68:LYS:HE2	1:A:68:LYS:HB2	6	0.03
(1,1334)	1:A:68:LYS:HE2	1:A:68:LYS:HB3	6	0.03
(1,1334)	1:A:68:LYS:HE3	1:A:68:LYS:HB2	6	0.03
(1,1334)	1:A:68:LYS:HE3	1:A:68:LYS:HB3	6	0.03
(1,1334)	1:A:68:LYS:HE2	1:A:68:LYS:HB2	28	0.03
(1,1334)	1:A:68:LYS:HE2	1:A:68:LYS:HB3	28	0.03
(1,1334)	1:A:68:LYS:HE3	1:A:68:LYS:HB2	28	0.03
(1,1334)	1:A:68:LYS:HE3	1:A:68:LYS:HB3	28	0.03
(1,1332)	1:A:68:LYS:HE2	1:A:69:LEU:H	3	0.03
(1,1332)	1:A:68:LYS:HE3	1:A:69:LEU:H	3	0.03
(1,1332)	1:A:68:LYS:HE2	1:A:69:LEU:H	29	0.03
(1,1332)	1:A:68:LYS:HE3	1:A:69:LEU:H	29	0.03
(1,1314)	1:A:64:LEU:HD21	1:A:68:LYS:HD2	29	0.03
(1,1314)	1:A:64:LEU:HD21	1:A:68:LYS:HD3	29	0.03
(1,1314)	1:A:64:LEU:HD22	1:A:68:LYS:HD2	29	0.03
(1,1314)	1:A:64:LEU:HD22	1:A:68:LYS:HD3	29	0.03
(1,1314)	1:A:64:LEU:HD23	1:A:68:LYS:HD2	29	0.03
(1,1314)	1:A:64:LEU:HD23	1:A:68:LYS:HD3	29	0.03
(1,1314)	1:A:64:LEU:HD21	1:A:68:LYS:HD2	30	0.03
(1,1314)	1:A:64:LEU:HD21	1:A:68:LYS:HD3	30	0.03
(1,1314)	1:A:64:LEU:HD22	1:A:68:LYS:HD2	30	0.03
(1,1314)	1:A:64:LEU:HD22	1:A:68:LYS:HD3	30	0.03



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1314)	1:A:64:LEU:HD23	1:A:68:LYS:HD2	30	0.03
(1,1314)	1:A:64:LEU:HD23	1:A:68:LYS:HD3	30	0.03
(1,1311)	1:A:64:LEU:HA	1:A:68:LYS:HD2	4	0.03
(1,1311)	1:A:64:LEU:HA	1:A:68:LYS:HD3	4	0.03
(1,1311)	1:A:64:LEU:HA	1:A:68:LYS:HD2	5	0.03
(1,1311)	1:A:64:LEU:HA	1:A:68:LYS:HD3	5	0.03
(1,1311)	1:A:64:LEU:HA	1:A:68:LYS:HD2	23	0.03
(1,1311)	1:A:64:LEU:HA	1:A:68:LYS:HD3	23	0.03
(1,1308)	1:A:64:LEU:HA	1:A:63:GLN:HE21	4	0.03
(1,1308)	1:A:64:LEU:HA	1:A:63:GLN:HE21	15	0.03
(1,1308)	1:A:64:LEU:HA	1:A:63:GLN:HE21	29	0.03
(1,1303)	1:A:64:LEU:HB2	1:A:31:LEU:HB3	17	0.03
(1,1285)	1:A:62:ARG:HD2	1:A:32:ALA:HB1	16	0.03
(1,1285)	1:A:62:ARG:HD2	1:A:32:ALA:HB2	16	0.03
(1,1285)	1:A:62:ARG:HD2	1:A:32:ALA:HB3	16	0.03
(1,1267)	1:A:61:VAL:HG21	1:A:60:GLU:HB3	29	0.03
(1,1267)	1:A:61:VAL:HG22	1:A:60:GLU:HB3	29	0.03
(1,1267)	1:A:61:VAL:HG23	1:A:60:GLU:HB3	29	0.03
(1,1252)	1:A:61:VAL:HA	1:A:63:GLN:HE22	3	0.03
(1,1252)	1:A:61:VAL:HA	1:A:63:GLN:HE22	11	0.03
(1,1252)	1:A:61:VAL:HA	1:A:63:GLN:HE22	12	0.03
(1,1252)	1:A:61:VAL:HA	1:A:63:GLN:HE22	14	0.03
(1,1252)	1:A:61:VAL:HA	1:A:63:GLN:HE22	15	0.03
(1,1252)	1:A:61:VAL:HA	1:A:63:GLN:HE22	29	0.03
(1,1252)	1:A:61:VAL:HA	1:A:63:GLN:HE22	30	0.03
(1,1239)	1:A:60:GLU:HB3	1:A:56:LEU:HB2	4	0.03
(1,1221)	1:A:58:ILE:HG21	1:A:57:PRO:HB3	8	0.03
(1,1221)	1:A:58:ILE:HG22	1:A:57:PRO:HB3	8	0.03
(1,1221)	1:A:58:ILE:HG23	1:A:57:PRO:HB3	8	0.03
(1,1221)	1:A:58:ILE:HG21	1:A:57:PRO:HB3	10	0.03
(1,1221)	1:A:58:ILE:HG22	1:A:57:PRO:HB3	10	0.03
(1,1221)	1:A:58:ILE:HG23	1:A:57:PRO:HB3	10	0.03
(1,1204)	1:A:58:ILE:HA	1:A:61:VAL:HB	29	0.03
(1,12)	1:A:41:GLY:HA2	1:A:61:VAL:HG11	6	0.03
(1,12)	1:A:41:GLY:HA2	1:A:61:VAL:HG12	6	0.03
(1,12)	1:A:41:GLY:HA2	1:A:61:VAL:HG13	6	0.03
(1,12)	1:A:41:GLY:HA2	1:A:58:ILE:HD11	6	0.03
(1,12)	1:A:41:GLY:HA2	1:A:58:ILE:HD12	6	0.03
(1,12)	1:A:41:GLY:HA2	1:A:58:ILE:HD13	6	0.03
(1,12)	1:A:41:GLY:HA2	1:A:64:LEU:HD11	6	0.03
(1,12)	1:A:41:GLY:HA2	1:A:64:LEU:HD12	6	0.03
(1,12)	1:A:41:GLY:HA2	1:A:64:LEU:HD13	6	0.03



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,119)	1:A:4:GLU:HB3	1:A:5:ALA:H	29	0.03
(1,1183)	1:A:56:LEU:HB2	1:A:57:PRO:HB2	10	0.03
(1,1183)	1:A:56:LEU:HB2	1:A:57:PRO:HG2	10	0.03
(1,1183)	1:A:56:LEU:HB2	1:A:57:PRO:HB2	11	0.03
(1,1183)	1:A:56:LEU:HB2	1:A:57:PRO:HG2	11	0.03
(1,1183)	1:A:56:LEU:HB2	1:A:57:PRO:HB2	19	0.03
(1,1183)	1:A:56:LEU:HB2	1:A:57:PRO:HG2	19	0.03
(1,1183)	1:A:56:LEU:HB2	1:A:57:PRO:HB2	27	0.03
(1,1183)	1:A:56:LEU:HB2	1:A:57:PRO:HG2	27	0.03
(1,1183)	1:A:56:LEU:HB2	1:A:57:PRO:HB2	30	0.03
(1,1183)	1:A:56:LEU:HB2	1:A:57:PRO:HG2	30	0.03
(1,1172)	1:A:55:VAL:HA	1:A:57:PRO:HG3	19	0.03
(1,1168)	1:A:54:LEU:HG	1:A:56:LEU:HD21	11	0.03
(1,1168)	1:A:54:LEU:HG	1:A:56:LEU:HD22	11	0.03
(1,1168)	1:A:54:LEU:HG	1:A:56:LEU:HD23	11	0.03
(1,1168)	1:A:54:LEU:HG	1:A:56:LEU:HD21	12	0.03
(1,1168)	1:A:54:LEU:HG	1:A:56:LEU:HD22	12	0.03
(1,1168)	1:A:54:LEU:HG	1:A:56:LEU:HD23	12	0.03
(1,1168)	1:A:54:LEU:HG	1:A:56:LEU:HD21	22	0.03
(1,1168)	1:A:54:LEU:HG	1:A:56:LEU:HD22	22	0.03
(1,1168)	1:A:54:LEU:HG	1:A:56:LEU:HD23	22	0.03
(1,1147)	1:A:54:LEU:HB2	1:A:48:LEU:HB3	14	0.03
(1,1147)	1:A:54:LEU:HB2	1:A:48:LEU:HB3	16	0.03
(1,1108)	1:A:48:LEU:HA	1:A:52:HIS:HB3	25	0.03
(1,11)	1:A:41:GLY:HA2	1:A:61:VAL:HG11	6	0.03
(1,11)	1:A:41:GLY:HA2	1:A:61:VAL:HG12	6	0.03
(1,11)	1:A:41:GLY:HA2	1:A:61:VAL:HG13	6	0.03
(1,11)	1:A:41:GLY:HA2	1:A:58:ILE:HD11	6	0.03
(1,11)	1:A:41:GLY:HA2	1:A:58:ILE:HD12	6	0.03
(1,11)	1:A:41:GLY:HA2	1:A:58:ILE:HD13	6	0.03
(1,11)	1:A:41:GLY:HA2	1:A:64:LEU:HD11	6	0.03
(1,11)	1:A:41:GLY:HA2	1:A:64:LEU:HD12	6	0.03
(1,11)	1:A:41:GLY:HA2	1:A:64:LEU:HD13	6	0.03
(1,1095)	1:A:39:LEU:HD21	1:A:42:VAL:H	3	0.03
(1,1095)	1:A:39:LEU:HD22	1:A:42:VAL:H	3	0.03
(1,1095)	1:A:39:LEU:HD23	1:A:42:VAL:H	3	0.03
(1,1095)	1:A:39:LEU:HD21	1:A:42:VAL:H	4	0.03
(1,1095)	1:A:39:LEU:HD22	1:A:42:VAL:H	4	0.03
(1,1095)	1:A:39:LEU:HD23	1:A:42:VAL:H	4	0.03
(1,1095)	1:A:39:LEU:HD21	1:A:42:VAL:H	22	0.03
(1,1095)	1:A:39:LEU:HD22	1:A:42:VAL:H	22	0.03
(1,1095)	1:A:39:LEU:HD23	1:A:42:VAL:H	22	0.03



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1095)	1:A:39:LEU:HD21	1:A:42:VAL:H	25	0.03
(1,1095)	1:A:39:LEU:HD22	1:A:42:VAL:H	25	0.03
(1,1095)	1:A:39:LEU:HD23	1:A:42:VAL:H	25	0.03
(1,1095)	1:A:39:LEU:HD21	1:A:42:VAL:H	26	0.03
(1,1095)	1:A:39:LEU:HD22	1:A:42:VAL:H	26	0.03
(1,1095)	1:A:39:LEU:HD23	1:A:42:VAL:H	26	0.03
(1,1064)	1:A:36:LEU:HD21	1:A:42:VAL:H	30	0.03
(1,1064)	1:A:36:LEU:HD22	1:A:42:VAL:H	30	0.03
(1,1064)	1:A:36:LEU:HD23	1:A:42:VAL:H	30	0.03
(1,1061)	1:A:36:LEU:HD21	1:A:38:SER:H	3	0.03
(1,1061)	1:A:36:LEU:HD22	1:A:38:SER:H	3	0.03
(1,1061)	1:A:36:LEU:HD23	1:A:38:SER:H	3	0.03
(1,1061)	1:A:36:LEU:HD21	1:A:38:SER:H	4	0.03
(1,1061)	1:A:36:LEU:HD22	1:A:38:SER:H	4	0.03
(1,1061)	1:A:36:LEU:HD23	1:A:38:SER:H	4	0.03
(1,1061)	1:A:36:LEU:HD21	1:A:38:SER:H	9	0.03
(1,1061)	1:A:36:LEU:HD22	1:A:38:SER:H	9	0.03
(1,1061)	1:A:36:LEU:HD23	1:A:38:SER:H	9	0.03
(1,1056)	1:A:36:LEU:HD21	1:A:62:ARG:HA	13	0.03
(1,1056)	1:A:36:LEU:HD22	1:A:62:ARG:HA	13	0.03
(1,1056)	1:A:36:LEU:HD23	1:A:62:ARG:HA	13	0.03
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD11	1:A:44:VAL:HG21	20	0.03
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD11	1:A:44:VAL:HG22	20	0.03
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD11	1:A:44:VAL:HG23	20	0.03
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD12	1:A:44:VAL:HG21	20	0.03
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD12	1:A:44:VAL:HG22	20	0.03
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD12	1:A:44:VAL:HG23	20	0.03
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD13	1:A:44:VAL:HG21	20	0.03
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD13	1:A:44:VAL:HG22	20	0.03
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD13	1:A:44:VAL:HG23	20	0.03
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD11	1:A:44:VAL:HG21	29	0.03
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD11	1:A:44:VAL:HG22	29	0.03
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD11	1:A:44:VAL:HG23	29	0.03
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD12	1:A:44:VAL:HG21	29	0.03
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD12	1:A:44:VAL:HG22	29	0.03
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD12	1:A:44:VAL:HG23	29	0.03
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD13	1:A:44:VAL:HG21	29	0.03
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD13	1:A:44:VAL:HG22	29	0.03
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD13	1:A:44:VAL:HG23	29	0.03
(1,1017)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:31:LEU:HA	18	0.03
(1,1017)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:31:LEU:HA	18	0.03
	1:A:34:LEU:HD23	1:A:31:LEU:HA	18	0.03



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1008)	1:A:34:LEU:HD11	1:A:31:LEU:HA	6	0.03
(1,1008)	1:A:34:LEU:HD12	1:A:31:LEU:HA	6	0.03
(1,1008)	1:A:34:LEU:HD13	1:A:31:LEU:HA	6	0.03
(1,1008)	1:A:34:LEU:HD11	1:A:31:LEU:HA	7	0.03
(1,1008)	1:A:34:LEU:HD12	1:A:31:LEU:HA	7	0.03
(1,1008)	1:A:34:LEU:HD13	1:A:31:LEU:HA	7	0.03
(1,1008)	1:A:34:LEU:HD11	1:A:31:LEU:HA	12	0.03
(1,1008)	1:A:34:LEU:HD12	1:A:31:LEU:HA	12	0.03
(1,1008)	1:A:34:LEU:HD13	1:A:31:LEU:HA	12	0.03
(1,1005)	1:A:33:ASP:HB3	1:A:30:SER:H	10	0.03
(1,1001)	1:A:33:ASP:HB2	1:A:33:ASP:H	27	0.03
(1,97)	1:A:52:HIS:HB2	1:A:54:LEU:HB3	17	0.02
(1,968)	1:A:27:LEU:HD11	1:A:67:ARG:HA	28	0.02
(1,968)	1:A:27:LEU:HD12	1:A:67:ARG:HA	28	0.02
(1,968)	1:A:27:LEU:HD13	1:A:67:ARG:HA	28	0.02
(1,931)	1:A:57:PRO:HG3	1:A:60:GLU:HG2	2	0.02
(1,931)	1:A:57:PRO:HG3	1:A:60:GLU:HG3	2	0.02
(1,882)	1:A:10:VAL:HG21	1:A:70:GLN:H	11	0.02
(1,882)	1:A:10:VAL:HG22	1:A:70:GLN:H	11	0.02
(1,882)	1:A:10:VAL:HG23	1:A:70:GLN:H	11	0.02
(1,880)	1:A:10:VAL:HG21	1:A:10:VAL:H	15	0.02
(1,880)	1:A:10:VAL:HG22	1:A:10:VAL:H	15	0.02
(1,880)	1:A:10:VAL:HG23	1:A:10:VAL:H	15	0.02
(1,862)	1:A:10:VAL:HA	1:A:9:LEU:HD21	6	0.02
(1,862)	1:A:10:VAL:HA	1:A:9:LEU:HD22	6	0.02
(1,862)	1:A:10:VAL:HA	1:A:9:LEU:HD23	6	0.02
(1,862)	1:A:10:VAL:HA	1:A:9:LEU:HD21	16	0.02
(1,862)	1:A:10:VAL:HA	1:A:9:LEU:HD22	16	0.02
(1,862)	1:A:10:VAL:HA	1:A:9:LEU:HD23	16	0.02
(1,862)	1:A:10:VAL:HA	1:A:9:LEU:HD21	24	0.02
(1,862)	1:A:10:VAL:HA	1:A:9:LEU:HD22	24	0.02
(1,862)	1:A:10:VAL:HA	1:A:9:LEU:HD23	24	0.02
(1,862)	1:A:10:VAL:HA	1:A:9:LEU:HD21	26	0.02
(1,862)	1:A:10:VAL:HA	1:A:9:LEU:HD22	26	0.02
(1,862)	1:A:10:VAL:HA	1:A:9:LEU:HD23	26	0.02
(1,862)	1:A:10:VAL:HA	1:A:9:LEU:HD21	29	0.02
(1,862)	1:A:10:VAL:HA	1:A:9:LEU:HD22	29	0.02
(1,862)	1:A:10:VAL:HA	1:A:9:LEU:HD23	29	0.02
(1,85)	1:A:24:GLY:H	1:A:23:ALA:HA	5	0.02
(1,85)	1:A:24:GLY:H	1:A:25:ILE:HA	5	0.02
(1,845)	1:A:8:ASP:HB2	1:A:11:LYS:HB2	21	0.02
(1,845)	1:A:8:ASP:HB2	1:A:11:LYS:HB3	21	0.02



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,845)	1:A:8:ASP:HB2	1:A:11:LYS:HB2	23	0.02
(1,845)	1:A:8:ASP:HB2	1:A:11:LYS:HB3	23	0.02
(1,842)	1:A:8:ASP:HA	1:A:9:LEU:H	18	0.02
(1,82)	1:A:73:SER:HB2	1:A:9:LEU:HB3	4	0.02
(1,82)	1:A:73:SER:HB2	1:A:7:ARG:HG2	4	0.02
(1,82)	1:A:73:SER:HB2	1:A:7:ARG:HG3	4	0.02
(1,82)	1:A:73:SER:HB2	1:A:9:LEU:HB3	13	0.02
(1,82)	1:A:73:SER:HB2	1:A:7:ARG:HG2	13	0.02
(1,82)	1:A:73:SER:HB2	1:A:7:ARG:HG3	13	0.02
(1,808)	1:A:65:THR:HG21	1:A:30:SER:HA	8	0.02
(1,808)	1:A:65:THR:HG22	1:A:30:SER:HA	8	0.02
(1,808)	1:A:65:THR:HG23	1:A:30:SER:HA	8	0.02
(1,808)	1:A:65:THR:HG21	1:A:30:SER:HA	11	0.02
(1,808)	1:A:65:THR:HG22	1:A:30:SER:HA	11	0.02
(1,808)	1:A:65:THR:HG23	1:A:30:SER:HA	11	0.02
(1,808)	1:A:65:THR:HG21	1:A:30:SER:HA	30	0.02
(1,808)	1:A:65:THR:HG22	1:A:30:SER:HA	30	0.02
(1,808)	1:A:65:THR:HG23	1:A:30:SER:HA	30	0.02
(1,785)	1:A:52:HIS:HB3	1:A:54:LEU:HB3	20	0.02
(1,785)	1:A:52:HIS:HB3	1:A:54:LEU:HB3	22	0.02
(1,785)	1:A:52:HIS:HB3	1:A:54:LEU:HB3	23	0.02
(1,783)	1:A:52:HIS:HB3	1:A:54:LEU:HD11	3	0.02
(1,783)	1:A:52:HIS:HB3	1:A:54:LEU:HD12	3	0.02
(1,783)	1:A:52:HIS:HB3	1:A:54:LEU:HD13	3	0.02
(1,783)	1:A:52:HIS:HB3	1:A:54:LEU:HD21	3	0.02
(1,783)	1:A:52:HIS:HB3	1:A:54:LEU:HD22	3	0.02
(1,783)	1:A:52:HIS:HB3	1:A:54:LEU:HD23	3	0.02
(1,783)	1:A:52:HIS:HB3	1:A:54:LEU:HD11	7	0.02
(1,783)	1:A:52:HIS:HB3	1:A:54:LEU:HD12	7	0.02
(1,783)	1:A:52:HIS:HB3	1:A:54:LEU:HD13	7	0.02
(1,783)	1:A:52:HIS:HB3	1:A:54:LEU:HD21	7	0.02
(1,783)	1:A:52:HIS:HB3	1:A:54:LEU:HD22	7	0.02
(1,783)	1:A:52:HIS:HB3	1:A:54:LEU:HD23	7	0.02
(1,783)	1:A:52:HIS:HB3	1:A:54:LEU:HD11	10	0.02
(1,783)	1:A:52:HIS:HB3	1:A:54:LEU:HD12	10	0.02
(1,783)	1:A:52:HIS:HB3	1:A:54:LEU:HD13	10	0.02
(1,783)	1:A:52:HIS:HB3	1:A:54:LEU:HD21	10	0.02
(1,783)	1:A:52:HIS:HB3	1:A:54:LEU:HD22	10	0.02
(1,783)	1:A:52:HIS:HB3	1:A:54:LEU:HD23	10	0.02
(1,783)	1:A:52:HIS:HB3	1:A:54:LEU:HD11	28	0.02
(1,783)	1:A:52:HIS:HB3	1:A:54:LEU:HD12	28	0.02
(1,783)	1:A:52:HIS:HB3	1:A:54:LEU:HD13	28	0.02



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,783)	1:A:52:HIS:HB3	1:A:54:LEU:HD21	28	0.02
(1,783)	1:A:52:HIS:HB3	1:A:54:LEU:HD22	28	0.02
(1,783)	1:A:52:HIS:HB3	1:A:54:LEU:HD23	28	0.02
(1,783)	1:A:52:HIS:HB3	1:A:54:LEU:HD11	30	0.02
(1,783)	1:A:52:HIS:HB3	1:A:54:LEU:HD12	30	0.02
(1,783)	1:A:52:HIS:HB3	1:A:54:LEU:HD13	30	0.02
(1,783)	1:A:52:HIS:HB3	1:A:54:LEU:HD21	30	0.02
(1,783)	1:A:52:HIS:HB3	1:A:54:LEU:HD22	30	0.02
(1,783)	1:A:52:HIS:HB3	1:A:54:LEU:HD23	30	0.02
(1,778)	1:A:52:HIS:HB3	1:A:6:GLN:HE21	19	0.02
(1,743)	1:A:70:GLN:HB2	1:A:72:MET:H	20	0.02
(1,743)	1:A:70:GLN:HB3	1:A:72:MET:H	20	0.02
(1,740)	1:A:70:GLN:HA	1:A:10:VAL:HG21	10	0.02
(1,740)	1:A:70:GLN:HA	1:A:10:VAL:HG22	10	0.02
(1,740)	1:A:70:GLN:HA	1:A:10:VAL:HG23	10	0.02
(1,740)	1:A:70:GLN:HA	1:A:10:VAL:HG21	23	0.02
(1,740)	1:A:70:GLN:HA	1:A:10:VAL:HG22	23	0.02
(1,740)	1:A:70:GLN:HA	1:A:10:VAL:HG23	23	0.02
(1,740)	1:A:70:GLN:HA	1:A:10:VAL:HG21	28	0.02
(1,740)	1:A:70:GLN:HA	1:A:10:VAL:HG22	28	0.02
(1,740)	1:A:70:GLN:HA	1:A:10:VAL:HG23	28	0.02
(1,732)	1:A:63:GLN:HG3	1:A:60:GLU:HA	1	0.02
(1,732)	1:A:63:GLN:HG3	1:A:60:GLU:HA	11	0.02
(1,706)	1:A:59:ARG:HD2	1:A:59:ARG:H	4	0.02
(1,706)	1:A:59:ARG:HD3	1:A:59:ARG:H	4	0.02
(1,706)	1:A:59:ARG:HD2	1:A:59:ARG:H	6	0.02
(1,706)	1:A:59:ARG:HD3	1:A:59:ARG:H	6	0.02
(1,706)	1:A:59:ARG:HD2	1:A:59:ARG:H	9	0.02
(1,706)	1:A:59:ARG:HD3	1:A:59:ARG:H	9	0.02
(1,706)	1:A:59:ARG:HD2	1:A:59:ARG:H	16	0.02
(1,706)	1:A:59:ARG:HD3	1:A:59:ARG:H	16	0.02
(1,706)	1:A:59:ARG:HD2	1:A:59:ARG:H	21	0.02
(1,706)	1:A:59:ARG:HD3	1:A:59:ARG:H	21	0.02
(1,700)	1:A:59:ARG:HA	1:A:62:ARG:HD2	26	0.02
(1,70)	1:A:9:LEU:HD21	1:A:72:MET:H	1	0.02
(1,70)	1:A:9:LEU:HD22	1:A:72:MET:H	1	0.02
(1,70)	1:A:9:LEU:HD23	1:A:72:MET:H	1	0.02
(1,70)	1:A:9:LEU:HD21	1:A:71:GLU:H	1	0.02
(1,70)	1:A:9:LEU:HD22	1:A:71:GLU:H	1	0.02
(1,70)	1:A:9:LEU:HD23	1:A:71:GLU:H	1	0.02
(1,70)	1:A:9:LEU:HD21	1:A:72:MET:H	25	0.02
(1,70)	1:A:9:LEU:HD22	1:A:72:MET:H	25	0.02



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,70)	1:A:9:LEU:HD23	1:A:72:MET:H	25	0.02
(1,70)	1:A:9:LEU:HD21	1:A:71:GLU:H	25	0.02
(1,70)	1:A:9:LEU:HD22	1:A:71:GLU:H	25	0.02
(1,70)	1:A:9:LEU:HD23	1:A:71:GLU:H	25	0.02
(1,70)	1:A:9:LEU:HD21	1:A:72:MET:H	26	0.02
(1,70)	1:A:9:LEU:HD22	1:A:72:MET:H	26	0.02
(1,70)	1:A:9:LEU:HD23	1:A:72:MET:H	26	0.02
(1,70)	1:A:9:LEU:HD21	1:A:71:GLU:H	26	0.02
(1,70)	1:A:9:LEU:HD22	1:A:71:GLU:H	26	0.02
(1,70)	1:A:9:LEU:HD23	1:A:71:GLU:H	26	0.02
(1,684)	1:A:43:GLU:HG3	1:A:39:LEU:HD21	21	0.02
(1,684)	1:A:43:GLU:HG3	1:A:39:LEU:HD22	21	0.02
(1,684)	1:A:43:GLU:HG3	1:A:39:LEU:HD23	21	0.02
(1,668)	1:A:49:GLU:HG2	1:A:46:GLN:HA	15	0.02
(1,662)	1:A:49:GLU:HA	1:A:46:GLN:HA	7	0.02
(1,662)	1:A:49:GLU:HA	1:A:46:GLN:HA	15	0.02
(1,66)	1:A:58:ILE:HD11	1:A:45:ARG:HE	2	0.02
(1,66)	1:A:58:ILE:HD12	1:A:45:ARG:HE	2	0.02
(1,66)	1:A:58:ILE:HD13	1:A:45:ARG:HE	2	0.02
(1,66)	1:A:58:ILE:HD11	1:A:63:GLN:HE22	2	0.02
(1,66)	1:A:58:ILE:HD12	1:A:63:GLN:HE22	2	0.02
(1,66)	1:A:58:ILE:HD13	1:A:63:GLN:HE22	2	0.02
(1,66)	1:A:25:ILE:HD11	1:A:29:SER:H	2	0.02
(1,66)	1:A:25:ILE:HD12	1:A:29:SER:H	2	0.02
(1,66)	1:A:25:ILE:HD13	1:A:29:SER:H	2	0.02
(1,66)	1:A:58:ILE:HD11	1:A:64:LEU:H	2	0.02
(1,66)	1:A:58:ILE:HD12	1:A:64:LEU:H	2	0.02
(1,66)	1:A:58:ILE:HD13	1:A:64:LEU:H	2	0.02
(1,638)	1:A:50:ARG:HD2	1:A:50:ARG:HA	10	0.02
(1,638)	1:A:50:ARG:HD3	1:A:50:ARG:HA	10	0.02
(1,621)	1:A:67:ARG:HD3	1:A:69:LEU:H	9	0.02
(1,607)	1:A:67:ARG:HA	1:A:67:ARG:HD3	27	0.02
(1,603)	1:A:66:LEU:HA	1:A:69:LEU:HB3	13	0.02
(1,599)	1:A:66:LEU:HA	1:A:69:LEU:H	18	0.02
(1,593)	1:A:66:LEU:HD11	1:A:66:LEU:HA	13	0.02
(1,593)	1:A:66:LEU:HD12	1:A:66:LEU:HA	13	0.02
(1,593)	1:A:66:LEU:HD13	1:A:66:LEU:HA	13	0.02
(1,593)	1:A:66:LEU:HD11	1:A:66:LEU:HA	15	0.02
(1,593)	1:A:66:LEU:HD12	1:A:66:LEU:HA	15	0.02
(1,593)	1:A:66:LEU:HD13	1:A:66:LEU:HA	15	0.02
(1,593)	1:A:66:LEU:HD11	1:A:66:LEU:HA	17	0.02
(1,593)	1:A:66:LEU:HD12	1:A:66:LEU:HA	17	0.02



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,593)	1:A:66:LEU:HD13	1:A:66:LEU:HA	17	0.02
(1,593)	1:A:66:LEU:HD11	1:A:66:LEU:HA	20	0.02
(1,593)	1:A:66:LEU:HD12	1:A:66:LEU:HA	20	0.02
(1,593)	1:A:66:LEU:HD13	1:A:66:LEU:HA	20	0.02
(1,593)	1:A:66:LEU:HD11	1:A:66:LEU:HA	23	0.02
(1,593)	1:A:66:LEU:HD12	1:A:66:LEU:HA	23	0.02
(1,593)	1:A:66:LEU:HD13	1:A:66:LEU:HA	23	0.02
(1,59)	1:A:36:LEU:HD11	1:A:64:LEU:HB2	2	0.02
(1,59)	1:A:36:LEU:HD12	1:A:64:LEU:HB2	2	0.02
(1,59)	1:A:36:LEU:HD13	1:A:64:LEU:HB2	2	0.02
(1,59)	1:A:66:LEU:HD21	1:A:64:LEU:HB2	2	0.02
(1,59)	1:A:66:LEU:HD22	1:A:64:LEU:HB2	2	0.02
(1,59)	1:A:66:LEU:HD23	1:A:64:LEU:HB2	2	0.02
(1,58)	1:A:66:LEU:HD21	1:A:10:VAL:HB	13	0.02
(1,58)	1:A:66:LEU:HD22	1:A:10:VAL:HB	13	0.02
(1,58)	1:A:66:LEU:HD23	1:A:10:VAL:HB	13	0.02
(1,58)	1:A:36:LEU:HD11	1:A:43:GLU:HB2	13	0.02
(1,58)	1:A:36:LEU:HD12	1:A:43:GLU:HB2	13	0.02
(1,58)	1:A:36:LEU:HD13	1:A:43:GLU:HB2	13	0.02
(1,58)	1:A:66:LEU:HD21	1:A:10:VAL:HB	15	0.02
(1,58)	1:A:66:LEU:HD22	1:A:10:VAL:HB	15	0.02
(1,58)	1:A:66:LEU:HD23	1:A:10:VAL:HB	15	0.02
(1,58)	1:A:36:LEU:HD11	1:A:43:GLU:HB2	15	0.02
(1,58)	1:A:36:LEU:HD12	1:A:43:GLU:HB2	15	0.02
(1,58)	1:A:36:LEU:HD13	1:A:43:GLU:HB2	15	0.02
(1,577)	1:A:66:LEU:HA	1:A:64:LEU:HB2	18	0.02
(1,536)	1:A:25:ILE:HD11	1:A:14:ALA:HB1	20	0.02
(1,536)	1:A:25:ILE:HD11	1:A:14:ALA:HB2	20	0.02
(1,536)	1:A:25:ILE:HD11	1:A:14:ALA:HB3	20	0.02
(1,536)	1:A:25:ILE:HD12	1:A:14:ALA:HB1	20	0.02
(1,536)	1:A:25:ILE:HD12	1:A:14:ALA:HB2	20	0.02
(1,536)	1:A:25:ILE:HD12	1:A:14:ALA:HB3	20	0.02
(1,536)	1:A:25:ILE:HD13	1:A:14:ALA:HB1	20	0.02
(1,536)	1:A:25:ILE:HD13	1:A:14:ALA:HB2	20	0.02
(1,536)	1:A:25:ILE:HD13	1:A:14:ALA:HB3	20	0.02
(1,53)	1:A:59:ARG:HG2	1:A:58:ILE:H	10	0.02
(1,53)	1:A:19:ILE:HG13	1:A:67:ARG:H	10	0.02
(1,513)	1:A:25:ILE:HB	1:A:22:LEU:HD11	15	0.02
(1,513)	1:A:25:ILE:HB	1:A:22:LEU:HD12	15	0.02
(1,513)	1:A:25:ILE:HB	1:A:22:LEU:HD13	15	0.02
(1,513)	1:A:25:ILE:HB	1:A:22:LEU:HD11	19	0.02
(1,513)	1:A:25:ILE:HB	1:A:22:LEU:HD12	19	0.02



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,513)	1:A:25:ILE:HB	1:A:22:LEU:HD13	19	0.02
(1,506)	1:A:19:ILE:HD11	1:A:18:GLY:HA2	29	0.02
(1,506)	1:A:19:ILE:HD12	1:A:18:GLY:HA2	29	0.02
(1,506)	1:A:19:ILE:HD13	1:A:18:GLY:HA2	29	0.02
(1,502)	1:A:19:ILE:HD11	1:A:25:ILE:HG13	10	0.02
(1,502)	1:A:19:ILE:HD12	1:A:25:ILE:HG13	10	0.02
(1,502)	1:A:19:ILE:HD13	1:A:25:ILE:HG13	10	0.02
(1,50)	1:A:16:ILE:HG21	1:A:39:LEU:HA	22	0.02
(1,50)	1:A:16:ILE:HG22	1:A:39:LEU:HA	22	0.02
(1,50)	1:A:16:ILE:HG23	1:A:39:LEU:HA	22	0.02
(1,50)	1:A:16:ILE:HG21	1:A:36:LEU:HA	22	0.02
(1,50)	1:A:16:ILE:HG22	1:A:36:LEU:HA	22	0.02
(1,50)	1:A:16:ILE:HG23	1:A:36:LEU:HA	22	0.02
(1,491)	1:A:27:LEU:HA	1:A:66:LEU:H	12	0.02
(1,479)	1:A:23:ALA:HA	1:A:21:ASP:HA	11	0.02
(1,479)	1:A:23:ALA:HA	1:A:21:ASP:HA	22	0.02
(1,475)	1:A:22:LEU:HD21	1:A:20:ARG:HB2	25	0.02
(1,475)	1:A:22:LEU:HD22	1:A:20:ARG:HB2	25	0.02
(1,475)	1:A:22:LEU:HD23	1:A:20:ARG:HB2	25	0.02
(1,47)	1:A:22:LEU:HD21	1:A:14:ALA:H	18	0.02
(1,47)	1:A:22:LEU:HD22	1:A:14:ALA:H	18	0.02
(1,47)	1:A:22:LEU:HD23	1:A:14:ALA:H	18	0.02
(1,47)	1:A:22:LEU:HD21	1:A:66:LEU:H	18	0.02
(1,47)	1:A:22:LEU:HD22	1:A:66:LEU:H	18	0.02
(1,47)	1:A:22:LEU:HD23	1:A:66:LEU:H	18	0.02
(1,461)	1:A:47:ILE:HG12	1:A:48:LEU:HD11	5	0.02
(1,461)	1:A:47:ILE:HG12	1:A:48:LEU:HD12	5	0.02
(1,461)	1:A:47:ILE:HG12	1:A:48:LEU:HD13	5	0.02
(1,461)	1:A:47:ILE:HG12	1:A:48:LEU:HD11	9	0.02
(1,461)	1:A:47:ILE:HG12	1:A:48:LEU:HD12	9	0.02
(1,461)	1:A:47:ILE:HG12	1:A:48:LEU:HD13	9	0.02
(1,461)	1:A:47:ILE:HG12	1:A:48:LEU:HD11	12	0.02
(1,461)	1:A:47:ILE:HG12	1:A:48:LEU:HD12	12	0.02
(1,461)	1:A:47:ILE:HG12	1:A:48:LEU:HD13	12	0.02
(1,461)	1:A:47:ILE:HG12	1:A:48:LEU:HD11	16	0.02
(1,461)	1:A:47:ILE:HG12	1:A:48:LEU:HD12	16	0.02
(1,461)	1:A:47:ILE:HG12	1:A:48:LEU:HD13	16	0.02
(1,461)	1:A:47:ILE:HG12	1:A:48:LEU:HD11	25	0.02
(1,461)	1:A:47:ILE:HG12	1:A:48:LEU:HD12	25	0.02
(1,461)	1:A:47:ILE:HG12	1:A:48:LEU:HD13	25	0.02
(1,460)	1:A:47:ILE:HG13	1:A:48:LEU:HD11	14	0.02
(1,460)	1:A:47:ILE:HG13	1:A:48:LEU:HD12	14	0.02



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,460)	1:A:47:ILE:HG13	1:A:48:LEU:HD13	14	0.02
(1,460)	1:A:47:ILE:HG13	1:A:48:LEU:HD11	15	0.02
(1,460)	1:A:47:ILE:HG13	1:A:48:LEU:HD12	15	0.02
(1,460)	1:A:47:ILE:HG13	1:A:48:LEU:HD13	15	0.02
(1,460)	1:A:47:ILE:HG13	1:A:48:LEU:HD11	19	0.02
(1,460)	1:A:47:ILE:HG13	1:A:48:LEU:HD12	19	0.02
(1,460)	1:A:47:ILE:HG13	1:A:48:LEU:HD13	19	0.02
(1,460)	1:A:47:ILE:HG13	1:A:48:LEU:HD11	26	0.02
(1,460)	1:A:47:ILE:HG13	1:A:48:LEU:HD12	26	0.02
(1,460)	1:A:47:ILE:HG13	1:A:48:LEU:HD13	26	0.02
(1,456)	1:A:47:ILE:HB	1:A:50:ARG:H	8	0.02
(1,456)	1:A:47:ILE:HB	1:A:50:ARG:H	22	0.02
(1,456)	1:A:47:ILE:HB	1:A:50:ARG:H	30	0.02
(1,45)	1:A:22:LEU:HD21	1:A:11:LYS:HE2	3	0.02
(1,45)	1:A:22:LEU:HD21	1:A:11:LYS:HE3	3	0.02
(1,45)	1:A:22:LEU:HD22	1:A:11:LYS:HE2	3	0.02
(1,45)	1:A:22:LEU:HD22	1:A:11:LYS:HE3	3	0.02
(1,45)	1:A:22:LEU:HD23	1:A:11:LYS:HE2	3	0.02
(1,45)	1:A:22:LEU:HD23	1:A:11:LYS:HE3	3	0.02
(1,45)	1:A:22:LEU:HD21	1:A:11:LYS:HE2	13	0.02
(1,45)	1:A:22:LEU:HD21	1:A:11:LYS:HE3	13	0.02
(1,45)	1:A:22:LEU:HD22	1:A:11:LYS:HE2	13	0.02
(1,45)	1:A:22:LEU:HD22	1:A:11:LYS:HE3	13	0.02
(1,45)	1:A:22:LEU:HD23	1:A:11:LYS:HE2	13	0.02
(1,45)	1:A:22:LEU:HD23	1:A:11:LYS:HE3	13	0.02
(1,45)	1:A:22:LEU:HD21	1:A:11:LYS:HE2	24	0.02
(1,45)	1:A:22:LEU:HD21	1:A:11:LYS:HE3	24	0.02
(1,45)	1:A:22:LEU:HD22	1:A:11:LYS:HE2	24	0.02
(1,45)	1:A:22:LEU:HD22	1:A:11:LYS:HE3	24	0.02
(1,45)	1:A:22:LEU:HD23	1:A:11:LYS:HE2	24	0.02
(1,45)	1:A:22:LEU:HD23	1:A:11:LYS:HE3	24	0.02
(1,447)	1:A:47:ILE:HA	1:A:51:GLU:HG2	24	0.02
(1,447)	1:A:47:ILE:HA	1:A:51:GLU:HG3	24	0.02
(1,444)	1:A:47:ILE:HA	1:A:50:ARG:HB3	16	0.02
(1,43)	1:A:13:VAL:HG21	1:A:17:LEU:H	8	0.02
(1,43)	1:A:13:VAL:HG22	1:A:17:LEU:H	8	0.02
(1,43)	1:A:13:VAL:HG23	1:A:17:LEU:H	8	0.02
(1,43)	1:A:13:VAL:HG21	1:A:73:SER:H	8	0.02
(1,43)	1:A:13:VAL:HG22	1:A:73:SER:H	8	0.02
(1,43)	1:A:13:VAL:HG23	1:A:73:SER:H	8	0.02
(1,43)	1:A:13:VAL:HG21	1:A:18:GLY:H	8	0.02
(1,43)	1:A:13:VAL:HG22	1:A:18:GLY:H	8	0.02



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,43)	1:A:13:VAL:HG23	1:A:18:GLY:H	8	0.02
(1,417)	1:A:45:ARG:HD2	1:A:61:VAL:HG11	4	0.02
(1,417)	1:A:45:ARG:HD2	1:A:61:VAL:HG12	4	0.02
(1,417)	1:A:45:ARG:HD2	1:A:61:VAL:HG13	4	0.02
(1,417)	1:A:45:ARG:HD3	1:A:61:VAL:HG11	4	0.02
(1,417)	1:A:45:ARG:HD3	1:A:61:VAL:HG12	4	0.02
(1,417)	1:A:45:ARG:HD3	1:A:61:VAL:HG13	4	0.02
(1,417)	1:A:45:ARG:HD2	1:A:61:VAL:HG11	9	0.02
(1,417)	1:A:45:ARG:HD2	1:A:61:VAL:HG12	9	0.02
(1,417)	1:A:45:ARG:HD2	1:A:61:VAL:HG13	9	0.02
(1,417)	1:A:45:ARG:HD3	1:A:61:VAL:HG11	9	0.02
(1,417)	1:A:45:ARG:HD3	1:A:61:VAL:HG12	9	0.02
(1,417)	1:A:45:ARG:HD3	1:A:61:VAL:HG13	9	0.02
(1,391)	1:A:19:ILE:HG21	1:A:21:ASP:HA	4	0.02
(1,391)	1:A:19:ILE:HG22	1:A:21:ASP:HA	4	0.02
(1,391)	1:A:19:ILE:HG23	1:A:21:ASP:HA	4	0.02
(1,391)	1:A:19:ILE:HG21	1:A:21:ASP:HA	24	0.02
(1,391)	1:A:19:ILE:HG22	1:A:21:ASP:HA	24	0.02
(1,391)	1:A:19:ILE:HG23	1:A:21:ASP:HA	24	0.02
(1,38)	1:A:58:ILE:HG21	1:A:32:ALA:HA	6	0.02
(1,38)	1:A:58:ILE:HG22	1:A:32:ALA:HA	6	0.02
(1,38)	1:A:58:ILE:HG23	1:A:32:ALA:HA	6	0.02
(1,38)	1:A:47:ILE:HG21	1:A:50:ARG:HA	6	0.02
(1,38)	1:A:47:ILE:HG22	1:A:50:ARG:HA	6	0.02
(1,38)	1:A:47:ILE:HG23	1:A:50:ARG:HA	6	0.02
(1,374)	1:A:19:ILE:HB	1:A:18:GLY:H	9	0.02
(1,373)	1:A:19:ILE:HB	1:A:19:ILE:H	1	0.02
(1,373)	1:A:19:ILE:HB	1:A:19:ILE:H	7	0.02
(1,373)	1:A:19:ILE:HB	1:A:19:ILE:H	9	0.02
(1,373)	1:A:19:ILE:HB	1:A:19:ILE:H	13	0.02
(1,373)	1:A:19:ILE:HB	1:A:19:ILE:H	16	0.02
(1,373)	1:A:19:ILE:HB	1:A:19:ILE:H	19	0.02
(1,373)	1:A:19:ILE:HB	1:A:19:ILE:H	22	0.02
(1,373)	1:A:19:ILE:HB	1:A:19:ILE:H	28	0.02
(1,373)	1:A:19:ILE:HB	1:A:19:ILE:H	30	0.02
(1,366)	1:A:17:LEU:HG	1:A:16:ILE:HG21	7	0.02
(1,366)	1:A:17:LEU:HG	1:A:16:ILE:HG22	7	0.02
(1,366)	1:A:17:LEU:HG	1:A:16:ILE:HG23	7	0.02
(1,363)	1:A:17:LEU:HG	1:A:19:ILE:HG21	1	0.02
(1,363)	1:A:17:LEU:HG	1:A:19:ILE:HG22	1	0.02
(1,363)	1:A:17:LEU:HG	1:A:19:ILE:HG23	1	0.02
(1,363)	1:A:17:LEU:HG	1:A:19:ILE:HG21	4	0.02



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,363)	1:A:17:LEU:HG	1:A:19:ILE:HG22	4	0.02
(1,363)	1:A:17:LEU:HG	1:A:19:ILE:HG23	4	0.02
(1,363)	1:A:17:LEU:HG	1:A:19:ILE:HG21	8	0.02
(1,363)	1:A:17:LEU:HG	1:A:19:ILE:HG22	8	0.02
(1,363)	1:A:17:LEU:HG	1:A:19:ILE:HG23	8	0.02
(1,363)	1:A:17:LEU:HG	1:A:19:ILE:HG21	12	0.02
(1,363)	1:A:17:LEU:HG	1:A:19:ILE:HG22	12	0.02
(1,363)	1:A:17:LEU:HG	1:A:19:ILE:HG23	12	0.02
(1,363)	1:A:17:LEU:HG	1:A:19:ILE:HG21	17	0.02
(1,363)	1:A:17:LEU:HG	1:A:19:ILE:HG22	17	0.02
(1,363)	1:A:17:LEU:HG	1:A:19:ILE:HG23	17	0.02
(1,363)	1:A:17:LEU:HG	1:A:19:ILE:HG21	23	0.02
(1,363)	1:A:17:LEU:HG	1:A:19:ILE:HG22	23	0.02
(1,363)	1:A:17:LEU:HG	1:A:19:ILE:HG23	23	0.02
(1,360)	1:A:17:LEU:HA	1:A:19:ILE:HG21	14	0.02
(1,360)	1:A:17:LEU:HA	1:A:19:ILE:HG22	14	0.02
(1,360)	1:A:17:LEU:HA	1:A:19:ILE:HG23	14	0.02
(1,360)	1:A:17:LEU:HA	1:A:19:ILE:HG21	16	0.02
(1,360)	1:A:17:LEU:HA	1:A:19:ILE:HG22	16	0.02
(1,360)	1:A:17:LEU:HA	1:A:19:ILE:HG23	16	0.02
(1,360)	1:A:17:LEU:HA	1:A:19:ILE:HG21	19	0.02
(1,360)	1:A:17:LEU:HA	1:A:19:ILE:HG22	19	0.02
(1,360)	1:A:17:LEU:HA	1:A:19:ILE:HG23	19	0.02
(1,319)	1:A:45:ARG:HB2	1:A:48:LEU:H	11	0.02
(1,315)	1:A:40:MET:HB3	1:A:39:LEU:HD21	3	0.02
(1,315)	1:A:40:MET:HB3	1:A:39:LEU:HD22	3	0.02
(1,315)	1:A:40:MET:HB3	1:A:39:LEU:HD23	3	0.02
(1,315)	1:A:40:MET:HB3	1:A:39:LEU:HD21	26	0.02
(1,315)	1:A:40:MET:HB3	1:A:39:LEU:HD22	26	0.02
(1,315)	1:A:40:MET:HB3	1:A:39:LEU:HD23	26	0.02
(1,315)	1:A:40:MET:HB3	1:A:39:LEU:HD21	29	0.02
(1,315)	1:A:40:MET:HB3	1:A:39:LEU:HD22	29	0.02
(1,315)	1:A:40:MET:HB3	1:A:39:LEU:HD23	29	0.02
(1,306)	1:A:40:MET:HB3	1:A:38:SER:H	10	0.02
(1,303)	1:A:40:MET:HB3	1:A:37:ASP:H	16	0.02
(1,297)	1:A:17:LEU:HD11	1:A:16:ILE:HA	23	0.02
(1,297)	1:A:17:LEU:HD12	1:A:16:ILE:HA	23	0.02
(1,297)	1:A:17:LEU:HD13	1:A:16:ILE:HA	23	0.02
(1,297)	1:A:17:LEU:HD21	1:A:16:ILE:HA	23	0.02
(1,297)	1:A:17:LEU:HD22	1:A:16:ILE:HA	23	0.02
(1,297)	1:A:17:LEU:HD23	1:A:16:ILE:HA	23	0.02
(1,264)	1:A:32:ALA:HA	1:A:34:LEU:HD11	9	0.02



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,264)	1:A:32:ALA:HA	1:A:34:LEU:HD12	9	0.02
(1,264)	1:A:32:ALA:HA	1:A:34:LEU:HD13	9	0.02
(1,244)	1:A:31:LEU:HD21	1:A:64:LEU:HG	7	0.02
(1,244)	1:A:31:LEU:HD22	1:A:64:LEU:HG	7	0.02
(1,244)	1:A:31:LEU:HD23	1:A:64:LEU:HG	7	0.02
(1,244)	1:A:31:LEU:HD21	1:A:64:LEU:HG	11	0.02
(1,244)	1:A:31:LEU:HD22	1:A:64:LEU:HG	11	0.02
(1,244)	1:A:31:LEU:HD23	1:A:64:LEU:HG	11	0.02
(1,244)	1:A:31:LEU:HD21	1:A:64:LEU:HG	28	0.02
(1,244)	1:A:31:LEU:HD22	1:A:64:LEU:HG	28	0.02
(1,244)	1:A:31:LEU:HD23	1:A:64:LEU:HG	28	0.02
(1,241)	1:A:31:LEU:HD11	1:A:64:LEU:HG	1	0.02
(1,241)	1:A:31:LEU:HD12	1:A:64:LEU:HG	1	0.02
(1,241)	1:A:31:LEU:HD13	1:A:64:LEU:HG	1	0.02
(1,239)	1:A:31:LEU:HD11	1:A:62:ARG:HG3	11	0.02
(1,239)	1:A:31:LEU:HD12	1:A:62:ARG:HG3	11	0.02
(1,239)	1:A:31:LEU:HD13	1:A:62:ARG:HG3	11	0.02
(1,229)	1:A:31:LEU:HA	1:A:36:LEU:HD21	2	0.02
(1,229)	1:A:31:LEU:HA	1:A:36:LEU:HD22	2	0.02
(1,229)	1:A:31:LEU:HA	1:A:36:LEU:HD23	2	0.02
(1,201)	1:A:29:SER:HB2	1:A:30:SER:H	27	0.02
(1,195)	1:A:29:SER:HB2	1:A:34:LEU:HG	28	0.02
(1,194)	1:A:29:SER:HB3	1:A:34:LEU:HG	5	0.02
(1,194)	1:A:29:SER:HB3	1:A:34:LEU:HG	24	0.02
(1,193)	1:A:29:SER:HB3	1:A:34:LEU:HD11	9	0.02
(1,193)	1:A:29:SER:HB3	1:A:34:LEU:HD12	9	0.02
(1,193)	1:A:29:SER:HB3	1:A:34:LEU:HD13	9	0.02
(1,18)	1:A:71:GLU:HA	1:A:74:SER:H	26	0.02
(1,18)	1:A:71:GLU:HA	1:A:69:LEU:H	26	0.02
(1,177)	1:A:22:LEU:HD11	1:A:24:GLY:HA2	4	0.02
(1,177)	1:A:22:LEU:HD12	1:A:24:GLY:HA2	4	0.02
(1,177)	1:A:22:LEU:HD13	1:A:24:GLY:HA2	4	0.02
(1,177)	1:A:22:LEU:HD11	1:A:24:GLY:HA2	9	0.02
(1,177)	1:A:22:LEU:HD12	1:A:24:GLY:HA2	9	0.02
(1,177)	1:A:22:LEU:HD13	1:A:24:GLY:HA2	9	0.02
(1,177)	1:A:22:LEU:HD11	1:A:24:GLY:HA2	11	0.02
(1,177)	1:A:22:LEU:HD12	1:A:24:GLY:HA2	11	0.02
(1,177)	1:A:22:LEU:HD13	1:A:24:GLY:HA2	11	0.02
(1,1732)	1:A:32:ALA:H	1:A:65:THR:HG21	16	0.02
(1,1732)	1:A:32:ALA:H	1:A:65:THR:HG22	16	0.02
(1,1732)	1:A:32:ALA:H	1:A:65:THR:HG23	16	0.02
(1,1732)	1:A:32:ALA:H	1:A:65:THR:HG21	19	0.02



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1732)	1:A:32:ALA:H	1:A:65:THR:HG22	19	0.02
(1,1732)	1:A:32:ALA:H	1:A:65:THR:HG23	19	0.02
(1,1732)	1:A:32:ALA:H	1:A:65:THR:HG21	21	0.02
(1,1732)	1:A:32:ALA:H	1:A:65:THR:HG22	21	0.02
(1,1732)	1:A:32:ALA:H	1:A:65:THR:HG23	21	0.02
(1,1732)	1:A:32:ALA:H	1:A:65:THR:HG21	24	0.02
(1,1732)	1:A:32:ALA:H	1:A:65:THR:HG22	24	0.02
(1,1732)	1:A:32:ALA:H	1:A:65:THR:HG23	24	0.02
(1,1731)	1:A:4:GLU:H	1:A:3:GLY:H	20	0.02
(1,1726)	1:A:80:THR:H	1:A:81:GLU:H	9	0.02
(1,1726)	1:A:80:THR:H	1:A:81:GLU:H	10	0.02
(1,1725)	1:A:80:THR:H	1:A:79:ASP:H	10	0.02
(1,1715)	1:A:67:ARG:H	1:A:67:ARG:HE	9	0.02
(1,1710)	1:A:63:GLN:H	1:A:64:LEU:H	2	0.02
(1,1710)	1:A:63:GLN:H	1:A:64:LEU:H	10	0.02
(1,1710)	1:A:63:GLN:H	1:A:64:LEU:H	15	0.02
(1,171)	1:A:22:LEU:HG	1:A:21:ASP:HA	6	0.02
(1,171)	1:A:22:LEU:HG	1:A:21:ASP:HA	8	0.02
(1,171)	1:A:22:LEU:HG	1:A:21:ASP:HA	10	0.02
(1,1701)	1:A:47:ILE:H	1:A:48:LEU:H	20	0.02
(1,1675)	1:A:21:ASP:H	1:A:20:ARG:H	7	0.02
(1,1654)	1:A:29:SER:H	1:A:28:ASP:H	10	0.02
(1,1648)	1:A:74:SER:HB3	1:A:54:LEU:HD21	30	0.02
(1,1648)	1:A:74:SER:HB3	1:A:54:LEU:HD22	30	0.02
(1,1648)	1:A:74:SER:HB3	1:A:54:LEU:HD23	30	0.02
(1,1631)	1:A:73:SER:HB2	1:A:10:VAL:HG21	16	0.02
(1,1631)	1:A:73:SER:HB2	1:A:10:VAL:HG22	16	0.02
(1,1631)	1:A:73:SER:HB2	1:A:10:VAL:HG23	16	0.02
(1,1631)	1:A:73:SER:HB2	1:A:10:VAL:HG21	20	0.02
(1,1631)	1:A:73:SER:HB2	1:A:10:VAL:HG22	20	0.02
(1,1631)	1:A:73:SER:HB2	1:A:10:VAL:HG23	20	0.02
(1,1631)	1:A:73:SER:HB2	1:A:10:VAL:HG21	27	0.02
(1,1631)	1:A:73:SER:HB2	1:A:10:VAL:HG22	27	0.02
(1,1631)	1:A:73:SER:HB2	1:A:10:VAL:HG23	27	0.02
(1,1630)	1:A:73:SER:HB3	1:A:10:VAL:HG21	19	0.02
(1,1630)	1:A:73:SER:HB3	1:A:10:VAL:HG22	19	0.02
(1,1630)	1:A:73:SER:HB3	1:A:10:VAL:HG23	19	0.02
(1,1624)	1:A:58:ILE:HD11	1:A:57:PRO:HD2	11	0.02
(1,1624)	1:A:58:ILE:HD12	1:A:57:PRO:HD2	11	0.02
(1,1624)	1:A:58:ILE:HD13	1:A:57:PRO:HD2	11	0.02
(1,1618)	1:A:58:ILE:HG12	1:A:59:ARG:HD2	7	0.02
(1,1618)	1:A:58:ILE:HG12	1:A:59:ARG:HD3	7	0.02



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1600)	1:A:36:LEU:HD11	1:A:40:MET:HG3	11	0.02
(1,1600)	1:A:36:LEU:HD12	1:A:40:MET:HG3	11	0.02
(1,1600)	1:A:36:LEU:HD13	1:A:40:MET:HG3	11	0.02
(1,1598)	1:A:70:GLN:HB2	1:A:9:LEU:HD21	15	0.02
(1,1598)	1:A:70:GLN:HB2	1:A:9:LEU:HD22	15	0.02
(1,1598)	1:A:70:GLN:HB2	1:A:9:LEU:HD23	15	0.02
(1,1598)	1:A:70:GLN:HB3	1:A:9:LEU:HD21	15	0.02
(1,1598)	1:A:70:GLN:HB3	1:A:9:LEU:HD22	15	0.02
(1,1598)	1:A:70:GLN:HB3	1:A:9:LEU:HD23	15	0.02
(1,1598)	1:A:70:GLN:HB2	1:A:9:LEU:HD21	29	0.02
(1,1598)	1:A:70:GLN:HB2	1:A:9:LEU:HD22	29	0.02
(1,1598)	1:A:70:GLN:HB2	1:A:9:LEU:HD23	29	0.02
(1,1598)	1:A:70:GLN:HB3	1:A:9:LEU:HD21	29	0.02
(1,1598)	1:A:70:GLN:HB3	1:A:9:LEU:HD22	29	0.02
(1,1598)	1:A:70:GLN:HB3	1:A:9:LEU:HD23	29	0.02
(1,1597)	1:A:27:LEU:HB2	1:A:27:LEU:H	12	0.02
(1,1593)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:29:SER:HA	10	0.02
(1,1593)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:29:SER:HA	10	0.02
(1,1593)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:29:SER:HA	10	0.02
(1,1589)	1:A:20:ARG:HG3	1:A:67:ARG:HE	22	0.02
(1,1588)	1:A:7:ARG:HG2	1:A:12:ALA:H	20	0.02
(1,1588)	1:A:7:ARG:HG3	1:A:12:ALA:H	20	0.02
(1,1587)	1:A:9:LEU:HG	1:A:75:LYS:HE2	6	0.02
(1,1587)	1:A:9:LEU:HG	1:A:75:LYS:HE3	6	0.02
(1,1587)	1:A:9:LEU:HG	1:A:75:LYS:HE2	18	0.02
(1,1587)	1:A:9:LEU:HG	1:A:75:LYS:HE3	18	0.02
(1,1586)	1:A:7:ARG:HG2	1:A:75:LYS:HE2	11	0.02
(1,1586)	1:A:7:ARG:HG2	1:A:75:LYS:HE3	11	0.02
(1,1586)	1:A:7:ARG:HG3	1:A:75:LYS:HE2	11	0.02
(1,1586)	1:A:7:ARG:HG3	1:A:75:LYS:HE3	11	0.02
(1,1586)	1:A:7:ARG:HG2	1:A:75:LYS:HE2	12	0.02
(1,1586)	1:A:7:ARG:HG2	1:A:75:LYS:HE3	12	0.02
(1,1586)	1:A:7:ARG:HG3	1:A:75:LYS:HE2	12	0.02
(1,1586)	1:A:7:ARG:HG3	1:A:75:LYS:HE3	12	0.02
(1,1586)	1:A:7:ARG:HG2	1:A:75:LYS:HE2	13	0.02
(1,1586)	1:A:7:ARG:HG2	1:A:75:LYS:HE3	13	0.02
(1,1586)	1:A:7:ARG:HG3	1:A:75:LYS:HE2	13	0.02
(1,1586)	1:A:7:ARG:HG3	1:A:75:LYS:HE3	13	0.02
(1,1586)	1:A:7:ARG:HG2	1:A:75:LYS:HE2	28	0.02
(1,1586)	1:A:7:ARG:HG2	1:A:75:LYS:HE3	28	0.02
(1,1586)	1:A:7:ARG:HG3	1:A:75:LYS:HE2	28	0.02
(1,1586)	1:A:7:ARG:HG3	1:A:75:LYS:HE3	28	0.02



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1584)	1:A:59:ARG:HG3	1:A:58:ILE:H	24	0.02
(1,1578)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:22:LEU:HA	14	0.02
(1,1578)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:22:LEU:HA	14	0.02
(1,1578)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:22:LEU:HA	14	0.02
(1,1576)	1:A:66:LEU:HD11	1:A:65:THR:HA	4	0.02
(1,1576)	1:A:66:LEU:HD12	1:A:65:THR:HA	4	0.02
(1,1576)	1:A:66:LEU:HD13	1:A:65:THR:HA	4	0.02
(1,1575)	1:A:66:LEU:HD11	1:A:13:VAL:H	20	0.02
(1,1575)	1:A:66:LEU:HD12	1:A:13:VAL:H	20	0.02
(1,1575)	1:A:66:LEU:HD13	1:A:13:VAL:H	20	0.02
(1,1574)	1:A:16:ILE:HG21	1:A:40:MET:HG2	27	0.02
(1,1574)	1:A:16:ILE:HG22	1:A:40:MET:HG2	27	0.02
(1,1574)	1:A:16:ILE:HG23	1:A:40:MET:HG2	27	0.02
(1,1567)	1:A:55:VAL:HG11	1:A:57:PRO:HB3	1	0.02
(1,1567)	1:A:55:VAL:HG12	1:A:57:PRO:HB3	1	0.02
(1,1567)	1:A:55:VAL:HG13	1:A:57:PRO:HB3	1	0.02
(1,1555)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:33:ASP:HB3	26	0.02
(1,1555)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:33:ASP:HB3	26	0.02
(1,1555)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:33:ASP:HB3	26	0.02
(1,1554)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:26:ASN:HB3	22	0.02
(1,1554)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:26:ASN:HB3	22	0.02
(1,1554)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:26:ASN:HB3	22	0.02
(1,1553)	1:A:19:ILE:HG21	1:A:26:ASN:H	1	0.02
(1,1553)	1:A:19:ILE:HG22	1:A:26:ASN:H	1	0.02
(1,1553)	1:A:19:ILE:HG23	1:A:26:ASN:H	1	0.02
(1,1553)	1:A:19:ILE:HG21	1:A:26:ASN:H	10	0.02
(1,1553)	1:A:19:ILE:HG22	1:A:26:ASN:H	10	0.02
(1,1553)	1:A:19:ILE:HG23	1:A:26:ASN:H	10	0.02
(1,1551)	1:A:19:ILE:HG21	1:A:17:LEU:H	16	0.02
(1,1551)	1:A:19:ILE:HG22	1:A:17:LEU:H	16	0.02
(1,1551)	1:A:19:ILE:HG23	1:A:17:LEU:H	16	0.02
(1,1551)	1:A:19:ILE:HG21	1:A:17:LEU:H	17	0.02
(1,1551)	1:A:19:ILE:HG22	1:A:17:LEU:H	17	0.02
(1,1551)	1:A:19:ILE:HG23	1:A:17:LEU:H	17	0.02
(1,1547)	1:A:44:VAL:HG11	1:A:40:MET:HA	5	0.02
(1,1547)	1:A:44:VAL:HG12	1:A:40:MET:HA	5	0.02
(1,1547)	1:A:44:VAL:HG13	1:A:40:MET:HA	5	0.02
(1,1546)	1:A:44:VAL:HG11	1:A:42:VAL:HA	6	0.02
(1,1546)	1:A:44:VAL:HG12	1:A:42:VAL:HA	6	0.02
(1,1546)	1:A:44:VAL:HG13	1:A:42:VAL:HA	6	0.02
(1,1546)	1:A:44:VAL:HG11	1:A:42:VAL:HA	13	0.02
(1,1546)	1:A:44:VAL:HG12	1:A:42:VAL:HA	13	0.02



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1546)	1:A:44:VAL:HG13	1:A:42:VAL:HA	13	0.02
(1,1546)	1:A:44:VAL:HG11	1:A:42:VAL:HA	20	0.02
(1,1546)	1:A:44:VAL:HG12	1:A:42:VAL:HA	20	0.02
(1,1546)	1:A:44:VAL:HG13	1:A:42:VAL:HA	20	0.02
(1,1546)	1:A:44:VAL:HG11	1:A:42:VAL:HA	26	0.02
(1,1546)	1:A:44:VAL:HG12	1:A:42:VAL:HA	26	0.02
(1,1546)	1:A:44:VAL:HG13	1:A:42:VAL:HA	26	0.02
(1,1545)	1:A:44:VAL:HG21	1:A:45:ARG:HE	26	0.02
(1,1545)	1:A:44:VAL:HG22	1:A:45:ARG:HE	26	0.02
(1,1545)	1:A:44:VAL:HG23	1:A:45:ARG:HE	26	0.02
(1,1531)	1:A:10:VAL:HG21	1:A:72:MET:H	5	0.02
(1,1531)	1:A:10:VAL:HG22	1:A:72:MET:H	5	0.02
(1,1531)	1:A:10:VAL:HG23	1:A:72:MET:H	5	0.02
(1,1531)	1:A:10:VAL:HG21	1:A:72:MET:H	13	0.02
(1,1531)	1:A:10:VAL:HG22	1:A:72:MET:H	13	0.02
(1,1531)	1:A:10:VAL:HG23	1:A:72:MET:H	13	0.02
(1,1523)	1:A:73:SER:HA	1:A:70:GLN:H	11	0.02
(1,1523)	1:A:73:SER:HA	1:A:70:GLN:H	29	0.02
(1,1517)	1:A:8:ASP:HB3	1:A:7:ARG:HA	19	0.02
(1,1508)	1:A:72:MET:HG3	1:A:9:LEU:HD11	16	0.02
(1,1508)	1:A:72:MET:HG3	1:A:9:LEU:HD12	16	0.02
(1,1508)	1:A:72:MET:HG3	1:A:9:LEU:HD13	16	0.02
(1,1505)	1:A:55:VAL:HG11	1:A:59:ARG:HD2	2	0.02
(1,1505)	1:A:55:VAL:HG11	1:A:59:ARG:HD3	2	0.02
(1,1505)	1:A:55:VAL:HG12	1:A:59:ARG:HD2	2	0.02
(1,1505)	1:A:55:VAL:HG12	1:A:59:ARG:HD3	2	0.02
(1,1505)	1:A:55:VAL:HG13	1:A:59:ARG:HD2	2	0.02
(1,1505)	1:A:55:VAL:HG13	1:A:59:ARG:HD3	2	0.02
(1,1505)	1:A:55:VAL:HG11	1:A:59:ARG:HD2	10	0.02
(1,1505)	1:A:55:VAL:HG11	1:A:59:ARG:HD3	10	0.02
(1,1505)	1:A:55:VAL:HG12	1:A:59:ARG:HD2	10	0.02
(1,1505)	1:A:55:VAL:HG12	1:A:59:ARG:HD3	10	0.02
(1,1505)	1:A:55:VAL:HG13	1:A:59:ARG:HD2	10	0.02
(1,1505)	1:A:55:VAL:HG13	1:A:59:ARG:HD3	10	0.02
(1,1505)	1:A:55:VAL:HG11	1:A:59:ARG:HD2	26	0.02
(1,1505)	1:A:55:VAL:HG11	1:A:59:ARG:HD3	26	0.02
(1,1505)	1:A:55:VAL:HG12	1:A:59:ARG:HD2	26	0.02
(1,1505)	1:A:55:VAL:HG12	1:A:59:ARG:HD3	26	0.02
(1,1505)	1:A:55:VAL:HG13	1:A:59:ARG:HD2	26	0.02
(1,1505)	1:A:55:VAL:HG13	1:A:59:ARG:HD3	26	0.02
(1,1505)	1:A:55:VAL:HG11	1:A:59:ARG:HD2	28	0.02
(1,1505)	1:A:55:VAL:HG11	1:A:59:ARG:HD3	28	0.02



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1505)	1:A:55:VAL:HG12	1:A:59:ARG:HD2	28	0.02
(1,1505)	1:A:55:VAL:HG12	1:A:59:ARG:HD3	28	0.02
(1,1505)	1:A:55:VAL:HG13	1:A:59:ARG:HD2	28	0.02
(1,1505)	1:A:55:VAL:HG13	1:A:59:ARG:HD3	28	0.02
(1,1505)	1:A:55:VAL:HG11	1:A:59:ARG:HD2	30	0.02
(1,1505)	1:A:55:VAL:HG11	1:A:59:ARG:HD3	30	0.02
(1,1505)	1:A:55:VAL:HG12	1:A:59:ARG:HD2	30	0.02
(1,1505)	1:A:55:VAL:HG12	1:A:59:ARG:HD3	30	0.02
(1,1505)	1:A:55:VAL:HG13	1:A:59:ARG:HD2	30	0.02
(1,1505)	1:A:55:VAL:HG13	1:A:59:ARG:HD3	30	0.02
(1,1503)	1:A:55:VAL:HG11	1:A:49:GLU:H	14	0.02
(1,1503)	1:A:55:VAL:HG12	1:A:49:GLU:H	14	0.02
(1,1503)	1:A:55:VAL:HG13	1:A:49:GLU:H	14	0.02
(1,1501)	1:A:49:GLU:HA	1:A:53:ASP:HB3	5	0.02
(1,1498)	1:A:67:ARG:HD2	1:A:69:LEU:H	10	0.02
(1,1498)	1:A:67:ARG:HD2	1:A:69:LEU:H	21	0.02
(1,1498)	1:A:67:ARG:HD2	1:A:69:LEU:H	24	0.02
(1,1498)	1:A:67:ARG:HD2	1:A:69:LEU:H	26	0.02
(1,1497)	1:A:65:THR:HG21	1:A:63:GLN:HB2	12	0.02
(1,1497)	1:A:65:THR:HG22	1:A:63:GLN:HB2	12	0.02
(1,1497)	1:A:65:THR:HG23	1:A:63:GLN:HB2	12	0.02
(1,1493)	1:A:46:GLN:HG3	1:A:50:ARG:HD2	17	0.02
(1,1493)	1:A:46:GLN:HG3	1:A:50:ARG:HD3	17	0.02
(1,1493)	1:A:46:GLN:HG3	1:A:50:ARG:HD2	21	0.02
(1,1493)	1:A:46:GLN:HG3	1:A:50:ARG:HD3	21	0.02
(1,1493)	1:A:46:GLN:HG3	1:A:50:ARG:HD2	24	0.02
(1,1493)	1:A:46:GLN:HG3	1:A:50:ARG:HD3	24	0.02
(1,1491)	1:A:42:VAL:HG21	1:A:46:GLN:HG2	25	0.02
(1,1491)	1:A:42:VAL:HG22	1:A:46:GLN:HG2	25	0.02
(1,1491)	1:A:42:VAL:HG23	1:A:46:GLN:HG2	25	0.02
(1,1491)	1:A:42:VAL:HG21	1:A:46:GLN:HG2	29	0.02
(1,1491)	1:A:42:VAL:HG22	1:A:46:GLN:HG2	29	0.02
(1,1491)	1:A:42:VAL:HG23	1:A:46:GLN:HG2	29	0.02
(1,1484)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:19:ILE:HB	17	0.02
(1,1484)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:19:ILE:HB	17	0.02
(1,1484)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:19:ILE:HB	17	0.02
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:13:VAL:HG11	8	0.02
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:13:VAL:HG12	8	0.02
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:13:VAL:HG13	8	0.02
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:13:VAL:HG11	8	0.02
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:13:VAL:HG12	8	0.02
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:13:VAL:HG13	8	0.02



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:13:VAL:HG11	8	0.02
	1:A:14:ALA:HB3	1:A:13:VAL:HG12	8	0.02
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:13:VAL:HG13	8	0.02
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:13:VAL:HG11	16	0.02
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:13:VAL:HG12	16	0.02
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:13:VAL:HG13	16	0.02
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:13:VAL:HG11	16	0.02
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:13:VAL:HG12	16	0.02
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:13:VAL:HG13	16	0.02
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:13:VAL:HG11	16	0.02
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:13:VAL:HG12	16	0.02
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:13:VAL:HG13	16	0.02
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:13:VAL:HG11	18	0.02
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:13:VAL:HG12	18	0.02
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:13:VAL:HG13	18	0.02
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:13:VAL:HG11	18	0.02
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:13:VAL:HG12	18	0.02
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:13:VAL:HG13	18	0.02
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:13:VAL:HG11	18	0.02
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:13:VAL:HG12	18	0.02
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:13:VAL:HG13	18	0.02
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:13:VAL:HG11	20	0.02
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:13:VAL:HG12	20	0.02
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:13:VAL:HG13	20	0.02
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:13:VAL:HG11	20	0.02
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:13:VAL:HG12	20	0.02
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:13:VAL:HG13	20	0.02
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:13:VAL:HG11	20	0.02
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:13:VAL:HG12	20	0.02
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:13:VAL:HG13	20	0.02
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:13:VAL:HG11	24	0.02
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:13:VAL:HG12	24	0.02
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:13:VAL:HG13	24	0.02
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:13:VAL:HG11	24	0.02
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:13:VAL:HG12	24	0.02
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:13:VAL:HG13	24	0.02
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:13:VAL:HG11	24	0.02
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:13:VAL:HG12	24	0.02
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:13:VAL:HG13	24	0.02
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:13:VAL:HG11	27	0.02
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:13:VAL:HG12	27	0.02
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:13:VAL:HG13	27	0.02



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:13:VAL:HG11	27	0.02
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:13:VAL:HG12	27	0.02
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:13:VAL:HG13	27	0.02
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:13:VAL:HG11	27	0.02
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:13:VAL:HG12	27	0.02
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:13:VAL:HG13	27	0.02
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:13:VAL:HG11	28	0.02
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:13:VAL:HG12	28	0.02
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:13:VAL:HG13	28	0.02
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:13:VAL:HG11	28	0.02
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:13:VAL:HG12	28	0.02
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:13:VAL:HG13	28	0.02
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:13:VAL:HG11	28	0.02
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:13:VAL:HG12	28	0.02
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:13:VAL:HG13	28	0.02
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:13:VAL:HG11	30	0.02
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:13:VAL:HG12	30	0.02
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:13:VAL:HG13	30	0.02
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:13:VAL:HG11	30	0.02
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:13:VAL:HG12	30	0.02
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:13:VAL:HG13	30	0.02
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:13:VAL:HG11	30	0.02
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:13:VAL:HG12	30	0.02
(1,1481)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:13:VAL:HG13	30	0.02
(1,1465)	1:A:14:ALA:HA	1:A:13:VAL:HG11	13	0.02
(1,1465)	1:A:14:ALA:HA	1:A:13:VAL:HG12	13	0.02
(1,1465)	1:A:14:ALA:HA	1:A:13:VAL:HG13	13	0.02
(1,1465)	1:A:14:ALA:HA	1:A:13:VAL:HG11	17	0.02
(1,1465)	1:A:14:ALA:HA	1:A:13:VAL:HG12	17	0.02
(1,1465)	1:A:14:ALA:HA	1:A:13:VAL:HG13	17	0.02
(1,1465)	1:A:14:ALA:HA	1:A:13:VAL:HG11	18	0.02
(1,1465)	1:A:14:ALA:HA	1:A:13:VAL:HG12	18	0.02
(1,1465)	1:A:14:ALA:HA	1:A:13:VAL:HG13	18	0.02
(1,1465)	1:A:14:ALA:HA	1:A:13:VAL:HG11	19	0.02
(1,1465)	1:A:14:ALA:HA	1:A:13:VAL:HG12	19	0.02
(1,1465)	1:A:14:ALA:HA	1:A:13:VAL:HG13	19	0.02
(1,1447)	1:A:13:VAL:HG11	1:A:17:LEU:HG	3	0.02
(1,1447)	1:A:13:VAL:HG12	1:A:17:LEU:HG	3	0.02
(1,1447)	1:A:13:VAL:HG13	1:A:17:LEU:HG	3	0.02
(1,1447)	1:A:13:VAL:HG11	1:A:17:LEU:HG	24	0.02
(1,1447)	1:A:13:VAL:HG12	1:A:17:LEU:HG	24	0.02
(1,1447)	1:A:13:VAL:HG13	1:A:17:LEU:HG	24	0.02



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1445)	1:A:44:VAL:HG11	1:A:47:ILE:HG13	4	0.02
(1,1445)	1:A:44:VAL:HG12	1:A:47:ILE:HG13	4	0.02
(1,1445)	1:A:44:VAL:HG13	1:A:47:ILE:HG13	4	0.02
(1,1445)	1:A:44:VAL:HG11	1:A:47:ILE:HG13	11	0.02
(1,1445)	1:A:44:VAL:HG12	1:A:47:ILE:HG13	11	0.02
(1,1445)	1:A:44:VAL:HG13	1:A:47:ILE:HG13	11	0.02
(1,1445)	1:A:44:VAL:HG11	1:A:47:ILE:HG13	14	0.02
(1,1445)	1:A:44:VAL:HG12	1:A:47:ILE:HG13	14	0.02
(1,1445)	1:A:44:VAL:HG13	1:A:47:ILE:HG13	14	0.02
(1,1435)	1:A:13:VAL:HG11	1:A:9:LEU:HA	20	0.02
(1,1435)	1:A:13:VAL:HG12	1:A:9:LEU:HA	20	0.02
(1,1435)	1:A:13:VAL:HG13	1:A:9:LEU:HA	20	0.02
(1,1435)	1:A:13:VAL:HG11	1:A:9:LEU:HA	29	0.02
(1,1435)	1:A:13:VAL:HG12	1:A:9:LEU:HA	29	0.02
(1,1435)	1:A:13:VAL:HG13	1:A:9:LEU:HA	29	0.02
(1,1429)	1:A:42:VAL:HG21	1:A:39:LEU:H	13	0.02
(1,1429)	1:A:42:VAL:HG22	1:A:39:LEU:H	13	0.02
(1,1429)	1:A:42:VAL:HG23	1:A:39:LEU:H	13	0.02
(1,1423)	1:A:42:VAL:HG21	1:A:39:LEU:HG	17	0.02
(1,1423)	1:A:42:VAL:HG22	1:A:39:LEU:HG	17	0.02
(1,1423)	1:A:42:VAL:HG23	1:A:39:LEU:HG	17	0.02
(1,1423)	1:A:42:VAL:HG21	1:A:39:LEU:HG	20	0.02
(1,1423)	1:A:42:VAL:HG22	1:A:39:LEU:HG	20	0.02
(1,1423)	1:A:42:VAL:HG23	1:A:39:LEU:HG	20	0.02
(1,1423)	1:A:42:VAL:HG21	1:A:39:LEU:HG	30	0.02
(1,1423)	1:A:42:VAL:HG22	1:A:39:LEU:HG	30	0.02
(1,1423)	1:A:42:VAL:HG23	1:A:39:LEU:HG	30	0.02
(1,1411)	1:A:42:VAL:HG11	1:A:43:GLU:HG3	1	0.02
(1,1411)	1:A:42:VAL:HG12	1:A:43:GLU:HG3	1	0.02
(1,1411)	1:A:42:VAL:HG13	1:A:43:GLU:HG3	1	0.02
(1,1411)	1:A:42:VAL:HG11	1:A:43:GLU:HG3	13	0.02
(1,1411)	1:A:42:VAL:HG12	1:A:43:GLU:HG3	13	0.02
(1,1411)	1:A:42:VAL:HG13	1:A:43:GLU:HG3	13	0.02
(1,1407)	1:A:42:VAL:HA	1:A:44:VAL:H	25	0.02
(1,1402)	1:A:42:VAL:HA	1:A:45:ARG:HB3	12	0.02
(1,1402)	1:A:42:VAL:HA	1:A:45:ARG:HB3	13	0.02
(1,1402)	1:A:42:VAL:HA	1:A:45:ARG:HB3	26	0.02
(1,1378)	1:A:12:ALA:HB1	1:A:9:LEU:HA	16	0.02
(1,1378)	1:A:12:ALA:HB2	1:A:9:LEU:HA	16	0.02
(1,1378)	1:A:12:ALA:HB3	1:A:9:LEU:HA	16	0.02
(1,1334)	1:A:68:LYS:HE2	1:A:68:LYS:HB2	14	0.02
(1,1334)	1:A:68:LYS:HE2	1:A:68:LYS:HB3	14	0.02



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1334)	1:A:68:LYS:HE3	1:A:68:LYS:HB2	14	0.02
(1,1334)	1:A:68:LYS:HE3	1:A:68:LYS:HB3	14	0.02
(1,1334)	1:A:68:LYS:HE2	1:A:68:LYS:HB2	15	0.02
(1,1334)	1:A:68:LYS:HE2	1:A:68:LYS:HB3	15	0.02
(1,1334)	1:A:68:LYS:HE3	1:A:68:LYS:HB2	15	0.02
(1,1334)	1:A:68:LYS:HE3	1:A:68:LYS:HB3	15	0.02
(1,1334)	1:A:68:LYS:HE2	1:A:68:LYS:HB2	26	0.02
(1,1334)	1:A:68:LYS:HE2	1:A:68:LYS:HB3	26	0.02
(1,1334)	1:A:68:LYS:HE3	1:A:68:LYS:HB2	26	0.02
(1,1334)	1:A:68:LYS:HE3	1:A:68:LYS:HB3	26	0.02
(1,1325)	1:A:67:ARG:HD2	1:A:67:ARG:HA	9	0.02
(1,1311)	1:A:64:LEU:HA	1:A:68:LYS:HD2	2	0.02
(1,1311)	1:A:64:LEU:HA	1:A:68:LYS:HD3	2	0.02
(1,1311)	1:A:64:LEU:HA	1:A:68:LYS:HD2	20	0.02
(1,1311)	1:A:64:LEU:HA	1:A:68:LYS:HD3	20	0.02
(1,1311)	1:A:64:LEU:HA	1:A:68:LYS:HD2	21	0.02
(1,1311)	1:A:64:LEU:HA	1:A:68:LYS:HD3	21	0.02
(1,1308)	1:A:64:LEU:HA	1:A:63:GLN:HE21	1	0.02
(1,1308)	1:A:64:LEU:HA	1:A:63:GLN:HE21	5	0.02
(1,1308)	1:A:64:LEU:HA	1:A:63:GLN:HE21	25	0.02
(1,1308)	1:A:64:LEU:HA	1:A:63:GLN:HE21	30	0.02
(1,1296)	1:A:63:GLN:HA	1:A:32:ALA:HB1	29	0.02
(1,1296)	1:A:63:GLN:HA	1:A:32:ALA:HB2	29	0.02
(1,1296)	1:A:63:GLN:HA	1:A:32:ALA:HB3	29	0.02
(1,1276)	1:A:62:ARG:HB3	1:A:32:ALA:HB1	8	0.02
(1,1276)	1:A:62:ARG:HB3	1:A:32:ALA:HB2	8	0.02
(1,1276)	1:A:62:ARG:HB3	1:A:32:ALA:HB3	8	0.02
(1,1267)	1:A:61:VAL:HG21	1:A:60:GLU:HB3	20	0.02
(1,1267)	1:A:61:VAL:HG22	1:A:60:GLU:HB3	20	0.02
(1,1267)	1:A:61:VAL:HG23	1:A:60:GLU:HB3	20	0.02
(1,1267)	1:A:61:VAL:HG21	1:A:60:GLU:HB3	24	0.02
(1,1267)	1:A:61:VAL:HG22	1:A:60:GLU:HB3	24	0.02
(1,1267)	1:A:61:VAL:HG23	1:A:60:GLU:HB3	24	0.02
(1,1260)	1:A:61:VAL:HG11	1:A:41:GLY:HA2	6	0.02
(1,1260)	1:A:61:VAL:HG12	1:A:41:GLY:HA2	6	0.02
(1,1260)	1:A:61:VAL:HG13	1:A:41:GLY:HA2	6	0.02
(1,1252)	1:A:61:VAL:HA	1:A:63:GLN:HE22	17	0.02
(1,1252)	1:A:61:VAL:HA	1:A:63:GLN:HE22	18	0.02
(1,1252)	1:A:61:VAL:HA	1:A:63:GLN:HE22	22	0.02
(1,1252)	1:A:61:VAL:HA	1:A:63:GLN:HE22	23	0.02
(1,1246)	1:A:61:VAL:HA	1:A:64:LEU:HG	2	0.02
(1,1239)	1:A:60:GLU:HB3	1:A:56:LEU:HB2	3	0.02



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

Key	$\frac{\text{4 from previous page.}}{\text{Atom-1}}$	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1239)	1:A:60:GLU:HB3	1:A:56:LEU:HB2	25	0.02
(1,1222)	1:A:58:ILE:HG21	1:A:63:GLN:HE22	6	0.02
(1,1222)	1:A:58:ILE:HG22	1:A:63:GLN:HE22	6	0.02
(1,1222)	1:A:58:ILE:HG23	1:A:63:GLN:HE22	6	0.02
(1,1222)	1:A:58:ILE:HG21	1:A:63:GLN:HE22	22	0.02
(1,1222)	1:A:58:ILE:HG22	1:A:63:GLN:HE22	22	0.02
(1,1222)	1:A:58:ILE:HG23	1:A:63:GLN:HE22	22	0.02
(1,1221)	1:A:58:ILE:HG21	1:A:57:PRO:HB3	19	0.02
(1,1221)	1:A:58:ILE:HG22	1:A:57:PRO:HB3	19	0.02
(1,1221)	1:A:58:ILE:HG23	1:A:57:PRO:HB3	19	0.02
(1,1221)	1:A:58:ILE:HG21	1:A:57:PRO:HB3	30	0.02
(1,1221)	1:A:58:ILE:HG22	1:A:57:PRO:HB3	30	0.02
(1,1221)	1:A:58:ILE:HG23	1:A:57:PRO:HB3	30	0.02
(1,1219)	1:A:58:ILE:HG21	1:A:59:ARG:HD2	9	0.02
(1,1219)	1:A:58:ILE:HG21	1:A:59:ARG:HD3	9	0.02
(1,1219)	1:A:58:ILE:HG22	1:A:59:ARG:HD2	9	0.02
(1,1219)	1:A:58:ILE:HG22	1:A:59:ARG:HD3	9	0.02
(1,1219)	1:A:58:ILE:HG23	1:A:59:ARG:HD2	9	0.02
(1,1219)	1:A:58:ILE:HG23	1:A:59:ARG:HD3	9	0.02
(1,1219)	1:A:58:ILE:HG21	1:A:59:ARG:HD2	14	0.02
(1,1219)	1:A:58:ILE:HG21	1:A:59:ARG:HD3	14	0.02
(1,1219)	1:A:58:ILE:HG22	1:A:59:ARG:HD2	14	0.02
(1,1219)	1:A:58:ILE:HG22	1:A:59:ARG:HD3	14	0.02
(1,1219)	1:A:58:ILE:HG23	1:A:59:ARG:HD2	14	0.02
(1,1219)	1:A:58:ILE:HG23	1:A:59:ARG:HD3	14	0.02
(1,12)	1:A:41:GLY:HA2	1:A:61:VAL:HG11	8	0.02
(1,12)	1:A:41:GLY:HA2	1:A:61:VAL:HG12	8	0.02
(1,12)	1:A:41:GLY:HA2	1:A:61:VAL:HG13	8	0.02
(1,12)	1:A:41:GLY:HA2	1:A:58:ILE:HD11	8	0.02
(1,12)	1:A:41:GLY:HA2	1:A:58:ILE:HD12	8	0.02
(1,12)	1:A:41:GLY:HA2	1:A:58:ILE:HD13	8	0.02
(1,12)	1:A:41:GLY:HA2	1:A:64:LEU:HD11	8	0.02
(1,12)	1:A:41:GLY:HA2	1:A:64:LEU:HD12	8	0.02
(1,12)	1:A:41:GLY:HA2	1:A:64:LEU:HD13	8	0.02
(1,1183)	1:A:56:LEU:HB2	1:A:57:PRO:HB2	5	0.02
(1,1183)	1:A:56:LEU:HB2	1:A:57:PRO:HG2	5	0.02
(1,1183)	1:A:56:LEU:HB2	1:A:57:PRO:HB2	16	0.02
(1,1183)	1:A:56:LEU:HB2	1:A:57:PRO:HG2	16	0.02
(1,1183)	1:A:56:LEU:HB2	1:A:57:PRO:HB2	23	0.02
(1,1183)	1:A:56:LEU:HB2	1:A:57:PRO:HG2	23	0.02
(1,1183)	1:A:56:LEU:HB2	1:A:57:PRO:HB2	25	0.02
(1,1183)	1:A:56:LEU:HB2	1:A:57:PRO:HG2	25	0.02



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1172)	1:A:55:VAL:HA	1:A:57:PRO:HG3	16	0.02
(1,1172)	1:A:55:VAL:HA	1:A:57:PRO:HG3	23	0.02
(1,1172)	1:A:55:VAL:HA	1:A:57:PRO:HG3	28	0.02
(1,1168)	1:A:54:LEU:HG	1:A:56:LEU:HD21	16	0.02
(1,1168)	1:A:54:LEU:HG	1:A:56:LEU:HD22	16	0.02
(1,1168)	1:A:54:LEU:HG	1:A:56:LEU:HD23	16	0.02
(1,1168)	1:A:54:LEU:HG	1:A:56:LEU:HD21	23	0.02
(1,1168)	1:A:54:LEU:HG	1:A:56:LEU:HD22	23	0.02
(1,1168)	1:A:54:LEU:HG	1:A:56:LEU:HD23	23	0.02
(1,1163)	1:A:54:LEU:HD11	1:A:51:GLU:HB2	14	0.02
(1,1163)	1:A:54:LEU:HD12	1:A:51:GLU:HB2	14	0.02
(1,1163)	1:A:54:LEU:HD13	1:A:51:GLU:HB2	14	0.02
(1,1163)	1:A:54:LEU:HD11	1:A:51:GLU:HB2	28	0.02
(1,1163)	1:A:54:LEU:HD12	1:A:51:GLU:HB2	28	0.02
(1,1163)	1:A:54:LEU:HD13	1:A:51:GLU:HB2	28	0.02
(1,1158)	1:A:54:LEU:HB3	1:A:48:LEU:HB3	29	0.02
(1,1149)	1:A:54:LEU:HB3	1:A:48:LEU:HG	18	0.02
(1,1147)	1:A:54:LEU:HB2	1:A:48:LEU:HB3	15	0.02
(1,1147)	1:A:54:LEU:HB2	1:A:48:LEU:HB3	19	0.02
(1,1147)	1:A:54:LEU:HB2	1:A:48:LEU:HB3	22	0.02
(1,1108)	1:A:48:LEU:HA	1:A:52:HIS:HB3	7	0.02
(1,1108)	1:A:48:LEU:HA	1:A:52:HIS:HB3	22	0.02
(1,11)	1:A:41:GLY:HA2	1:A:61:VAL:HG11	8	0.02
(1,11)	1:A:41:GLY:HA2	1:A:61:VAL:HG12	8	0.02
(1,11)	1:A:41:GLY:HA2	1:A:61:VAL:HG13	8	0.02
(1,11)	1:A:41:GLY:HA2	1:A:58:ILE:HD11	8	0.02
(1,11)	1:A:41:GLY:HA2	1:A:58:ILE:HD12	8	0.02
(1,11)	1:A:41:GLY:HA2	1:A:58:ILE:HD13	8	0.02
(1,11)	1:A:41:GLY:HA2	1:A:64:LEU:HD11	8	0.02
(1,11)	1:A:41:GLY:HA2	1:A:64:LEU:HD12	8	0.02
(1,11)	1:A:41:GLY:HA2	1:A:64:LEU:HD13	8	0.02
(1,1095)	1:A:39:LEU:HD21	1:A:42:VAL:H	1	0.02
(1,1095)	1:A:39:LEU:HD22	1:A:42:VAL:H	1	0.02
(1,1095)	1:A:39:LEU:HD23	1:A:42:VAL:H	1	0.02
(1,1095)	1:A:39:LEU:HD21	1:A:42:VAL:H	29	0.02
(1,1095)	1:A:39:LEU:HD22	1:A:42:VAL:H	29	0.02
(1,1095)	1:A:39:LEU:HD23	1:A:42:VAL:H	29	0.02
(1,1091)	1:A:39:LEU:HD11	1:A:39:LEU:HA	28	0.02
(1,1091)	1:A:39:LEU:HD12	1:A:39:LEU:HA	28	0.02
(1,1091)	1:A:39:LEU:HD13	1:A:39:LEU:HA	28	0.02
(1,1071)	1:A:36:LEU:HG	1:A:38:SER:H	7	0.02
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD11	1:A:44:VAL:HG21	9	0.02



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD11	1:A:44:VAL:HG22	9	0.02
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD11	1:A:44:VAL:HG23	9	0.02
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD12	1:A:44:VAL:HG21	9	0.02
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD12	1:A:44:VAL:HG22	9	0.02
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD12	1:A:44:VAL:HG23	9	0.02
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD13	1:A:44:VAL:HG21	9	0.02
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD13	1:A:44:VAL:HG22	9	0.02
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD13	1:A:44:VAL:HG23	9	0.02
(1,1037)	1:A:36:LEU:HB3	1:A:40:MET:HA	9	0.02
(1,1028)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:33:ASP:H	12	0.02
(1,1028)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:33:ASP:H	12	0.02
(1,1028)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:33:ASP:H	12	0.02
(1,1016)	1:A:34:LEU:HD11	1:A:29:SER:H	4	0.02
(1,1016)	1:A:34:LEU:HD12	1:A:29:SER:H	4	0.02
(1,1016)	1:A:34:LEU:HD13	1:A:29:SER:H	4	0.02
(1,1008)	1:A:34:LEU:HD11	1:A:31:LEU:HA	8	0.02
(1,1008)	1:A:34:LEU:HD12	1:A:31:LEU:HA	8	0.02
(1,1008)	1:A:34:LEU:HD13	1:A:31:LEU:HA	8	0.02
(1,1008)	1:A:34:LEU:HD11	1:A:31:LEU:HA	22	0.02
(1,1008)	1:A:34:LEU:HD12	1:A:31:LEU:HA	22	0.02
(1,1008)	1:A:34:LEU:HD13	1:A:31:LEU:HA	22	0.02
(1,1008)	1:A:34:LEU:HD11	1:A:31:LEU:HA	25	0.02
(1,1008)	1:A:34:LEU:HD12	1:A:31:LEU:HA	25	0.02
(1,1008)	1:A:34:LEU:HD13	1:A:31:LEU:HA	25	0.02
(1,1008)	1:A:34:LEU:HD11	1:A:31:LEU:HA	30	0.02
(1,1008)	1:A:34:LEU:HD12	1:A:31:LEU:HA	30	0.02
(1,1008)	1:A:34:LEU:HD13	1:A:31:LEU:HA	30	0.02
(1,1000)	1:A:33:ASP:HB2	1:A:35:GLY:H	22	0.02
(1,996)	1:A:33:ASP:HB2	1:A:29:SER:HB2	12	0.01
(1,996)	1:A:33:ASP:HB2	1:A:29:SER:HB2	22	0.01
(1,972)	1:A:27:LEU:HD21	1:A:70:GLN:HE21	5	0.01
(1,972)	1:A:27:LEU:HD22	1:A:70:GLN:HE21	5	0.01
(1,972)	1:A:27:LEU:HD23	1:A:70:GLN:HE21	5	0.01
(1,972)	1:A:27:LEU:HD21	1:A:70:GLN:HE21	11	0.01
(1,972)	1:A:27:LEU:HD22	1:A:70:GLN:HE21	11	0.01
(1,972)	1:A:27:LEU:HD23	1:A:70:GLN:HE21	11	0.01
(1,972)	1:A:27:LEU:HD21	1:A:70:GLN:HE21	13	0.01
(1,972)	1:A:27:LEU:HD22	1:A:70:GLN:HE21	13	0.01
(1,972)	1:A:27:LEU:HD23	1:A:70:GLN:HE21	13	0.01
(1,972)	1:A:27:LEU:HD21	1:A:70:GLN:HE21	15	0.01
(1,972)	1:A:27:LEU:HD22	1:A:70:GLN:HE21	15	0.01
(1,972)	1:A:27:LEU:HD23	1:A:70:GLN:HE21	15	0.01



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,972)	1:A:27:LEU:HD21	1:A:70:GLN:HE21	16	0.01
(1,972)	1:A:27:LEU:HD22	1:A:70:GLN:HE21	16	0.01
(1,972)	1:A:27:LEU:HD23	1:A:70:GLN:HE21	16	0.01
(1,971)	1:A:27:LEU:HD11	1:A:25:ILE:H	15	0.01
(1,971)	1:A:27:LEU:HD12	1:A:25:ILE:H	15	0.01
(1,971)	1:A:27:LEU:HD13	1:A:25:ILE:H	15	0.01
(1,969)	1:A:27:LEU:HD21	1:A:27:LEU:HA	12	0.01
(1,969)	1:A:27:LEU:HD22	1:A:27:LEU:HA	12	0.01
(1,969)	1:A:27:LEU:HD23	1:A:27:LEU:HA	12	0.01
(1,968)	1:A:27:LEU:HD11	1:A:67:ARG:HA	4	0.01
(1,968)	1:A:27:LEU:HD12	1:A:67:ARG:HA	4	0.01
(1,968)	1:A:27:LEU:HD13	1:A:67:ARG:HA	4	0.01
(1,968)	1:A:27:LEU:HD11	1:A:67:ARG:HA	9	0.01
(1,968)	1:A:27:LEU:HD12	1:A:67:ARG:HA	9	0.01
(1,968)	1:A:27:LEU:HD13	1:A:67:ARG:HA	9	0.01
(1,968)	1:A:27:LEU:HD11	1:A:67:ARG:HA	11	0.01
(1,968)	1:A:27:LEU:HD12	1:A:67:ARG:HA	11	0.01
(1,968)	1:A:27:LEU:HD13	1:A:67:ARG:HA	11	0.01
(1,939)	1:A:57:PRO:HD2	1:A:60:GLU:HG2	22	0.01
(1,939)	1:A:57:PRO:HD2	1:A:60:GLU:HG3	22	0.01
(1,933)	1:A:57:PRO:HG3	1:A:60:GLU:H	1	0.01
(1,931)	1:A:57:PRO:HG3	1:A:60:GLU:HG2	29	0.01
(1,931)	1:A:57:PRO:HG3	1:A:60:GLU:HG3	29	0.01
(1,9)	1:A:16:ILE:HG21	1:A:43:GLU:H	8	0.01
(1,9)	1:A:16:ILE:HG22	1:A:43:GLU:H	8	0.01
(1,9)	1:A:16:ILE:HG23	1:A:43:GLU:H	8	0.01
(1,9)	1:A:16:ILE:HG21	1:A:42:VAL:H	8	0.01
(1,9)	1:A:16:ILE:HG22	1:A:42:VAL:H	8	0.01
(1,9)	1:A:16:ILE:HG23	1:A:42:VAL:H	8	0.01
(1,9)	1:A:47:ILE:HG21	1:A:50:ARG:HE	8	0.01
(1,9)	1:A:47:ILE:HG22	1:A:50:ARG:HE	8	0.01
(1,9)	1:A:47:ILE:HG23	1:A:50:ARG:HE	8	0.01
(1,899)	1:A:47:ILE:HG21	1:A:9:LEU:HD11	8	0.01
(1,899)	1:A:47:ILE:HG21	1:A:9:LEU:HD12	8	0.01
(1,899)	1:A:47:ILE:HG21	1:A:9:LEU:HD13	8	0.01
(1,899)	1:A:47:ILE:HG22	1:A:9:LEU:HD11	8	0.01
(1,899)	1:A:47:ILE:HG22	1:A:9:LEU:HD12	8	0.01
(1,899)	1:A:47:ILE:HG22	1:A:9:LEU:HD13	8	0.01
(1,899)	1:A:47:ILE:HG23	1:A:9:LEU:HD11	8	0.01
(1,899)	1:A:47:ILE:HG23	1:A:9:LEU:HD12	8	0.01
(1,899)	1:A:47:ILE:HG23	1:A:9:LEU:HD13	8	0.01
(1,899)	1:A:47:ILE:HG21	1:A:9:LEU:HD11	9	0.01



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,899)	1:A:47:ILE:HG21	1:A:9:LEU:HD12	9	0.01
(1,899)	1:A:47:ILE:HG21	1:A:9:LEU:HD13	9	0.01
(1,899)	1:A:47:ILE:HG22	1:A:9:LEU:HD11	9	0.01
(1,899)	1:A:47:ILE:HG22	1:A:9:LEU:HD12	9	0.01
(1,899)	1:A:47:ILE:HG22	1:A:9:LEU:HD13	9	0.01
(1,899)	1:A:47:ILE:HG23	1:A:9:LEU:HD11	9	0.01
(1,899)	1:A:47:ILE:HG23	1:A:9:LEU:HD12	9	0.01
(1,899)	1:A:47:ILE:HG23	1:A:9:LEU:HD13	9	0.01
(1,899)	1:A:47:ILE:HG21	1:A:9:LEU:HD11	22	0.01
(1,899)	1:A:47:ILE:HG21	1:A:9:LEU:HD12	22	0.01
(1,899)	1:A:47:ILE:HG21	1:A:9:LEU:HD13	22	0.01
(1,899)	1:A:47:ILE:HG22	1:A:9:LEU:HD11	22	0.01
(1,899)	1:A:47:ILE:HG22	1:A:9:LEU:HD12	22	0.01
(1,899)	1:A:47:ILE:HG22	1:A:9:LEU:HD13	22	0.01
(1,899)	1:A:47:ILE:HG23	1:A:9:LEU:HD11	22	0.01
(1,899)	1:A:47:ILE:HG23	1:A:9:LEU:HD12	22	0.01
(1,899)	1:A:47:ILE:HG23	1:A:9:LEU:HD13	22	0.01
(1,880)	1:A:10:VAL:HG21	1:A:10:VAL:H	11	0.01
(1,880)	1:A:10:VAL:HG22	1:A:10:VAL:H	11	0.01
(1,880)	1:A:10:VAL:HG23	1:A:10:VAL:H	11	0.01
(1,876)	1:A:10:VAL:HG21	1:A:68:LYS:HB2	5	0.01
(1,876)	1:A:10:VAL:HG21	1:A:68:LYS:HB3	5	0.01
(1,876)	1:A:10:VAL:HG22	1:A:68:LYS:HB2	5	0.01
(1,876)	1:A:10:VAL:HG22	1:A:68:LYS:HB3	5	0.01
(1,876)	1:A:10:VAL:HG23	1:A:68:LYS:HB2	5	0.01
(1,876)	1:A:10:VAL:HG23	1:A:68:LYS:HB3	5	0.01
(1,876)	1:A:10:VAL:HG21	1:A:68:LYS:HB2	8	0.01
(1,876)	1:A:10:VAL:HG21	1:A:68:LYS:HB3	8	0.01
(1,876)	1:A:10:VAL:HG22	1:A:68:LYS:HB2	8	0.01
(1,876)	1:A:10:VAL:HG22	1:A:68:LYS:HB3	8	0.01
(1,876)	1:A:10:VAL:HG23	1:A:68:LYS:HB2	8	0.01
(1,876)	1:A:10:VAL:HG23	1:A:68:LYS:HB3	8	0.01
(1,867)	1:A:10:VAL:HB	1:A:11:LYS:H	17	0.01
(1,862)	1:A:10:VAL:HA	1:A:9:LEU:HD21	7	0.01
(1,862)	1:A:10:VAL:HA	1:A:9:LEU:HD22	7	0.01
(1,862)	1:A:10:VAL:HA	1:A:9:LEU:HD23	7	0.01
(1,846)	1:A:8:ASP:HB3	1:A:11:LYS:HD2	4	0.01
(1,846)	1:A:8:ASP:HB3	1:A:11:LYS:HD3	4	0.01
(1,846)	1:A:8:ASP:HB3	1:A:11:LYS:HD2	15	0.01
(1,846)	1:A:8:ASP:HB3	1:A:11:LYS:HD3	15	0.01
(1,82)	1:A:73:SER:HB2	1:A:9:LEU:HB3	2	0.01
(1,82)	1:A:73:SER:HB2	1:A:7:ARG:HG2	2	0.01



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,82)	1:A:73:SER:HB2	1:A:7:ARG:HG3	2	0.01
(1,808)	1:A:65:THR:HG21	1:A:30:SER:HA	3	0.01
(1,808)	1:A:65:THR:HG22	1:A:30:SER:HA	3	0.01
(1,808)	1:A:65:THR:HG23	1:A:30:SER:HA	3	0.01
(1,808)	1:A:65:THR:HG21	1:A:30:SER:HA	21	0.01
(1,808)	1:A:65:THR:HG22	1:A:30:SER:HA	21	0.01
(1,808)	1:A:65:THR:HG23	1:A:30:SER:HA	21	0.01
(1,801)	1:A:65:THR:HA	1:A:31:LEU:HD11	4	0.01
(1,801)	1:A:65:THR:HA	1:A:31:LEU:HD12	4	0.01
(1,801)	1:A:65:THR:HA	1:A:31:LEU:HD13	4	0.01
(1,801)	1:A:65:THR:HA	1:A:31:LEU:HD11	8	0.01
(1,801)	1:A:65:THR:HA	1:A:31:LEU:HD12	8	0.01
(1,801)	1:A:65:THR:HA	1:A:31:LEU:HD13	8	0.01
(1,798)	1:A:51:GLU:HG2	1:A:50:ARG:HG2	1	0.01
(1,798)	1:A:51:GLU:HG3	1:A:50:ARG:HG2	1	0.01
(1,783)	1:A:52:HIS:HB3	1:A:54:LEU:HD11	6	0.01
(1,783)	1:A:52:HIS:HB3	1:A:54:LEU:HD12	6	0.01
(1,783)	1:A:52:HIS:HB3	1:A:54:LEU:HD13	6	0.01
(1,783)	1:A:52:HIS:HB3	1:A:54:LEU:HD21	6	0.01
(1,783)	1:A:52:HIS:HB3	1:A:54:LEU:HD22	6	0.01
(1,783)	1:A:52:HIS:HB3	1:A:54:LEU:HD23	6	0.01
(1,783)	1:A:52:HIS:HB3	1:A:54:LEU:HD11	11	0.01
(1,783)	1:A:52:HIS:HB3	1:A:54:LEU:HD12	11	0.01
(1,783)	1:A:52:HIS:HB3	1:A:54:LEU:HD13	11	0.01
(1,783)	1:A:52:HIS:HB3	1:A:54:LEU:HD21	11	0.01
(1,783)	1:A:52:HIS:HB3	1:A:54:LEU:HD22	11	0.01
(1,783)	1:A:52:HIS:HB3	1:A:54:LEU:HD23	11	0.01
(1,755)	1:A:70:GLN:HG2	1:A:10:VAL:HG21	2	0.01
(1,755)	1:A:70:GLN:HG2	1:A:10:VAL:HG22	2	0.01
(1,755)	1:A:70:GLN:HG2	1:A:10:VAL:HG23	2	0.01
(1,743)	1:A:70:GLN:HB2	1:A:72:MET:H	13	0.01
(1,743)	1:A:70:GLN:HB3	1:A:72:MET:H	13	0.01
(1,743)	1:A:70:GLN:HB2	1:A:72:MET:H	21	0.01
(1,743)	1:A:70:GLN:HB3	1:A:72:MET:H	21	0.01
(1,743)	1:A:70:GLN:HB2	1:A:72:MET:H	24	0.01
(1,743)	1:A:70:GLN:HB3	1:A:72:MET:H	24	0.01
(1,740)	1:A:70:GLN:HA	1:A:10:VAL:HG21	4	0.01
(1,740)	1:A:70:GLN:HA	1:A:10:VAL:HG22	4	0.01
(1,740)	1:A:70:GLN:HA	1:A:10:VAL:HG23	4	0.01
(1,740)	1:A:70:GLN:HA	1:A:10:VAL:HG21	17	0.01
(1,740)	1:A:70:GLN:HA	1:A:10:VAL:HG22	17	0.01
(1,740)	1:A:70:GLN:HA	1:A:10:VAL:HG23	17	0.01



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,732)	1:A:63:GLN:HG3	1:A:60:GLU:HA	4	0.01
(1,732)	1:A:63:GLN:HG3	1:A:60:GLU:HA	13	0.01
(1,732)	1:A:63:GLN:HG3	1:A:60:GLU:HA	26	0.01
(1,730)	1:A:63:GLN:HG2	1:A:60:GLU:HA	2	0.01
(1,715)	1:A:63:GLN:HB3	1:A:60:GLU:HA	13	0.01
(1,711)	1:A:63:GLN:HA	1:A:30:SER:HB2	3	0.01
(1,711)	1:A:63:GLN:HA	1:A:30:SER:HB2	14	0.01
(1,710)	1:A:63:GLN:HA	1:A:30:SER:HB3	24	0.01
(1,706)	1:A:59:ARG:HD2	1:A:59:ARG:H	7	0.01
(1,706)	1:A:59:ARG:HD3	1:A:59:ARG:H	7	0.01
(1,706)	1:A:59:ARG:HD2	1:A:59:ARG:H	10	0.01
(1,706)	1:A:59:ARG:HD3	1:A:59:ARG:H	10	0.01
(1,706)	1:A:59:ARG:HD2	1:A:59:ARG:H	20	0.01
(1,706)	1:A:59:ARG:HD3	1:A:59:ARG:H	20	0.01
(1,706)	1:A:59:ARG:HD2	1:A:59:ARG:H	23	0.01
(1,706)	1:A:59:ARG:HD3	1:A:59:ARG:H	23	0.01
(1,70)	1:A:9:LEU:HD21	1:A:72:MET:H	19	0.01
(1,70)	1:A:9:LEU:HD22	1:A:72:MET:H	19	0.01
(1,70)	1:A:9:LEU:HD23	1:A:72:MET:H	19	0.01
(1,70)	1:A:9:LEU:HD21	1:A:71:GLU:H	19	0.01
(1,70)	1:A:9:LEU:HD22	1:A:71:GLU:H	19	0.01
(1,70)	1:A:9:LEU:HD23	1:A:71:GLU:H	19	0.01
(1,691)	1:A:43:GLU:HB2	1:A:47:ILE:HD11	2	0.01
(1,691)	1:A:43:GLU:HB2	1:A:47:ILE:HD12	2	0.01
(1,691)	1:A:43:GLU:HB2	1:A:47:ILE:HD13	2	0.01
(1,662)	1:A:49:GLU:HA	1:A:46:GLN:HA	2	0.01
(1,662)	1:A:49:GLU:HA	1:A:46:GLN:HA	13	0.01
(1,638)	1:A:50:ARG:HD2	1:A:50:ARG:HA	16	0.01
(1,638)	1:A:50:ARG:HD3	1:A:50:ARG:HA	16	0.01
(1,607)	1:A:67:ARG:HA	1:A:67:ARG:HD3	4	0.01
(1,607)	1:A:67:ARG:HA	1:A:67:ARG:HD3	16	0.01
(1,607)	1:A:67:ARG:HA	1:A:67:ARG:HD3	17	0.01
(1,607)	1:A:67:ARG:HA	1:A:67:ARG:HD3	26	0.01
(1,607)	1:A:67:ARG:HA	1:A:67:ARG:HD3	29	0.01
(1,593)	1:A:66:LEU:HD11	1:A:66:LEU:HA	3	0.01
(1,593)	1:A:66:LEU:HD12	1:A:66:LEU:HA	3	0.01
(1,593)	1:A:66:LEU:HD13	1:A:66:LEU:HA	3	0.01
(1,593)	1:A:66:LEU:HD11	1:A:66:LEU:HA	4	0.01
(1,593)	1:A:66:LEU:HD12	1:A:66:LEU:HA	4	0.01
(1,593)	1:A:66:LEU:HD13	1:A:66:LEU:HA	4	0.01
(1,593)	1:A:66:LEU:HD11	1:A:66:LEU:HA	5	0.01
(1,593)	1:A:66:LEU:HD12	1:A:66:LEU:HA	5	0.01
\ / - /				ad on mort nago



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

Key	Atom-1	$\mathbf{Atom} extbf{-2}$	Model	Violation (Å)
(1,593)	1:A:66:LEU:HD13	1:A:66:LEU:HA	5	0.01
(1,593)	1:A:66:LEU:HD11	1:A:66:LEU:HA	19	0.01
(1,593)	1:A:66:LEU:HD12	1:A:66:LEU:HA	19	0.01
(1,593)	1:A:66:LEU:HD13	1:A:66:LEU:HA	19	0.01
(1,59)	1:A:36:LEU:HD11	1:A:64:LEU:HB2	19	0.01
(1,59)	1:A:36:LEU:HD12	1:A:64:LEU:HB2	19	0.01
(1,59)	1:A:36:LEU:HD13	1:A:64:LEU:HB2	19	0.01
(1,59)	1:A:66:LEU:HD21	1:A:64:LEU:HB2	19	0.01
(1,59)	1:A:66:LEU:HD22	1:A:64:LEU:HB2	19	0.01
(1,59)	1:A:66:LEU:HD23	1:A:64:LEU:HB2	19	0.01
(1,58)	1:A:66:LEU:HD21	1:A:10:VAL:HB	6	0.01
(1,58)	1:A:66:LEU:HD22	1:A:10:VAL:HB	6	0.01
(1,58)	1:A:66:LEU:HD23	1:A:10:VAL:HB	6	0.01
(1,58)	1:A:36:LEU:HD11	1:A:43:GLU:HB2	6	0.01
(1,58)	1:A:36:LEU:HD12	1:A:43:GLU:HB2	6	0.01
(1,58)	1:A:36:LEU:HD13	1:A:43:GLU:HB2	6	0.01
(1,58)	1:A:66:LEU:HD21	1:A:10:VAL:HB	7	0.01
(1,58)	1:A:66:LEU:HD22	1:A:10:VAL:HB	7	0.01
(1,58)	1:A:66:LEU:HD23	1:A:10:VAL:HB	7	0.01
(1,58)	1:A:36:LEU:HD11	1:A:43:GLU:HB2	7	0.01
(1,58)	1:A:36:LEU:HD12	1:A:43:GLU:HB2	7	0.01
(1,58)	1:A:36:LEU:HD13	1:A:43:GLU:HB2	7	0.01
(1,536)	1:A:25:ILE:HD11	1:A:14:ALA:HB1	9	0.01
(1,536)	1:A:25:ILE:HD11	1:A:14:ALA:HB2	9	0.01
(1,536)	1:A:25:ILE:HD11	1:A:14:ALA:HB3	9	0.01
(1,536)	1:A:25:ILE:HD12	1:A:14:ALA:HB1	9	0.01
(1,536)	1:A:25:ILE:HD12	1:A:14:ALA:HB2	9	0.01
(1,536)	1:A:25:ILE:HD12	1:A:14:ALA:HB3	9	0.01
(1,536)	1:A:25:ILE:HD13	1:A:14:ALA:HB1	9	0.01
(1,536)	1:A:25:ILE:HD13	1:A:14:ALA:HB2	9	0.01
(1,536)	1:A:25:ILE:HD13	1:A:14:ALA:HB3	9	0.01
(1,536)	1:A:25:ILE:HD11	1:A:14:ALA:HB1	23	0.01
(1,536)	1:A:25:ILE:HD11	1:A:14:ALA:HB2	23	0.01
(1,536)	1:A:25:ILE:HD11	1:A:14:ALA:HB3	23	0.01
(1,536)	1:A:25:ILE:HD12	1:A:14:ALA:HB1	23	0.01
(1,536)	1:A:25:ILE:HD12	1:A:14:ALA:HB2	23	0.01
(1,536)	1:A:25:ILE:HD12	1:A:14:ALA:HB3	23	0.01
(1,536)	1:A:25:ILE:HD13	1:A:14:ALA:HB1	23	0.01
(1,536)	1:A:25:ILE:HD13	1:A:14:ALA:HB2	23	0.01
(1,536)	1:A:25:ILE:HD13	1:A:14:ALA:HB3	23	0.01
(1,531)	1:A:25:ILE:HD11	1:A:22:LEU:HA	1	0.01
(1,531)	1:A:25:ILE:HD12	1:A:22:LEU:HA	1	0.01



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,531)	1:A:25:ILE:HD13	1:A:22:LEU:HA	1	0.01
(1,531)	1:A:25:ILE:HD11	1:A:22:LEU:HA	6	0.01
(1,531)	1:A:25:ILE:HD12	1:A:22:LEU:HA	6	0.01
(1,531)	1:A:25:ILE:HD13	1:A:22:LEU:HA	6	0.01
(1,531)	1:A:25:ILE:HD11	1:A:22:LEU:HA	10	0.01
(1,531)	1:A:25:ILE:HD12	1:A:22:LEU:HA	10	0.01
(1,531)	1:A:25:ILE:HD13	1:A:22:LEU:HA	10	0.01
(1,531)	1:A:25:ILE:HD11	1:A:22:LEU:HA	28	0.01
(1,531)	1:A:25:ILE:HD12	1:A:22:LEU:HA	28	0.01
(1,531)	1:A:25:ILE:HD13	1:A:22:LEU:HA	28	0.01
(1,521)	1:A:25:ILE:HB	1:A:27:LEU:HD21	22	0.01
(1,521)	1:A:25:ILE:HB	1:A:27:LEU:HD22	22	0.01
(1,521)	1:A:25:ILE:HB	1:A:27:LEU:HD23	22	0.01
(1,513)	1:A:25:ILE:HB	1:A:22:LEU:HD11	11	0.01
(1,513)	1:A:25:ILE:HB	1:A:22:LEU:HD12	11	0.01
(1,513)	1:A:25:ILE:HB	1:A:22:LEU:HD13	11	0.01
(1,513)	1:A:25:ILE:HB	1:A:22:LEU:HD11	14	0.01
(1,513)	1:A:25:ILE:HB	1:A:22:LEU:HD12	14	0.01
(1,513)	1:A:25:ILE:HB	1:A:22:LEU:HD13	14	0.01
(1,513)	1:A:25:ILE:HB	1:A:22:LEU:HD11	27	0.01
(1,513)	1:A:25:ILE:HB	1:A:22:LEU:HD12	27	0.01
(1,513)	1:A:25:ILE:HB	1:A:22:LEU:HD13	27	0.01
(1,506)	1:A:19:ILE:HD11	1:A:18:GLY:HA2	1	0.01
(1,506)	1:A:19:ILE:HD12	1:A:18:GLY:HA2	1	0.01
(1,506)	1:A:19:ILE:HD13	1:A:18:GLY:HA2	1	0.01
(1,498)	1:A:47:ILE:HD11	1:A:43:GLU:HG3	6	0.01
(1,498)	1:A:47:ILE:HD12	1:A:43:GLU:HG3	6	0.01
(1,498)	1:A:47:ILE:HD13	1:A:43:GLU:HG3	6	0.01
(1,491)	1:A:27:LEU:HA	1:A:66:LEU:H	3	0.01
(1,491)	1:A:27:LEU:HA	1:A:66:LEU:H	17	0.01
(1,49)	1:A:47:ILE:HG21	1:A:43:GLU:HG3	22	0.01
(1,49)	1:A:47:ILE:HG22	1:A:43:GLU:HG3	22	0.01
(1,49)	1:A:47:ILE:HG23	1:A:43:GLU:HG3	22	0.01
(1,49)	1:A:16:ILE:HG21	1:A:43:GLU:HG3	22	0.01
(1,49)	1:A:16:ILE:HG22	1:A:43:GLU:HG3	22	0.01
(1,49)	1:A:16:ILE:HG23	1:A:43:GLU:HG3	22	0.01
(1,479)	1:A:23:ALA:HA	1:A:21:ASP:HA	26	0.01
(1,475)	1:A:22:LEU:HD21	1:A:20:ARG:HB2	11	0.01
(1,475)	1:A:22:LEU:HD22	1:A:20:ARG:HB2	11	0.01
(1,475)	1:A:22:LEU:HD23	1:A:20:ARG:HB2	11	0.01
(1,475)	1:A:22:LEU:HD21	1:A:20:ARG:HB2	29	0.01
(1,475)	1:A:22:LEU:HD22	1:A:20:ARG:HB2	29	0.01



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,475)	1:A:22:LEU:HD23	1:A:20:ARG:HB2	29	0.01
(1,469)	1:A:17:LEU:HD11	1:A:16:ILE:H	10	0.01
(1,469)	1:A:17:LEU:HD12	1:A:16:ILE:H	10	0.01
(1,469)	1:A:17:LEU:HD13	1:A:16:ILE:H	10	0.01
(1,461)	1:A:47:ILE:HG12	1:A:48:LEU:HD11	1	0.01
(1,461)	1:A:47:ILE:HG12	1:A:48:LEU:HD12	1	0.01
(1,461)	1:A:47:ILE:HG12	1:A:48:LEU:HD13	1	0.01
(1,461)	1:A:47:ILE:HG12	1:A:48:LEU:HD11	3	0.01
(1,461)	1:A:47:ILE:HG12	1:A:48:LEU:HD12	3	0.01
(1,461)	1:A:47:ILE:HG12	1:A:48:LEU:HD13	3	0.01
(1,461)	1:A:47:ILE:HG12	1:A:48:LEU:HD11	7	0.01
(1,461)	1:A:47:ILE:HG12	1:A:48:LEU:HD12	7	0.01
(1,461)	1:A:47:ILE:HG12	1:A:48:LEU:HD13	7	0.01
(1,461)	1:A:47:ILE:HG12	1:A:48:LEU:HD11	8	0.01
(1,461)	1:A:47:ILE:HG12	1:A:48:LEU:HD12	8	0.01
(1,461)	1:A:47:ILE:HG12	1:A:48:LEU:HD13	8	0.01
(1,461)	1:A:47:ILE:HG12	1:A:48:LEU:HD11	21	0.01
(1,461)	1:A:47:ILE:HG12	1:A:48:LEU:HD12	21	0.01
(1,461)	1:A:47:ILE:HG12	1:A:48:LEU:HD13	21	0.01
(1,460)	1:A:47:ILE:HG13	1:A:48:LEU:HD11	1	0.01
(1,460)	1:A:47:ILE:HG13	1:A:48:LEU:HD12	1	0.01
(1,460)	1:A:47:ILE:HG13	1:A:48:LEU:HD13	1	0.01
(1,460)	1:A:47:ILE:HG13	1:A:48:LEU:HD11	3	0.01
(1,460)	1:A:47:ILE:HG13	1:A:48:LEU:HD12	3	0.01
(1,460)	1:A:47:ILE:HG13	1:A:48:LEU:HD13	3	0.01
(1,460)	1:A:47:ILE:HG13	1:A:48:LEU:HD11	6	0.01
(1,460)	1:A:47:ILE:HG13	1:A:48:LEU:HD12	6	0.01
(1,460)	1:A:47:ILE:HG13	1:A:48:LEU:HD13	6	0.01
(1,460)	1:A:47:ILE:HG13	1:A:48:LEU:HD11	8	0.01
(1,460)	1:A:47:ILE:HG13	1:A:48:LEU:HD12	8	0.01
(1,460)	1:A:47:ILE:HG13	1:A:48:LEU:HD13	8	0.01
(1,460)	1:A:47:ILE:HG13	1:A:48:LEU:HD11	10	0.01
(1,460)	1:A:47:ILE:HG13	1:A:48:LEU:HD12	10	0.01
(1,460)	1:A:47:ILE:HG13	1:A:48:LEU:HD13	10	0.01
(1,460)	1:A:47:ILE:HG13	1:A:48:LEU:HD11	13	0.01
(1,460)	1:A:47:ILE:HG13	1:A:48:LEU:HD12	13	0.01
(1,460)	1:A:47:ILE:HG13	1:A:48:LEU:HD13	13	0.01
(1,460)	1:A:47:ILE:HG13	1:A:48:LEU:HD11	20	0.01
(1,460)	1:A:47:ILE:HG13	1:A:48:LEU:HD12	20	0.01
(1,460)	1:A:47:ILE:HG13	1:A:48:LEU:HD13	20	0.01
(1,460)	1:A:47:ILE:HG13	1:A:48:LEU:HD11	21	0.01
(1,460)	1:A:47:ILE:HG13	1:A:48:LEU:HD12	21	0.01



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,460)	1:A:47:ILE:HG13	1:A:48:LEU:HD13	21	0.01
(1,460)	1:A:47:ILE:HG13	1:A:48:LEU:HD11	25	0.01
(1,460)	1:A:47:ILE:HG13	1:A:48:LEU:HD12	25	0.01
(1,460)	1:A:47:ILE:HG13	1:A:48:LEU:HD13	25	0.01
(1,460)	1:A:47:ILE:HG13	1:A:48:LEU:HD11	27	0.01
(1,460)	1:A:47:ILE:HG13	1:A:48:LEU:HD12	27	0.01
(1,460)	1:A:47:ILE:HG13	1:A:48:LEU:HD13	27	0.01
(1,453)	1:A:47:ILE:HA	1:A:50:ARG:H	8	0.01
(1,45)	1:A:22:LEU:HD21	1:A:11:LYS:HE2	22	0.01
(1,45)	1:A:22:LEU:HD21	1:A:11:LYS:HE3	22	0.01
(1,45)	1:A:22:LEU:HD22	1:A:11:LYS:HE2	22	0.01
(1,45)	1:A:22:LEU:HD22	1:A:11:LYS:HE3	22	0.01
(1,45)	1:A:22:LEU:HD23	1:A:11:LYS:HE2	22	0.01
(1,45)	1:A:22:LEU:HD23	1:A:11:LYS:HE3	22	0.01
(1,444)	1:A:47:ILE:HA	1:A:50:ARG:HB3	8	0.01
(1,43)	1:A:13:VAL:HG21	1:A:17:LEU:H	13	0.01
(1,43)	1:A:13:VAL:HG22	1:A:17:LEU:H	13	0.01
(1,43)	1:A:13:VAL:HG23	1:A:17:LEU:H	13	0.01
(1,43)	1:A:13:VAL:HG21	1:A:73:SER:H	13	0.01
(1,43)	1:A:13:VAL:HG22	1:A:73:SER:H	13	0.01
(1,43)	1:A:13:VAL:HG23	1:A:73:SER:H	13	0.01
(1,43)	1:A:13:VAL:HG21	1:A:18:GLY:H	13	0.01
(1,43)	1:A:13:VAL:HG22	1:A:18:GLY:H	13	0.01
(1,43)	1:A:13:VAL:HG23	1:A:18:GLY:H	13	0.01
(1,43)	1:A:13:VAL:HG21	1:A:17:LEU:H	27	0.01
(1,43)	1:A:13:VAL:HG22	1:A:17:LEU:H	27	0.01
(1,43)	1:A:13:VAL:HG23	1:A:17:LEU:H	27	0.01
(1,43)	1:A:13:VAL:HG21	1:A:73:SER:H	27	0.01
(1,43)	1:A:13:VAL:HG22	1:A:73:SER:H	27	0.01
(1,43)	1:A:13:VAL:HG23	1:A:73:SER:H	27	0.01
(1,43)	1:A:13:VAL:HG21	1:A:18:GLY:H	27	0.01
(1,43)	1:A:13:VAL:HG22	1:A:18:GLY:H	27	0.01
(1,43)	1:A:13:VAL:HG23	1:A:18:GLY:H	27	0.01
(1,417)	1:A:45:ARG:HD2	1:A:61:VAL:HG11	11	0.01
(1,417)	1:A:45:ARG:HD2	1:A:61:VAL:HG12	11	0.01
(1,417)	1:A:45:ARG:HD2	1:A:61:VAL:HG13	11	0.01
(1,417)	1:A:45:ARG:HD3	1:A:61:VAL:HG11	11	0.01
(1,417)	1:A:45:ARG:HD3	1:A:61:VAL:HG12	11	0.01
(1,417)	1:A:45:ARG:HD3	1:A:61:VAL:HG13	11	0.01
(1,417)	1:A:45:ARG:HD2	1:A:61:VAL:HG11	16	0.01
(1,417)	1:A:45:ARG:HD2	1:A:61:VAL:HG12	16	0.01
(1,417)	1:A:45:ARG:HD2	1:A:61:VAL:HG13	16	0.01



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,417)	1:A:45:ARG:HD3	1:A:61:VAL:HG11	16	0.01
(1,417)	1:A:45:ARG:HD3	1:A:61:VAL:HG12	16	0.01
(1,417)	1:A:45:ARG:HD3	1:A:61:VAL:HG13	16	0.01
(1,394)	1:A:19:ILE:HG21	1:A:25:ILE:HG13	13	0.01
(1,394)	1:A:19:ILE:HG22	1:A:25:ILE:HG13	13	0.01
(1,394)	1:A:19:ILE:HG23	1:A:25:ILE:HG13	13	0.01
(1,394)	1:A:19:ILE:HG21	1:A:25:ILE:HG13	21	0.01
(1,394)	1:A:19:ILE:HG22	1:A:25:ILE:HG13	21	0.01
(1,394)	1:A:19:ILE:HG23	1:A:25:ILE:HG13	21	0.01
(1,391)	1:A:19:ILE:HG21	1:A:21:ASP:HA	13	0.01
(1,391)	1:A:19:ILE:HG22	1:A:21:ASP:HA	13	0.01
(1,391)	1:A:19:ILE:HG23	1:A:21:ASP:HA	13	0.01
(1,391)	1:A:19:ILE:HG21	1:A:21:ASP:HA	16	0.01
(1,391)	1:A:19:ILE:HG22	1:A:21:ASP:HA	16	0.01
(1,391)	1:A:19:ILE:HG23	1:A:21:ASP:HA	16	0.01
(1,391)	1:A:19:ILE:HG21	1:A:21:ASP:HA	18	0.01
(1,391)	1:A:19:ILE:HG22	1:A:21:ASP:HA	18	0.01
(1,391)	1:A:19:ILE:HG23	1:A:21:ASP:HA	18	0.01
(1,38)	1:A:58:ILE:HG21	1:A:32:ALA:HA	11	0.01
(1,38)	1:A:58:ILE:HG22	1:A:32:ALA:HA	11	0.01
(1,38)	1:A:58:ILE:HG23	1:A:32:ALA:HA	11	0.01
(1,38)	1:A:47:ILE:HG21	1:A:50:ARG:HA	11	0.01
(1,38)	1:A:47:ILE:HG22	1:A:50:ARG:HA	11	0.01
(1,38)	1:A:47:ILE:HG23	1:A:50:ARG:HA	11	0.01
(1,373)	1:A:19:ILE:HB	1:A:19:ILE:H	3	0.01
(1,373)	1:A:19:ILE:HB	1:A:19:ILE:H	8	0.01
(1,373)	1:A:19:ILE:HB	1:A:19:ILE:H	10	0.01
(1,373)	1:A:19:ILE:HB	1:A:19:ILE:H	15	0.01
(1,373)	1:A:19:ILE:HB	1:A:19:ILE:H	18	0.01
(1,373)	1:A:19:ILE:HB	1:A:19:ILE:H	23	0.01
(1,373)	1:A:19:ILE:HB	1:A:19:ILE:H	25	0.01
(1,363)	1:A:17:LEU:HG	1:A:19:ILE:HG21	6	0.01
(1,363)	1:A:17:LEU:HG	1:A:19:ILE:HG22	6	0.01
(1,363)	1:A:17:LEU:HG	1:A:19:ILE:HG23	6	0.01
(1,363)	1:A:17:LEU:HG	1:A:19:ILE:HG21	19	0.01
(1,363)	1:A:17:LEU:HG	1:A:19:ILE:HG22	19	0.01
(1,363)	1:A:17:LEU:HG	1:A:19:ILE:HG23	19	0.01
(1,363)	1:A:17:LEU:HG	1:A:19:ILE:HG21	24	0.01
(1,363)	1:A:17:LEU:HG	1:A:19:ILE:HG22	24	0.01
(1,363)	1:A:17:LEU:HG	1:A:19:ILE:HG23	24	0.01
(1,363)	1:A:17:LEU:HG	1:A:19:ILE:HG21	30	0.01
(1,363)	1:A:17:LEU:HG	1:A:19:ILE:HG22	30	0.01



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

(1,363) 1:A:17:LEU:HG 1:A:19:ILE:HG23 30 0.0 (1,32) 1:A:27:LEU:HD11 1:A:70:GLN:HE21 22 0.0 (1,32) 1:A:27:LEU:HD12 1:A:70:GLN:HE21 22 0.0 (1,32) 1:A:27:LEU:HD13 1:A:70:GLN:HE21 22 0.0 (1,32) 1:A:66:LEU:HD11 1:A:70:GLN:HE21 22 0.0 (1,32) 1:A:66:LEU:HD12 1:A:70:GLN:HE21 22 0.0 (1,32) 1:A:66:LEU:HD13 1:A:70:GLN:HE21 22 0.0 (1,32) 1:A:66:LEU:HD13 1:A:40:HE21 22 0.0 (1,31) 1:A:45:ARG:HB2 1:A:48:LEU:H 24 0.0 (1,315) 1:A:40:MET:HB3 1:A:39:LEU:HD21 18 0.0 (1,315) 1:A:40:MET:HB3 1:A:39:LEU:HD23 18 0.0 (1,315) 1:A:40:MET:HB3 1:A:39:LEU:HD21 21 0.0 (1,315) 1:A:40:MET:HB3 1:A:39:LEU:HD21 21 0.0	01 01 01 01 01
(1,32) 1:A:27:LEU:HD12 1:A:70:GLN:HE21 22 0.0 (1,32) 1:A:27:LEU:HD13 1:A:70:GLN:HE21 22 0.0 (1,32) 1:A:66:LEU:HD11 1:A:70:GLN:HE21 22 0.0 (1,32) 1:A:66:LEU:HD12 1:A:70:GLN:HE21 22 0.0 (1,32) 1:A:66:LEU:HD13 1:A:70:GLN:HE21 22 0.0 (1,319) 1:A:45:ARG:HB2 1:A:48:LEU:H 24 0.0 (1,315) 1:A:40:MET:HB3 1:A:39:LEU:HD21 18 0.0 (1,315) 1:A:40:MET:HB3 1:A:39:LEU:HD23 18 0.0 (1,315) 1:A:40:MET:HB3 1:A:39:LEU:HD23 18 0.0 (1,315) 1:A:40:MET:HB3 1:A:39:LEU:HD21 21 0.0	01 01 01 01
(1,32) 1:A:27:LEU:HD13 1:A:70:GLN:HE21 22 0.0 (1,32) 1:A:66:LEU:HD11 1:A:70:GLN:HE21 22 0.0 (1,32) 1:A:66:LEU:HD12 1:A:70:GLN:HE21 22 0.0 (1,32) 1:A:66:LEU:HD13 1:A:70:GLN:HE21 22 0.0 (1,319) 1:A:45:ARG:HB2 1:A:48:LEU:H 24 0.0 (1,315) 1:A:40:MET:HB3 1:A:39:LEU:HD21 18 0.0 (1,315) 1:A:40:MET:HB3 1:A:39:LEU:HD22 18 0.0 (1,315) 1:A:40:MET:HB3 1:A:39:LEU:HD23 18 0.0 (1,315) 1:A:40:MET:HB3 1:A:39:LEU:HD21 21 0.0)1)1)1
(1,32) 1:A:66:LEU:HD11 1:A:70:GLN:HE21 22 0.0 (1,32) 1:A:66:LEU:HD12 1:A:70:GLN:HE21 22 0.0 (1,32) 1:A:66:LEU:HD13 1:A:70:GLN:HE21 22 0.0 (1,319) 1:A:45:ARG:HB2 1:A:48:LEU:H 24 0.0 (1,315) 1:A:40:MET:HB3 1:A:39:LEU:HD21 18 0.0 (1,315) 1:A:40:MET:HB3 1:A:39:LEU:HD22 18 0.0 (1,315) 1:A:40:MET:HB3 1:A:39:LEU:HD23 18 0.0 (1,315) 1:A:40:MET:HB3 1:A:39:LEU:HD21 21 0.0	01
(1,32) 1:A:66:LEU:HD12 1:A:70:GLN:HE21 22 0.0 (1,32) 1:A:66:LEU:HD13 1:A:70:GLN:HE21 22 0.0 (1,319) 1:A:45:ARG:HB2 1:A:48:LEU:H 24 0.0 (1,315) 1:A:40:MET:HB3 1:A:39:LEU:HD21 18 0.0 (1,315) 1:A:40:MET:HB3 1:A:39:LEU:HD22 18 0.0 (1,315) 1:A:40:MET:HB3 1:A:39:LEU:HD23 18 0.0 (1,315) 1:A:40:MET:HB3 1:A:39:LEU:HD21 21 0.0	01
(1,32) 1:A:66:LEU:HD13 1:A:70:GLN:HE21 22 0.0 (1,319) 1:A:45:ARG:HB2 1:A:48:LEU:H 24 0.0 (1,315) 1:A:40:MET:HB3 1:A:39:LEU:HD21 18 0.0 (1,315) 1:A:40:MET:HB3 1:A:39:LEU:HD22 18 0.0 (1,315) 1:A:40:MET:HB3 1:A:39:LEU:HD23 18 0.0 (1,315) 1:A:40:MET:HB3 1:A:39:LEU:HD21 21 0.0	
(1,319) 1:A:45:ARG:HB2 1:A:48:LEU:H 24 0.0 (1,315) 1:A:40:MET:HB3 1:A:39:LEU:HD21 18 0.0 (1,315) 1:A:40:MET:HB3 1:A:39:LEU:HD22 18 0.0 (1,315) 1:A:40:MET:HB3 1:A:39:LEU:HD23 18 0.0 (1,315) 1:A:40:MET:HB3 1:A:39:LEU:HD21 21 0.0	01
(1,315) 1:A:40:MET:HB3 1:A:39:LEU:HD21 18 0.0 (1,315) 1:A:40:MET:HB3 1:A:39:LEU:HD22 18 0.0 (1,315) 1:A:40:MET:HB3 1:A:39:LEU:HD23 18 0.0 (1,315) 1:A:40:MET:HB3 1:A:39:LEU:HD21 21 0.0 (1,315) 1:A:40:MET:HB3 1:A:39:LEU:HD21 21 0.0	
(1,315) 1:A:40:MET:HB3 1:A:39:LEU:HD22 18 0.0 (1,315) 1:A:40:MET:HB3 1:A:39:LEU:HD23 18 0.0 (1,315) 1:A:40:MET:HB3 1:A:39:LEU:HD21 21 0.0)1
(1,315) 1:A:40:MET:HB3 1:A:39:LEU:HD23 18 0.0 (1,315) 1:A:40:MET:HB3 1:A:39:LEU:HD21 21 0.0	01
(1,315) 1:A:40:MET:HB3 1:A:39:LEU:HD21 21 0.0)1
	01
(1.91f) 1.A.40.MET.HD9 1.A.90.LEH HD99 91 0.6	01
(1,315) 1:A:40:MET:HB3 1:A:39:LEU:HD22 21 0.0	01
(1,315) 1:A:40:MET:HB3 1:A:39:LEU:HD23 21 0.0)1
(1,306) 1:A:40:MET:HB3 1:A:38:SER:H 19 0.0)1
(1,306) 1:A:40:MET:HB3 1:A:38:SER:H 21 0.0)1
(1,306) 1:A:40:MET:HB3 1:A:38:SER:H 26 0.0	01
(1,244) 1:A:31:LEU:HD21 1:A:64:LEU:HG 18 0.0	01
(1,244) 1:A:31:LEU:HD22 1:A:64:LEU:HG 18 0.0)1
(1,244) 1:A:31:LEU:HD23 1:A:64:LEU:HG 18 0.0)1
(1,241) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:64:LEU:HG 24 0.0)1
(1,241) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:64:LEU:HG 24 0.0)1
(1,241) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:64:LEU:HG 24 0.0)1
(1,239) 1:A:31:LEU:HD11 1:A:62:ARG:HG3 24 0.0	01
(1,239) 1:A:31:LEU:HD12 1:A:62:ARG:HG3 24 0.0)1
(1,239) 1:A:31:LEU:HD13 1:A:62:ARG:HG3 24 0.0)1
(1,229) 1:A:31:LEU:HA 1:A:36:LEU:HD21 20 0.0)1
(1,229) 1:A:31:LEU:HA 1:A:36:LEU:HD22 20 0.0)1
(1,229) 1:A:31:LEU:HA 1:A:36:LEU:HD23 20 0.0)1
(1,221) 1:A:31:LEU:HB2 1:A:36:LEU:HB2 9 0.0	01
(1,221) 1:A:31:LEU:HB2 1:A:36:LEU:HB2 17 0.0)1
(1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 1 0.0	01
(1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 14 0.0	01
(1,213) 1:A:30:SER:HB3 1:A:33:ASP:HA 16 0.0	01
(1,209) 1:A:30:SER:HB2 1:A:31:LEU:H 27 0.0	01
(1,196) 1:A:29:SER:HB3 1:A:33:ASP:HB2 20 0.0)1
(1,194) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HG 14 0.0)1
(1,194) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HG 19 0.0)1
(1,193) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD11 8 0.0)1
(1,193) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD12 8 0.0)1
(1,193) 1:A:29:SER:HB3 1:A:34:LEU:HD13 8 0.0)1
(1,18) 1:A:71:GLU:HA 1:A:74:SER:H 23 0.0)1



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

Key	$\frac{1 \text{ from previous page.}}{\text{Atom-1}}$	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,18)	1:A:71:GLU:HA	1:A:69:LEU:H	23	0.01
(1,1732)	1:A:32:ALA:H	1:A:65:THR:HG21	5	0.01
(1,1732)	1:A:32:ALA:H	1:A:65:THR:HG22	5	0.01
(1,1732)	1:A:32:ALA:H	1:A:65:THR:HG23	5	0.01
(1,1732)	1:A:32:ALA:H	1:A:65:THR:HG21	13	0.01
(1,1732)	1:A:32:ALA:H	1:A:65:THR:HG22	13	0.01
(1,1732)	1:A:32:ALA:H	1:A:65:THR:HG23	13	0.01
(1,1725)	1:A:80:THR:H	1:A:79:ASP:H	28	0.01
(1,1724)	1:A:78:SER:H	1:A:77:GLY:H	22	0.01
(1,1710)	1:A:63:GLN:H	1:A:64:LEU:H	14	0.01
(1,1710)	1:A:63:GLN:H	1:A:64:LEU:H	24	0.01
(1,1701)	1:A:47:ILE:H	1:A:48:LEU:H	2	0.01
(1,17)	1:A:72:MET:HB3	1:A:9:LEU:HD21	19	0.01
(1,17)	1:A:72:MET:HB3	1:A:9:LEU:HD22	19	0.01
(1,17)	1:A:72:MET:HB3	1:A:9:LEU:HD23	19	0.01
(1,17)	1:A:72:MET:HB3	1:A:48:LEU:HD11	19	0.01
(1,17)	1:A:72:MET:HB3	1:A:48:LEU:HD12	19	0.01
(1,17)	1:A:72:MET:HB3	1:A:48:LEU:HD13	19	0.01
(1,1692)	1:A:33:ASP:H	1:A:36:LEU:H	11	0.01
(1,1692)	1:A:33:ASP:H	1:A:36:LEU:H	15	0.01
(1,1679)	1:A:24:GLY:H	1:A:22:LEU:H	7	0.01
(1,1663)	1:A:11:LYS:H	1:A:15:HIS:H	21	0.01
(1,1646)	1:A:9:LEU:HG	1:A:9:LEU:H	16	0.01
(1,1645)	1:A:9:LEU:HD11	1:A:9:LEU:H	13	0.01
(1,1645)	1:A:9:LEU:HD12	1:A:9:LEU:H	13	0.01
(1,1645)	1:A:9:LEU:HD13	1:A:9:LEU:H	13	0.01
(1,1631)	1:A:73:SER:HB2	1:A:10:VAL:HG21	6	0.01
(1,1631)	1:A:73:SER:HB2	1:A:10:VAL:HG22	6	0.01
(1,1631)	1:A:73:SER:HB2	1:A:10:VAL:HG23	6	0.01
(1,1631)	1:A:73:SER:HB2	1:A:10:VAL:HG21	12	0.01
(1,1631)	1:A:73:SER:HB2	1:A:10:VAL:HG22	12	0.01
(1,1631)	1:A:73:SER:HB2	1:A:10:VAL:HG23	12	0.01
(1,1624)	1:A:58:ILE:HD11	1:A:57:PRO:HD2	5	0.01
(1,1624)	1:A:58:ILE:HD12	1:A:57:PRO:HD2	5	0.01
(1,1624)	1:A:58:ILE:HD13	1:A:57:PRO:HD2	5	0.01
(1,1624)	1:A:58:ILE:HD11	1:A:57:PRO:HD2	26	0.01
(1,1624)	1:A:58:ILE:HD12	1:A:57:PRO:HD2	26	0.01
(1,1624)	1:A:58:ILE:HD13	1:A:57:PRO:HD2	26	0.01
(1,1598)	1:A:70:GLN:HB2	1:A:9:LEU:HD21	20	0.01
(1,1598)	1:A:70:GLN:HB2	1:A:9:LEU:HD22	20	0.01
(1,1598)	1:A:70:GLN:HB2	1:A:9:LEU:HD23	20	0.01
(1,1598)	1:A:70:GLN:HB3	1:A:9:LEU:HD21	20	0.01



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1598)	1:A:70:GLN:HB3	1:A:9:LEU:HD22	20	0.01
(1,1598)	1:A:70:GLN:HB3	1:A:9:LEU:HD23	20	0.01
(1,1596)	1:A:12:ALA:HA	1:A:7:ARG:HD2	29	0.01
(1,1596)	1:A:12:ALA:HA	1:A:7:ARG:HD3	29	0.01
(1,1593)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:29:SER:HA	11	0.01
(1,1593)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:29:SER:HA	11	0.01
(1,1593)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:29:SER:HA	11	0.01
(1,1592)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:30:SER:H	7	0.01
(1,1592)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:30:SER:H	7	0.01
(1,1592)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:30:SER:H	7	0.01
(1,1589)	1:A:20:ARG:HG3	1:A:67:ARG:HE	30	0.01
(1,1587)	1:A:9:LEU:HG	1:A:75:LYS:HE2	3	0.01
(1,1587)	1:A:9:LEU:HG	1:A:75:LYS:HE3	3	0.01
(1,1587)	1:A:9:LEU:HG	1:A:75:LYS:HE2	7	0.01
(1,1587)	1:A:9:LEU:HG	1:A:75:LYS:HE3	7	0.01
(1,1587)	1:A:9:LEU:HG	1:A:75:LYS:HE2	9	0.01
(1,1587)	1:A:9:LEU:HG	1:A:75:LYS:HE3	9	0.01
(1,1576)	1:A:66:LEU:HD11	1:A:65:THR:HA	22	0.01
(1,1576)	1:A:66:LEU:HD12	1:A:65:THR:HA	22	0.01
(1,1576)	1:A:66:LEU:HD13	1:A:65:THR:HA	22	0.01
(1,1576)	1:A:66:LEU:HD11	1:A:65:THR:HA	28	0.01
(1,1576)	1:A:66:LEU:HD12	1:A:65:THR:HA	28	0.01
(1,1576)	1:A:66:LEU:HD13	1:A:65:THR:HA	28	0.01
(1,1575)	1:A:66:LEU:HD11	1:A:13:VAL:H	4	0.01
(1,1575)	1:A:66:LEU:HD12	1:A:13:VAL:H	4	0.01
(1,1575)	1:A:66:LEU:HD13	1:A:13:VAL:H	4	0.01
(1,1574)	1:A:16:ILE:HG21	1:A:40:MET:HG2	30	0.01
(1,1574)	1:A:16:ILE:HG22	1:A:40:MET:HG2	30	0.01
(1,1574)	1:A:16:ILE:HG23	1:A:40:MET:HG2	30	0.01
(1,1561)	1:A:22:LEU:HD21	1:A:23:ALA:HA	1	0.01
(1,1561)	1:A:22:LEU:HD22	1:A:23:ALA:HA	1	0.01
(1,1561)	1:A:22:LEU:HD23	1:A:23:ALA:HA	1	0.01
(1,1553)	1:A:19:ILE:HG21	1:A:26:ASN:H	30	0.01
(1,1553)	1:A:19:ILE:HG22	1:A:26:ASN:H	30	0.01
(1,1553)	1:A:19:ILE:HG23	1:A:26:ASN:H	30	0.01
(1,1552)	1:A:19:ILE:HG21	1:A:24:GLY:H	20	0.01
(1,1552)	1:A:19:ILE:HG22	1:A:24:GLY:H	20	0.01
(1,1552)	1:A:19:ILE:HG23	1:A:24:GLY:H	20	0.01
(1,1547)	1:A:44:VAL:HG11	1:A:40:MET:HA	28	0.01
(1,1547)	1:A:44:VAL:HG12	1:A:40:MET:HA	28	0.01
(1,1547)	1:A:44:VAL:HG13	1:A:40:MET:HA	28	0.01
(1,1546)	1:A:44:VAL:HG11	1:A:42:VAL:HA	4	0.01



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

(1,1546) 1:A:44:VAL:HG12 1:A:42:VAL:HA 4 0.01 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG13 1:A:42:VAL:HA 4 0.01 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG11 1:A:42:VAL:HA 17 0.01 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG12 1:A:42:VAL:HA 17 0.01 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG13 1:A:42:VAL:HA 17 0.01 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG11 1:A:42:VAL:HA 21 0.01 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG12 1:A:42:VAL:HA 21 0.01 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG13 1:A:42:VAL:HA 21 0.01 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG13 1:A:42:VAL:HA 29 0.01 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG13 1:A:42:VAL:HA 29 0.01 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG11 1:A:42:VAL:HA 29 0.01 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG12 1:A:42:VAL:HA 29 0.01 (1,1553) 1:A:10:VAL:HG21 1:A:72:MET:H 23 0.01 (1,1531) 1:A:10:VAL:HG21 1:A:	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1546) 1:A:44:VAL:HG11 1:A:42:VAL:HA 17 0.01 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG12 1:A:42:VAL:HA 17 0.01 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG13 1:A:42:VAL:HA 17 0.01 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG11 1:A:42:VAL:HA 21 0.01 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG12 1:A:42:VAL:HA 21 0.01 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG13 1:A:42:VAL:HA 21 0.01 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG11 1:A:42:VAL:HA 29 0.01 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG12 1:A:42:VAL:HA 29 0.01 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG13 1:A:42:VAL:HA 29 0.01 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:72:MET:H 23 0.01 (1,1531) 1:A:10:VAL:HG21 1:A:72:MET:H 23 0.01 (1,1531) 1:A:10:VAL:HG22 1:A:72:MET:H 23 0.01 (1,1523) 1:A:73:SER:HA 1:A:70:GLN:H 2 0.01 (1,1523) 1:A:73:SER:HA 1:A:740:GL	(1,1546)	1:A:44:VAL:HG12	1:A:42:VAL:HA	4	0.01
(1,1546) 1:A:44:VAL:HG12 1:A:42:VAL:HA 17 0.01 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG13 1:A:42:VAL:HA 17 0.01 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG11 1:A:42:VAL:HA 21 0.01 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG12 1:A:42:VAL:HA 21 0.01 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG13 1:A:42:VAL:HA 21 0.01 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG11 1:A:42:VAL:HA 29 0.01 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG12 1:A:42:VAL:HA 29 0.01 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG13 1:A:42:VAL:HA 29 0.01 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG13 1:A:42:VAL:HA 29 0.01 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG21 1:A:72:MET:H 23 0.01 (1,1531) 1:A:10:VAL:HG21 1:A:72:MET:H 23 0.01 (1,1531) 1:A:10:VAL:HG22 1:A:72:MET:H 23 0.01 (1,1523) 1:A:73:SER:HA 1:A:70:GLN:H 2 0.01 (1,1523) 1:A:73:SER:HA 1:A:740:GL	(1,1546)	1:A:44:VAL:HG13	1:A:42:VAL:HA	4	0.01
(1,1546) 1:A:44:VAL:HG13 1:A:42:VAL:HA 17 0.01 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG11 1:A:42:VAL:HA 21 0.01 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG12 1:A:42:VAL:HA 21 0.01 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG13 1:A:42:VAL:HA 21 0.01 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG11 1:A:42:VAL:HA 29 0.01 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG12 1:A:42:VAL:HA 29 0.01 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG13 1:A:42:VAL:HA 29 0.01 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG13 1:A:42:VAL:HA 29 0.01 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG13 1:A:42:VAL:HA 29 0.01 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG12 1:A:42:VAL:HA 29 0.01 (1,1531) 1:A:10:VAL:HG21 1:A:72:MET:H 23 0.01 (1,1531) 1:A:10:VAL:HG22 1:A:72:MET:H 23 0.01 (1,1523) 1:A:73:SER:HA 1:A:70:GLN:H 26 0.01 (1,1523) 1:A:73:SER:HA 1:A:70:G	(1,1546)	1:A:44:VAL:HG11	1:A:42:VAL:HA	17	0.01
(1,1546) 1:A:44:VAL:HG11 1:A:42:VAL:HA 21 0.01 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG12 1:A:42:VAL:HA 21 0.01 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG13 1:A:42:VAL:HA 21 0.01 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG11 1:A:42:VAL:HA 29 0.01 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG12 1:A:42:VAL:HA 29 0.01 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG13 1:A:42:VAL:HA 29 0.01 (1,1531) 1:A:10:VAL:HG21 1:A:72:MET:H 23 0.01 (1,1531) 1:A:10:VAL:HG22 1:A:72:MET:H 23 0.01 (1,1531) 1:A:10:VAL:HG23 1:A:72:MET:H 23 0.01 (1,1523) 1:A:73:SER:HA 1:A:70:GLN:H 2 0.01 (1,1523) 1:A:73:SER:HA 1:A:70:GLN:H 2 0.01 (1,1517) 1:A:8:ASP:HB3 1:A:7:ARG:HA 13 0.01 (1,1503) 1:A:55:VAL:HG11 1:A:49:GLU:H 21 0.01 (1,1503) 1:A:55:VAL:HG13 1:A:49:GLU:H <td>(1,1546)</td> <td>1:A:44:VAL:HG12</td> <td>1:A:42:VAL:HA</td> <td>17</td> <td>0.01</td>	(1,1546)	1:A:44:VAL:HG12	1:A:42:VAL:HA	17	0.01
(1,1546) 1:A:44:VAL:HG12 1:A:42:VAL:HA 21 0.01 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG13 1:A:42:VAL:HA 21 0.01 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG11 1:A:42:VAL:HA 29 0.01 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG12 1:A:42:VAL:HA 29 0.01 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG13 1:A:42:VAL:HA 29 0.01 (1,1531) 1:A:10:VAL:HG21 1:A:72:MET:H 23 0.01 (1,1531) 1:A:10:VAL:HG22 1:A:72:MET:H 23 0.01 (1,1531) 1:A:10:VAL:HG23 1:A:72:MET:H 23 0.01 (1,1531) 1:A:73:SER:HA 1:A:70:GLN:H 2 0.01 (1,1523) 1:A:73:SER:HA 1:A:70:GLN:H 2 0.01 (1,1523) 1:A:73:SER:HA 1:A:70:GLN:H 26 0.01 (1,1517) 1:A:8:ASP:HB3 1:A:7:ARG:HA 13 0.01 (1,1503) 1:A:55:VAL:HG11 1:A:49:GLU:H 21 0.01 (1,1503) 1:A:55:VAL:HG13 1:A:49:GLU:H	(1,1546)	1:A:44:VAL:HG13	1:A:42:VAL:HA	17	0.01
(1,1546) 1:A:44:VAL:HG13 1:A:42:VAL:HA 21 0.01 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG11 1:A:42:VAL:HA 29 0.01 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG12 1:A:42:VAL:HA 29 0.01 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG13 1:A:42:VAL:HA 29 0.01 (1,1531) 1:A:10:VAL:HG21 1:A:72:MET:H 23 0.01 (1,1531) 1:A:10:VAL:HG22 1:A:72:MET:H 23 0.01 (1,1531) 1:A:10:VAL:HG23 1:A:72:MET:H 23 0.01 (1,1531) 1:A:73:SER:HA 1:A:70:GLN:H 2 0.01 (1,1523) 1:A:73:SER:HA 1:A:70:GLN:H 2 0.01 (1,1523) 1:A:73:SER:HA 1:A:7:ARG:HA 13 0.01 (1,1517) 1:A:8:ASP:HB3 1:A:7:ARG:HA 13 0.01 (1,1503) 1:A:55:VAL:HG11 1:A:49:GLU:H 21 0.01 (1,1503) 1:A:55:VAL:HG12 1:A:49:GLU:H 21 0.01 (1,1503) 1:A:55:VAL:HG12 1:A:49:GLU:H	(1,1546)	1:A:44:VAL:HG11	1:A:42:VAL:HA	21	0.01
(1,1546) 1:A:44:VAL:HG11 1:A:42:VAL:HA 29 0.01 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG12 1:A:42:VAL:HA 29 0.01 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG13 1:A:42:VAL:HA 29 0.01 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG13 1:A:42:VAL:HA 29 0.01 (1,1531) 1:A:10:VAL:HG21 1:A:72:MET:H 23 0.01 (1,1531) 1:A:10:VAL:HG22 1:A:72:MET:H 23 0.01 (1,1531) 1:A:10:VAL:HG23 1:A:72:MET:H 23 0.01 (1,1523) 1:A:73:SER:HA 1:A:70:GLN:H 2 0.01 (1,1523) 1:A:73:SER:HA 1:A:70:GLN:H 26 0.01 (1,1517) 1:A:8:ASP:HB3 1:A:7:ARG:HA 13 0.01 (1,1517) 1:A:8:ASP:HB3 1:A:7:ARG:HA 29 0.01 (1,1503) 1:A:55:VAL:HG11 1:A:49:GLU:H 21 0.01 (1,1503) 1:A:55:VAL:HG13 1:A:49:GLU:H 26 0.01 (1,1503) 1:A:55:VAL:HG12 1:A:49:GLU:H	(1,1546)	1:A:44:VAL:HG12	1:A:42:VAL:HA	21	0.01
(1,1546) 1:A:44:VAL:HG12 1:A:42:VAL:HA 29 0.01 (1,1546) 1:A:44:VAL:HG13 1:A:42:VAL:HA 29 0.01 (1,1531) 1:A:10:VAL:HG21 1:A:72:MET:H 23 0.01 (1,1531) 1:A:10:VAL:HG22 1:A:72:MET:H 23 0.01 (1,1531) 1:A:10:VAL:HG23 1:A:72:MET:H 23 0.01 (1,1523) 1:A:73:SER:HA 1:A:70:GLN:H 2 0.01 (1,1523) 1:A:73:SER:HA 1:A:70:GLN:H 26 0.01 (1,1523) 1:A:73:SER:HA 1:A:70:GLN:H 26 0.01 (1,1517) 1:A:8:ASP:HB3 1:A:7:ARG:HA 13 0.01 (1,1517) 1:A:8:ASP:HB3 1:A:7:ARG:HA 29 0.01 (1,1503) 1:A:55:VAL:HG11 1:A:49:GLU:H 21 0.01 (1,1503) 1:A:55:VAL:HG13 1:A:49:GLU:H 21 0.01 (1,1503) 1:A:55:VAL:HG11 1:A:49:GLU:H 26 0.01 (1,1503) 1:A:55:VAL:HG13 1:A:49:GLU:H	(1,1546)	1:A:44:VAL:HG13	1:A:42:VAL:HA	21	0.01
(1,1546) 1:A:44:VAL:HG13 1:A:42:VAL:HA 29 0.01 (1,1531) 1:A:10:VAL:HG21 1:A:72:MET:H 23 0.01 (1,1531) 1:A:10:VAL:HG22 1:A:72:MET:H 23 0.01 (1,1531) 1:A:10:VAL:HG23 1:A:72:MET:H 23 0.01 (1,1523) 1:A:73:SER:HA 1:A:70:GLN:H 2 0.01 (1,1523) 1:A:73:SER:HA 1:A:70:GLN:H 26 0.01 (1,1523) 1:A:73:SER:HA 1:A:70:GLN:H 26 0.01 (1,1523) 1:A:47:3SER:HA 1:A:70:GLN:H 26 0.01 (1,1517) 1:A:8:ASP:HB3 1:A:70:ARG:HA 13 0.01 (1,1517) 1:A:8:ASP:HB3 1:A:7:ARG:HA 29 0.01 (1,1503) 1:A:55:VAL:HG11 1:A:49:GLU:H 21 0.01 (1,1503) 1:A:55:VAL:HG13 1:A:49:GLU:H 26 0.01 (1,1503) 1:A:55:VAL:HG11 1:A:49:GLU:H 26 0.01 (1,1503) 1:A:55:VAL:HG12 1:A:49:GLU:H	(1,1546)	1:A:44:VAL:HG11	1:A:42:VAL:HA	29	0.01
(1,1531) 1:A:10:VAL:HG21 1:A:72:MET:H 23 0.01 (1,1531) 1:A:10:VAL:HG22 1:A:72:MET:H 23 0.01 (1,1531) 1:A:10:VAL:HG23 1:A:72:MET:H 23 0.01 (1,1523) 1:A:73:SER:HA 1:A:70:GLN:H 2 0.01 (1,1523) 1:A:73:SER:HA 1:A:70:GLN:H 26 0.01 (1,1517) 1:A:8:ASP:HB3 1:A:7:ARG:HA 13 0.01 (1,1517) 1:A:8:ASP:HB3 1:A:7:ARG:HA 29 0.01 (1,1503) 1:A:55:VAL:HG11 1:A:49:GLU:H 21 0.01 (1,1503) 1:A:55:VAL:HG12 1:A:49:GLU:H 21 0.01 (1,1503) 1:A:55:VAL:HG13 1:A:49:GLU:H 26 0.01 (1,1503) 1:A:55:VAL:HG12 1:A:49:GLU:H 26 0.01 (1,1503) 1:A:55:VAL:HG13 1:A:49:GLU:H 26 0.01 (1,1497) 1:A:65:THR:HG21 1:A:63:GLN:HB2 7 0.01 (1,1497) 1:A:65:THR:HG23 1:A:63:GLN:HB2	(1,1546)	1:A:44:VAL:HG12	1:A:42:VAL:HA	29	0.01
(1,1531) 1:A:10:VAL:HG22 1:A:72:MET:H 23 0.01 (1,1531) 1:A:10:VAL:HG23 1:A:72:MET:H 23 0.01 (1,1523) 1:A:73:SER:HA 1:A:70:GLN:H 2 0.01 (1,1523) 1:A:73:SER:HA 1:A:70:GLN:H 26 0.01 (1,1517) 1:A:8:ASP:HB3 1:A:7:ARG:HA 13 0.01 (1,1517) 1:A:8:ASP:HB3 1:A:7:ARG:HA 29 0.01 (1,1503) 1:A:55:VAL:HG11 1:A:49:GLU:H 21 0.01 (1,1503) 1:A:55:VAL:HG12 1:A:49:GLU:H 21 0.01 (1,1503) 1:A:55:VAL:HG13 1:A:49:GLU:H 26 0.01 (1,1503) 1:A:55:VAL:HG12 1:A:49:GLU:H 26 0.01 (1,1503) 1:A:55:VAL:HG13 1:A:49:GLU:H 26 0.01 (1,1497) 1:A:65:THR:HG21 1:A:63:GLN:HB2 7 0.01 (1,1497) 1:A:65:THR:HG22 1:A:63:GLN:HB2 7 0.01 (1,1497) 1:A:65:THR:HG23 1:A:63:GLN:HB2	(1,1546)	1:A:44:VAL:HG13	1:A:42:VAL:HA	29	0.01
(1,1531) 1:A:10:VAL:HG23 1:A:72:MET:H 23 0.01 (1,1523) 1:A:73:SER:HA 1:A:70:GLN:H 2 0.01 (1,1523) 1:A:73:SER:HA 1:A:70:GLN:H 26 0.01 (1,1517) 1:A:8:ASP:HB3 1:A:7:ARG:HA 13 0.01 (1,1517) 1:A:8:ASP:HB3 1:A:7:ARG:HA 29 0.01 (1,1503) 1:A:55:VAL:HG11 1:A:49:GLU:H 21 0.01 (1,1503) 1:A:55:VAL:HG12 1:A:49:GLU:H 21 0.01 (1,1503) 1:A:55:VAL:HG13 1:A:49:GLU:H 26 0.01 (1,1503) 1:A:55:VAL:HG11 1:A:49:GLU:H 26 0.01 (1,1503) 1:A:55:VAL:HG12 1:A:49:GLU:H 26 0.01 (1,1497) 1:A:65:THR:HG21 1:A:63:GLN:HB2 7 0.01 (1,1497) 1:A:65:THR:HG22 1:A:63:GLN:HB2 7 0.01 (1,1497) 1:A:65:THR:HG23 1:A:63:GLN:HB2 7 0.01 (1,1493) 1:A:46:GLN:HG3 1:A:50:ARG:HD2	(1,1531)	1:A:10:VAL:HG21	1:A:72:MET:H	23	0.01
(1,1523) 1:A:73:SER:HA 1:A:70:GLN:H 2 0.01 (1,1523) 1:A:73:SER:HA 1:A:70:GLN:H 26 0.01 (1,1517) 1:A:8:ASP:HB3 1:A:7:ARG:HA 13 0.01 (1,1517) 1:A:8:ASP:HB3 1:A:7:ARG:HA 29 0.01 (1,1503) 1:A:55:VAL:HG11 1:A:49:GLU:H 21 0.01 (1,1503) 1:A:55:VAL:HG12 1:A:49:GLU:H 21 0.01 (1,1503) 1:A:55:VAL:HG13 1:A:49:GLU:H 26 0.01 (1,1503) 1:A:55:VAL:HG11 1:A:49:GLU:H 26 0.01 (1,1503) 1:A:55:VAL:HG12 1:A:49:GLU:H 26 0.01 (1,1497) 1:A:65:THR:HG21 1:A:63:GLN:HB2 7 0.01 (1,1497) 1:A:65:THR:HG22 1:A:63:GLN:HB2 7 0.01 (1,1493) 1:A:46:GLN:HG3 1:A:50:ARG:HD2 2 0.01 (1,1493) 1:A:46:GLN:HG3 1:A:50:ARG:HD3 2 0.01	(1,1531)	1:A:10:VAL:HG22	1:A:72:MET:H	23	0.01
(1,1523) 1:A:73:SER:HA 1:A:70:GLN:H 26 0.01 (1,1517) 1:A:8:ASP:HB3 1:A:7:ARG:HA 13 0.01 (1,1517) 1:A:8:ASP:HB3 1:A:7:ARG:HA 29 0.01 (1,1503) 1:A:55:VAL:HG11 1:A:49:GLU:H 21 0.01 (1,1503) 1:A:55:VAL:HG12 1:A:49:GLU:H 21 0.01 (1,1503) 1:A:55:VAL:HG13 1:A:49:GLU:H 26 0.01 (1,1503) 1:A:55:VAL:HG11 1:A:49:GLU:H 26 0.01 (1,1503) 1:A:55:VAL:HG12 1:A:49:GLU:H 26 0.01 (1,1503) 1:A:55:VAL:HG13 1:A:49:GLU:H 26 0.01 (1,1497) 1:A:65:THR:HG21 1:A:63:GLN:HB2 7 0.01 (1,1497) 1:A:65:THR:HG22 1:A:63:GLN:HB2 7 0.01 (1,1493) 1:A:46:GLN:HG3 1:A:50:ARG:HD2 2 0.01 (1,1493) 1:A:46:GLN:HG3 1:A:50:ARG:HD3 2 0.01	(1,1531)	1:A:10:VAL:HG23	1:A:72:MET:H	23	0.01
(1,1517) 1:A:8:ASP:HB3 1:A:7:ARG:HA 13 0.01 (1,1517) 1:A:8:ASP:HB3 1:A:7:ARG:HA 29 0.01 (1,1503) 1:A:55:VAL:HG11 1:A:49:GLU:H 21 0.01 (1,1503) 1:A:55:VAL:HG12 1:A:49:GLU:H 21 0.01 (1,1503) 1:A:55:VAL:HG13 1:A:49:GLU:H 26 0.01 (1,1503) 1:A:55:VAL:HG11 1:A:49:GLU:H 26 0.01 (1,1503) 1:A:55:VAL:HG12 1:A:49:GLU:H 26 0.01 (1,1503) 1:A:55:VAL:HG13 1:A:49:GLU:H 26 0.01 (1,1497) 1:A:65:THR:HG21 1:A:63:GLN:HB2 7 0.01 (1,1497) 1:A:65:THR:HG22 1:A:63:GLN:HB2 7 0.01 (1,1497) 1:A:65:THR:HG23 1:A:63:GLN:HB2 7 0.01 (1,1493) 1:A:46:GLN:HG3 1:A:50:ARG:HD3 2 0.01 (1,1493) 1:A:46:GLN:HG3 1:A:50:ARG:HD3 2 0.01	(1,1523)	1:A:73:SER:HA	1:A:70:GLN:H	2	0.01
(1,1517) 1:A:8:ASP:HB3 1:A:7:ARG:HA 29 0.01 (1,1503) 1:A:55:VAL:HG11 1:A:49:GLU:H 21 0.01 (1,1503) 1:A:55:VAL:HG12 1:A:49:GLU:H 21 0.01 (1,1503) 1:A:55:VAL:HG13 1:A:49:GLU:H 26 0.01 (1,1503) 1:A:55:VAL:HG11 1:A:49:GLU:H 26 0.01 (1,1503) 1:A:55:VAL:HG12 1:A:49:GLU:H 26 0.01 (1,1503) 1:A:55:VAL:HG13 1:A:49:GLU:H 26 0.01 (1,1497) 1:A:65:THR:HG21 1:A:63:GLN:HB2 7 0.01 (1,1497) 1:A:65:THR:HG22 1:A:63:GLN:HB2 7 0.01 (1,1497) 1:A:65:THR:HG23 1:A:63:GLN:HB2 7 0.01 (1,1493) 1:A:46:GLN:HG3 1:A:50:ARG:HD2 2 0.01 (1,1493) 1:A:46:GLN:HG3 1:A:50:ARG:HD3 2 0.01	(1,1523)	1:A:73:SER:HA	1:A:70:GLN:H	26	0.01
(1,1503) 1:A:55:VAL:HG11 1:A:49:GLU:H 21 0.01 (1,1503) 1:A:55:VAL:HG12 1:A:49:GLU:H 21 0.01 (1,1503) 1:A:55:VAL:HG13 1:A:49:GLU:H 21 0.01 (1,1503) 1:A:55:VAL:HG11 1:A:49:GLU:H 26 0.01 (1,1503) 1:A:55:VAL:HG12 1:A:49:GLU:H 26 0.01 (1,1503) 1:A:55:VAL:HG13 1:A:49:GLU:H 26 0.01 (1,1497) 1:A:65:THR:HG21 1:A:63:GLN:HB2 7 0.01 (1,1497) 1:A:65:THR:HG22 1:A:63:GLN:HB2 7 0.01 (1,1497) 1:A:65:THR:HG23 1:A:63:GLN:HB2 7 0.01 (1,1493) 1:A:46:GLN:HG3 1:A:50:ARG:HD2 2 0.01 (1,1493) 1:A:46:GLN:HG3 1:A:50:ARG:HD3 2 0.01	(1,1517)	1:A:8:ASP:HB3	1:A:7:ARG:HA	13	0.01
(1,1503) 1:A:55:VAL:HG12 1:A:49:GLU:H 21 0.01 (1,1503) 1:A:55:VAL:HG13 1:A:49:GLU:H 21 0.01 (1,1503) 1:A:55:VAL:HG11 1:A:49:GLU:H 26 0.01 (1,1503) 1:A:55:VAL:HG12 1:A:49:GLU:H 26 0.01 (1,1503) 1:A:55:VAL:HG13 1:A:49:GLU:H 26 0.01 (1,1497) 1:A:65:THR:HG21 1:A:63:GLN:HB2 7 0.01 (1,1497) 1:A:65:THR:HG22 1:A:63:GLN:HB2 7 0.01 (1,1497) 1:A:65:THR:HG23 1:A:63:GLN:HB2 7 0.01 (1,1493) 1:A:46:GLN:HG3 1:A:50:ARG:HD2 2 0.01 (1,1493) 1:A:46:GLN:HG3 1:A:50:ARG:HD3 2 0.01	(1,1517)	1:A:8:ASP:HB3	1:A:7:ARG:HA	29	0.01
(1,1503) 1:A:55:VAL:HG13 1:A:49:GLU:H 21 0.01 (1,1503) 1:A:55:VAL:HG11 1:A:49:GLU:H 26 0.01 (1,1503) 1:A:55:VAL:HG12 1:A:49:GLU:H 26 0.01 (1,1503) 1:A:55:VAL:HG13 1:A:49:GLU:H 26 0.01 (1,1497) 1:A:65:THR:HG21 1:A:63:GLN:HB2 7 0.01 (1,1497) 1:A:65:THR:HG22 1:A:63:GLN:HB2 7 0.01 (1,1497) 1:A:65:THR:HG23 1:A:63:GLN:HB2 7 0.01 (1,1493) 1:A:46:GLN:HG3 1:A:50:ARG:HD2 2 0.01 (1,1493) 1:A:46:GLN:HG3 1:A:50:ARG:HD3 2 0.01	(1,1503)	1:A:55:VAL:HG11	1:A:49:GLU:H	21	0.01
(1,1503) 1:A:55:VAL:HG11 1:A:49:GLU:H 26 0.01 (1,1503) 1:A:55:VAL:HG12 1:A:49:GLU:H 26 0.01 (1,1503) 1:A:55:VAL:HG13 1:A:49:GLU:H 26 0.01 (1,1497) 1:A:65:THR:HG21 1:A:63:GLN:HB2 7 0.01 (1,1497) 1:A:65:THR:HG22 1:A:63:GLN:HB2 7 0.01 (1,1497) 1:A:65:THR:HG23 1:A:63:GLN:HB2 7 0.01 (1,1493) 1:A:46:GLN:HG3 1:A:50:ARG:HD2 2 0.01 (1,1493) 1:A:46:GLN:HG3 1:A:50:ARG:HD3 2 0.01	(1,1503)	1:A:55:VAL:HG12	1:A:49:GLU:H	21	0.01
(1,1503) 1:A:55:VAL:HG12 1:A:49:GLU:H 26 0.01 (1,1503) 1:A:55:VAL:HG13 1:A:49:GLU:H 26 0.01 (1,1497) 1:A:65:THR:HG21 1:A:63:GLN:HB2 7 0.01 (1,1497) 1:A:65:THR:HG22 1:A:63:GLN:HB2 7 0.01 (1,1497) 1:A:65:THR:HG23 1:A:63:GLN:HB2 7 0.01 (1,1493) 1:A:46:GLN:HG3 1:A:50:ARG:HD2 2 0.01 (1,1493) 1:A:46:GLN:HG3 1:A:50:ARG:HD3 2 0.01	(1,1503)	1:A:55:VAL:HG13	1:A:49:GLU:H	21	0.01
(1,1503) 1:A:55:VAL:HG13 1:A:49:GLU:H 26 0.01 (1,1497) 1:A:65:THR:HG21 1:A:63:GLN:HB2 7 0.01 (1,1497) 1:A:65:THR:HG22 1:A:63:GLN:HB2 7 0.01 (1,1497) 1:A:65:THR:HG23 1:A:63:GLN:HB2 7 0.01 (1,1493) 1:A:46:GLN:HG3 1:A:50:ARG:HD2 2 0.01 (1,1493) 1:A:46:GLN:HG3 1:A:50:ARG:HD3 2 0.01	(1,1503)	1:A:55:VAL:HG11	1:A:49:GLU:H	26	0.01
(1,1497) 1:A:65:THR:HG21 1:A:63:GLN:HB2 7 0.01 (1,1497) 1:A:65:THR:HG22 1:A:63:GLN:HB2 7 0.01 (1,1497) 1:A:65:THR:HG23 1:A:63:GLN:HB2 7 0.01 (1,1493) 1:A:46:GLN:HG3 1:A:50:ARG:HD2 2 0.01 (1,1493) 1:A:46:GLN:HG3 1:A:50:ARG:HD3 2 0.01	(1,1503)	1:A:55:VAL:HG12	1:A:49:GLU:H	26	0.01
(1,1497) 1:A:65:THR:HG22 1:A:63:GLN:HB2 7 0.01 (1,1497) 1:A:65:THR:HG23 1:A:63:GLN:HB2 7 0.01 (1,1493) 1:A:46:GLN:HG3 1:A:50:ARG:HD2 2 0.01 (1,1493) 1:A:46:GLN:HG3 1:A:50:ARG:HD3 2 0.01	(1,1503)	1:A:55:VAL:HG13	1:A:49:GLU:H	26	0.01
(1,1497) 1:A:65:THR:HG23 1:A:63:GLN:HB2 7 0.01 (1,1493) 1:A:46:GLN:HG3 1:A:50:ARG:HD2 2 0.01 (1,1493) 1:A:46:GLN:HG3 1:A:50:ARG:HD3 2 0.01	(1,1497)	1:A:65:THR:HG21	1:A:63:GLN:HB2	7	0.01
(1,1493) 1:A:46:GLN:HG3 1:A:50:ARG:HD2 2 0.01 (1,1493) 1:A:46:GLN:HG3 1:A:50:ARG:HD3 2 0.01	(1,1497)	1:A:65:THR:HG22	1:A:63:GLN:HB2	7	0.01
(1,1493) 1:A:46:GLN:HG3 1:A:50:ARG:HD3 2 0.01	(1,1497)	1:A:65:THR:HG23	1:A:63:GLN:HB2	7	0.01
	(1,1493)	1:A:46:GLN:HG3	1:A:50:ARG:HD2	2	0.01
(1,1491) 1:A:42:VAL:HG21 1:A:46:GLN:HG2 5 0.01	(1,1493)	1:A:46:GLN:HG3	1:A:50:ARG:HD3	2	0.01
1 () () () () () () () () () ((1,1491)	1:A:42:VAL:HG21	1:A:46:GLN:HG2	5	0.01
(1,1491) 1:A:42:VAL:HG22 1:A:46:GLN:HG2 5 0.01	(1,1491)	1:A:42:VAL:HG22	1:A:46:GLN:HG2	5	0.01
(1,1491) 1:A:42:VAL:HG23 1:A:46:GLN:HG2 5 0.01	(1,1491)	1:A:42:VAL:HG23	1:A:46:GLN:HG2	5	0.01
(1,1491) 1:A:42:VAL:HG21 1:A:46:GLN:HG2 13 0.01	(1,1491)	1:A:42:VAL:HG21	1:A:46:GLN:HG2	13	0.01
(1,1491) 1:A:42:VAL:HG22 1:A:46:GLN:HG2 13 0.01	(1,1491)	1:A:42:VAL:HG22	1:A:46:GLN:HG2	13	0.01
(1,1491) 1:A:42:VAL:HG23 1:A:46:GLN:HG2 13 0.01	(1,1491)	1:A:42:VAL:HG23	1:A:46:GLN:HG2	13	0.01
(1,1484) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:19:ILE:HB 7 0.01	(1,1484)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:19:ILE:HB	7	0.01
(1,1484) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:19:ILE:HB 7 0.01	, ,	1:A:14:ALA:HB2	1:A:19:ILE:HB	7	0.01
(1,1484) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:19:ILE:HB 7 0.01	(1,1484)	1:A:14:ALA:HB3	1:A:19:ILE:HB	7	0.01
(1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG11 7 0.01	(1,1481)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:13:VAL:HG11	7	0.01
(1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG12 7 0.01		1:A:14:ALA:HB1	1:A:13:VAL:HG12	7	0.01
(1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG13 7 0.01	(1,1481)	1:A:14:ALA:HB1	1:A:13:VAL:HG13	7	0.01
(1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG11 7 0.01	(1,1481)	1:A:14:ALA:HB2	1:A:13:VAL:HG11	7	0.01



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

(1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG12 7 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 7 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG11 7 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG12 7 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG13 7 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG11 14 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG12 14 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 14 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG11 14 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 14 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG13 14 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG13 14 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG13 14 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3	(\mathbf{A})
(1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG11 7 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG12 7 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG13 7 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG11 14 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG12 14 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG13 14 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 14 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG12 14 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 14 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG11 14 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG12 14 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG13 14 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG13 22 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1	
(1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG12 7 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG13 7 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG11 14 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG12 14 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG13 14 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG11 14 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG12 14 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 14 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG11 14 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG12 14 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG13 14 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG11 22 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG12 22 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2	
(1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG13 7 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG11 14 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG12 14 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG13 14 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG11 14 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG12 14 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 14 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG13 14 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG12 14 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG13 14 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG13 22 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG13 22 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG11 22 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2	
(1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG11 14 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG12 14 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG13 14 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG11 14 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG12 14 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 14 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG11 14 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG12 14 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG13 14 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG11 22 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG12 22 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG11 22 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG12 22 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2	
(1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG12 14 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG13 14 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG11 14 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG12 14 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 14 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG11 14 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG12 14 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG13 14 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG11 22 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG13 22 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG11 22 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 22 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 22 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3	
(1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG13 14 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG11 14 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG12 14 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 14 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG11 14 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG12 14 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG13 14 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG11 22 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG12 22 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG11 22 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG12 22 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 22 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 22 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3	
(1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG11 14 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG12 14 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 14 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG11 14 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG12 14 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG13 14 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG11 22 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG12 22 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG11 22 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG12 22 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG12 22 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 22 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 22 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG11 22 0.01	
(1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG12 14 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 14 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG11 14 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG12 14 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG13 14 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG11 22 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG12 22 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG11 22 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG12 22 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG12 22 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 22 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 22 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG11 22 0.01	
(1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 14 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG11 14 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG12 14 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG13 14 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG11 22 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG12 22 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG11 22 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG12 22 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 22 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 22 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG11 22 0.01	
(1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG11 14 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG12 14 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG13 14 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG11 22 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG12 22 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG11 22 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG12 22 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 22 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 22 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG11 22 0.01	
(1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG12 14 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG13 14 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG11 22 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG12 22 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG13 22 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG11 22 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG12 22 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 22 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 22 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG11 22 0.01	
(1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG13 14 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG11 22 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG12 22 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG13 22 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG11 22 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG12 22 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 22 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 22 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG11 22 0.01	
(1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG11 22 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG12 22 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG13 22 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG11 22 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG12 22 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 22 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG11 22 0.01	
(1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG12 22 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG13 22 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG11 22 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG12 22 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 22 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG11 22 0.01	
(1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG13 22 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG11 22 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG12 22 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 22 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG11 22 0.01	
(1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG11 22 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG12 22 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 22 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG11 22 0.01	
(1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG12 22 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 22 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG11 22 0.01	
(1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 22 0.01 (1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG11 22 0.01	
(1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG11 22 0.01	
(1 1 4 0 1)	
(1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG12 22 0.01	
(1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG13 22 0.01	
(1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG11 23 0.01	
(1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG12 23 0.01	
(1,1481) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:13:VAL:HG13 23 0.01	
(1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG11 23 0.01	
(1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG12 23 0.01	
(1,1481) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:13:VAL:HG13 23 0.01	
(1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG11 23 0.01	
(1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG12 23 0.01	
(1,1481) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:13:VAL:HG13 23 0.01	
(1,1476) 1:A:14:ALA:HB1 1:A:15:HIS:H 21 0.01	
(1,1476) 1:A:14:ALA:HB2 1:A:15:HIS:H 21 0.01	
(1,1476) 1:A:14:ALA:HB3 1:A:15:HIS:H 21 0.01	
(1,1465) 1:A:14:ALA:HA 1:A:13:VAL:HG11 1 0.01	
(1,1465) 1:A:14:ALA:HA 1:A:13:VAL:HG12 1 0.01	
(1,1465) 1:A:14:ALA:HA 1:A:13:VAL:HG13 1 0.01	
(1,1465) 1:A:14:ALA:HA 1:A:13:VAL:HG11 2 0.01	
(1,1465) 1:A:14:ALA:HA 1:A:13:VAL:HG12 2 0.01	
(1,1465) 1:A:14:ALA:HA 1:A:13:VAL:HG13 2 0.01	
(1,1465) 1:A:14:ALA:HA 1:A:13:VAL:HG11 5 0.01	



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1465)	1:A:14:ALA:HA	1:A:13:VAL:HG12	5	0.01
(1,1465)	1:A:14:ALA:HA	1:A:13:VAL:HG13	5	0.01
(1,1465)	1:A:14:ALA:HA	1:A:13:VAL:HG11	6	0.01
(1,1465)	1:A:14:ALA:HA	1:A:13:VAL:HG12	6	0.01
(1,1465)	1:A:14:ALA:HA	1:A:13:VAL:HG13	6	0.01
(1,1465)	1:A:14:ALA:HA	1:A:13:VAL:HG11	8	0.01
(1,1465)	1:A:14:ALA:HA	1:A:13:VAL:HG12	8	0.01
(1,1465)	1:A:14:ALA:HA	1:A:13:VAL:HG13	8	0.01
(1,1465)	1:A:14:ALA:HA	1:A:13:VAL:HG11	9	0.01
(1,1465)	1:A:14:ALA:HA	1:A:13:VAL:HG12	9	0.01
(1,1465)	1:A:14:ALA:HA	1:A:13:VAL:HG13	9	0.01
(1,1465)	1:A:14:ALA:HA	1:A:13:VAL:HG11	14	0.01
(1,1465)	1:A:14:ALA:HA	1:A:13:VAL:HG12	14	0.01
(1,1465)	1:A:14:ALA:HA	1:A:13:VAL:HG13	14	0.01
(1,1465)	1:A:14:ALA:HA	1:A:13:VAL:HG11	20	0.01
(1,1465)	1:A:14:ALA:HA	1:A:13:VAL:HG12	20	0.01
(1,1465)	1:A:14:ALA:HA	1:A:13:VAL:HG13	20	0.01
(1,1465)	1:A:14:ALA:HA	1:A:13:VAL:HG11	22	0.01
(1,1465)	1:A:14:ALA:HA	1:A:13:VAL:HG12	22	0.01
(1,1465)	1:A:14:ALA:HA	1:A:13:VAL:HG13	22	0.01
(1,1465)	1:A:14:ALA:HA	1:A:13:VAL:HG11	25	0.01
(1,1465)	1:A:14:ALA:HA	1:A:13:VAL:HG12	25	0.01
(1,1465)	1:A:14:ALA:HA	1:A:13:VAL:HG13	25	0.01
(1,1465)	1:A:14:ALA:HA	1:A:13:VAL:HG11	26	0.01
(1,1465)	1:A:14:ALA:HA	1:A:13:VAL:HG12	26	0.01
(1,1465)	1:A:14:ALA:HA	1:A:13:VAL:HG13	26	0.01
(1,1465)	1:A:14:ALA:HA	1:A:13:VAL:HG11	27	0.01
(1,1465)	1:A:14:ALA:HA	1:A:13:VAL:HG12	27	0.01
(1,1465)	1:A:14:ALA:HA	1:A:13:VAL:HG13	27	0.01
(1,1447)	1:A:13:VAL:HG11	1:A:17:LEU:HG	14	0.01
(1,1447)	1:A:13:VAL:HG12	1:A:17:LEU:HG	14	0.01
(1,1447)	1:A:13:VAL:HG13	1:A:17:LEU:HG	14	0.01
(1,1447)	1:A:13:VAL:HG11	1:A:17:LEU:HG	20	0.01
(1,1447)	1:A:13:VAL:HG12	1:A:17:LEU:HG	20	0.01
(1,1447)	1:A:13:VAL:HG13	1:A:17:LEU:HG	20	0.01
(1,1445)	1:A:44:VAL:HG11	1:A:47:ILE:HG13	13	0.01
(1,1445)	1:A:44:VAL:HG12	1:A:47:ILE:HG13	13	0.01
(1,1445)	1:A:44:VAL:HG13	1:A:47:ILE:HG13	13	0.01
(1,1445)	1:A:44:VAL:HG11	1:A:47:ILE:HG13	17	0.01
(1,1445)	1:A:44:VAL:HG12	1:A:47:ILE:HG13	17	0.01
(1,1445)	1:A:44:VAL:HG13	1:A:47:ILE:HG13	17	0.01
(1,1445)	1:A:44:VAL:HG11	1:A:47:ILE:HG13	20	0.01



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

(1,1445) 1:A:44:VAL:HG12 1:A:47:ILE:HG13 20 0.0 (1,1445) 1:A:44:VAL:HG13 1:A:47:ILE:HG13 20 0.0 (1,1445) 1:A:44:VAL:HG11 1:A:47:ILE:HG13 29 0.0 (1,1445) 1:A:44:VAL:HG12 1:A:47:ILE:HG13 29 0.0 (1,1445) 1:A:44:VAL:HG13 1:A:47:ILE:HG13 29 0.0 (1,1445) 1:A:44:VAL:HG13 1:A:9:LEU:HA 23 0.0 (1,1435) 1:A:13:VAL:HG12 1:A:9:LEU:HA 23 0.0 (1,1435) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:9:LEU:HA 26 0.0 (1,1435) 1:A:13:VAL:HG12 1:A:9:LEU:HA 26 0.0 (1,1435) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:9:LEU:HA 26 0.0 (1,1435) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:9:LEU:HA 26 0.0 (1,1437) 1:A:42:VAL:HG21 1:A:42:VAL:H 11 0.0	01 01 01 01 01 01
(1,1445) 1:A:44:VAL:HG11 1:A:47:ILE:HG13 29 0.0 (1,1445) 1:A:44:VAL:HG12 1:A:47:ILE:HG13 29 0.0 (1,1445) 1:A:44:VAL:HG13 1:A:47:ILE:HG13 29 0.0 (1,1445) 1:A:13:VAL:HG11 1:A:9:LEU:HA 23 0.0 (1,1435) 1:A:13:VAL:HG12 1:A:9:LEU:HA 23 0.0 (1,1435) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:9:LEU:HA 23 0.0 (1,1435) 1:A:13:VAL:HG11 1:A:9:LEU:HA 26 0.0 (1,1435) 1:A:13:VAL:HG12 1:A:9:LEU:HA 26 0.0 (1,1435) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:9:LEU:HA 26 0.0 (1,1435) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:9:LEU:HA 26 0.0)1)1)1)1)1
(1,1445) 1:A:44:VAL:HG12 1:A:47:ILE:HG13 29 0.0 (1,1445) 1:A:44:VAL:HG13 1:A:47:ILE:HG13 29 0.0 (1,1435) 1:A:13:VAL:HG11 1:A:9:LEU:HA 23 0.0 (1,1435) 1:A:13:VAL:HG12 1:A:9:LEU:HA 23 0.0 (1,1435) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:9:LEU:HA 23 0.0 (1,1435) 1:A:13:VAL:HG11 1:A:9:LEU:HA 26 0.0 (1,1435) 1:A:13:VAL:HG12 1:A:9:LEU:HA 26 0.0 (1,1435) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:9:LEU:HA 26 0.0 (1,1435) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:9:LEU:HA 26 0.0)1)1)1)1
(1,1445) 1:A:44:VAL:HG13 1:A:47:ILE:HG13 29 0.0 (1,1435) 1:A:13:VAL:HG11 1:A:9:LEU:HA 23 0.0 (1,1435) 1:A:13:VAL:HG12 1:A:9:LEU:HA 23 0.0 (1,1435) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:9:LEU:HA 23 0.0 (1,1435) 1:A:13:VAL:HG11 1:A:9:LEU:HA 26 0.0 (1,1435) 1:A:13:VAL:HG12 1:A:9:LEU:HA 26 0.0 (1,1435) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:9:LEU:HA 26 0.0 (1,1435) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:9:LEU:HA 26 0.0)1)1)1
(1,1435) 1:A:13:VAL:HG11 1:A:9:LEU:HA 23 0.0 (1,1435) 1:A:13:VAL:HG12 1:A:9:LEU:HA 23 0.0 (1,1435) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:9:LEU:HA 23 0.0 (1,1435) 1:A:13:VAL:HG11 1:A:9:LEU:HA 26 0.0 (1,1435) 1:A:13:VAL:HG12 1:A:9:LEU:HA 26 0.0 (1,1435) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:9:LEU:HA 26 0.0)1)1
(1,1435) 1:A:13:VAL:HG12 1:A:9:LEU:HA 23 0.0 (1,1435) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:9:LEU:HA 23 0.0 (1,1435) 1:A:13:VAL:HG11 1:A:9:LEU:HA 26 0.0 (1,1435) 1:A:13:VAL:HG12 1:A:9:LEU:HA 26 0.0 (1,1435) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:9:LEU:HA 26 0.0 (1,1435) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:9:LEU:HA 26 0.0)1
(1,1435) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:9:LEU:HA 23 0.0 (1,1435) 1:A:13:VAL:HG11 1:A:9:LEU:HA 26 0.0 (1,1435) 1:A:13:VAL:HG12 1:A:9:LEU:HA 26 0.0 (1,1435) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:9:LEU:HA 26 0.0	
(1,1435) 1:A:13:VAL:HG11 1:A:9:LEU:HA 26 0.0 (1,1435) 1:A:13:VAL:HG12 1:A:9:LEU:HA 26 0.0 (1,1435) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:9:LEU:HA 26 0.0	11
(1,1435) 1:A:13:VAL:HG12 1:A:9:LEU:HA 26 0.0 (1,1435) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:9:LEU:HA 26 0.0	, <u>T</u>
(1,1435) 1:A:13:VAL:HG13 1:A:9:LEU:HA 26 0.0)1
)1
(1.1427) $1 \cdot A \cdot 42 \cdot VAI \cdot HC21$ $1 \cdot A \cdot 42 \cdot VAI \cdot H$ 11 0.0)1
(1,112) 1.11.12)1
(1,1427) 1:A:42:VAL:HG22 1:A:42:VAL:H 11 0.0)1
(1,1427) 1:A:42:VAL:HG23 1:A:42:VAL:H 11 0.0)1
(1,1423) 1:A:42:VAL:HG21 1:A:39:LEU:HG 3 0.0)1
(1,1423) 1:A:42:VAL:HG22 1:A:39:LEU:HG 3 0.0)1
(1,1423) 1:A:42:VAL:HG23 1:A:39:LEU:HG 3 0.0)1
(1,1423) 1:A:42:VAL:HG21 1:A:39:LEU:HG 8 0.0)1
(1,1423) 1:A:42:VAL:HG22 1:A:39:LEU:HG 8 0.0)1
(1,1423) 1:A:42:VAL:HG23 1:A:39:LEU:HG 8 0.0)1
(1,1423) 1:A:42:VAL:HG21 1:A:39:LEU:HG 27 0.0)1
(1,1423) 1:A:42:VAL:HG22 1:A:39:LEU:HG 27 0.0)1
(1,1423) 1:A:42:VAL:HG23 1:A:39:LEU:HG 27 0.0)1
(1,1411) 1:A:42:VAL:HG11 1:A:43:GLU:HG3 29 0.0)1
(1,1411) 1:A:42:VAL:HG12 1:A:43:GLU:HG3 29 0.0)1
(1,1411) 1:A:42:VAL:HG13 1:A:43:GLU:HG3 29 0.0)1
(1,1407) 1:A:42:VAL:HA 1:A:44:VAL:H 4 0.0)1
(1,1407) 1:A:42:VAL:HA 1:A:44:VAL:H 6 0.0)1
(1,1407) 1:A:42:VAL:HA 1:A:44:VAL:H 8 0.0)1
(1,1407) 1:A:42:VAL:HA 1:A:44:VAL:H 12 0.0)1
(1,1407) 1:A:42:VAL:HA 1:A:44:VAL:H 19 0.0)1
(1,1407) 1:A:42:VAL:HA 1:A:44:VAL:H 20 0.0)1
(1,1407) 1:A:42:VAL:HA 1:A:44:VAL:H 22 0.0)1
(1,1402) 1:A:42:VAL:HA 1:A:45:ARG:HB3 24 0.0)1
(1,1393) 1:A:44:VAL:HA 1:A:48:LEU:HG 3 0.0)1
(1,1393) 1:A:44:VAL:HA 1:A:48:LEU:HG 24 0.0)1
(1,1393) 1:A:44:VAL:HA 1:A:48:LEU:HG 27 0.0)1
(1,1387) 1:A:12:ALA:HB1 1:A:7:ARG:HB2 29 0.0)1
(1,1387) 1:A:12:ALA:HB2 1:A:7:ARG:HB2 29 0.0)1
(1,1387) 1:A:12:ALA:HB3 1:A:7:ARG:HB2 29 0.0)1
(1,1369) 1:A:71:GLU:HG2 1:A:72:MET:H 13 0.0)1
(1,1334) 1:A:68:LYS:HE2 1:A:68:LYS:HB2 10 0.0)1



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1334)	1:A:68:LYS:HE2	1:A:68:LYS:HB3	10	0.01
(1,1334)	1:A:68:LYS:HE3	1:A:68:LYS:HB2	10	0.01
(1,1334)	1:A:68:LYS:HE3	1:A:68:LYS:HB3	10	0.01
(1,1334)	1:A:68:LYS:HE2	1:A:68:LYS:HB2	11	0.01
(1,1334)	1:A:68:LYS:HE2	1:A:68:LYS:HB3	11	0.01
(1,1334)	1:A:68:LYS:HE3	1:A:68:LYS:HB2	11	0.01
(1,1334)	1:A:68:LYS:HE3	1:A:68:LYS:HB3	11	0.01
(1,1334)	1:A:68:LYS:HE2	1:A:68:LYS:HB2	16	0.01
(1,1334)	1:A:68:LYS:HE2	1:A:68:LYS:HB3	16	0.01
(1,1334)	1:A:68:LYS:HE3	1:A:68:LYS:HB2	16	0.01
(1,1334)	1:A:68:LYS:HE3	1:A:68:LYS:HB3	16	0.01
(1,1334)	1:A:68:LYS:HE2	1:A:68:LYS:HB2	19	0.01
(1,1334)	1:A:68:LYS:HE2	1:A:68:LYS:HB3	19	0.01
(1,1334)	1:A:68:LYS:HE3	1:A:68:LYS:HB2	19	0.01
(1,1334)	1:A:68:LYS:HE3	1:A:68:LYS:HB3	19	0.01
(1,1332)	1:A:68:LYS:HE2	1:A:69:LEU:H	8	0.01
(1,1332)	1:A:68:LYS:HE3	1:A:69:LEU:H	8	0.01
(1,1332)	1:A:68:LYS:HE2	1:A:69:LEU:H	21	0.01
(1,1332)	1:A:68:LYS:HE3	1:A:69:LEU:H	21	0.01
(1,1332)	1:A:68:LYS:HE2	1:A:69:LEU:H	22	0.01
(1,1332)	1:A:68:LYS:HE3	1:A:69:LEU:H	22	0.01
(1,1328)	1:A:68:LYS:HD2	1:A:65:THR:H	2	0.01
(1,1328)	1:A:68:LYS:HD3	1:A:65:THR:H	2	0.01
(1,1311)	1:A:64:LEU:HA	1:A:68:LYS:HD2	16	0.01
(1,1311)	1:A:64:LEU:HA	1:A:68:LYS:HD3	16	0.01
(1,1308)	1:A:64:LEU:HA	1:A:63:GLN:HE21	10	0.01
(1,1308)	1:A:64:LEU:HA	1:A:63:GLN:HE21	21	0.01
(1,1308)	1:A:64:LEU:HA	1:A:63:GLN:HE21	24	0.01
(1,1308)	1:A:64:LEU:HA	1:A:63:GLN:HE21	26	0.01
(1,1302)	1:A:64:LEU:HB3	1:A:31:LEU:HB3	14	0.01
(1,1302)	1:A:64:LEU:HB3	1:A:31:LEU:HB3	27	0.01
(1,1274)	1:A:62:ARG:HA	1:A:63:GLN:HE22	2	0.01
(1,1267)	1:A:61:VAL:HG21	1:A:60:GLU:HB3	8	0.01
(1,1267)	1:A:61:VAL:HG22	1:A:60:GLU:HB3	8	0.01
(1,1267)	1:A:61:VAL:HG23	1:A:60:GLU:HB3	8	0.01
(1,1267)	1:A:61:VAL:HG21	1:A:60:GLU:HB3	27	0.01
(1,1267)	1:A:61:VAL:HG22	1:A:60:GLU:HB3	27	0.01
(1,1267)	1:A:61:VAL:HG23	1:A:60:GLU:HB3	27	0.01
(1,1260)	1:A:61:VAL:HG11	1:A:41:GLY:HA2	8	0.01
(1,1260)	1:A:61:VAL:HG12	1:A:41:GLY:HA2	8	0.01
(1,1260)	1:A:61:VAL:HG13	1:A:41:GLY:HA2	8	0.01
(1,1252)	1:A:61:VAL:HA	1:A:63:GLN:HE22	6	0.01



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1252)	1:A:61:VAL:HA	1:A:63:GLN:HE22	10	0.01
(1,1252)	1:A:61:VAL:HA	1:A:63:GLN:HE22	13	0.01
(1,1252)	1:A:61:VAL:HA	1:A:63:GLN:HE22	21	0.01
(1,1252)	1:A:61:VAL:HA	1:A:63:GLN:HE22	26	0.01
(1,1252)	1:A:61:VAL:HA	1:A:63:GLN:HE22	28	0.01
(1,1248)	1:A:61:VAL:HA	1:A:62:ARG:HB3	11	0.01
(1,1239)	1:A:60:GLU:HB3	1:A:56:LEU:HB2	17	0.01
(1,1239)	1:A:60:GLU:HB3	1:A:56:LEU:HB2	21	0.01
(1,1239)	1:A:60:GLU:HB3	1:A:56:LEU:HB2	27	0.01
(1,1222)	1:A:58:ILE:HG21	1:A:63:GLN:HE22	21	0.01
(1,1222)	1:A:58:ILE:HG22	1:A:63:GLN:HE22	21	0.01
(1,1222)	1:A:58:ILE:HG23	1:A:63:GLN:HE22	21	0.01
(1,1221)	1:A:58:ILE:HG21	1:A:57:PRO:HB3	13	0.01
(1,1221)	1:A:58:ILE:HG22	1:A:57:PRO:HB3	13	0.01
(1,1221)	1:A:58:ILE:HG23	1:A:57:PRO:HB3	13	0.01
(1,1221)	1:A:58:ILE:HG21	1:A:57:PRO:HB3	27	0.01
(1,1221)	1:A:58:ILE:HG22	1:A:57:PRO:HB3	27	0.01
(1,1221)	1:A:58:ILE:HG23	1:A:57:PRO:HB3	27	0.01
(1,1221)	1:A:58:ILE:HG21	1:A:57:PRO:HB3	29	0.01
(1,1221)	1:A:58:ILE:HG22	1:A:57:PRO:HB3	29	0.01
(1,1221)	1:A:58:ILE:HG23	1:A:57:PRO:HB3	29	0.01
(1,1220)	1:A:58:ILE:HG21	1:A:62:ARG:HD2	17	0.01
(1,1220)	1:A:58:ILE:HG22	1:A:62:ARG:HD2	17	0.01
(1,1220)	1:A:58:ILE:HG23	1:A:62:ARG:HD2	17	0.01
(1,1219)	1:A:58:ILE:HG21	1:A:59:ARG:HD2	19	0.01
(1,1219)	1:A:58:ILE:HG21	1:A:59:ARG:HD3	19	0.01
(1,1219)	1:A:58:ILE:HG22	1:A:59:ARG:HD2	19	0.01
(1,1219)	1:A:58:ILE:HG22	1:A:59:ARG:HD3	19	0.01
(1,1219)	1:A:58:ILE:HG23	1:A:59:ARG:HD2	19	0.01
(1,1219)	1:A:58:ILE:HG23	1:A:59:ARG:HD3	19	0.01
(1,1203)	1:A:56:LEU:HD21	1:A:54:LEU:HA	14	0.01
(1,1203)	1:A:56:LEU:HD22	1:A:54:LEU:HA	14	0.01
(1,1203)	1:A:56:LEU:HD23	1:A:54:LEU:HA	14	0.01
(1,1184)	1:A:56:LEU:HB3	1:A:57:PRO:HG3	29	0.01
(1,1183)	1:A:56:LEU:HB2	1:A:57:PRO:HB2	3	0.01
(1,1183)	1:A:56:LEU:HB2	1:A:57:PRO:HG2	3	0.01
(1,1183)	1:A:56:LEU:HB2	1:A:57:PRO:HB2	17	0.01
(1,1183)	1:A:56:LEU:HB2	1:A:57:PRO:HG2	17	0.01
(1,1183)	1:A:56:LEU:HB2	1:A:57:PRO:HB2	20	0.01
(1,1183)	1:A:56:LEU:HB2	1:A:57:PRO:HG2	20	0.01
(1,1172)	1:A:55:VAL:HA	1:A:57:PRO:HG3	15	0.01
(1,1172)	1:A:55:VAL:HA	1:A:57:PRO:HG3	25	0.01



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1172)	1:A:55:VAL:HA	1:A:57:PRO:HG3	30	0.01
(1,1168)	1:A:54:LEU:HG	1:A:56:LEU:HD21	3	0.01
(1,1168)	1:A:54:LEU:HG	1:A:56:LEU:HD22	3	0.01
(1,1168)	1:A:54:LEU:HG	1:A:56:LEU:HD23	3	0.01
(1,1168)	1:A:54:LEU:HG	1:A:56:LEU:HD21	10	0.01
(1,1168)	1:A:54:LEU:HG	1:A:56:LEU:HD22	10	0.01
(1,1168)	1:A:54:LEU:HG	1:A:56:LEU:HD23	10	0.01
(1,1168)	1:A:54:LEU:HG	1:A:56:LEU:HD21	13	0.01
(1,1168)	1:A:54:LEU:HG	1:A:56:LEU:HD22	13	0.01
(1,1168)	1:A:54:LEU:HG	1:A:56:LEU:HD23	13	0.01
(1,1168)	1:A:54:LEU:HG	1:A:56:LEU:HD21	18	0.01
(1,1168)	1:A:54:LEU:HG	1:A:56:LEU:HD22	18	0.01
(1,1168)	1:A:54:LEU:HG	1:A:56:LEU:HD23	18	0.01
(1,1168)	1:A:54:LEU:HG	1:A:56:LEU:HD21	19	0.01
(1,1168)	1:A:54:LEU:HG	1:A:56:LEU:HD22	19	0.01
(1,1168)	1:A:54:LEU:HG	1:A:56:LEU:HD23	19	0.01
(1,1168)	1:A:54:LEU:HG	1:A:56:LEU:HD21	27	0.01
(1,1168)	1:A:54:LEU:HG	1:A:56:LEU:HD22	27	0.01
(1,1168)	1:A:54:LEU:HG	1:A:56:LEU:HD23	27	0.01
(1,1168)	1:A:54:LEU:HG	1:A:56:LEU:HD21	28	0.01
(1,1168)	1:A:54:LEU:HG	1:A:56:LEU:HD22	28	0.01
(1,1168)	1:A:54:LEU:HG	1:A:56:LEU:HD23	28	0.01
(1,1163)	1:A:54:LEU:HD11	1:A:51:GLU:HB2	17	0.01
(1,1163)	1:A:54:LEU:HD12	1:A:51:GLU:HB2	17	0.01
(1,1163)	1:A:54:LEU:HD13	1:A:51:GLU:HB2	17	0.01
(1,1162)	1:A:54:LEU:HD11	1:A:52:HIS:HB2	1	0.01
(1,1162)	1:A:54:LEU:HD12	1:A:52:HIS:HB2	1	0.01
(1,1162)	1:A:54:LEU:HD13	1:A:52:HIS:HB2	1	0.01
(1,1161)	1:A:54:LEU:HD11	1:A:52:HIS:HB3	3	0.01
(1,1161)	1:A:54:LEU:HD12	1:A:52:HIS:HB3	3	0.01
(1,1161)	1:A:54:LEU:HD13	1:A:52:HIS:HB3	3	0.01
(1,1161)	1:A:54:LEU:HD11	1:A:52:HIS:HB3	6	0.01
(1,1161)	1:A:54:LEU:HD12	1:A:52:HIS:HB3	6	0.01
(1,1161)	1:A:54:LEU:HD13	1:A:52:HIS:HB3	6	0.01
(1,1161)	1:A:54:LEU:HD11	1:A:52:HIS:HB3	7	0.01
(1,1161)	1:A:54:LEU:HD12	1:A:52:HIS:HB3	7	0.01
(1,1161)	1:A:54:LEU:HD13	1:A:52:HIS:HB3	7	0.01
(1,1161)	1:A:54:LEU:HD11	1:A:52:HIS:HB3	10	0.01
(1,1161)	1:A:54:LEU:HD12	1:A:52:HIS:HB3	10	0.01
(1,1161)	1:A:54:LEU:HD13	1:A:52:HIS:HB3	10	0.01
(1,1161)	1:A:54:LEU:HD11	1:A:52:HIS:HB3	11	0.01
(1,1161)	1:A:54:LEU:HD12	1:A:52:HIS:HB3	11	0.01



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

('	1:A:54:LEU:HD13	1 A FO THO HDO		
(1 1161) 1		1:A:52:HIS:HB3	11	0.01
(1,1161) 1	1:A:54:LEU:HD11	1:A:52:HIS:HB3	28	0.01
(1,1161) 1	1:A:54:LEU:HD12	1:A:52:HIS:HB3	28	0.01
(1,1161) 1	1:A:54:LEU:HD13	1:A:52:HIS:HB3	28	0.01
(1,1161) 1	1:A:54:LEU:HD11	1:A:52:HIS:HB3	30	0.01
(1,1161) 1	1:A:54:LEU:HD12	1:A:52:HIS:HB3	30	0.01
(1,1161) 1	1:A:54:LEU:HD13	1:A:52:HIS:HB3	30	0.01
(1,1158)	1:A:54:LEU:HB3	1:A:48:LEU:HB3	2	0.01
(1,1147)	1:A:54:LEU:HB2	1:A:48:LEU:HB3	7	0.01
(1,1147)	1:A:54:LEU:HB2	1:A:48:LEU:HB3	9	0.01
(1,1147)	1:A:54:LEU:HB2	1:A:48:LEU:HB3	25	0.01
(1,111) 1	1:A:55:VAL:HG21	1:A:49:GLU:HG3	9	0.01
(1,111) 1	1:A:55:VAL:HG22	1:A:49:GLU:HG3	9	0.01
(1,111) 1	1:A:55:VAL:HG23	1:A:49:GLU:HG3	9	0.01
(1,1108)	1:A:48:LEU:HA	1:A:52:HIS:HB3	9	0.01
(1,1108)	1:A:48:LEU:HA	1:A:52:HIS:HB3	12	0.01
(1,1108)	1:A:48:LEU:HA	1:A:52:HIS:HB3	23	0.01
(1,1103)	1:A:40:MET:HG3	1:A:40:MET:H	19	0.01
(1,1095) 1	1:A:39:LEU:HD21	1:A:42:VAL:H	10	0.01
(1,1095) 1	1:A:39:LEU:HD22	1:A:42:VAL:H	10	0.01
(1,1095) 1	1:A:39:LEU:HD23	1:A:42:VAL:H	10	0.01
(1,1071)	1:A:36:LEU:HG	1:A:38:SER:H	11	0.01
(1,1071)	1:A:36:LEU:HG	1:A:38:SER:H	15	0.01
(1,1071)	1:A:36:LEU:HG	1:A:38:SER:H	17	0.01
(1,1064) 1	1:A:36:LEU:HD21	1:A:42:VAL:H	3	0.01
(1,1064) 1	1:A:36:LEU:HD22	1:A:42:VAL:H	3	0.01
(1,1064) 1	1:A:36:LEU:HD23	1:A:42:VAL:H	3	0.01
(1,1061) 1	1:A:36:LEU:HD21	1:A:38:SER:H	1	0.01
(1,1061) 1	1:A:36:LEU:HD22	1:A:38:SER:H	1	0.01
(1,1061) 1	1:A:36:LEU:HD23	1:A:38:SER:H	1	0.01
(1,1056) 1	1:A:36:LEU:HD21	1:A:62:ARG:HA	10	0.01
(1,1056) 1	1:A:36:LEU:HD22	1:A:62:ARG:HA	10	0.01
()	1:A:36:LEU:HD23	1:A:62:ARG:HA	10	0.01
(' /	1:A:36:LEU:HD21	1:A:62:ARG:HA	12	0.01
(1,1056) 1	1:A:36:LEU:HD22	1:A:62:ARG:HA	12	0.01
(1,1056) 1	1:A:36:LEU:HD23	1:A:62:ARG:HA	12	0.01
(1,1052) 1	1:A:36:LEU:HD11	1:A:41:GLY:HA2	11	0.01
	1:A:36:LEU:HD12	1:A:41:GLY:HA2	11	0.01
(1,1052) 1	1:A:36:LEU:HD13	1:A:41:GLY:HA2	11	0.01
(1,1052) 1	1:A:36:LEU:HD11	1:A:41:GLY:HA2	18	0.01
(1,1052) 1	1:A:36:LEU:HD12	1:A:41:GLY:HA2	18	0.01
(1,1052) 1	1:A:36:LEU:HD13	1:A:41:GLY:HA2	18	0.01



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD11	1:A:44:VAL:HG21	6	0.01
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD11	1:A:44:VAL:HG22	6	0.01
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD11	1:A:44:VAL:HG23	6	0.01
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD12	1:A:44:VAL:HG21	6	0.01
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD12	1:A:44:VAL:HG22	6	0.01
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD12	1:A:44:VAL:HG23	6	0.01
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD13	1:A:44:VAL:HG21	6	0.01
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD13	1:A:44:VAL:HG22	6	0.01
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD13	1:A:44:VAL:HG23	6	0.01
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD11	1:A:44:VAL:HG21	11	0.01
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD11	1:A:44:VAL:HG22	11	0.01
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD11	1:A:44:VAL:HG23	11	0.01
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD12	1:A:44:VAL:HG21	11	0.01
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD12	1:A:44:VAL:HG22	11	0.01
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD12	1:A:44:VAL:HG23	11	0.01
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD13	1:A:44:VAL:HG21	11	0.01
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD13	1:A:44:VAL:HG22	11	0.01
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD13	1:A:44:VAL:HG23	11	0.01
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD11	1:A:44:VAL:HG21	17	0.01
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD11	1:A:44:VAL:HG22	17	0.01
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD11	1:A:44:VAL:HG23	17	0.01
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD12	1:A:44:VAL:HG21	17	0.01
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD12	1:A:44:VAL:HG22	17	0.01
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD12	1:A:44:VAL:HG23	17	0.01
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD13	1:A:44:VAL:HG21	17	0.01
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD13	1:A:44:VAL:HG22	17	0.01
(1,1050)	1:A:36:LEU:HD13	1:A:44:VAL:HG23	17	0.01
(1,1047)	1:A:36:LEU:HD21	1:A:44:VAL:HG21	26	0.01
(1,1047)	1:A:36:LEU:HD21	1:A:44:VAL:HG22	26	0.01
(1,1047)	1:A:36:LEU:HD21	1:A:44:VAL:HG23	26	0.01
(1,1047)	1:A:36:LEU:HD22	1:A:44:VAL:HG21	26	0.01
(1,1047)	1:A:36:LEU:HD22	1:A:44:VAL:HG22	26	0.01
(1,1047)	1:A:36:LEU:HD22	1:A:44:VAL:HG23	26	0.01
(1,1047)	1:A:36:LEU:HD23	1:A:44:VAL:HG21	26	0.01
(1,1047)	1:A:36:LEU:HD23	1:A:44:VAL:HG22	26	0.01
(1,1047)	1:A:36:LEU:HD23	1:A:44:VAL:HG23	26	0.01
(1,1037)	1:A:36:LEU:HB3	1:A:40:MET:HA	7	0.01
(1,1037)	1:A:36:LEU:HB3	1:A:40:MET:HA	23	0.01
(1,1028)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:33:ASP:H	2	0.01
(1,1028)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:33:ASP:H	2	0.01
(1,1028)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:33:ASP:H	2	0.01
(1,1028)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:33:ASP:H	7	0.01



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1028)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:33:ASP:H	7	0.01
(1,1028)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:33:ASP:H	7	0.01
(1,1028)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:33:ASP:H	8	0.01
(1,1028)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:33:ASP:H	8	0.01
(1,1028)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:33:ASP:H	8	0.01
(1,1028)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:33:ASP:H	11	0.01
(1,1028)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:33:ASP:H	11	0.01
(1,1028)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:33:ASP:H	11	0.01
(1,1028)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:33:ASP:H	18	0.01
(1,1028)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:33:ASP:H	18	0.01
(1,1028)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:33:ASP:H	18	0.01
(1,1028)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:33:ASP:H	22	0.01
(1,1028)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:33:ASP:H	22	0.01
(1,1028)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:33:ASP:H	22	0.01
(1,1009)	1:A:34:LEU:HD11	1:A:29:SER:HB2	8	0.01
(1,1009)	1:A:34:LEU:HD12	1:A:29:SER:HB2	8	0.01
(1,1009)	1:A:34:LEU:HD13	1:A:29:SER:HB2	8	0.01
(1,1009)	1:A:34:LEU:HD11	1:A:29:SER:HB2	11	0.01
(1,1009)	1:A:34:LEU:HD12	1:A:29:SER:HB2	11	0.01
(1,1009)	1:A:34:LEU:HD13	1:A:29:SER:HB2	11	0.01
(1,1009)	1:A:34:LEU:HD11	1:A:29:SER:HB2	15	0.01
(1,1009)	1:A:34:LEU:HD12	1:A:29:SER:HB2	15	0.01
(1,1009)	1:A:34:LEU:HD13	1:A:29:SER:HB2	15	0.01
(1,1008)	1:A:34:LEU:HD11	1:A:31:LEU:HA	10	0.01
(1,1008)	1:A:34:LEU:HD12	1:A:31:LEU:HA	10	0.01
(1,1008)	1:A:34:LEU:HD13	1:A:31:LEU:HA	10	0.01
(1,1008)	1:A:34:LEU:HD11	1:A:31:LEU:HA	15	0.01
(1,1008)	1:A:34:LEU:HD12	1:A:31:LEU:HA	15	0.01
(1,1008)	1:A:34:LEU:HD13	1:A:31:LEU:HA	15	0.01
(1,1005)	1:A:33:ASP:HB3	1:A:30:SER:H	2	0.01
(1,1005)	1:A:33:ASP:HB3	1:A:30:SER:H	3	0.01
(1,1000)	1:A:33:ASP:HB2	1:A:35:GLY:H	7	0.01



9 Dihedral angle restraints analysis

No dihedral angle restraints found

