

wwPDB NMR Structure Validation Summary Report (i)

Feb 25, 2020 – 04:40 PM CST

PDB ID : 2K07

Title: Solution NMR structure of human E2-like ubiquitin-fold modifier conjugating

enzyme 1 (UFC1). Northeast Structural Genomics Consortium target HR41

Authors: Liu, G.; Eletsky, A.; Atreya, H.S.; Aramini, J.M.; Xiao, R.; Acton, T.;

Montelione, G.T.; Szyperski, T.; Northeast Structural Genomics Consortium

(NESG)

Deposited on : 2008-01-25

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 : $\overline{\text{Wang et al.}}$ (2010)

ShiftChecker : 2.6.dev1

BMRB Restraints Analalysis : v1.2

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

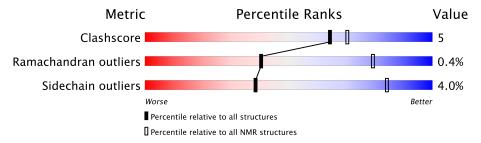
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : 2.6.dev1

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 55%.

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



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

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

Mol	Chain	Length	Quality of chain			
1	A	175	79%	6%	15%	



2 Ensemble composition and analysis (i)

This entry contains 20 models. Model 15 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 as representative, based on the following criterion: *lowest energy*.

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

Well-defined (core) protein residues					
Well-defined core	Residue ran	ige (total)	Backbone RMSD (Å)	Medoid model	
1	A:5-A:106,	A:113-A:159	0.65	15	
	(149)				

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

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

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

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



3 Entry composition (i)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 2888 atoms, of which 1437 are hydrogens and 0 are deuteriums.

• Molecule 1 is a protein called Ufm1-conjugating enzyme 1.

Mol	Chain	Residues	Atoms			Trace			
1	Λ	175	Total	С	Н	N	О	S	0
	A	175	2888	931	1437	258	256	6	U

There are 8 discrepancies between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	168	LEU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q9Y3C8
A	169	GLU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q9Y3C8
A	170	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q9Y3C8
A	171	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q9Y3C8
A	172	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q9Y3C8
A	173	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q9Y3C8
A	174	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q9Y3C8
A	175	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q9Y3C8

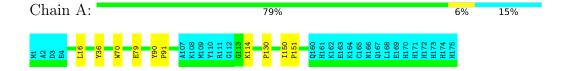


4 Residue-property plots (i)

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.

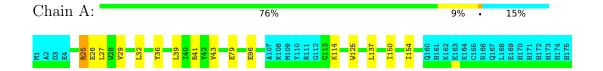
• Molecule 1: Ufm1-conjugating enzyme 1



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

The representative model is number 15. Colouring as in section 4.1 above.

• Molecule 1: Ufm1-conjugating enzyme 1





5 Refinement protocol and experimental data overview (i)



The models were refined using the following method: molecular dynamics, simulated annealing, distance geometry, torsion angle dynamics.

Of the 100 calculated structures, 20 were deposited, based on the following criterion: target function.

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

Software name	Classification	Version
CNS	refinement	1.1
CYANA	refinement	2.1
CYANA	structure solution	2.1

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)	2ko7_nmr.cif
Number of chemical shift lists	1
Total number of shifts	1969
Number of shifts mapped to atoms	1180
Number of unparsed shifts	260
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	529
Assignment completeness (well-defined parts)	55%

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



6 Model quality (i)

6.1 Standard geometry (i)

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

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

6.2 Too-close contacts (i)

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	1225	1227	1224	11±4
All	All	24500	24540	24480	226

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 5.

5 of 133 unique clashes are listed below, sorted by their clash magnitude.

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	$\mathbf{Distance}(\mathbf{\mathring{A}})$	Models	
Atom-1	Atom-2	Clash(A)	Distance(A)	Worst	Total
1:A:96:GLU:HB2	1:A:114:LYS:HD3	0.81	1.51	15	2
1:A:65:TRP:HB2	1:A:84:PHE:HB2	0.80	1.53	3	2
1:A:16:LEU:HD21	1:A:35:GLU:HB3	0.78	1.54	14	5
1:A:102:LEU:HA	1:A:105:LYS:HD3	0.66	1.67	4	1
1:A:16:LEU:O	1:A:131:LYS:HA	0.64	1.92	5	2

6.3 Torsion angles (i)

6.3.1 Protein backbone (i)

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



Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Perce	entiles
1	A	149/175 (85%)	142±2 (95±1%)	6±2 (4±1%)	1±1 (0±1%)	40	79
All	All	2980/3500 (85%)	2841 (95%)	127 (4%)	12 (0%)	40	79

All 5 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	130	PRO	5
1	A	74	ASP	4
1	A	103	ASP	1
1	A	19	ASN	1
1	A	97	ILE	1

6.3.2 Protein sidechains (i)

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles		
1	A	131/154 (85%)	126±2 (96±2%)	5±2 (4±2%)	38	84	
All	All	2620/3080 (85%)	2515 (96%)	105 (4%)	38	84	

5 of 43 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	36	TYR	8
1	A	79	GLU	7
1	A	41	ARG	6
1	A	32	LEU	6
1	A	53	TRP	5

6.3.3 RNA (i)

There are no RNA molecules in this entry.



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

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

6.5 Carbohydrates (i)

There are no carbohydrates in this entry.

6.6 Ligand geometry (i)

There are no ligands in this entry.

6.7 Other polymers (i)

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues (i)

There are no chain breaks in this entry.



7 Chemical shift validation (i)

The completeness of assignment taking into account all chemical shift lists is 55% for the well-defined parts and 51% for the entire structure.

7.1 Chemical shift list 1

File name: 2ko7 nmr.cif

Chemical shift list name: nef_chemical_shift_list_tbl

7.1.1 Bookkeeping (i)

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

Total number of shifts	1969
Number of shifts mapped to atoms	1180
Number of unparsed shifts	260
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	529
Number of shift outliers (ShiftChecker)	1

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

• Chemical shift has been reported more than once. First 5 (of 260) occurrences are reported below.

Shift ID	Chain	Res	Type	Atom	Shift Data			
	Chain	nes	Type		Value	Uncertainty	Ambiguity	
3	A	3	ASP	HB%	2.760	0.020	1	
9	A	4	GLU	HB%	2.030	0.020	1	
11	A	4	GLU	HG%	2.320	0.020	1	
19	A	5	ALA	HB%	1.470	0.020	1	
20	A	5	ALA	HB%	1.470	0.020	1	

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

• No matching atoms found in structure. First 5 (of 529) occurrences are reported below.

Chain Ros		Type	Atom		Shift Dat	a
Chain	rtes	Type	Atom	Value	Shift Dat Uncertainty	Ambiguity
A	161	HIS	HBy	2.88	0.02	2
A	167	GLN	HE2x	7.5	0.02	2



Continued from previous page...

Chain	Pos Type		Atom		Shift Dat	a
Chain	nes	Туре	Atom	Value	Shift Dat Uncertainty	Ambiguity
A	111	ARG	HGx	1.58	0.02	2
A	121	PHE	HBx	3.1	0.02	2
A	122	LYS	HE%	2.99	0.02	1

7.1.2 Chemical shift referencing (i)

The following table shows the suggested chemical shift referencing corrections.

Nucleus	# values	Correction \pm precision, ppm	Suggested action
$^{13}\mathrm{C}_{\alpha}$	164	-0.09 ± 0.14	None needed ($< 0.5 \text{ ppm}$)
$^{13}C_{\beta}$	154	0.25 ± 0.18	None needed (< 0.5 ppm)
¹³ C′	0		None (insufficient data)
^{15}N	152	0.66 ± 0.27	Should be applied

7.1.3 Completeness of resonance assignments (i)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the well-defined regions of the structure. The overall completeness is 55%, i.e. 1073 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 1939. 23 out of 25 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	$^{1}\mathrm{H}$	$^{13}\mathbf{C}$	$^{15}{ m N}$
Backbone	567/725 (78%)	279/288 (97%)	$149/298 \ (50\%)$	139/139 (100%)
Sidechain	376/1024 (37%)	45/601 (7%)	321/375~(86%)	10/48 (21%)
Aromatic	130/190 (68%)	65/98~(66%)	59/80 (74%)	6/12 (50%)
Overall	1073/1939 (55%)	389/987 (39%)	529/753 (70%)	155/199 (78%)

7.1.4 Statistically unusual chemical shifts 1

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

Mo	l Chain	Res	Type	Atom	Shift, ppm	Expected range, ppm	Z-score
1	A	22	PRO	HA	2.52	6.05 - 2.75	-5.7

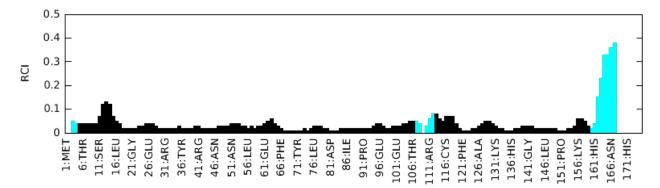
7.1.5 Random Coil Index (RCI) plots (i)

The image below reports random coil index values for the protein chains in the structure. The height of each bar gives a probability of a given residue to be disordered, as predicted from



the available chemical shifts and the amino acid sequence. A value above 0.2 is an indication of significant predicted disorder. The colour of the bar shows whether the residue is in the well-defined core (black) or in the ill-defined residue ranges (cyan), as described in section 2 on ensemble composition.

Random coil index (RCI) for chain A:





8 Distance restraints analysis

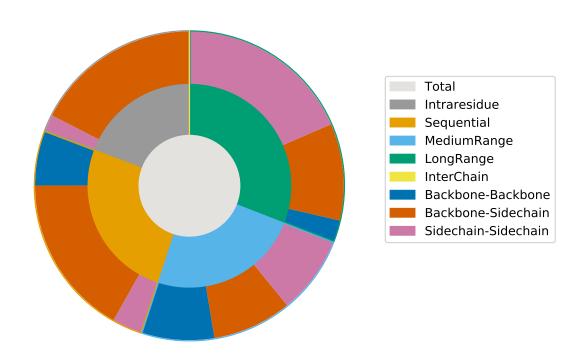
8.1 Distance restraints summary

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

Dogtroints type	$B-B^1(H^4)$	$\mathbf{B} ext{-}\mathbf{S}^2(\mathbf{H}^4)$	S-S ³ (H ⁴)	Total		
Restraints type	D-D ² (H ²)	D-S -(I 1-)	S-S*(I 1-)	$Total(H^4)$	RR^5	$\%^6$
Intraresidue (i-j =0)	3(0)	626(0)	63(0)	692(0)	4.1	19.2
Sequential (i-j =1)	207(0)	606(0)	114(0)	927(0)	5.6	25.8
Medium range ($ i-j >1$ and $ i-j <5$)	274(60)	299(0)	295(0)	868(60)	5.2	24.1
Long range (i-j ≥5)	82(16)	365(0)	665(0)	1112(16)	6.7	30.9
Inter chain	0(0)	0(0)	0(0)	0(0)	0.0	0.0
Total	566(76)	1896(0)	1137(0)	3599(76)	21.6	100.0

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

8.1.1 Pie chart: Distance restraints summary





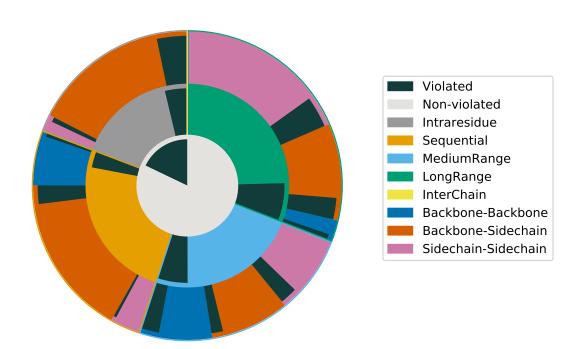
8.2 Distance violations summary

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

Doctroints true	$B-B^{1}(\%^{4})$	$B-S^2(\%^4)$	$S-S^3(\%^4)$	To	otal	
Restraints type	D-D (%)	D-3 (%)	S-S'(%)	$Total(\%^4)$	RR^5	$\%^6$
Intraresidue ($ i-j =0$)	0(0.0)	115(18.4)	19(30.2)	134(19.4)	0.8	20.8
Sequential (i-j =1)	17(8.2)	72(11.9)	11(9.6)	100(10.8)	0.6	15.5
Medium range ($ i-j >1$ and $ i-j <5$)	71(25.9)	45(15.1)	67(22.7)	183(21.1)	1.1	28.4
Long range (i-j ≥5)	23(28.0)	83(22.7)	121(18.2)	227(20.4)	1.4	35.2
Inter chain	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0.0	0.0
Total	111(19.6)	315(16.6)	218(19.2)	644(17.9)	3.9	100.0

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

8.2.1 Pie-chart: Distance violations summary





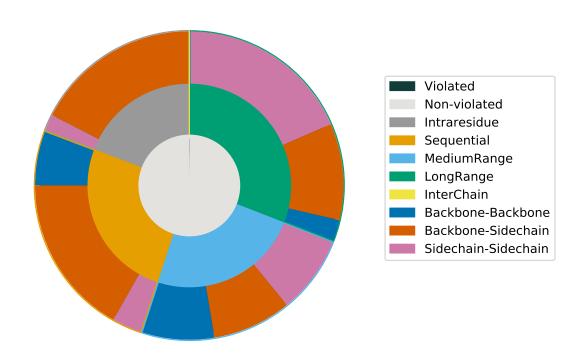
8.3 Consistent distance violations summary

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

Dogtrojeta temo	$B-B^{1}(\%^{4})$	$B-S^2(\%^4)$	$S-S^3(\%^4)$	To	otal	
Restraints type	D-D (%)	D-3 (%)	S-S'(%)	$Total(\%^4)$	RR^5	$\%^6$
Intraresidue (i-j =0)	0(0.0)	1(0.2)	0(0.0)	1(0.1)	0.0	20.0
Sequential (i-j =1)	0(0.0)	1(0.2)	0(0.0)	1(0.1)	0.0	20.0
Medium range ($ i-j >1$ and $ i-j <5$)	1(0.4)	1(0.3)	0(0.0)	2(0.2)	0.0	40.0
Long range (i-j ≥5)	0(0.0)	1(0.3)	0(0.0)	1(0.1)	0.0	20.0
Inter chain	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0.0	0.0
Total	1(0.2)	4(0.2)	0(0.0)	5(0.1)	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	80.9	0.2
0.2-0.5	13.1	0.5
0.5-1.0	8.9	1.0
1.0-2.0	4.6	2.0
2.0-5.0	1.8	3.92
5.0<	None	None

8.5 Distance violations in ensemble

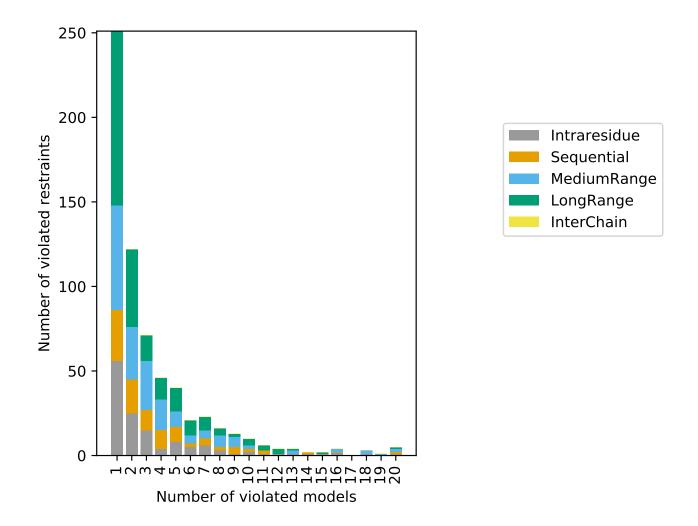
The restraints are grouped based on the number of violated models and listed here.

I		f violat		strair	nts	No. of violated models
IR^1	SQ^2	MR^3	$ LR^4 $	$ IC^5 $	Total	10. of violated models
56	30	62	103	0	251	1
25	20	31	46	0	122	2
15	12	29	15	0	71	3
4	11	18	13	0	46	4
8	9	9	14	0	40	5
5	2	5	9	0	21	6
6	4	5	8	0	23	7
3	2	7	4	0	16	8
1	4	6	2	0	13	9
2	2	2	4	0	10	10
1	2	0	3	0	6	11
1	0	0	3	0	4	12
1	0	2	1	0	4	13
1	1	0	0	0	2	14
1	0	0	1	0	2	15
2	0	2	0	0	4	16
0	0	0	0	0	0	17
1	0	2	0	0	3	18
0	0	1	0	0	1	19
1	1	2	1	0	5	20

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



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



558 intraresidue restraints, 827 sequential restraints, 685 medium range restraints,885 long range restraints and 0 inter chain restraints are not violated. There are totally 2955 restrains not violated in any of the models

8.6 Violations in each model

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

Model ID		N	o. of v	riolati	Mean (Å)	Max (Å)		
Model ID	IR^1	SQ^2	$ m MR^3$	LR^4	IC^5	Total	Mean (A)	Max (A)
1	26	15	32	28	0	101	0.29	3.19
2	21	16	33	32	0	102	0.35	3.63
3	27	16	26	35	0	104	0.18	1.6
4	26	22	30	40	0	118	0.25	2.76
5	23	15	34	40	0	112	0.17	1.61



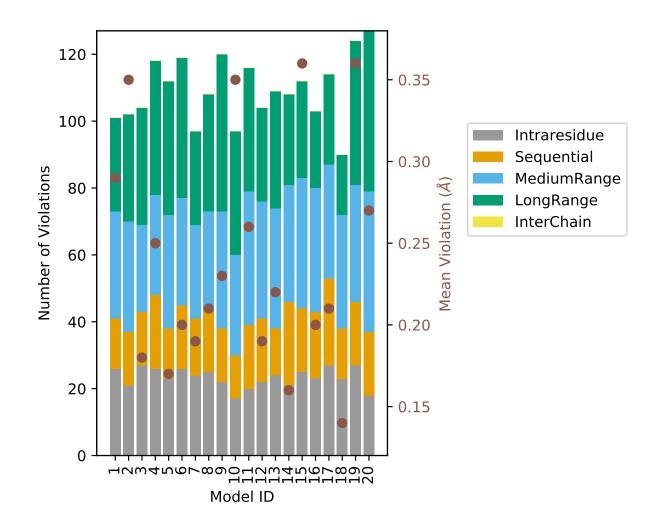
Continued from previous page...

Madal ID		N	o. of v	iolati	ons		M (8)	N/1 (Å)
Model ID	IR^1	SQ^2	MR^3	LR^4	IC^5	Total	Mean (Å)	Max (Å)
6	26	19	32	42	0	119	0.2	1.6
7	24	17	28	28	0	97	0.19	2.52
8	25	19	29	35	0	108	0.21	2.6
9	22	16	35	47	0	120	0.23	2.34
10	17	13	30	37	0	97	0.35	3.15
11	20	19	40	37	0	116	0.26	2.91
12	22	19	35	28	0	104	0.19	2.0
13	24	14	36	35	0	109	0.22	2.12
14	21	25	35	27	0	108	0.16	1.3
15	25	19	39	29	0	112	0.36	3.71
16	23	20	37	23	0	103	0.2	1.51
17	27	26	34	27	0	114	0.21	2.58
18	23	15	34	18	0	90	0.14	1.28
19	27	19	35	43	0	124	0.36	3.92
20	18	19	42	48	0	127	0.27	2.72

 $^{^1 \}rm intraresidue$ 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

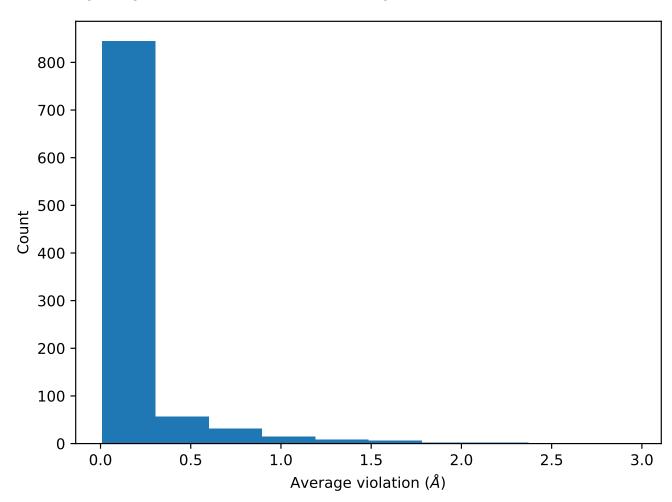




8.7 Most violated distance restraints

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)
(1,970)	1:A:28:TRP:HE1	1:A:62:GLY:HA2	20	0.82	1.26
(1,638)	1:A:58:SER:H	1:A:62:GLY:HA3	20	0.98	1.6
(1,3168)	1:A:40:ILE:H	1:A:40:ILE:HG12	20	0.06	0.15
(1,3119)	1:A:28:TRP:HB2	1:A:29:VAL:H	20	0.16	0.25
(1,3079)	1:A:21:GLY:HA2	1:A:23:ARG:HB2	20	0.43	0.76
(1,3621)	1:A:135:ALA:O	1:A:139:ALA:H	19	0.05	0.11



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,3617)	1:A:120:HIS:O	1:A:124:LEU:H	18	0.06	0.11
(1,3199)	1:A:51:ASN:HB2	1:A:51:ASN:HD22	18	0.28	0.36
(1,2022)	1:A:32:LEU:HB3	1:A:36:TYR:HE1	18	1.47	3.4
(1,474)	1:A:136:HIS:H	1:A:136:HIS:HB3	16	0.01	0.02
(1,3132)	1:A:30:GLN:HE22	1:A:34:GLU:HG2	16	0.87	1.27
(1,2021)	1:A:32:LEU:HB2	1:A:36:TYR:HE1	16	1.51	2.97
(1,197)	1:A:45:ASN:H	1:A:45:ASN:HB3	16	0.03	0.06
(1,3485)	1:A:127:ARG:H	1:A:127:ARG:HG2	15	0.1	0.19
(1,2091)	1:A:110:TYR:HE1	1:A:115:ILE:H	15	0.98	3.92
(1,828)	1:A:51:ASN:HB2	1:A:51:ASN:HD22	14	0.04	0.06
(1,155)	1:A:37:GLN:HB3	1:A:38:SER:H	14	0.04	0.09
(1,640)	1:A:59:ASN:H	1:A:62:GLY:HA3	13	0.19	0.47
(1,457)	1:A:131:LYS:H	1:A:131:LYS:HB3	13	0.02	0.03
(1,3319)	1:A:72:ILE:HG12	1:A:77:LYS:HE2	13	0.7	1.13
(1,3131)	1:A:30:GLN:HE21	1:A:34:GLU:HG2	13	0.37	0.74
(1,60)	1:A:23:ARG:H	1:A:23:ARG:HB3	12	0.02	0.05
(1,3399)	1:A:96:GLU:HB2	1:A:114:LYS:HB2	12	0.66	1.83
(1,3316)	1:A:71:TYR:HE1	1:A:151:PRO:HG2	12	1.68	3.63
(1,1925)	1:A:42:TYR:HE1	1:A:135:ALA:HA	12	0.64	1.23
(1,3476)	1:A:122:LYS:HB3	1:A:123:PRO:HD2	11	0.21	0.48
(1,3315)	1:A:71:TYR:HE1	1:A:151:PRO:HB2	11	1.96	2.99
(1,3308)	1:A:70:TRP:HB2	1:A:71:TYR:H	11	0.1	0.2
(1,2031)	1:A:71:TYR:HE1	1:A:151:PRO:HG2	11	1.62	3.44
(1,1924)	1:A:42:TYR:HD1	1:A:135:ALA:HA	11	0.43	0.84
(1,1582)	1:A:30:GLN:HB2	1:A:30:GLN:HE21	11	0.08	0.14
(1,1582)	1:A:30:GLN:HB3	1:A:30:GLN:HE21	11	0.08	0.14
(1,3625)	1:A:141:GLY:O	1:A:145:TRP:H	10	0.03	0.06
(1,3304)	1:A:69:CYS:HB2	1:A:70:TRP:H	10	0.18	0.3
(1,3252)	1:A:58:SER:HB2	1:A:59:ASN:H	10	0.27	0.39
(1,3183)	1:A:44:GLU:H	1:A:44:GLU:HG2	10	0.26	0.37
(1,3176)	1:A:41:ARG:HG2	1:A:45:ASN:HD22	10	0.81	1.42
(1,1991)	1:A:84:PHE:HB3	1:A:97:ILE:HA	10	0.03	0.06
(1,1949)	1:A:125:TRP:HH2	1:A:137:LEU:HA	10	0.03	0.07
(1,1779)	1:A:22:PRO:HA	1:A:28:TRP:HD1	10	0.03	0.08
(1,1317)	1:A:12:GLU:H	1:A:12:GLU:HB3	10	0.02	0.04
(1,1042)	1:A:72:ILE:HG13	1:A:78:TYR:H	10	0.05	0.09
(1,3629)	1:A:146:LEU:O	1:A:150:ILE:H	9	0.03	0.06
(1,3585)	1:A:36:TYR:O	1:A:40:ILE:H	9	0.03	0.05
(1,3583)	1:A:35:GLU:O	1:A:39:LEU:H	9	0.03	0.05
(1,3581)	1:A:34:GLU:O	1:A:38:SER:H	9	0.02	0.03
(1,3540)	1:A:160:GLN:HB2	1:A:161:HIS:H	9	0.11	0.24
(1,3524)	1:A:156:LYS:H	1:A:156:LYS:HG2	9	0.12	0.16



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,344)	1:A:83:GLU:HB3	1:A:84:PHE:H	9	0.03	0.07
(1,3088)	1:A:22:PRO:HB2	1:A:28:TRP:HZ2	9	0.23	0.34
(1,3078)	1:A:21:GLY:H	1:A:24:ASP:HB2	9	0.33	0.48
(1,2030)	1:A:71:TYR:HE1	1:A:73:HIS:HB3	9	1.09	2.03
(1,195)	1:A:44:GLU:HB2	1:A:45:ASN:H	9	0.13	0.18
(1,1382)	1:A:57:GLU:HB2	1:A:58:SER:H	9	0.03	0.09
(1,1076)	1:A:42:TYR:HE1	1:A:139:ALA:H	9	0.65	1.54
(1,780)	1:A:32:LEU:H	1:A:32:LEU:HG	8	0.03	0.06
(1,3568)	1:A:24:ASP:O	1:A:28:TRP:N	8	0.03	0.06
(1,3267)	1:A:60:LYS:HB2	1:A:61:GLU:H	8	0.36	0.48
(1,3254)	1:A:58:SER:HB2	1:A:62:GLY:HA3	8	0.63	0.86
(1,3190)	1:A:47:LYS:H	1:A:52:ASP:HB2	8	0.41	0.98
(1,3074)	1:A:20:ALA:H	1:A:91:PRO:HD2	8	0.41	0.51
(1,1936)	1:A:71:TYR:HE1	1:A:151:PRO:HG3	8	0.81	1.97
(1,1935)	1:A:150:ILE:HB	1:A:151:PRO:HD2	8	0.03	0.07
(1,1935)	1:A:150:ILE:HB	1:A:151:PRO:HD3	8	0.03	0.07
(1,1828)	1:A:54:PHE:HE1	1:A:56:LEU:HG	8	1.03	2.6
(1,1550)	1:A:12:GLU:H	1:A:12:GLU:HG2	8	0.03	0.07
(1,1470)	1:A:58:SER:HB3	1:A:62:GLY:HA3	8	0.62	0.74
(1,1414)	1:A:121:PHE:HA	1:A:124:LEU:H	8	0.03	0.05
(1,1369)	1:A:44:GLU:H	1:A:44:GLU:HB3	8	0.04	0.05
(1,1360)	1:A:41:ARG:HA	1:A:44:GLU:H	8	0.04	0.08
(1,1072)	1:A:133:GLY:H	1:A:136:HIS:HE1	8	0.03	0.06
(1,1054)	1:A:94:ALA:H	1:A:125:TRP:HZ2	8	0.02	0.04
(1,815)	1:A:45:ASN:HB2	1:A:45:ASN:HD22	7	0.03	0.06
(1,767)	1:A:25:ARG:H	1:A:25:ARG:HG2	7	0.02	0.06
(1,663)	1:A:83:GLU:H	1:A:98:ALA:H	7	0.04	0.15
(1,627)	1:A:46:ASN:HA	1:A:49:ALA:H	7	0.03	0.06
(1,610)	1:A:23:ARG:H	1:A:88:ILE:HA	7	0.05	0.07
(1,579)	1:A:164:LYS:HB3	1:A:165:CYS:H	7	0.03	0.06
(1,554)	1:A:156:LYS:H	1:A:156:LYS:HB3	7	0.02	0.02
(1,3611)	1:A:69:CYS:O	1:A:80:PHE:H	7	0.03	0.06
(1,3607)	1:A:53:TRP:O	1:A:70:TRP:H	7	0.04	0.09
(1,3565)	1:A:7:ARG:O	1:A:11:SER:H	7	0.02	0.04
(1,3545)	1:A:163:GLU:HB2	1:A:164:LYS:H	7	0.12	0.27
(1,3065)	1:A:19:ASN:HB3	1:A:91:PRO:HB2	7	0.29	0.98
(1,2763)	1:A:76:LEU:HD21	1:A:163:GLU:HA	7	0.04	0.07
(1,2763)	1:A:76:LEU:HD22	1:A:163:GLU:HA	7	0.04	0.07
(1,2763)	1:A:76:LEU:HD23	1:A:163:GLU:HA	7	0.04	0.07
(1,2683)	1:A:80:PHE:HE1	1:A:146:LEU:HD21	7	0.36	0.65
(1,2683)	1:A:80:PHE:HE1	1:A:146:LEU:HD22	7	0.36	0.65
(1,2683)	1:A:80:PHE:HE1	1:A:146:LEU:HD23	7	0.36	0.65



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,262)	1:A:61:GLU:H	1:A:61:GLU:HB3	7	0.02	0.04
(1,2600)	1:A:129:VAL:HG11	1:A:130:PRO:HA	7	0.03	0.06
(1,2600)	1:A:129:VAL:HG12	1:A:130:PRO:HA	7	0.03	0.06
(1,2600)	1:A:129:VAL:HG13	1:A:130:PRO:HA	7	0.03	0.06
(1,260)	1:A:60:LYS:HB3	1:A:61:GLU:H	7	0.07	0.13
(1,1864)	1:A:76:LEU:HG	1:A:78:TYR:HE1	7	0.54	1.14
(1,1600)	1:A:37:GLN:HA	1:A:37:GLN:HG3	7	0.02	0.05
(1,1469)	1:A:58:SER:HB2	1:A:62:GLY:HA3	7	0.56	0.71
(1,1343)	1:A:34:GLU:HA	1:A:37:GLN:HB3	7	0.04	0.07
(1,126)	1:A:34:GLU:H	1:A:34:GLU:HB3	7	0.02	0.02
(1,1075)	1:A:53:TRP:HZ2	1:A:139:ALA:H	7	0.06	0.08
(1,846)	1:A:61:GLU:H	1:A:61:GLU:HG3	6	0.03	0.08
(1,759)	1:A:19:ASN:HB3	1:A:19:ASN:HD22	6	0.04	0.06
(1,697)	1:A:133:GLY:HA2	1:A:136:HIS:H	6	0.11	0.22
(1,652)	1:A:56:LEU:HA	1:A:66:PHE:H	6	0.05	0.11
(1,559)	1:A:158:VAL:HB	1:A:159:ILE:H	6	0.04	0.09
(1,3589)	1:A:39:LEU:O	1:A:43:VAL:H	6	0.04	0.06
(1,3497)	1:A:135:ALA:HA	1:A:138:MET:HB2	6	0.2	0.29
(1,3474)	1:A:122:LYS:HA	1:A:122:LYS:HD2	6	0.07	0.14
(1,3398)	1:A:96:GLU:H	1:A:96:GLU:HG2	6	0.13	0.39
(1,3184)	1:A:44:GLU:HA	1:A:44:GLU:HG2	6	0.26	0.31
(1,3073)	1:A:20:ALA:H	1:A:91:PRO:HG2	6	0.5	0.96
(1,2977)	1:A:110:TYR:HE1	1:A:115:ILE:HG21	6	0.57	1.85
(1,2977)	1:A:110:TYR:HE1	1:A:115:ILE:HG22	6	0.57	1.85
(1,2977)	1:A:110:TYR:HE1	1:A:115:ILE:HG23	6	0.57	1.85
(1,2725)	1:A:71:TYR:HD1	1:A:154:ILE:HD11	6	0.41	0.82
(1,2725)	1:A:71:TYR:HD1	1:A:154:ILE:HD12	6	0.41	0.82
(1,2725)	1:A:71:TYR:HD1	1:A:154:ILE:HD13	6	0.41	0.82
(1,2358)	1:A:39:LEU:HD21	1:A:65:TRP:HZ3	6	0.02	0.04
(1,2358)	1:A:39:LEU:HD22	1:A:65:TRP:HZ3	6	0.02	0.04
(1,2358)	1:A:39:LEU:HD23	1:A:65:TRP:HZ3	6	0.02	0.04
(1,2044)	1:A:110:TYR:HE1	1:A:116:CYS:HA	6	1.43	2.52
(1,1934)	1:A:71:TYR:HE1	1:A:147:ALA:HA	6	1.31	2.67
(1,190)	1:A:41:ARG:HA	1:A:45:ASN:H	6	0.05	0.11
(1,1796)	1:A:32:LEU:HG	1:A:36:TYR:HE1	6	0.56	1.15
(1,1328)	1:A:25:ARG:HB3	1:A:26:GLU:H	6	0.05	0.1
(1,1084)	1:A:53:TRP:HE1	1:A:71:TYR:HE1	6	0.35	0.75
(1,1003)	1:A:56:LEU:H	1:A:65:TRP:HZ3	6	0.02	0.03
(1,967)	1:A:20:ALA:H	1:A:91:PRO:HD2	5	0.04	0.08
(1,891)	1:A:105:LYS:H	1:A:105:LYS:HG3	5	0.09	0.15
(1,890)	1:A:105:LYS:H	1:A:105:LYS:HG2	5	0.09	0.19
(1,771)	1:A:25:ARG:HG3	1:A:26:GLU:H	5	0.04	0.06



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,760)	1:A:19:ASN:HB2	1:A:19:ASN:HD22	5	0.01	0.02
(1,613)	1:A:23:ARG:HA	1:A:25:ARG:H	5	0.04	0.06
(1,563)	1:A:159:ILE:HB	1:A:160:GLN:H	5	0.06	0.08
(1,387)	1:A:103:ASP:HA	1:A:104:GLY:H	5	0.18	0.18
(1,3622)	1:A:135:ALA:O	1:A:139:ALA:N	5	0.03	0.06
(1,3609)	1:A:73:HIS:H	1:A:76:LEU:O	5	0.03	0.07
(1,3603)	1:A:55:ARG:O	1:A:68:LYS:H	5	0.03	0.05
(1,3591)	1:A:40:ILE:O	1:A:44:GLU:H	5	0.03	0.04
(1,3577)	1:A:31:ARG:O	1:A:35:GLU:H	5	0.03	0.07
(1,3575)	1:A:30:GLN:O	1:A:34:GLU:H	5	0.03	0.05
(1,3549)	1:A:164:LYS:HB2	1:A:165:CYS:H	5	0.31	0.45
(1,3487)	1:A:127:ARG:HB2	1:A:128:ASN:H	5	0.07	0.17
(1,3470)	1:A:122:LYS:H	1:A:122:LYS:HG2	5	0.22	0.23
(1,3454)	1:A:114:LYS:H	1:A:114:LYS:HG2	5	0.18	0.32
(1,333)	1:A:81:ASP:H	1:A:81:ASP:HB2	5	0.07	0.12
(1,3214)	1:A:56:LEU:HA	1:A:67:GLY:HA2	5	0.18	0.31
(1,3200)	1:A:52:ASP:H	1:A:52:ASP:HB2	5	0.21	0.28
(1,3016)	1:A:125:TRP:HH2	1:A:133:GLY:HA3	5	0.23	0.35
(1,2996)	1:A:68:LYS:HD3	1:A:70:TRP:HZ2	5	0.03	0.07
(1,2923)	1:A:18:THR:HG21	1:A:27:LEU:HD11	5	0.03	0.06
(1,2923)	1:A:18:THR:HG21	1:A:27:LEU:HD12	5	0.03	0.06
(1,2923)	1:A:18:THR:HG21	1:A:27:LEU:HD13	5	0.03	0.06
(1,2923)	1:A:18:THR:HG22	1:A:27:LEU:HD11	5	0.03	0.06
(1,2923)	1:A:18:THR:HG22	1:A:27:LEU:HD12	5	0.03	0.06
(1,2923)	1:A:18:THR:HG22	1:A:27:LEU:HD13	5	0.03	0.06
(1,2923)	1:A:18:THR:HG23	1:A:27:LEU:HD11	5	0.03	0.06
(1,2923)	1:A:18:THR:HG23	1:A:27:LEU:HD12	5	0.03	0.06
(1,2923)	1:A:18:THR:HG23	1:A:27:LEU:HD13	5	0.03	0.06
(1,29)	1:A:10:VAL:HA	1:A:11:SER:H	5	0.03	0.04
(1,279)	1:A:65:TRP:HB2	1:A:66:PHE:H	5	0.02	0.03
(1,2732)	1:A:78:TYR:HB3	1:A:154:ILE:HD11	5	0.02	0.04
(1,2732)	1:A:78:TYR:HB3	1:A:154:ILE:HD12	5	0.02	0.04
(1,2732)	1:A:78:TYR:HB3	1:A:154:ILE:HD13	5	0.02	0.04
(1,2712)	1:A:106:THR:HB	1:A:153:LEU:HD11	5	0.04	0.06
(1,2712)	1:A:106:THR:HB	1:A:153:LEU:HD12	5	0.04	0.06
(1,2712)	1:A:106:THR:HB	1:A:153:LEU:HD13	5	0.04	0.06
(1,252)	1:A:58:SER:HB2	1:A:59:ASN:H	5	0.03	0.06
(1,2409)	1:A:32:LEU:HD11	1:A:61:GLU:HA	5	0.04	0.06
(1,2409)	1:A:32:LEU:HD12	1:A:61:GLU:HA	5	0.04	0.06
(1,2409)	1:A:32:LEU:HD13	1:A:61:GLU:HA	5	0.04	0.06
(1,2387)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:47:LYS:HE2	5	0.03	0.06
(1,2387)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:47:LYS:HE3	5	0.03	0.06



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,2387)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:47:LYS:HE2	5	0.03	0.06
(1,2387)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:47:LYS:HE3	5	0.03	0.06
(1,2387)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:47:LYS:HE2	5	0.03	0.06
(1,2387)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:47:LYS:HE3	5	0.03	0.06
(1,2331)	1:A:26:GLU:HG2	1:A:27:LEU:HD21	5	0.05	0.06
(1,2331)	1:A:26:GLU:HG2	1:A:27:LEU:HD22	5	0.05	0.06
(1,2331)	1:A:26:GLU:HG2	1:A:27:LEU:HD23	5	0.05	0.06
(1,2331)	1:A:26:GLU:HG3	1:A:27:LEU:HD21	5	0.05	0.06
(1,2331)	1:A:26:GLU:HG3	1:A:27:LEU:HD22	5	0.05	0.06
(1,2331)	1:A:26:GLU:HG3	1:A:27:LEU:HD23	5	0.05	0.06
(1,2073)	1:A:32:LEU:HB2	1:A:36:TYR:HD1	5	0.67	1.05
(1,2040)	1:A:53:TRP:HH2	1:A:138:MET:HA	5	0.02	0.03
(1,1823)	1:A:56:LEU:HG	1:A:65:TRP:HE3	5	0.05	0.11
(1,1786)	1:A:23:ARG:HB2	1:A:88:ILE:HA	5	0.05	0.11
(1,1090)	1:A:71:TYR:H	1:A:80:PHE:HE1	5	0.21	0.36
(1,1079)	1:A:53:TRP:HH2	1:A:143:GLY:H	5	0.02	0.04
(1,1035)	1:A:53:TRP:HE3	1:A:70:TRP:H	5	0.05	0.09
(1,1000)	1:A:53:TRP:H	1:A:53:TRP:HD1	5	0.09	0.17
(1,840)	1:A:57:GLU:HG3	1:A:58:SER:H	4	0.03	0.04
(1,435)	1:A:123:PRO:HA	1:A:125:TRP:H	4	0.03	0.06
(1,403)	1:A:113:GLY:H	1:A:114:LYS:H	4	0.06	0.09
(1,3601)	1:A:67:GLY:H	1:A:82:ILE:O	4	0.02	0.03
(1,3599)	1:A:57:GLU:O	1:A:66:PHE:H	4	0.03	0.04
(1,3595)	1:A:43:VAL:O	1:A:47:LYS:H	4	0.03	0.05
(1,3574)	1:A:28:TRP:O	1:A:32:LEU:N	4	0.02	0.02
(1,3559)	1:A:4:GLU:O	1:A:8:ARG:H	4	0.04	0.07
(1,3548)	1:A:164:LYS:HA	1:A:164:LYS:HG2	4	0.07	0.11
(1,3488)	1:A:127:ARG:HB2	1:A:128:ASN:HD22	4	0.21	0.45
(1,3448)	1:A:110:TYR:HD1	1:A:114:LYS:HD2	4	1.44	3.47
(1,3312)	1:A:70:TRP:HD1	1:A:77:LYS:HD2	4	0.35	0.55
(1,3294)	1:A:68:LYS:HB2	1:A:70:TRP:HZ2	4	0.6	0.97
(1,3292)	1:A:68:LYS:HA	1:A:68:LYS:HD2	4	0.17	0.19
(1,3279)	1:A:64:ARG:HB2	1:A:64:ARG:HD2	4	0.24	0.59
(1,3249)	1:A:57:GLU:HG2	1:A:58:SER:H	4	0.1	0.14
(1,3215)	1:A:56:LEU:HB2	1:A:57:GLU:H	4	0.05	0.08
(1,3197)	1:A:51:ASN:H	1:A:52:ASP:HB2	4	0.65	1.14
(1,3186)	1:A:44:GLU:HG2	1:A:48:ASN:HD21	4	0.25	0.5
(1,3180)	1:A:41:ARG:HD2	1:A:45:ASN:HD22	4	0.17	0.2
(1,3177)	1:A:41:ARG:HD2	1:A:44:GLU:H	4	0.38	0.69
(1,3175)	1:A:41:ARG:HG2	1:A:45:ASN:HD21	4	0.48	0.99
(1,3160)	1:A:35:GLU:HB2	1:A:36:TYR:H	4	0.05	0.07
(1,3154)	1:A:33:LYS:HG2	1:A:36:TYR:HD1	4	0.18	0.32



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,3109)	1:A:24:ASP:HB2	1:A:28:TRP:H	4	0.08	0.18
(1,3072)	1:A:20:ALA:H	1:A:91:PRO:HB2	4	0.36	0.42
(1,3060)	1:A:19:ASN:HA	1:A:91:PRO:HB2	4	0.13	0.31
(1,2985)	1:A:28:TRP:HZ2	1:A:63:THR:HB	4	0.02	0.04
(1,2841)	1:A:94:ALA:HB1	1:A:121:PHE:HE1	4	0.23	0.34
(1,2841)	1:A:94:ALA:HB2	1:A:121:PHE:HE1	4	0.23	0.34
(1,2841)	1:A:94:ALA:HB3	1:A:121:PHE:HE1	4	0.23	0.34
(1,2798)	1:A:109:MET:HE1	1:A:115:ILE:HG21	4	0.02	0.04
(1,2798)	1:A:109:MET:HE1	1:A:115:ILE:HG22	4	0.02	0.04
(1,2798)	1:A:109:MET:HE1	1:A:115:ILE:HG23	4	0.02	0.04
(1,2798)	1:A:109:MET:HE2	1:A:115:ILE:HG21	4	0.02	0.04
(1,2798)	1:A:109:MET:HE2	1:A:115:ILE:HG22	4	0.02	0.04
(1,2798)	1:A:109:MET:HE2	1:A:115:ILE:HG23	4	0.02	0.04
(1,2798)	1:A:109:MET:HE3	1:A:115:ILE:HG21	4	0.02	0.04
(1,2798)	1:A:109:MET:HE3	1:A:115:ILE:HG22	4	0.02	0.04
(1,2798)	1:A:109:MET:HE3	1:A:115:ILE:HG23	4	0.02	0.04
(1,2727)	1:A:71:TYR:HE1	1:A:154:ILE:HD11	4	0.52	0.98
(1,2727)	1:A:71:TYR:HE1	1:A:154:ILE:HD12	4	0.52	0.98
(1,2727)	1:A:71:TYR:HE1	1:A:154:ILE:HD13	4	0.52	0.98
(1,2513)	1:A:97:ILE:HD11	1:A:142:LEU:HB3	4	0.01	0.02
(1,2513)	1:A:97:ILE:HD12	1:A:142:LEU:HB3	4	0.01	0.02
(1,2513)	1:A:97:ILE:HD13	1:A:142:LEU:HB3	4	0.01	0.02
(1,2426)	1:A:72:ILE:HG21	1:A:75:LEU:H	4	0.04	0.07
(1,2426)	1:A:72:ILE:HG22	1:A:75:LEU:H	4	0.04	0.07
(1,2426)	1:A:72:ILE:HG23	1:A:75:LEU:H	4	0.04	0.07
(1,2086)	1:A:70:TRP:HD1	1:A:72:ILE:HG12	4	0.03	0.05
(1,2058)	1:A:64:ARG:HD3	1:A:66:PHE:HE1	4	1.28	3.71
(1,1808)	1:A:41:ARG:HD3	1:A:45:ASN:HD22	4	0.05	0.08
(1,1772)	1:A:15:VAL:HB	1:A:131:LYS:HB3	4	0.05	0.05
(1,1438)	1:A:162:LYS:HA	1:A:163:GLU:H	4	0.07	0.08
(1,143)	1:A:36:TYR:H	1:A:36:TYR:HB3	4	0.03	0.04
(1,1386)	1:A:74:ASP:HB3	1:A:75:LEU:H	4	0.02	0.03
(1,1257)	1:A:70:TRP:H	1:A:146:LEU:HD11	4	0.04	0.06
(1,1257)	1:A:70:TRP:H	1:A:146:LEU:HD12	4	0.04	0.06
(1,1257)	1:A:70:TRP:H	1:A:146:LEU:HD13	4	0.04	0.06
(1,1082)	1:A:46:ASN:HD21	1:A:53:TRP:HE1	4	0.04	0.11
(1,1069)	1:A:127:ARG:HB2	1:A:128:ASN:HD21	4	0.04	0.08
(1,1041)	1:A:76:LEU:H	1:A:78:TYR:HE1	4	0.15	0.22
(1,1024)	1:A:63:THR:HA	1:A:65:TRP:HE1	4	0.02	0.02
(1,1)	1:A:3:ASP:HA	1:A:4:GLU:H	4	0.11	0.17
(1,990)	1:A:12:GLU:HB2	1:A:45:ASN:HD22	3	0.02	0.03
(1,86)	1:A:27:LEU:HB3	1:A:28:TRP:H	3	0.04	0.07



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,845)	1:A:61:GLU:H	1:A:61:GLU:HG2	3	0.05	0.08
(1,829)	1:A:51:ASN:HB3	1:A:51:ASN:HD22	3	0.05	0.06
(1,793)	1:A:37:GLN:HG3	1:A:37:GLN:HE22	3	0.04	0.04
(1,646)	1:A:59:ASN:H	1:A:64:ARG:H	3	0.02	0.04
(1,633)	1:A:47:LYS:HA	1:A:51:ASN:H	3	0.04	0.06
(1,632)	1:A:49:ALA:HA	1:A:51:ASN:H	3	0.02	0.04
(1,608)	1:A:21:GLY:H	1:A:24:ASP:HB2	3	0.02	0.03
(1,574)	1:A:163:GLU:H	1:A:163:GLU:HB3	3	0.03	0.05
(1,384)	1:A:103:ASP:H	1:A:103:ASP:HB2	3	0.04	0.06
(1,3632)	1:A:149:GLU:O	1:A:153:LEU:N	3	0.03	0.04
(1,3631)	1:A:149:GLU:O	1:A:153:LEU:H	3	0.05	0.1
(1,3608)	1:A:53:TRP:O	1:A:70:TRP:N	3	0.02	0.05
(1,3597)	1:A:44:GLU:O	1:A:48:ASN:H	3	0.01	0.02
(1,3584)	1:A:35:GLU:O	1:A:39:LEU:N	3	0.02	0.02
(1,3579)	1:A:32:LEU:O	1:A:36:TYR:H	3	0.02	0.03
(1,3569)	1:A:25:ARG:O	1:A:29:VAL:H	3	0.02	0.03
(1,3563)	1:A:6:THR:O	1:A:10:VAL:H	3	0.03	0.06
(1,3561)	1:A:5:ALA:O	1:A:9:VAL:H	3	0.01	0.02
(1,3550)	1:A:164:LYS:HG2	1:A:165:CYS:H	3	0.16	0.25
(1,3546)	1:A:164:LYS:H	1:A:164:LYS:HB2	3	0.13	0.2
(1,3543)	1:A:161:HIS:HB2	1:A:162:LYS:H	3	0.16	0.25
(1,3453)	1:A:114:LYS:H	1:A:114:LYS:HB2	3	0.16	0.35
(1,3449)	1:A:110:TYR:HE1	1:A:114:LYS:HB2	3	0.5	1.2
(1,3447)	1:A:110:TYR:HD1	1:A:114:LYS:HG2	3	0.73	1.19
(1,3433)	1:A:103:ASP:H	1:A:103:ASP:HB2	3	0.28	0.3
(1,343)	1:A:83:GLU:HB2	1:A:84:PHE:H	3	0.11	0.13
(1,3367)	1:A:87:PRO:HG2	1:A:90:TYR:H	3	0.12	0.17
(1,3284)	1:A:64:ARG:HD2	1:A:66:PHE:HE1	3	0.98	2.4
(1,3282)	1:A:64:ARG:HG2	1:A:66:PHE:HE1	3	0.81	1.89
(1,3280)	1:A:64:ARG:HB3	1:A:64:ARG:HD2	3	0.08	0.14
(1,3251)	1:A:58:SER:H	1:A:58:SER:HB2	3	0.03	0.04
(1,3188)	1:A:46:ASN:HA	1:A:51:ASN:HB2	3	0.32	0.66
(1,3187)	1:A:44:GLU:HG2	1:A:48:ASN:HD22	3	0.53	0.79
(1,3170)	1:A:40:ILE:HG21	1:A:44:GLU:HG2	3	0.19	0.26
(1,3170)	1:A:40:ILE:HG22	1:A:44:GLU:HG2	3	0.19	0.26
(1,3170)	1:A:40:ILE:HG23	1:A:44:GLU:HG2	3	0.19	0.26
(1,3150)	1:A:33:LYS:H	1:A:34:GLU:HG2	3	0.28	0.43
(1,3149)	1:A:33:LYS:H	1:A:33:LYS:HG2	3	0.08	0.15
(1,3053)	1:A:15:VAL:HG11	1:A:131:LYS:HD2	3	0.24	0.47
(1,3053)	1:A:15:VAL:HG12	1:A:131:LYS:HD2	3	0.24	0.47
(1,3053)	1:A:15:VAL:HG13	1:A:131:LYS:HD2	3	0.24	0.47
(1,3042)	1:A:7:ARG:HG2	1:A:8:ARG:H	3	0.62	0.77



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,2995)	1:A:68:LYS:HD2	1:A:70:TRP:HZ2	3	0.06	0.14
(1,293)	1:A:69:CYS:HB2	1:A:70:TRP:H	3	0.03	0.05
(1,2816)	1:A:84:PHE:HZ	1:A:134:LEU:HD21	3	0.03	0.04
(1,2816)	1:A:84:PHE:HZ	1:A:134:LEU:HD22	3	0.03	0.04
(1,2816)	1:A:84:PHE:HZ	1:A:134:LEU:HD23	3	0.03	0.04
(1,2806)	1:A:109:MET:HE1	1:A:145:TRP:HZ2	3	0.03	0.05
(1,2806)	1:A:109:MET:HE2	1:A:145:TRP:HZ2	3	0.03	0.05
(1,2806)	1:A:109:MET:HE3	1:A:145:TRP:HZ2	3	0.03	0.05
(1,2505)	1:A:94:ALA:HB1	1:A:137:LEU:HB3	3	0.02	0.03
(1,2505)	1:A:94:ALA:HB2	1:A:137:LEU:HB3	3	0.02	0.03
(1,2505)	1:A:94:ALA:HB3	1:A:137:LEU:HB3	3	0.02	0.03
(1,2297)	1:A:16:LEU:HD21	1:A:35:GLU:HA	3	0.02	0.03
(1,2297)	1:A:16:LEU:HD22	1:A:35:GLU:HA	3	0.02	0.03
(1,2297)	1:A:16:LEU:HD23	1:A:35:GLU:HA	3	0.02	0.03
(1,2141)	1:A:56:LEU:HD11	1:A:57:GLU:H	3	0.04	0.07
(1,2141)	1:A:56:LEU:HD12	1:A:57:GLU:H	3	0.04	0.07
(1,2141)	1:A:56:LEU:HD13	1:A:57:GLU:H	3	0.04	0.07
(1,202)	1:A:45:ASN:HB3	1:A:46:ASN:H	3	0.03	0.04
(1,1967)	1:A:70:TRP:HD1	1:A:77:LYS:HE3	3	0.03	0.05
(1,1953)	1:A:124:LEU:HA	1:A:127:ARG:HG3	3	0.04	0.05
(1,1939)	1:A:10:VAL:HA	1:A:13:ILE:HG13	3	0.04	0.07
(1,1912)	1:A:124:LEU:HG	1:A:132:PHE:HE1	3	0.35	0.7
(1,1906)	1:A:122:LYS:HB2	1:A:123:PRO:HD3	3	0.05	0.06
(1,1905)	1:A:122:LYS:HB3	1:A:123:PRO:HD2	3	0.03	0.04
(1,1874)	1:A:81:ASP:HB2	1:A:83:GLU:HG2	3	0.02	0.03
(1,1874)	1:A:81:ASP:HB2	1:A:83:GLU:HG3	3	0.02	0.03
(1,1867)	1:A:70:TRP:HD1	1:A:79:GLU:HG2	3	0.05	0.08
(1,1867)	1:A:70:TRP:HD1	1:A:79:GLU:HG3	3	0.05	0.08
(1,1858)	1:A:73:HIS:HB2	1:A:78:TYR:HE1	3	1.21	1.57
(1,1820)	1:A:47:LYS:HA	1:A:52:ASP:HB3	3	0.05	0.05
(1,1807)	1:A:41:ARG:HD2	1:A:45:ASN:HD22	3	0.03	0.05
(1,1795)	1:A:28:TRP:HD1	1:A:32:LEU:HG	3	0.06	0.1
(1,1633)	1:A:61:GLU:HA	1:A:61:GLU:HG3	3	0.02	0.02
(1,1614)	1:A:47:LYS:HA	1:A:47:LYS:HG3	3	0.02	0.03
(1,1482)	1:A:74:ASP:HB2	1:A:76:LEU:H	3	0.04	0.05
(1,1422)	1:A:127:ARG:H	1:A:127:ARG:HB3	3	0.04	0.06
(1,137)	1:A:32:LEU:HA	1:A:36:TYR:H	3	0.04	0.07
(1,1339)	1:A:32:LEU:HB2	1:A:33:LYS:H	3	0.05	0.06
(1,1337)	1:A:32:LEU:H	1:A:32:LEU:HB3	3	0.04	0.06
(1,1336)	1:A:29:VAL:HA	1:A:32:LEU:HB3	3	0.01	0.02
(1,129)	1:A:32:LEU:HA	1:A:35:GLU:H	3	0.02	0.03
(1,1066)	1:A:124:LEU:HA	1:A:128:ASN:HD21	3	0.04	0.07



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,1005)	1:A:57:GLU:H	1:A:65:TRP:HE3	3	0.02	0.02
(1,998)	1:A:44:GLU:HG3	1:A:48:ASN:HD21	2	0.06	0.06
(1,996)	1:A:45:ASN:HA	1:A:48:ASN:HD21	2	0.04	0.05
(1,993)	1:A:46:ASN:HD21	1:A:51:ASN:HD22	2	0.04	0.05
(1,973)	1:A:22:PRO:HA	1:A:28:TRP:HE1	2	0.01	0.02
(1,965)	1:A:20:ALA:H	1:A:28:TRP:HE3	2	0.03	0.05
(1,90)	1:A:26:GLU:HA	1:A:29:VAL:H	2	0.04	0.04
(1,764)	1:A:23:ARG:H	1:A:23:ARG:HG3	2	0.03	0.06
(1,752)	1:A:13:ILE:H	1:A:13:ILE:HG12	2	0.01	0.02
(1,673)	1:A:64:ARG:HA	1:A:86:ILE:H	2	0.03	0.04
(1,66)	1:A:24:ASP:H	1:A:25:ARG:H	2	0.01	0.01
(1,651)	1:A:65:TRP:H	1:A:85:ASP:HA	2	0.01	0.02
(1,648)	1:A:62:GLY:HA3	1:A:64:ARG:H	2	0.14	0.16
(1,609)	1:A:21:GLY:H	1:A:24:ASP:HB3	2	0.07	0.07
(1,580)	1:A:165:CYS:H	1:A:166:ASN:H	2	0.04	0.07
(1,578)	1:A:164:LYS:HB2	1:A:165:CYS:H	2	0.07	0.07
(1,569)	1:A:161:HIS:HA	1:A:162:LYS:H	2	0.03	0.04
(1,418)	1:A:119:ASP:H	1:A:119:ASP:HB2	2	0.01	0.02
(1,396)	1:A:106:THR:HA	1:A:107:ALA:H	2	0.04	0.05
(1,3633)	1:A:150:ILE:O	1:A:154:ILE:H	2	0.03	0.04
(1,3615)	1:A:83:GLU:O	1:A:98:ALA:H	2	0.06	0.06
(1,3613)	1:A:65:TRP:O	1:A:84:PHE:H	2	0.01	0.01
(1,3605)	1:A:69:CYS:H	1:A:80:PHE:O	2	0.01	0.02
(1,3592)	1:A:40:ILE:O	1:A:44:GLU:N	2	0.02	0.03
(1,3567)	1:A:24:ASP:O	1:A:28:TRP:H	2	0.03	0.04
(1,3544)	1:A:163:GLU:H	1:A:163:GLU:HB2	2	0.08	0.12
(1,353)	1:A:85:ASP:HB2	1:A:86:ILE:H	2	0.07	0.1
(1,3475)	1:A:122:LYS:HB2	1:A:123:PRO:HD2	2	0.28	0.37
(1,3463)	1:A:118:THR:HG21	1:A:121:PHE:HB2	2	0.01	0.02
(1,3463)	1:A:118:THR:HG22	1:A:121:PHE:HB2	2	0.01	0.02
(1,3463)	1:A:118:THR:HG23	1:A:121:PHE:HB2	2	0.01	0.02
(1,3451)	1:A:111:ARG:HA	1:A:111:ARG:HG2	2	0.21	0.28
(1,3434)	1:A:105:LYS:H	1:A:105:LYS:HB2	2	0.21	0.25
(1,3400)	1:A:96:GLU:HB2	1:A:114:LYS:HG2	2	0.85	0.91
(1,3375)	1:A:88:ILE:H	1:A:88:ILE:HG12	2	0.25	0.26
(1,3356)	1:A:84:PHE:HB2	1:A:98:ALA:H	2	0.06	0.08
(1,3353)	1:A:84:PHE:HB2	1:A:85:ASP:H	2	0.07	0.1
(1,3333)	1:A:77:LYS:HB2	1:A:77:LYS:HE2	2	0.12	0.14
(1,3328)	1:A:76:LEU:HD21	1:A:164:LYS:HG2	2	0.29	0.35
(1,3328)	1:A:76:LEU:HD22	1:A:164:LYS:HG2	2	0.29	0.35
(1,3328)	1:A:76:LEU:HD23	1:A:164:LYS:HG2	2	0.29	0.35
(1,3326)	1:A:76:LEU:HD11	1:A:161:HIS:HB2	2	0.19	0.26



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,3326)	1:A:76:LEU:HD12	1:A:161:HIS:HB2	2	0.19	0.26
(1,3326)	1:A:76:LEU:HD13	1:A:161:HIS:HB2	2	0.19	0.26
(1,3314)	1:A:71:TYR:HE1	1:A:73:HIS:HB2	2	0.89	0.92
(1,3301)	1:A:68:LYS:HD2	1:A:80:PHE:H	2	0.97	1.0
(1,3273)	1:A:61:GLU:HA	1:A:61:GLU:HG2	2	0.29	0.31
(1,3266)	1:A:60:LYS:HB2	1:A:60:LYS:HE2	2	0.01	0.02
(1,3266)	1:A:60:LYS:HB2	1:A:60:LYS:HE3	2	0.01	0.02
(1,3230)	1:A:56:LEU:HD11	1:A:67:GLY:HA2	2	0.41	0.5
(1,3230)	1:A:56:LEU:HD12	1:A:67:GLY:HA2	2	0.41	0.5
(1,3230)	1:A:56:LEU:HD13	1:A:67:GLY:HA2	2	0.41	0.5
(1,3227)	1:A:56:LEU:HD11	1:A:66:PHE:H	2	0.05	0.05
(1,3227)	1:A:56:LEU:HD12	1:A:66:PHE:H	2	0.05	0.05
(1,3227)	1:A:56:LEU:HD13	1:A:66:PHE:H	2	0.05	0.05
(1,322)	1:A:78:TYR:H	1:A:78:TYR:HB2	2	0.03	0.03
(1,3166)	1:A:37:GLN:HG2	1:A:38:SER:H	2	0.1	0.16
(1,3147)	1:A:32:LEU:HD11	1:A:65:TRP:HZ2	2	0.27	0.51
(1,3147)	1:A:32:LEU:HD12	1:A:65:TRP:HZ2	2	0.27	0.51
(1,3147)	1:A:32:LEU:HD13	1:A:65:TRP:HZ2	2	0.27	0.51
(1,3144)	1:A:32:LEU:HD11	1:A:62:GLY:HA2	2	0.19	0.35
(1,3144)	1:A:32:LEU:HD12	1:A:62:GLY:HA2	2	0.19	0.35
(1,3144)	1:A:32:LEU:HD13	1:A:62:GLY:HA2	2	0.19	0.35
(1,3140)	1:A:32:LEU:HD11	1:A:36:TYR:HE1	2	0.7	0.83
(1,3140)	1:A:32:LEU:HD12	1:A:36:TYR:HE1	2	0.7	0.83
(1,3140)	1:A:32:LEU:HD13	1:A:36:TYR:HE1	2	0.7	0.83
(1,3136)	1:A:32:LEU:HA	1:A:32:LEU:HD11	2	0.2	0.21
(1,3136)	1:A:32:LEU:HA	1:A:32:LEU:HD12	2	0.2	0.21
(1,3136)	1:A:32:LEU:HA	1:A:32:LEU:HD13	2	0.2	0.21
(1,3124)	1:A:28:TRP:HE1	1:A:61:GLU:HG2	2	0.47	0.5
(1,3123)	1:A:28:TRP:HE1	1:A:32:LEU:HD11	2	0.21	0.26
(1,3123)	1:A:28:TRP:HE1	1:A:32:LEU:HD12	2	0.21	0.26
(1,3123)	1:A:28:TRP:HE1	1:A:32:LEU:HD13	2	0.21	0.26
(1,3092)	1:A:22:PRO:HG2	1:A:86:ILE:HB	2	0.09	0.09
(1,296)	1:A:70:TRP:HB2	1:A:71:TYR:H	2	0.01	0.02
(1,2834)	1:A:87:PRO:HB3	1:A:93:THR:HG21	2	0.02	0.02
(1,2834)	1:A:87:PRO:HB3	1:A:93:THR:HG22	2	0.02	0.02
(1,2834)	1:A:87:PRO:HB3	1:A:93:THR:HG23	2	0.02	0.02
(1,2823)	1:A:56:LEU:HD21	1:A:65:TRP:HB3	2	0.04	0.05
(1,2823)	1:A:56:LEU:HD22	1:A:65:TRP:HB3	2	0.04	0.05
(1,2823)	1:A:56:LEU:HD23	1:A:65:TRP:HB3	2	0.04	0.05
(1,2820)	1:A:118:THR:HG21	1:A:121:PHE:HB2	2	0.01	0.02
(1,2820)	1:A:118:THR:HG22	1:A:121:PHE:HB2	2	0.01	0.02
(1,2820)	1:A:118:THR:HG23	1:A:121:PHE:HB2	2	0.01	0.02



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,2680)	1:A:53:TRP:HE3	1:A:146:LEU:HD21	2	0.03	0.04
(1,2680)	1:A:53:TRP:HE3	1:A:146:LEU:HD22	2	0.03	0.04
(1,2680)	1:A:53:TRP:HE3	1:A:146:LEU:HD23	2	0.03	0.04
(1,2626)	1:A:95:PRO:HG3	1:A:134:LEU:HD11	2	0.01	0.01
(1,2626)	1:A:95:PRO:HG3	1:A:134:LEU:HD12	2	0.01	0.01
(1,2626)	1:A:95:PRO:HG3	1:A:134:LEU:HD13	2	0.01	0.01
(1,259)	1:A:60:LYS:HB2	1:A:61:GLU:H	2	0.03	0.04
(1,2579)	1:A:117:LEU:HD21	1:A:141:GLY:HA3	2	0.07	0.08
(1,2579)	1:A:117:LEU:HD22	1:A:141:GLY:HA3	2	0.07	0.08
(1,2579)	1:A:117:LEU:HD23	1:A:141:GLY:HA3	2	0.07	0.08
(1,253)	1:A:58:SER:HB3	1:A:59:ASN:H	2	0.01	0.01
(1,248)	1:A:57:GLU:HA	1:A:58:SER:H	2	0.01	0.01
(1,2471)	1:A:28:TRP:HH2	1:A:86:ILE:HG21	2	0.05	0.07
(1,2471)	1:A:28:TRP:HH2	1:A:86:ILE:HG22	2	0.05	0.07
(1,2471)	1:A:28:TRP:HH2	1:A:86:ILE:HG23	2	0.05	0.07
(1,2444)	1:A:76:LEU:HD21	1:A:164:LYS:HA	2	0.03	0.03
(1,2444)	1:A:76:LEU:HD22	1:A:164:LYS:HA	2	0.03	0.03
(1,2444)	1:A:76:LEU:HD23	1:A:164:LYS:HA	2	0.03	0.03
(1,2442)	1:A:74:ASP:HB3	1:A:154:ILE:HG21	2	0.03	0.06
(1,2442)	1:A:74:ASP:HB3	1:A:154:ILE:HG22	2	0.03	0.06
(1,2442)	1:A:74:ASP:HB3	1:A:154:ILE:HG23	2	0.03	0.06
(1,2402)	1:A:56:LEU:HD21	1:A:65:TRP:HE3	2	0.03	0.04
(1,2402)	1:A:56:LEU:HD22	1:A:65:TRP:HE3	2	0.03	0.04
(1,2402)	1:A:56:LEU:HD23	1:A:65:TRP:HE3	2	0.03	0.04
(1,2386)	1:A:40:ILE:HG21	1:A:44:GLU:HG2	2	0.03	0.03
(1,2386)	1:A:40:ILE:HG22	1:A:44:GLU:HG2	2	0.03	0.03
(1,2386)	1:A:40:ILE:HG23	1:A:44:GLU:HG2	2	0.03	0.03
(1,2338)	1:A:18:THR:HG21	1:A:30:GLN:HB2	2	0.01	0.01
(1,2338)	1:A:18:THR:HG21	1:A:30:GLN:HB3	2	0.01	0.01
(1,2338)	1:A:18:THR:HG22	1:A:30:GLN:HB2	2	0.01	0.01
(1,2338)	1:A:18:THR:HG22	1:A:30:GLN:HB3	2	0.01	0.01
(1,2338)	1:A:18:THR:HG23	1:A:30:GLN:HB2	2	0.01	0.01
(1,2338)	1:A:18:THR:HG23	1:A:30:GLN:HB3	2	0.01	0.01
(1,2321)	1:A:23:ARG:HD2	1:A:88:ILE:HG21	2	0.03	0.03
(1,2321)	1:A:23:ARG:HD2	1:A:88:ILE:HG22	2	0.03	0.03
(1,2321)	1:A:23:ARG:HD2	1:A:88:ILE:HG23	2	0.03	0.03
(1,2321)	1:A:23:ARG:HD3	1:A:88:ILE:HG21	2	0.03	0.03
(1,2321)	1:A:23:ARG:HD3	1:A:88:ILE:HG22	2	0.03	0.03
(1,2321)	1:A:23:ARG:HD3	1:A:88:ILE:HG23	2	0.03	0.03
(1,2089)	1:A:73:HIS:H	1:A:78:TYR:HE1	2	0.1	0.18
(1,2087)	1:A:71:TYR:HE1	1:A:150:ILE:HG13	2	1.46	2.21
(1,206)	1:A:43:VAL:HA	1:A:47:LYS:H	2	0.03	0.04



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,2050)	1:A:64:ARG:HD2	1:A:66:PHE:HE1	2	1.04	2.02
(1,2029)	1:A:71:TYR:HE1	1:A:73:HIS:HB2	2	0.51	0.54
(1,2019)	1:A:22:PRO:HB2	1:A:28:TRP:HZ2	2	0.02	0.03
(1,1983)	1:A:131:LYS:HA	1:A:131:LYS:HD3	2	0.04	0.08
(1,196)	1:A:44:GLU:HB3	1:A:45:ASN:H	2	0.08	0.09
(1,1948)	1:A:46:ASN:HB2	1:A:52:ASP:HA	2	0.04	0.08
(1,1948)	1:A:46:ASN:HB3	1:A:52:ASP:HA	2	0.04	0.08
(1,1904)	1:A:122:LYS:HB3	1:A:123:PRO:HD3	2	0.02	0.02
(1,1894)	1:A:80:PHE:HD1	1:A:101:GLU:HG2	2	0.03	0.03
(1,1894)	1:A:80:PHE:HD1	1:A:101:GLU:HG3	2	0.03	0.03
(1,1894)	1:A:80:PHE:HD2	1:A:101:GLU:HG2	2	0.03	0.03
(1,1894)	1:A:80:PHE:HD2	1:A:101:GLU:HG3	2	0.03	0.03
(1,1890)	1:A:87:PRO:HG3	1:A:93:THR:HB	2	0.03	0.04
(1,1888)	1:A:89:THR:HB	1:A:93:THR:HB	2	0.01	0.01
(1,1866)	1:A:70:TRP:HE3	1:A:79:GLU:HG2	2	0.07	0.07
(1,1866)	1:A:70:TRP:HE3	1:A:79:GLU:HG3	2	0.07	0.07
(1,1859)	1:A:73:HIS:HB3	1:A:78:TYR:HE1	2	0.1	0.18
(1,1819)	1:A:47:LYS:HA	1:A:52:ASP:HB2	2	0.01	0.01
(1,1804)	1:A:36:TYR:H	1:A:37:GLN:HG3	2	0.03	0.05
(1,1789)	1:A:24:ASP:HB2	1:A:27:LEU:HB3	2	0.07	0.07
(1,1711)	1:A:131:LYS:H	1:A:131:LYS:HG2	2	0.15	0.23
(1,1708)	1:A:128:ASN:HA	1:A:128:ASN:HD21	2	0.02	0.02
(1,1694)	1:A:122:LYS:HB2	1:A:122:LYS:HD3	2	0.03	0.03
(1,1669)	1:A:96:GLU:HA	1:A:96:GLU:HG2	2	0.1	0.16
(1,1666)	1:A:88:ILE:H	1:A:88:ILE:HG12	2	0.06	0.07
(1,1611)	1:A:44:GLU:HA	1:A:44:GLU:HG3	2	0.01	0.02
(1,1591)	1:A:33:LYS:HB2	1:A:33:LYS:HE2	2	0.02	0.03
(1,1591)	1:A:33:LYS:HB2	1:A:33:LYS:HE3	2	0.02	0.03
(1,1591)	1:A:33:LYS:HB3	1:A:33:LYS:HE2	2	0.02	0.03
(1,1591)	1:A:33:LYS:HB3	1:A:33:LYS:HE3	2	0.02	0.03
(1,1570)	1:A:25:ARG:HA	1:A:25:ARG:HG3	2	0.04	0.04
(1,1559)	1:A:17:LYS:H	1:A:17:LYS:HD2	2	0.03	0.04
(1,1559)	1:A:17:LYS:H	1:A:17:LYS:HD3	2	0.03	0.04
(1,1552)	1:A:12:GLU:H	1:A:12:GLU:HG3	2	0.1	0.13
(1,1549)	1:A:12:GLU:HA	1:A:12:GLU:HG3	2	0.27	0.27
(1,1531)	1:A:124:LEU:HA	1:A:127:ARG:HB3	2	0.04	0.04
(1,1498)	1:A:98:ALA:HA	1:A:114:LYS:HA	2	0.07	0.08
(1,1494)	1:A:87:PRO:HA	1:A:89:THR:H	2	0.01	0.01
(1,1428)	1:A:135:ALA:HA	1:A:138:MET:HB3	2	0.01	0.02
(1,1427)	1:A:135:ALA:HA	1:A:138:MET:HB2	2	0.04	0.05
(1,1412)	1:A:119:ASP:HA	1:A:122:LYS:HB3	2	0.04	0.04
(1,141)	1:A:35:GLU:HB3	1:A:36:TYR:H	2	0.09	0.1



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,1400)	1:A:111:ARG:HA	1:A:112:GLY:H	2	0.07	0.07
(1,1397)	1:A:101:GLU:H	1:A:101:GLU:HB3	2	0.06	0.06
(1,1304)	1:A:4:GLU:HA	1:A:7:ARG:H	2	0.03	0.04
(1,1300)	1:A:107:ALA:HB1	1:A:108:LYS:H	2	0.03	0.03
(1,1300)	1:A:107:ALA:HB2	1:A:108:LYS:H	2	0.03	0.03
(1,1300)	1:A:107:ALA:HB3	1:A:108:LYS:H	2	0.03	0.03
(1,1229)	1:A:18:THR:HG21	1:A:31:ARG:H	2	0.03	0.04
(1,1229)	1:A:18:THR:HG22	1:A:31:ARG:H	2	0.03	0.04
(1,1229)	1:A:18:THR:HG23	1:A:31:ARG:H	2	0.03	0.04
(1,1218)	1:A:28:TRP:HE1	1:A:63:THR:HG21	2	0.02	0.02
(1,1218)	1:A:28:TRP:HE1	1:A:63:THR:HG22	2	0.02	0.02
(1,1218)	1:A:28:TRP:HE1	1:A:63:THR:HG23	2	0.02	0.02
(1,1213)	1:A:18:THR:HG21	1:A:20:ALA:H	2	0.04	0.05
(1,1213)	1:A:18:THR:HG22	1:A:20:ALA:H	2	0.04	0.05
(1,1213)	1:A:18:THR:HG23	1:A:20:ALA:H	2	0.04	0.05
(1,113)	1:A:29:VAL:HA	1:A:33:LYS:H	2	0.06	0.09
(1,1112)	1:A:127:ARG:H	1:A:128:ASN:HD22	2	0.02	0.02
(1,1111)	1:A:128:ASN:HD22	1:A:132:PHE:HE1	2	0.68	1.29
(1,1109)	1:A:46:ASN:HD22	1:A:51:ASN:HD22	2	0.03	0.06
(1,1098)	1:A:53:TRP:HE1	1:A:139:ALA:HA	2	0.01	0.02
(1,1085)	1:A:51:ASN:HD21	1:A:53:TRP:HE1	2	0.03	0.04
(1,1022)	1:A:65:TRP:HE1	1:A:84:PHE:HE1	2	0.26	0.31
(1,1017)	1:A:64:ARG:H	1:A:66:PHE:HE1	2	0.97	1.59
(1,1014)	1:A:59:ASN:HD22	1:A:63:THR:H	2	0.03	0.05
(1,1006)	1:A:57:GLU:H	1:A:65:TRP:HB3	2	0.06	0.1
(1,999)	1:A:44:GLU:HG2	1:A:48:ASN:HD21	1	0.06	0.06
(1,989)	1:A:12:GLU:HB3	1:A:45:ASN:HD22	1	0.02	0.02
(1,978)	1:A:30:GLN:HE22	1:A:33:LYS:HD2	1	0.07	0.07
(1,978)	1:A:30:GLN:HE22	1:A:33:LYS:HD3	1	0.07	0.07
(1,96)	1:A:27:LEU:HA	1:A:30:GLN:H	1	0.1	0.1
(1,951)	1:A:162:LYS:HG2	1:A:163:GLU:H	1	0.08	0.08
(1,951)	1:A:162:LYS:HG3	1:A:163:GLU:H	1	0.08	0.08
(1,947)	1:A:160:GLN:H	1:A:160:GLN:HG2	1	0.09	0.09
(1,859)	1:A:75:LEU:H	1:A:75:LEU:HG	1	0.04	0.04
(1,830)	1:A:51:ASN:HA	1:A:51:ASN:HD21	1	0.01	0.01
(1,792)	1:A:37:GLN:HG2	1:A:37:GLN:HE22	1	0.04	0.04
(1,763)	1:A:23:ARG:H	1:A:23:ARG:HG2	1	0.08	0.08
(1,746)	1:A:7:ARG:H	1:A:7:ARG:HG3	1	0.01	0.01
(1,744)	1:A:4:GLU:H	1:A:4:GLU:HG2	1	0.01	0.01
(1,744)	1:A:4:GLU:H	1:A:4:GLU:HG3	1	0.01	0.01
(1,725)	1:A:67:GLY:H	1:A:83:GLU:HA	1	0.02	0.02
(1,719)	1:A:57:GLU:H	1:A:66:PHE:H	1	0.05	0.05



Continued from previous page...

(1,716 1:A:156:LYS:HB2	Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,712) 1:A:153:LEU:HA 1:A:156:LYS:H 1 0.06 0.06 (1,663) 1:A:133:GLY:H 1:A:136:HIS:H 1 0.05 0.05 (1,666) 1:A:69:CYS:H 1:A:82:ILE:H 1 0.01 0.01 (1,660) 1:A:73:HIS:H 1:A:77:LYS:HA 1 0.01 0.01 (1,658) 1:A:71:TYR:H 1:A:79:GLU:HA 1 0.01 0.01 (1,655) 1:A:70:TRP:H 1:A:79:GLU:HA 1 0.01 0.01 (1,587) 1:A:167:GLN:H 1:A:167:GLN:HB3 1 0.13 0.13 (1,577) 1:A:164:DYS:H 1:A:165:CYS:H 1 0.01 0.01 (1,572) 1:A:164:DYS:H 1:A:163:GU:H 1 0.02 0.02 (1,570) 1:A:161:HIS:HB2 1:A:162:LYS:H 1 0.01 0.01 (1,570) 1:A:161:HIS:HB2 1:A:162:LYS:H 1 0.01 0.01 (1,571) 1:A:161:HIS:HB2 1:A:162:LYS:H 1 0.01 0.01	(1,716)	1:A:156:LYS:HB2	1:A:158:VAL:H	1	0.03	0.03
(1,693)	(1,714)	1:A:154:ILE:HA	1:A:158:VAL:H	1	0.02	0.02
(1,666) 1:A:69:CYS:H 1:A:82:ILE:H 1 0.01 0.01 (1,660) 1:A:73:HIS:H 1:A:77:IVS:HA 1 0.01 0.01 (1,658) 1:A:70:TYR:H 1:A:79:GLU:HA 1 0.05 0.05 0.05 (1,655) 1:A:70:TYR:H 1:A:79:GLU:HA 1 0.01 0.01 (1,557) 1:A:167:GLN:H 1:A:167:GLN:HB3 1 0.01 0.01 (1,577) 1:A:164:LYS:H 1:A:165:CYS:H 1 0.01 0.01 (1,577) 1:A:164:LYS:H 1:A:163:GLU:H 1 0.02 0.02 (1,570) 1:A:161:HIS:HB2 1:A:163:GLU:H 1 0.02 0.02 (1,570) 1:A:161:HIS:HB2 1:A:193:SN:H 1 0.04 0.04 (1,51) 1:A:18:THR:HB 1:A:193-SN:H 1 0.01 0.01 (1,454) 1:A:125:TRP:HB2 1:A:126:ALA:H 1 0.01 0.01 (1,445) 1:A:125:TRP:HB2 1:A:126:ALA:H 1 0.01 0.01 (1,405) 1:A:114:LYS:H 1:A:114:LYS:HB3 1 0.06 0.06 (1,404) 1:A:114:LYS:H 1:A:114:LYS:HB3 1 0.05 0.05 (1,395) 1:A:103:ASP:H 1:A:105:LYS:HB2 1 0.02 0.02 (1,391) 1:A:105:LYS:H 1:A:105:LYS:HB2 1 0.03 0.03 (1,385) 1:A:103:ASP:H 1:A:103:ASP:HB3 1 0.04 0.04 (1,379) 1:A:103:ASP:H 1:A:103:ASP:HB3 1 0.04 0.04 (1,379) 1:A:103:ASP:HB3 1 0.04 0.04 (1,379) 1:A:103:ASP:HB3 1:A:103:ASP:HB3 1 0.04 0.04 (1,372) 1:A:96:GLU:HA 1:A:97:ILE:H 1 0.015 0.05 (1,3607) 1:A:142:LEU:O 1:A:146:LEU:H 1 0.02 0.02 (1,3610) 1:A:13:HIS:N 1:A:166:LEU:H 1 0.03 0.03 (1,3657) 1:A:142:LEU:O 1:A:146:LEU:H 1 0.02 0.02 (1,3596) 1:A:13:WAL:O 1:A:146:LEU:H 1 0.03 0.03 (1,3571) 1:A:167:GLN:H 1:A:167:GLN:HB2 1 0.01 0.01 (1,353) 1:A:166:GLN:H 1:A:167:GLN:HB2 1 0.02 0.02 (1,3596) 1:A:143:VAL:O 1:A:145:LEU:O 1 0.02 0.02 (1,3596) 1:A:143:VAL:O 1:A:145:LEU:H 1 0.03 0.03 (1,3571) 1:A:167:GLN:H 1:A:167:GLN:HB2 1 0.02 0.02 (1,3593) 1:A:143:CU:HD:O 1:A:145:LEU:H 1 0.05 0.05 (1,3508) 1:A:145:LEU:HDI1 1:A:145:TRP:HE3 1 0.05 0.05 (1,3508) 1:A:145:LEU:HDI1 1:A:145:TRP:HE3 1 0.05 0.05 (1,3508) 1:A:145:LEU:HDI	(1,712)	1:A:153:LEU:HA	1:A:156:LYS:H	1	0.06	0.06
1.660	(1,693)	1:A:133:GLY:H	1:A:136:HIS:H	1	0.05	0.05
(1,658) 1:A:71:TYR:H 1:A:79:GLU:HA 1 0.05 0.05 (1,655) 1:A:70:TRP:H 1:A:79:GLU:HA 1 0.01 0.01 (1,587) 1:A:167:GLN:H 1:A:167:GLN:HB3 1 0.13 0.13 (1,577) 1:A:164:LYS:H 1:A:165:CYS:H 1 0.01 0.01 (1,577) 1:A:164:LYS:H 1:A:165:CYS:H 1 0.00 0.02 (1,570) 1:A:161:HIS:HB2 1:A:162:LYS:H 1 0.04 0.04 (1,51) 1:A:18:THR:HB 1:A:19:ASN:H 1 0.01 0.01 (1,51) 1:A:18:THR:HB 1:A:19:ASN:H 1 0.01 0.01 (1,454) 1:A:128:ASN:H 1:A:128:ASN:H 1 0.01 0.01 (1,454) 1:A:125:TRP:HB2 1:A:126:ALA:H 1 0.03 0.03 (1,445) 1:A:125:TRP:HB2 1:A:126:ALA:H 1 0.01 0.01 (1,405) 1:A:141:LYS:H 1:A:141:LYS:HB3 1 0.06 0.06 (1,404) 1:A:114:LYS:H 1:A:141:LYS:HB3 1 0.06 0.06 (1,404) 1:A:106:THR:H 1:A:107:ALA:H 1 0.02 0.02 (1,395) 1:A:106:THR:H 1:A:107:ALA:H 1 0.02 0.02 (1,391) 1:A:106:THR:H 1:A:105:LYS:HB2 1 0.03 0.03 (1,385) 1:A:103:ASP:H 1:A:103:ASP:HB3 1 0.04 (1,379) 1:A:100:PRO:HB3 1:A:101:GLU:H 1 0.04 0.04 (1,374) 1:A:97:ILE:H 1:A:97:ILE:HB 1 0.01 0.01 (1,372) 1:A:96:GLU:HA 1:A:97:ILE:HB 1 0.01 0.01 (1,3627) 1:A:142:LEU:O 1:A:146:LEU:H 1 0.03 0.03 (1,3618) 1:A:120:HIS:O 1:A:146:LEU:H 1 0.02 0.02 (1,3610) 1:A:73:HIS:N 1:A:167:GLEU:N 1 0.02 0.02 (1,3596) 1:A:41:ARG:O 1:A:47:LYS:N 1 0.01 0.01 (1,3593) 1:A:120:HIS:O 1:A:146:LEU:H 1 0.03 0.03 (1,3573) 1:A:28:TRP:O 1:A:47:LYS:N 1 0.01 0.01 (1,3593) 1:A:167:GLN:H 1:A:167:GLN:HB2 1 0.03 0.03 (1,3573) 1:A:28:TRP:O 1:A:47:LYS:N 1 0.01 0.01 (1,3593) 1:A:41:ARG:O 1:A:45:ASN:H 1 0.00 0.03 0.03 (1,3573) 1:A:28:TRP:O 1:A:31:ARG:H 1 0.01 0.01 (1,3593) 1:A:140:GLD:HH 1:A:167:GLN:HB2 1 0.02 0.02 (1,3598) 1:A:149:GLU:HA 1:A:167:GLN:HB2 1 0.02 0.02 (1,3598) 1:A:149:GLU:HA 1:A:167:GLN:HB2 1 0.00 0.00 0.00 (1,3593) 1:A:149:GLU:HA 1:A:167:GLN:HB2 1 0.00 0.00 0.00 (1,3593) 1:A:149:GLU:HA 1:A:167:GLN:HB2 1 0.00 0.00 0.00 0.00 0.00 0.00 0.00 0	(1,666)	1:A:69:CYS:H	1:A:82:ILE:H	1	0.01	0.01
(1,655) 1:A:70:TRP:H 1:A:79:GLU:HA 1 0.01 0.01 (1,587) 1:A:167:GLN:H 1:A:167:GLN:HB3 1 0.13 0.13 (1,577) 1:A:164:LYS:H 1:A:165:CYS:H 1 0.01 0.01 (1,572) 1:A:162:LYS:H 1:A:163:GLU:H 1 0.02 0.02 0.02 (1,570) 1:A:161:HIS:HB2 1:A:163:CYS:H 1 0.01 0.01 (1,572) 1:A:161:HIS:HB2 1:A:163:CYS:H 1 0.00 0.02 0.02 (1,451) 1:A:18:THR:HB 1:A:19:ASN:H 1 0.01 0.01 0.01 (1,454) 1:A:128:ASN:H 1:A:129:VAL:H 1 0.03 0.03 (1,445) 1:A:125:TRP:HB2 1:A:126:ALA:H 1 0.01 0.01 (1,405) 1:A:141:LYS:H 1:A:141:LYS:HB3 1 0.06 0.06 (1,404) 1:A:141:LYS:H 1:A:141:LYS:HB2 1 0.05 0.05 (1,395) 1:A:106:THR:H 1:A:107:ALA:H 1 0.02 0.02 (1,391) 1:A:105:LYS:H 1:A:105:LYS:HB2 1 0.03 0.03 (1,385) 1:A:106:THR:H 1:A:107:ALA:H 1 0.02 0.02 (1,391) 1:A:100:PRO:HB3 1:A:101:GLU:H 1 0.04 0.04 (1,379) 1:A:100:PRO:HB3 1:A:101:GLU:H 1 0.04 0.04 (1,374) 1:A:97:ILE:H 1:A:97:ILE:HB 1 0.01 0.01 (1,3627) 1:A:142:LEU:O 1:A:146:LEU:H 1 0.03 0.03 (1,3619) 1:A:121:PHE:O 1:A:146:LEU:H 1 0.02 0.02 (1,3619) 1:A:121:PHE:O 1:A:146:LEU:H 1 0.02 0.02 (1,3596) 1:A:137:GLU:HS:O 1:A:124:LEU:O 1:A:125:TRP:H 1 0.02 0.02 (1,3596) 1:A:137:GLN:O 1:A:146:LEU:H 1 0.03 0.03 (1,3587) 1:A:127:LE:O 1:A:142:LEU:O 1:A:144:LEU:O 1 0.02 0.02 (1,3596) 1:A:43:VAL:O 1:A:145:TRP:H 1 0.03 0.03 (1,3573) 1:A:128:TRP:O 1:A:121:PHE:O 1:A:125:TRP:H 1 0.02 0.02 (1,3596) 1:A:43:VAL:O 1:A:145:ASR:H 1 0.03 0.03 (1,3573) 1:A:128:TRP:O 1:A:141:ARG:H 1 0.03 0.03 (1,3573) 1:A:128:TRP:O 1:A:141:ARG:H 1 0.01 0.01 (1,3597) 1:A:160:GLN:H 1:A:160:GLN:HB2 1 0.02 0.02 (1,3590) 1:A:140:GLU:HA 1:A:141:TRP:HE3 1 0.00 0.03 (1,3573) 1:A:128:TRP:O 1:A:141:TRP:HE3 1 0.00 0.00 0.00 (1,3587) 1:A:140:GLU:HA 1:A:141:TRP:HE3 1 0.05 0.05 (1,3598) 1:A:141:EU:HD11 1:A:145:TRP:HE3 1 0.05 0.05 (1,3598) 1:A:142:LEU:HD11 1:A:1	(1,660)	1:A:73:HIS:H	1:A:77:LYS:HA	1	0.01	0.01
(1,587) 1:A:167:GLN:H 1:A:167:GLN:HB3 1 0.13 0.13 (1,577) 1:A:164:LYS:H 1:A:165:CYS:H 1 0.01 0.01 (1,577) 1:A:164:LYS:H 1:A:165:CYS:H 1 0.01 0.01 (1,570) 1:A:181:HB:HB2 1:A:162:LYS:H 1 0.04 0.04 (1,51) 1:A:18:THR:HB 1:A:19:ASN:H 1 0.01 0.01 (1,454) 1:A:128:ASN:H 1:A:129:VAL:H 1 0.03 0.03 (1,445) 1:A:125:TRP:HB2 1:A:126:ALA:H 1 0.01 0.01 (1,405) 1:A:14:LYS:H 1:A:14:LYS:HB3 1 0.06 0.06 (1,395) 1:A:106:THR:H 1:A:107:ALA:H 1 0.05 0.05 (1,395) 1:A:106:THR:H 1:A:105:LYS:HB2 1 0.03 0.03 (1,371) 1:A:100:EYS:H 1:A:101:GLU:H 1 0.04 0.04 (1,372) 1:A:400:PRO:HB3 1:A:101:GLU:H 1 0.04 0.04	(1,658)	1:A:71:TYR:H	1:A:79:GLU:HA	1	0.05	0.05
(1,577) 1:A:164:LYS:H 1:A:165:CYS:H 1 0.01 0.01 (1,572) 1:A:162:LYS:H 1:A:163:GLU:H 1 0.02 0.02 (1,570) 1:A:161:HIS:HB2 1:A:162:LYS:H 1 0.04 0.04 (1,570) 1:A:161:HIS:HB2 1:A:162:ASN:H 1 0.01 0.01 (1,451) 1:A:128:ASN:H 1:A:129:VAL:H 1 0.03 0.03 (1,445) 1:A:128:ASN:H 1:A:126:ALA:H 1 0.01 0.01 (1,445) 1:A:14:LYS:H 1:A:114:LYS:HB3 1 0.06 0.06 (1,404) 1:A:14:LYS:H 1:A:114:LYS:HB2 1 0.05 0.05 (1,395) 1:A:106:THR:H 1:A:107:ALA:H 1 0.02 0.02 (1,391) 1:A:105:LYS:H 1:A:105:LYS:HB2 1 0.03 0.03 (1,385) 1:A:100:PRO:HB3 1:A:101:GLU:H 1 0.04 0.04 (1,379) 1:A:100:PRO:HB3 1:A:101:GLU:H 1 0.04 0.04	(1,655)	1:A:70:TRP:H	1:A:79:GLU:HA	1	0.01	0.01
(1,572) 1:A:162:LYS:H 1:A:163:GLU:H 1 0.02 0.02 (1,570) 1:A:161:HIS:HB2 1:A:162:LYS:H 1 0.04 0.04 (1,570) 1:A:161:HIS:HB2 1:A:162:SYS:H 1 0.04 0.04 (1,51) 1:A:161:HIS:HB2 1:A:19:ASN:H 1 0.01 0.01 (1,454) 1:A:128:ASN:H 1 1 0.01 0.03 (1,445) 1:A:125:TRP:HB2 1:A:126:ALA:H 1 0.01 0.01 (1,405) 1:A:14:LYS:H 1:A:114:LYS:HB3 1 0.06 0.06 (1,404) 1:A:14:LYS:H 1:A:114:LYS:HB2 1 0.05 0.05 (1,395) 1:A:106:THR:H 1:A:107:AL:H 1 0.02 0.02 (1,391) 1:A:106:THR:H 1:A:105:ASP:HB2 1 0.03 0.03 (1,385) 1:A:106:THR:H 1:A:107:AL:H 1 0.02 0.02 (1,379) 1:A:100:PRO:HB3 1:A:101:GLU:H 1 0.04 0.04 <	(1,587)	1:A:167:GLN:H	1:A:167:GLN:HB3	1	0.13	0.13
(1,570) 1:A:161:HIS:HB2 1:A:162:LYS:H 1 0.04 0.04 (1,51) 1:A:18:THR:HB 1:A:19:ASN:H 1 0.01 0.01 (1,454) 1:A:128:ASN:H 1:A:129:VAL:H 1 0.03 0.03 (1,445) 1:A:125:TRP:HB2 1:A:126:AAA:H 1 0.01 0.01 (1,405) 1:A:14:LYS:H 1:A:114:LYS:HB3 1 0.06 0.06 (1,404) 1:A:106:THR:H 1:A:114:LYS:HB2 1 0.05 0.05 (1,395) 1:A:106:THR:H 1:A:107:ALA:H 1 0.02 0.02 (1,391) 1:A:105:LYS:H 1:A:105:LYS:HB2 1 0.03 0.03 (1,395) 1:A:106:PRO:HB3 1:A:101:GLU:H 1 0.04 0.04 (1,379) 1:A:100:PRO:HB3 1:A:101:GLU:H 1 0.04 0.04 (1,374) 1:A:97:ILE:H 1:A:97:ILE:HB 1 0.01 0.01 (1,372) 1:A:49:GLU:HA 1:A:97:ILE:HB 1 0.01 0.01 <t< td=""><td>(1,577)</td><td>1:A:164:LYS:H</td><td>1:A:165:CYS:H</td><td>1</td><td>0.01</td><td>0.01</td></t<>	(1,577)	1:A:164:LYS:H	1:A:165:CYS:H	1	0.01	0.01
(1,51) 1:A:18:THR:HB 1:A:19:ASN:H 1 0.01 0.01 (1,454) 1:A:128:ASN:H 1:A:129:VAL:H 1 0.03 0.03 (1,445) 1:A:125:TRP:HB2 1:A:126:ALA:H 1 0.01 0.01 (1,405) 1:A:114:LYS:H 1:A:114:LYS:HB3 1 0.06 0.06 (1,404) 1:A:106:THR:H 1:A:107:ALA:H 1 0.02 0.02 (1,395) 1:A:106:THR:H 1:A:107:ALA:H 1 0.02 0.02 (1,391) 1:A:105:LYS:H 1:A:105:LYS:HB2 1 0.03 0.03 (1,385) 1:A:103:ASP:H 1:A:103:ASP:HB3 1 0.04 0.04 (1,379) 1:A:100:PRO:HB3 1:A:101:GLU:H 1 0.04 0.04 (1,374) 1:A:97:ILE:H 1:A:97:ILE:HB 1 0.01 0.01 (1,372) 1:A:96:GLU:HA 1:A:97:ILE:HB 1 0.01 0.01 (1,3627) 1:A:142:LEU:O 1:A:1425:TRP:H 1 0.02 0.02 <tr< td=""><td>(1,572)</td><td>1:A:162:LYS:H</td><td>1:A:163:GLU:H</td><td>1</td><td>0.02</td><td>0.02</td></tr<>	(1,572)	1:A:162:LYS:H	1:A:163:GLU:H	1	0.02	0.02
(1,454) 1:A:128:ASN:H 1:A:129:VAL:H 1 0.03 0.03 (1,445) 1:A:125:TRP:HB2 1:A:126:ALA:H 1 0.01 0.01 (1,405) 1:A:114:LYS:H 1:A:114:LYS:HB3 1 0.06 0.06 (1,404) 1:A:114:LYS:H 1:A:114:LYS:HB2 1 0.05 0.05 (1,395) 1:A:106:THR:H 1:A:107:ALA:H 1 0.02 0.02 (1,391) 1:A:103:ASP:H 1:A:105:LYS:HB2 1 0.03 0.03 (1,385) 1:A:103:ASP:H 1:A:103:ASP:HB3 1 0.04 0.04 (1,379) 1:A:100:PRO:HB3 1:A:101:GLU:H 1 0.04 0.04 (1,379) 1:A:100:PRO:HB3 1:A:101:GLU:H 1 0.04 0.04 (1,379) 1:A:100:PRO:HB3 1:A:101:GLU:H 1 0.04 0.04 (1,374) 1:A:497:ILE:H 1:A:97:ILE:HB 1 0.01 0.01 (1,372) 1:A:466:GLU:HA 1:A:497:ILE:HB 1 0.05 0.02 <td>(1,570)</td> <td>1:A:161:HIS:HB2</td> <td>1:A:162:LYS:H</td> <td>1</td> <td>0.04</td> <td>0.04</td>	(1,570)	1:A:161:HIS:HB2	1:A:162:LYS:H	1	0.04	0.04
(1,445) 1:A:125:TRP:HB2 1:A:126:ALA:H 1 0.01 0.01 (1,405) 1:A:114:LYS:H 1:A:114:LYS:HB3 1 0.06 0.06 (1,404) 1:A:114:LYS:H 1:A:114:LYS:HB2 1 0.05 0.05 (1,395) 1:A:106:THR:H 1:A:107:ALA:H 1 0.02 0.02 (1,391) 1:A:105:LYS:H 1:A:105:LYS:HB2 1 0.03 0.03 (1,385) 1:A:103:ASP:H 1:A:103:ASP:HB3 1 0.04 0.04 (1,379) 1:A:100:PRO:HB3 1:A:101:GLU:H 1 0.04 0.04 (1,374) 1:A:97:ILE:H 1:A:97:ILE:HB 1 0.01 0.01 (1,372) 1:A:49:GLU:HA 1:A:97:ILE:HB 1 0.01 0.01 (1,3627) 1:A:142:LEU:O 1:A:146:LEU:H 1 0.03 0.03 (1,3618) 1:A:13:1:PHE:O 1:A:125:TRP:H 1 0.02 0.02 (1,3610) 1:A:3:14:RO:G 1:A:47:LYS:N 1 0.01 0.01	(1,51)	1:A:18:THR:HB	1:A:19:ASN:H	1	0.01	0.01
(1,445) 1:A:125:TRP:HB2 1:A:126:ALA:H 1 0.01 0.01 (1,405) 1:A:114:LYS:H 1:A:114:LYS:HB3 1 0.06 0.06 (1,404) 1:A:114:LYS:H 1:A:114:LYS:HB2 1 0.05 0.05 (1,395) 1:A:106:THR:H 1:A:107:ALA:H 1 0.02 0.02 (1,391) 1:A:105:LYS:H 1:A:105:LYS:HB2 1 0.03 0.03 (1,385) 1:A:103:ASP:H 1:A:103:ASP:HB3 1 0.04 0.04 (1,379) 1:A:100:PRO:HB3 1:A:101:GLU:H 1 0.04 0.04 (1,374) 1:A:97:ILE:H 1:A:97:ILE:HB 1 0.01 0.01 (1,372) 1:A:49:GLU:HA 1:A:197:ILE:H 1 0.05 0.05 (1,3627) 1:A:142:LEU:O 1:A:146:LEU:H 1 0.03 0.03 (1,3618) 1:A:120:HIS:O 1:A:124:LEU:N 1 0.02 0.02 (1,3596) 1:A:43:WAL:O 1:A:47:LYS:N 1 0.01 0.01	(1,454)	1:A:128:ASN:H	1:A:129:VAL:H	1	0.03	0.03
(1,404) 1:A:114:LYS:H 1:A:114:LYS:HB2 1 0.05 0.05 (1,395) 1:A:106:THR:H 1:A:107:ALA:H 1 0.02 0.02 (1,391) 1:A:105:LYS:H 1:A:105:LYS:HB2 1 0.03 0.03 (1,385) 1:A:103:ASP:H 1:A:101:GLU:H 1 0.04 0.04 (1,379) 1:A:100:PRO:HB3 1:A:101:GLU:H 1 0.04 0.04 (1,374) 1:A:97:ILE:H 1:A:97:ILE:HB 1 0.01 0.01 (1,372) 1:A:96:GLU:HA 1:A:97:ILE:HB 1 0.01 0.01 (1,3627) 1:A:142:LEU:O 1:A:146:LEU:H 1 0.03 0.03 (1,3619) 1:A:121:PHE:O 1:A:125:TRP:H 1 0.02 0.02 (1,3618) 1:A:120:HIS:O 1:A:124:LEU:N 1 0.02 0.02 (1,3596) 1:A:43:VAL:O 1:A:47:LYS:N 1 0.01 0.01 (1,3593) 1:A:41:ARG:O 1:A:445:ASN:H 1 0.03 0.03	(1,445)	1:A:125:TRP:HB2	1:A:126:ALA:H	1	0.01	0.01
(1,395) 1:A:106:THR:H 1:A:107:ALA:H 1 0.02 0.02 (1,391) 1:A:105:LYS:H 1:A:105:LYS:HB2 1 0.03 0.03 (1,385) 1:A:103:ASP:H 1:A:103:ASP:HB3 1 0.04 0.04 (1,379) 1:A:100:PRO:HB3 1:A:101:GLU:H 1 0.04 0.04 (1,374) 1:A:97:ILE:H 1:A:97:ILE:HB 1 0.01 0.01 (1,372) 1:A:96:GLU:HA 1:A:97:ILE:HB 1 0.01 0.01 (1,3627) 1:A:142:LEU:O 1:A:146:LEU:H 1 0.03 0.03 (1,3619) 1:A:121:PHE:O 1:A:125:TRP:H 1 0.02 0.02 (1,3618) 1:A:121:PHE:O 1:A:124:LEU:N 1 0.02 0.02 (1,3610) 1:A:73:HIS:N 1:A:76:LEU:O 1 0.02 0.02 (1,3596) 1:A:43:VAL:O 1:A:47:LYS:N 1 0.01 0.01 (1,3593) 1:A:41:ARG:O 1:A:44:ARG:H 1 0.03 0.03	(1,405)	1:A:114:LYS:H	1:A:114:LYS:HB3	1	0.06	0.06
(1,391) 1:A:105:LYS:H 1:A:105:LYS:HB2 1 0.03 0.03 (1,385) 1:A:103:ASP:H 1:A:103:ASP:HB3 1 0.04 0.04 (1,379) 1:A:100:PRO:HB3 1:A:101:GLU:H 1 0.04 0.04 (1,374) 1:A:97:ILE:H 1 0.01 0.01 (1,372) 1:A:96:GLU:HA 1:A:97:ILE:H 1 0.15 0.15 (1,3627) 1:A:142:LEU:O 1:A:146:LEU:H 1 0.03 0.03 (1,3619) 1:A:121:PHE:O 1:A:125:TRP:H 1 0.02 0.02 (1,3618) 1:A:120:HIS:O 1:A:124:LEU:N 1 0.02 0.02 (1,3610) 1:A:73:HIS:N 1:A:76:LEU:O 1 0.02 0.02 (1,3596) 1:A:43:VAL:O 1:A:47:LYS:N 1 0.01 0.01 (1,3593) 1:A:41:ARG:O 1:A:44:ARG:H 1 0.03 0.03 (1,3571) 1:A:27:LEU:O 1:A:31:AFG:BU:H 1 0.03 0.03 (1,3571)	(1,404)	1:A:114:LYS:H	1:A:114:LYS:HB2	1	0.05	0.05
(1,385) 1:A:103:ASP:H 1:A:103:ASP:HB3 1 0.04 0.04 (1,379) 1:A:100:PRO:HB3 1:A:101:GLU:H 1 0.04 0.04 (1,374) 1:A:97:ILE:H 1:A:97:ILE:HB 1 0.01 0.01 (1,372) 1:A:96:GLU:HA 1:A:97:ILE:H 1 0.15 0.15 (1,3627) 1:A:142:LEU:O 1:A:146:LEU:H 1 0.03 0.03 (1,3619) 1:A:121:PHE:O 1:A:125:TRP:H 1 0.02 0.02 (1,3618) 1:A:120:HIS:O 1:A:124:LEU:N 1 0.02 0.02 (1,3610) 1:A:73:HIS:N 1:A:76:LEU:O 1 0.02 0.02 (1,3593) 1:A:43:VAL:O 1:A:47:LYS:N 1 0.01 0.01 (1,3593) 1:A:41:ARG:O 1:A:43:ARG:H 1 0.03 0.03 (1,3573) 1:A:28:TRP:O 1:A:32:LEU:H 1 0.03 0.03 (1,3551) 1:A:160:GLN:H 1:A:161:HIS:H 1 0.01 0.01	· ' /	1:A:106:THR:H	1:A:107:ALA:H	1	0.02	0.02
(1,385) 1:A:103:ASP:H 1:A:103:ASP:HB3 1 0.04 0.04 (1,379) 1:A:100:PRO:HB3 1:A:101:GLU:H 1 0.04 0.04 (1,374) 1:A:97:ILE:H 1:A:97:ILE:HB 1 0.01 0.01 (1,372) 1:A:96:GLU:HA 1:A:97:ILE:H 1 0.15 0.15 (1,3627) 1:A:142:LEU:O 1:A:146:LEU:H 1 0.03 0.03 (1,3619) 1:A:121:PHE:O 1:A:125:TRP:H 1 0.02 0.02 (1,3618) 1:A:120:HIS:O 1:A:124:LEU:N 1 0.02 0.02 (1,3610) 1:A:73:HIS:N 1:A:76:LEU:O 1 0.02 0.02 (1,3593) 1:A:43:VAL:O 1:A:47:LYS:N 1 0.01 0.01 (1,3593) 1:A:41:ARG:O 1:A:43:ARG:H 1 0.03 0.03 (1,3573) 1:A:28:TRP:O 1:A:32:LEU:H 1 0.03 0.03 (1,3551) 1:A:160:GLN:H 1:A:161:HIS:H 1 0.01 0.01	(1,391)	1:A:105:LYS:H	1:A:105:LYS:HB2	1	0.03	0.03
(1,374) 1:A:97:ILE:H 1:A:97:ILE:HB 1 0.01 0.01 (1,372) 1:A:96:GLU:HA 1:A:97:ILE:H 1 0.15 0.15 (1,3627) 1:A:142:LEU:O 1:A:146:LEU:H 1 0.03 0.03 (1,3619) 1:A:121:PHE:O 1:A:125:TRP:H 1 0.02 0.02 (1,3618) 1:A:120:HIS:O 1:A:124:LEU:N 1 0.02 0.02 (1,3610) 1:A:73:HIS:N 1:A:76:LEU:O 1 0.02 0.02 (1,3596) 1:A:43:VAL:O 1:A:47:LYS:N 1 0.01 0.01 (1,3593) 1:A:41:ARG:O 1:A:45:ASN:H 1 0.03 0.03 (1,3587) 1:A:37:GLN:O 1:A:41:ARG:H 1 0.03 0.03 (1,3573) 1:A:28:TRP:O 1:A:32:LEU:H 1 0.03 0.03 (1,3571) 1:A:167:GLN:H 1:A:167:GLN:HB2 1 0.12 0.12 (1,3541) 1:A:160:GLN:HG2 1:A:161:HIS:H 1 0.07 0.07	, ,	1:A:103:ASP:H	1:A:103:ASP:HB3	1	0.04	0.04
(1,372) 1:A:96:GLU:HA 1:A:97:ILE:H 1 0.15 0.15 (1,3627) 1:A:142:LEU:O 1:A:146:LEU:H 1 0.03 0.03 (1,3619) 1:A:121:PHE:O 1:A:125:TRP:H 1 0.02 0.02 (1,3618) 1:A:120:HIS:O 1:A:124:LEU:N 1 0.02 0.02 (1,3610) 1:A:73:HIS:N 1:A:76:LEU:O 1 0.02 0.02 (1,3596) 1:A:43:VAL:O 1:A:47:LYS:N 1 0.01 0.01 (1,3593) 1:A:41:ARG:O 1:A:45:ASN:H 1 0.03 0.03 (1,3573) 1:A:37:GLN:O 1:A:41:ARG:H 1 0.03 0.03 (1,3573) 1:A:28:TRP:O 1:A:31:ARG:H 1 0.03 0.03 (1,3571) 1:A:27:LEU:O 1:A:31:ARG:H 1 0.01 0.01 (1,3551) 1:A:160:GLN:H 1:A:161:HIS:H 1 0.07 0.07 (1,3537) 1:A:160:GLN:H 1:A:160:GLN:HB2 1 0.02 0.02	(1,379)	1:A:100:PRO:HB3	1:A:101:GLU:H	1	0.04	0.04
(1,3627) 1:A:142:LEU:O 1:A:146:LEU:H 1 0.03 0.03 (1,3619) 1:A:121:PHE:O 1:A:125:TRP:H 1 0.02 0.02 (1,3618) 1:A:120:HIS:O 1:A:124:LEU:N 1 0.02 0.02 (1,3610) 1:A:73:HIS:N 1:A:76:LEU:O 1 0.02 0.02 (1,3596) 1:A:43:VAL:O 1:A:47:LYS:N 1 0.01 0.01 (1,3593) 1:A:41:ARG:O 1:A:45:ASN:H 1 0.03 0.03 (1,3587) 1:A:37:GLN:O 1:A:41:ARG:H 1 0.03 0.03 (1,3573) 1:A:28:TRP:O 1:A:32:LEU:H 1 0.03 0.03 (1,3571) 1:A:167:GLN:H 1:A:167:GLN:HB2 1 0.01 0.01 (1,3551) 1:A:160:GLN:H 1:A:167:GLN:HB2 1 0.12 0.12 (1,3541) 1:A:160:GLN:HG2 1:A:161:HIS:H 1 0.07 0.07 (1,3508) 1:A:149:GLU:HA 1:A:149:GLU:HG2 1 0.27 0.27 <	(1,374)	1:A:97:ILE:H	1:A:97:ILE:HB	1	0.01	0.01
(1,3627) 1:A:142:LEU:O 1:A:146:LEU:H 1 0.03 0.03 (1,3619) 1:A:121:PHE:O 1:A:125:TRP:H 1 0.02 0.02 (1,3618) 1:A:120:HIS:O 1:A:124:LEU:N 1 0.02 0.02 (1,3610) 1:A:73:HIS:N 1:A:76:LEU:O 1 0.02 0.02 (1,3596) 1:A:43:VAL:O 1:A:47:LYS:N 1 0.01 0.01 (1,3593) 1:A:41:ARG:O 1:A:45:ASN:H 1 0.03 0.03 (1,3587) 1:A:37:GLN:O 1:A:41:ARG:H 1 0.03 0.03 (1,3573) 1:A:28:TRP:O 1:A:32:LEU:H 1 0.03 0.03 (1,3571) 1:A:167:GLN:H 1:A:167:GLN:HB2 1 0.01 0.01 (1,3551) 1:A:160:GLN:H 1:A:167:GLN:HB2 1 0.12 0.12 (1,3541) 1:A:160:GLN:HG2 1:A:161:HIS:H 1 0.07 0.07 (1,3508) 1:A:149:GLU:HA 1:A:149:GLU:HG2 1 0.27 0.27 <	(1,372)	1:A:96:GLU:HA	1:A:97:ILE:H	1	0.15	0.15
(1,3618) 1:A:120:HIS:O 1:A:124:LEU:N 1 0.02 0.02 (1,3610) 1:A:73:HIS:N 1:A:76:LEU:O 1 0.02 0.02 (1,3596) 1:A:43:VAL:O 1:A:47:LYS:N 1 0.01 0.01 (1,3593) 1:A:41:ARG:O 1:A:45:ASN:H 1 0.03 0.03 (1,3587) 1:A:37:GLN:O 1:A:41:ARG:H 1 0.03 0.03 (1,3573) 1:A:28:TRP:O 1:A:32:LEU:H 1 0.03 0.03 (1,3571) 1:A:27:LEU:O 1:A:31:ARG:H 1 0.01 0.01 (1,3551) 1:A:167:GLN:H 1:A:167:GLN:HB2 1 0.12 0.12 (1,3541) 1:A:160:GLN:HG2 1:A:161:HIS:H 1 0.07 0.07 (1,3537) 1:A:149:GLU:HA 1:A:160:GLN:HB2 1 0.02 0.02 (1,3508) 1:A:149:GLU:HA 1:A:149:GLU:HG2 1 0.27 0.27 (1,3508) 1:A:142:LEU:HD11 1:A:145:TRP:HE3 1 0.05 0.05	, ,	1:A:142:LEU:O	1:A:146:LEU:H	1	0.03	0.03
(1,3610) 1:A:73:HIS:N 1:A:76:LEU:O 1 0.02 0.02 (1,3596) 1:A:43:VAL:O 1:A:47:LYS:N 1 0.01 0.01 (1,3593) 1:A:41:ARG:O 1:A:45:ASN:H 1 0.03 0.03 (1,3587) 1:A:37:GLN:O 1:A:41:ARG:H 1 0.03 0.03 (1,3573) 1:A:28:TRP:O 1:A:32:LEU:H 1 0.03 0.03 (1,3571) 1:A:27:LEU:O 1:A:31:ARG:H 1 0.01 0.01 (1,3571) 1:A:167:GLN:H 1:A:167:GLN:HB2 1 0.01 0.01 (1,3551) 1:A:160:GLN:HG2 1:A:161:HIS:H 1 0.07 0.07 (1,3541) 1:A:160:GLN:HG2 1:A:161:HIS:H 1 0.07 0.07 (1,3537) 1:A:160:GLN:H 1:A:160:GLN:HB2 1 0.02 0.02 (1,3520) 1:A:149:GLU:HA 1:A:149:GLU:HG2 1 0.27 0.27 (1,3508) 1:A:142:LEU:HD11 1:A:145:TRP:HE3 1 0.05 0.05	(1,3619)	1:A:121:PHE:O	1:A:125:TRP:H	1	0.02	0.02
(1,3596) 1:A:43:VAL:O 1:A:47:LYS:N 1 0.01 0.01 (1,3593) 1:A:41:ARG:O 1:A:45:ASN:H 1 0.03 0.03 (1,3587) 1:A:37:GLN:O 1:A:41:ARG:H 1 0.03 0.03 (1,3573) 1:A:28:TRP:O 1:A:32:LEU:H 1 0.03 0.03 (1,3571) 1:A:27:LEU:O 1:A:31:ARG:H 1 0.01 0.01 (1,3551) 1:A:167:GLN:H 1:A:167:GLN:HB2 1 0.12 0.12 (1,3541) 1:A:160:GLN:HG2 1:A:161:HIS:H 1 0.07 0.07 (1,3537) 1:A:160:GLN:H 1:A:160:GLN:HB2 1 0.02 0.02 (1,3520) 1:A:149:GLU:HA 1:A:149:GLU:HG2 1 0.27 0.27 (1,3508) 1:A:142:LEU:HD11 1:A:145:TRP:HE3 1 0.05 0.05 (1,3508) 1:A:142:LEU:HD13 1:A:145:TRP:HE3 1 0.05 0.05 (1,3493) 1:A:131:LYS:H 1:A:131:LYS:HD2 1 0.42 0.42	(1,3618)	1:A:120:HIS:O	1:A:124:LEU:N	1	0.02	0.02
(1,3593) 1:A:41:ARG:O 1:A:45:ASN:H 1 0.03 0.03 (1,3587) 1:A:37:GLN:O 1:A:41:ARG:H 1 0.03 0.03 (1,3573) 1:A:28:TRP:O 1:A:32:LEU:H 1 0.03 0.03 (1,3571) 1:A:27:LEU:O 1:A:31:ARG:H 1 0.01 0.01 (1,3551) 1:A:167:GLN:H 1:A:167:GLN:HB2 1 0.12 0.12 (1,3541) 1:A:160:GLN:HG2 1:A:161:HIS:H 1 0.07 0.07 (1,3537) 1:A:160:GLN:H 1:A:160:GLN:HB2 1 0.02 0.02 (1,3520) 1:A:149:GLU:HA 1:A:149:GLU:HG2 1 0.27 0.27 (1,3508) 1:A:142:LEU:HD11 1:A:145:TRP:HE3 1 0.05 0.05 (1,3508) 1:A:142:LEU:HD13 1:A:145:TRP:HE3 1 0.05 0.05 (1,3493) 1:A:131:LYS:H 1:A:131:LYS:HD2 1 0.42 0.42 (1,3473) 1:A:122:LYS:HA 1:A:1212:LYS:HG2 1 0.02 0.02 <td>(1,3610)</td> <td>1:A:73:HIS:N</td> <td>1:A:76:LEU:O</td> <td>1</td> <td>0.02</td> <td>0.02</td>	(1,3610)	1:A:73:HIS:N	1:A:76:LEU:O	1	0.02	0.02
(1,3587) 1:A:37:GLN:O 1:A:41:ARG:H 1 0.03 0.03 (1,3573) 1:A:28:TRP:O 1:A:32:LEU:H 1 0.03 0.03 (1,3571) 1:A:27:LEU:O 1:A:31:ARG:H 1 0.01 0.01 (1,3551) 1:A:167:GLN:H 1:A:167:GLN:HB2 1 0.12 0.12 (1,3541) 1:A:160:GLN:HG2 1:A:161:HIS:H 1 0.07 0.07 (1,3537) 1:A:160:GLN:H 1:A:160:GLN:HB2 1 0.02 0.02 (1,3520) 1:A:149:GLU:HA 1:A:149:GLU:HG2 1 0.27 0.27 (1,3508) 1:A:142:LEU:HD11 1:A:145:TRP:HE3 1 0.05 0.05 (1,3508) 1:A:142:LEU:HD12 1:A:145:TRP:HE3 1 0.05 0.05 (1,3508) 1:A:142:LEU:HD13 1:A:145:TRP:HE3 1 0.05 0.05 (1,3493) 1:A:131:LYS:H 1:A:131:LYS:HD2 1 0.42 0.42 (1,3473) 1:A:142:LEU:HD14 1:A:122:LYS:HG2 1 0.02 <th< td=""><td>(1,3596)</td><td>1:A:43:VAL:O</td><td>1:A:47:LYS:N</td><td>1</td><td>0.01</td><td>0.01</td></th<>	(1,3596)	1:A:43:VAL:O	1:A:47:LYS:N	1	0.01	0.01
(1,3573) 1:A:28:TRP:O 1:A:32:LEU:H 1 0.03 0.03 (1,3571) 1:A:27:LEU:O 1:A:31:ARG:H 1 0.01 0.01 (1,3551) 1:A:167:GLN:H 1:A:167:GLN:HB2 1 0.12 0.12 (1,3541) 1:A:160:GLN:HG2 1:A:161:HIS:H 1 0.07 0.07 (1,3537) 1:A:160:GLN:H 1:A:160:GLN:HB2 1 0.02 0.02 (1,3520) 1:A:149:GLU:HA 1:A:149:GLU:HG2 1 0.27 0.27 (1,3508) 1:A:142:LEU:HD11 1:A:145:TRP:HE3 1 0.05 0.05 (1,3508) 1:A:142:LEU:HD12 1:A:145:TRP:HE3 1 0.05 0.05 (1,3508) 1:A:142:LEU:HD13 1:A:145:TRP:HE3 1 0.05 0.05 (1,3493) 1:A:131:LYS:H 1:A:131:LYS:HD2 1 0.42 0.42 (1,3473) 1:A:122:LYS:HA 1:A:122:LYS:HG2 1 0.02 0.02	(1,3593)	1:A:41:ARG:O	1:A:45:ASN:H	1	0.03	0.03
(1,3571) 1:A:27:LEU:O 1:A:31:ARG:H 1 0.01 0.01 (1,3551) 1:A:167:GLN:H 1:A:167:GLN:HB2 1 0.12 0.12 (1,3541) 1:A:160:GLN:HG2 1:A:161:HIS:H 1 0.07 0.07 (1,3537) 1:A:160:GLN:H 1:A:160:GLN:HB2 1 0.02 0.02 (1,3520) 1:A:149:GLU:HA 1:A:149:GLU:HG2 1 0.27 0.27 (1,3508) 1:A:142:LEU:HD11 1:A:145:TRP:HE3 1 0.05 0.05 (1,3508) 1:A:142:LEU:HD12 1:A:145:TRP:HE3 1 0.05 0.05 (1,3508) 1:A:142:LEU:HD13 1:A:145:TRP:HE3 1 0.05 0.05 (1,3493) 1:A:131:LYS:H 1:A:131:LYS:HD2 1 0.42 0.42 (1,3473) 1:A:122:LYS:HA 1:A:122:LYS:HG2 1 0.02 0.02	(1,3587)	1:A:37:GLN:O	1:A:41:ARG:H	1	0.03	0.03
(1,3551) 1:A:167:GLN:H 1:A:167:GLN:HB2 1 0.12 0.12 (1,3541) 1:A:160:GLN:HG2 1:A:161:HIS:H 1 0.07 0.07 (1,3537) 1:A:160:GLN:H 1:A:160:GLN:HB2 1 0.02 0.02 (1,3520) 1:A:149:GLU:HA 1:A:149:GLU:HG2 1 0.27 0.27 (1,3508) 1:A:142:LEU:HD11 1:A:145:TRP:HE3 1 0.05 0.05 (1,3508) 1:A:142:LEU:HD12 1:A:145:TRP:HE3 1 0.05 0.05 (1,3508) 1:A:142:LEU:HD13 1:A:145:TRP:HE3 1 0.05 0.05 (1,3493) 1:A:131:LYS:H 1:A:131:LYS:HD2 1 0.42 0.42 (1,3473) 1:A:122:LYS:HA 1:A:122:LYS:HG2 1 0.02 0.02	(1,3573)	1:A:28:TRP:O	1:A:32:LEU:H	1	0.03	0.03
(1,3541) 1:A:160:GLN:HG2 1:A:161:HIS:H 1 0.07 0.07 (1,3537) 1:A:160:GLN:H 1:A:160:GLN:HB2 1 0.02 0.02 (1,3520) 1:A:149:GLU:HA 1:A:149:GLU:HG2 1 0.27 0.27 (1,3508) 1:A:142:LEU:HD11 1:A:145:TRP:HE3 1 0.05 0.05 (1,3508) 1:A:142:LEU:HD12 1:A:145:TRP:HE3 1 0.05 0.05 (1,3508) 1:A:142:LEU:HD13 1:A:145:TRP:HE3 1 0.05 0.05 (1,3493) 1:A:131:LYS:H 1:A:131:LYS:HD2 1 0.42 0.42 (1,3473) 1:A:122:LYS:HA 1:A:122:LYS:HG2 1 0.02 0.02	(1,3571)	1:A:27:LEU:O	1:A:31:ARG:H	1	0.01	0.01
(1,3537) 1:A:160:GLN:H 1:A:160:GLN:HB2 1 0.02 0.02 (1,3520) 1:A:149:GLU:HA 1:A:149:GLU:HG2 1 0.27 0.27 (1,3508) 1:A:142:LEU:HD11 1:A:145:TRP:HE3 1 0.05 0.05 (1,3508) 1:A:142:LEU:HD12 1:A:145:TRP:HE3 1 0.05 0.05 (1,3508) 1:A:142:LEU:HD13 1:A:145:TRP:HE3 1 0.05 0.05 (1,3493) 1:A:131:LYS:H 1:A:131:LYS:HD2 1 0.42 0.42 (1,3473) 1:A:122:LYS:HA 1:A:122:LYS:HG2 1 0.02 0.02	` ′	1:A:167:GLN:H	1:A:167:GLN:HB2	1	0.12	0.12
(1,3537) 1:A:160:GLN:H 1:A:160:GLN:HB2 1 0.02 0.02 (1,3520) 1:A:149:GLU:HA 1:A:149:GLU:HG2 1 0.27 0.27 (1,3508) 1:A:142:LEU:HD11 1:A:145:TRP:HE3 1 0.05 0.05 (1,3508) 1:A:142:LEU:HD12 1:A:145:TRP:HE3 1 0.05 0.05 (1,3508) 1:A:142:LEU:HD13 1:A:145:TRP:HE3 1 0.05 0.05 (1,3493) 1:A:131:LYS:H 1:A:131:LYS:HD2 1 0.42 0.42 (1,3473) 1:A:122:LYS:HA 1:A:122:LYS:HG2 1 0.02 0.02	(1,3541)	1:A:160:GLN:HG2	1:A:161:HIS:H	1	0.07	0.07
(1,3520) 1:A:149:GLU:HA 1:A:149:GLU:HG2 1 0.27 0.27 (1,3508) 1:A:142:LEU:HD11 1:A:145:TRP:HE3 1 0.05 0.05 (1,3508) 1:A:142:LEU:HD12 1:A:145:TRP:HE3 1 0.05 0.05 (1,3508) 1:A:142:LEU:HD13 1:A:145:TRP:HE3 1 0.05 0.05 (1,3493) 1:A:131:LYS:H 1:A:131:LYS:HD2 1 0.42 0.42 (1,3473) 1:A:122:LYS:HA 1:A:122:LYS:HG2 1 0.02 0.02	, ,	1:A:160:GLN:H	1:A:160:GLN:HB2	1	0.02	0.02
(1,3508) 1:A:142:LEU:HD11 1:A:145:TRP:HE3 1 0.05 0.05 (1,3508) 1:A:142:LEU:HD12 1:A:145:TRP:HE3 1 0.05 0.05 (1,3508) 1:A:142:LEU:HD13 1:A:145:TRP:HE3 1 0.05 0.05 (1,3493) 1:A:131:LYS:H 1:A:131:LYS:HD2 1 0.42 0.42 (1,3473) 1:A:122:LYS:HA 1:A:122:LYS:HG2 1 0.02 0.02	` ′	1:A:149:GLU:HA	1:A:149:GLU:HG2	1	0.27	0.27
(1,3508) 1:A:142:LEU:HD12 1:A:145:TRP:HE3 1 0.05 0.05 (1,3508) 1:A:142:LEU:HD13 1:A:145:TRP:HE3 1 0.05 0.05 (1,3493) 1:A:131:LYS:H 1:A:131:LYS:HD2 1 0.42 0.42 (1,3473) 1:A:122:LYS:HA 1:A:122:LYS:HG2 1 0.02 0.02		1:A:142:LEU:HD11	1:A:145:TRP:HE3	1	0.05	0.05
(1,3508) 1:A:142:LEU:HD13 1:A:145:TRP:HE3 1 0.05 0.05 (1,3493) 1:A:131:LYS:H 1:A:131:LYS:HD2 1 0.42 0.42 (1,3473) 1:A:122:LYS:HA 1:A:122:LYS:HG2 1 0.02 0.02		1:A:142:LEU:HD12	1:A:145:TRP:HE3	1	0.05	0.05
(1,3493) 1:A:131:LYS:H 1:A:131:LYS:HD2 1 0.42 0.42 (1,3473) 1:A:122:LYS:HA 1:A:122:LYS:HG2 1 0.02 0.02	_ `	1:A:142:LEU:HD13	1:A:145:TRP:HE3		0.05	0.05
(1,3473) 1:A:122:LYS:HA 1:A:122:LYS:HG2 1 0.02 0.02	· · /	1:A:131:LYS:H	1:A:131:LYS:HD2		0.42	0.42
	('	1:A:122:LYS:HA	1:A:122:LYS:HG2			
(1,9400) + 1.A.121.1 HE.HD2 + 1.A.122.LIS.H + 1 + 0.00 + 0.00	(1,3466)	1:A:121:PHE:HB2	1:A:122:LYS:H	1	0.06	0.06



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
	1:A:119:ASP:HA	1:A:122:LYS:HG2	1	0.48	0.48
(1,3452)	1:A:111:ARG:HG2	1:A:112:GLY:H	1	0.02	0.02
(1,3446)	1:A:110:TYR:HD1	1:A:114:LYS:HB2	1	0.92	0.92
(1,3444)	1:A:109:MET:HG2	1:A:115:ILE:HA	1	0.57	0.57
(1,3439)	1:A:105:LYS:HB2	1:A:158:VAL:HG11	1	0.6	0.6
(1,3439)	1:A:105:LYS:HB2	1:A:158:VAL:HG12	1	0.6	0.6
(1,3439)	1:A:105:LYS:HB2	1:A:158:VAL:HG13	1	0.6	0.6
(1,3392)	1:A:95:PRO:HG2	1:A:134:LEU:HD11	1	0.01	0.01
(1,3392)	1:A:95:PRO:HG2	1:A:134:LEU:HD12	1	0.01	0.01
(1,3392)	1:A:95:PRO:HG2	1:A:134:LEU:HD13	1	0.01	0.01
(1,339)	1:A:82:ILE:HB	1:A:83:GLU:H	1	0.02	0.02
(1,3354)	1:A:84:PHE:HB2	1:A:97:ILE:HA	1	0.33	0.33
(1,3352)	1:A:83:GLU:H	1:A:100:PRO:HD2	1	0.01	0.01
(1,3345)	1:A:81:ASP:H	1:A:99:VAL:HG11	1	0.25	0.25
(1,3345)	1:A:81:ASP:H	1:A:99:VAL:HG12	1	0.25	0.25
(1,3345)	1:A:81:ASP:H	1:A:99:VAL:HG13	1	0.25	0.25
(1,3340)	1:A:80:PHE:HB2	1:A:99:VAL:HG11	1	0.06	0.06
(1,3340)	1:A:80:PHE:HB2	1:A:99:VAL:HG12	1	0.06	0.06
(1,3340)	1:A:80:PHE:HB2	1:A:99:VAL:HG13	1	0.06	0.06
(1,3337)	1:A:78:TYR:HE1	1:A:159:ILE:HG12	1	0.2	0.2
(1,3330)	1:A:77:LYS:H	1:A:77:LYS:HD2	1	0.01	0.01
(1,3323)	1:A:72:ILE:HD11	1:A:77:LYS:HE2	1	0.16	0.16
(1,3323)	1:A:72:ILE:HD12	1:A:77:LYS:HE2	1	0.16	0.16
(1,3323)	1:A:72:ILE:HD13	1:A:77:LYS:HE2	1	0.16	0.16
(1,3299)	1:A:68:LYS:HG2	1:A:82:ILE:H	1	0.75	0.75
(1,3290)	1:A:67:GLY:HA2	1:A:82:ILE:HD11	1	0.08	0.08
(1,3290)	1:A:67:GLY:HA2	1:A:82:ILE:HD12	1	0.08	0.08
(1,3290)	1:A:67:GLY:HA2	1:A:82:ILE:HD13	1	0.08	0.08
(1,3276)	1:A:61:GLU:HG2	1:A:63:THR:HG21	1	0.26	0.26
(1,3276)	1:A:61:GLU:HG2	1:A:63:THR:HG22	1	0.26	0.26
(1,3276)	1:A:61:GLU:HG2	1:A:63:THR:HG23	1	0.26	0.26
(1,3268)	1:A:60:LYS:HB2	1:A:61:GLU:HG2	1	0.05	0.05
(1,3263)	1:A:59:ASN:HD22	1:A:61:GLU:HG2	1	0.73	0.73
(1,3253)	1:A:58:SER:HB2	1:A:62:GLY:H	1	0.14	0.14
(1,325)	1:A:78:TYR:HB3	1:A:79:GLU:H	1	0.01	0.01
(1,3248)	1:A:57:GLU:HA	1:A:57:GLU:HG2	1	0.01	0.01
(1,3217)	1:A:56:LEU:HB2	1:A:67:GLY:HA2	1	0.04	0.04
(1,3210)	1:A:55:ARG:HG2	1:A:70:TRP:HH2	1	0.47	0.47
(1,3209)	1:A:55:ARG:HG2	1:A:70:TRP:HZ3	1	0.72	0.72
(1,3201)	1:A:53:TRP:HB2	1:A:70:TRP:H	1	0.19	0.19
(1,3194)	1:A:47:LYS:HG3	1:A:52:ASP:HB3	1	0.07	0.07
(1,3178)	1:A:41:ARG:HD2	1:A:45:ASN:H	1	0.01	0.01



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,3165)	1:A:37:GLN:HG2	1:A:37:GLN:HE22	1	0.26	0.26
(1,3134)	1:A:31:ARG:H	1:A:33:LYS:HG2	1	0.02	0.02
(1,3108)	1:A:24:ASP:HB2	1:A:27:LEU:HD21	1	0.39	0.39
(1,3108)	1:A:24:ASP:HB2	1:A:27:LEU:HD22	1	0.39	0.39
(1,3108)	1:A:24:ASP:HB2	1:A:27:LEU:HD23	1	0.39	0.39
(1,3106)	1:A:24:ASP:HB2	1:A:27:LEU:H	1	0.07	0.07
(1,3101)	1:A:23:ARG:HA	1:A:23:ARG:HG2	1	0.22	0.22
(1,3100)	1:A:23:ARG:H	1:A:23:ARG:HG2	1	0.26	0.26
(1,3096)	1:A:22:PRO:HD2	1:A:86:ILE:HG21	1	0.12	0.12
(1,3096)	1:A:22:PRO:HD2	1:A:86:ILE:HG22	1	0.12	0.12
(1,3096)	1:A:22:PRO:HD2	1:A:86:ILE:HG23	1	0.12	0.12
(1,3089)	1:A:22:PRO:HB2	1:A:63:THR:HG21	1	0.15	0.15
(1,3089)	1:A:22:PRO:HB2	1:A:63:THR:HG22	1	0.15	0.15
(1,3089)	1:A:22:PRO:HB2	1:A:63:THR:HG23	1	0.15	0.15
(1,3075)	1:A:20:ALA:HB1	1:A:24:ASP:HB2	1	0.01	0.01
(1,3075)	1:A:20:ALA:HB2	1:A:24:ASP:HB2	1	0.01	0.01
(1,3075)	1:A:20:ALA:HB3	1:A:24:ASP:HB2	1	0.01	0.01
(1,3070)	1:A:19:ASN:HD21	1:A:130:PRO:HD2	1	0.09	0.09
(1,3068)	1:A:19:ASN:HD21	1:A:129:VAL:HG11	1	0.28	0.28
(1,3068)	1:A:19:ASN:HD21	1:A:129:VAL:HG12	1	0.28	0.28
(1,3068)	1:A:19:ASN:HD21	1:A:129:VAL:HG13	1	0.28	0.28
(1,3062)	1:A:19:ASN:HB2	1:A:91:PRO:HB2	1	0.03	0.03
(1,3041)	1:A:7:ARG:H	1:A:7:ARG:HG2	1	0.09	0.09
(1,3038)	1:A:4:GLU:HA	1:A:7:ARG:HG2	1	0.28	0.28
(1,3022)	1:A:121:PHE:HE1	1:A:140:LEU:HB2	1	1.45	1.45
(1,3011)	1:A:145:TRP:HE3	1:A:148:VAL:HB	1	0.01	0.01
(1,3007)	1:A:132:PHE:HE1	1:A:140:LEU:HG	1	0.72	0.72
(1,3004)	1:A:125:TRP:HZ3	1:A:137:LEU:HB2	1	0.03	0.03
(1,3001)	1:A:84:PHE:HE1	1:A:97:ILE:HB	1	0.51	0.51
(1,2921)	1:A:105:LYS:HD2	1:A:158:VAL:HG21	1	0.02	0.02
(1,2921)	1:A:105:LYS:HD2	1:A:158:VAL:HG22	1	0.02	0.02
(1,2921)	1:A:105:LYS:HD2	1:A:158:VAL:HG23	1	0.02	0.02
(1,2921)	1:A:105:LYS:HD3	1:A:158:VAL:HG21	1	0.02	0.02
(1,2921)	1:A:105:LYS:HD3	1:A:158:VAL:HG22	1	0.02	0.02
(1,2921)	1:A:105:LYS:HD3	1:A:158:VAL:HG23	1	0.02	0.02
(1,292)	1:A:69:CYS:HB3	1:A:70:TRP:H	1	0.01	0.01
(1,2877)	1:A:15:VAL:HG11	1:A:131:LYS:HD3	1	0.07	0.07
(1,2877)	1:A:15:VAL:HG12	1:A:131:LYS:HD3	1	0.07	0.07
(1,2877)	1:A:15:VAL:HG13	1:A:131:LYS:HD3	1	0.07	0.07
(1,2870)	1:A:15:VAL:HG11	1:A:131:LYS:HD2	1	0.02	0.02
(1,2870)	1:A:15:VAL:HG12	1:A:131:LYS:HD2	1	0.02	0.02
(1,2870)	1:A:15:VAL:HG13	1:A:131:LYS:HD2	1	0.02	0.02



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,2865)	1:A:124:LEU:HD21	1:A:140:LEU:HB3	1	0.03	0.03
(1,2865)	1:A:124:LEU:HD22	1:A:140:LEU:HB3	1	0.03	0.03
(1,2865)	1:A:124:LEU:HD23	1:A:140:LEU:HB3	1	0.03	0.03
(1,2842)	1:A:94:ALA:HB1	1:A:125:TRP:HH2	1	0.01	0.01
(1,2842)	1:A:94:ALA:HB2	1:A:125:TRP:HH2	1	0.01	0.01
(1,2842)	1:A:94:ALA:HB3	1:A:125:TRP:HH2	1	0.01	0.01
(1,2825)	1:A:72:ILE:HD11	1:A:77:LYS:HE3	1	0.01	0.01
(1,2825)	1:A:72:ILE:HD12	1:A:77:LYS:HE3	1	0.01	0.01
(1,2825)	1:A:72:ILE:HD13	1:A:77:LYS:HE3	1	0.01	0.01
(1,2824)	1:A:72:ILE:HD11	1:A:77:LYS:HD3	1	0.01	0.01
(1,2824)	1:A:72:ILE:HD12	1:A:77:LYS:HD3	1	0.01	0.01
(1,2824)	1:A:72:ILE:HD13	1:A:77:LYS:HD3	1	0.01	0.01
(1,2808)	1:A:102:LEU:H	1:A:109:MET:HE1	1	0.04	0.04
(1,2808)	1:A:102:LEU:H	1:A:109:MET:HE2	1	0.04	0.04
(1,2808)	1:A:102:LEU:H	1:A:109:MET:HE3	1	0.04	0.04
(1,2805)	1:A:109:MET:HE1	1:A:145:TRP:HH2	1	0.01	0.01
(1,2805)	1:A:109:MET:HE2	1:A:145:TRP:HH2	1	0.01	0.01
(1,2805)	1:A:109:MET:HE3	1:A:145:TRP:HH2	1	0.01	0.01
(1,2797)	1:A:106:THR:HG21	1:A:109:MET:HE1	1	0.03	0.03
(1,2797)	1:A:106:THR:HG21	1:A:109:MET:HE2	1	0.03	0.03
(1,2797)	1:A:106:THR:HG21	1:A:109:MET:HE3	1	0.03	0.03
(1,2797)	1:A:106:THR:HG22	1:A:109:MET:HE1	1	0.03	0.03
(1,2797)	1:A:106:THR:HG22	1:A:109:MET:HE2	1	0.03	0.03
(1,2797)	1:A:106:THR:HG22	1:A:109:MET:HE3	1	0.03	0.03
(1,2797)	1:A:106:THR:HG23	1:A:109:MET:HE1	1	0.03	0.03
(1,2797)	1:A:106:THR:HG23	1:A:109:MET:HE2	1	0.03	0.03
(1,2797)	1:A:106:THR:HG23	1:A:109:MET:HE3	1	0.03	0.03
(1,2770)	1:A:76:LEU:HD21	1:A:164:LYS:HE2	1	0.05	0.05
(1,2770)	1:A:76:LEU:HD21	1:A:164:LYS:HE3	1	0.05	0.05
(1,2770)	1:A:76:LEU:HD22	1:A:164:LYS:HE2	1	0.05	0.05
(1,2770)	1:A:76:LEU:HD22	1:A:164:LYS:HE3	1	0.05	0.05
(1,2770)	1:A:76:LEU:HD23	1:A:164:LYS:HE2	1	0.05	0.05
(1,2770)	1:A:76:LEU:HD23	1:A:164:LYS:HE3	1	0.05	0.05
(1,2765)	1:A:76:LEU:HD21	1:A:164:LYS:HB2	1	0.04	0.04
(1,2765)	1:A:76:LEU:HD22	1:A:164:LYS:HB2	1	0.04	0.04
(1,2765)	1:A:76:LEU:HD23	1:A:164:LYS:HB2	1	0.04	0.04
(1,2746)	1:A:80:PHE:HZ	1:A:159:ILE:HG21	1	0.01	0.01
(1,2746)	1:A:80:PHE:HZ	1:A:159:ILE:HG22	1	0.01	0.01
(1,2746)	1:A:80:PHE:HZ	1:A:159:ILE:HG23	1	0.01	0.01
(1,2735)	1:A:78:TYR:HB2	1:A:154:ILE:HG21	1	0.02	0.02
(1,2735)	1:A:78:TYR:HB2	1:A:154:ILE:HG22	1	0.02	0.02
(1,2735)	1:A:78:TYR:HB2	1:A:154:ILE:HG23	1	0.02	0.02



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,2731)	1:A:151:PRO:HA	1:A:154:ILE:HD11	1	0.01	0.01
(1,2731)	1:A:151:PRO:HA	1:A:154:ILE:HD12	1	0.01	0.01
(1,2731)	1:A:151:PRO:HA	1:A:154:ILE:HD13	1	0.01	0.01
(1,2718)	1:A:153:LEU:HD11	1:A:156:LYS:HE2	1	0.01	0.01
(1,2718)	1:A:153:LEU:HD11	1:A:156:LYS:HE3	1	0.01	0.01
(1,2718)	1:A:153:LEU:HD12	1:A:156:LYS:HE2	1	0.01	0.01
(1,2718)	1:A:153:LEU:HD12	1:A:156:LYS:HE3	1	0.01	0.01
(1,2718)	1:A:153:LEU:HD13	1:A:156:LYS:HE2	1	0.01	0.01
(1,2718)	1:A:153:LEU:HD13	1:A:156:LYS:HE3	1	0.01	0.01
(1,2714)	1:A:106:THR:HB	1:A:153:LEU:HD21	1	0.02	0.02
(1,2714)	1:A:106:THR:HB	1:A:153:LEU:HD22	1	0.02	0.02
(1,2714)	1:A:106:THR:HB	1:A:153:LEU:HD23	1	0.02	0.02
(1,2707)	1:A:146:LEU:HA	1:A:150:ILE:HD11	1	0.02	0.02
(1,2707)	1:A:146:LEU:HA	1:A:150:ILE:HD12	1	0.02	0.02
(1,2707)	1:A:146:LEU:HA	1:A:150:ILE:HD13	1	0.02	0.02
(1,270)	1:A:64:ARG:H	1:A:64:ARG:HB3	1	0.01	0.01
(1,2640)	1:A:125:TRP:HZ3	1:A:137:LEU:HD11	1	0.02	0.02
(1,2640)	1:A:125:TRP:HZ3	1:A:137:LEU:HD12	1	0.02	0.02
(1,2640)	1:A:125:TRP:HZ3	1:A:137:LEU:HD13	1	0.02	0.02
(1,2625)	1:A:95:PRO:HG2	1:A:134:LEU:HD11	1	0.01	0.01
(1,2625)	1:A:95:PRO:HG2	1:A:134:LEU:HD12	1	0.01	0.01
(1,2625)	1:A:95:PRO:HG2	1:A:134:LEU:HD13	1	0.01	0.01
(1,2615)	1:A:84:PHE:HE1	1:A:134:LEU:HD21	1	0.02	0.02
(1,2615)	1:A:84:PHE:HE1	1:A:134:LEU:HD22	1	0.02	0.02
(1,2615)	1:A:84:PHE:HE1	1:A:134:LEU:HD23	1	0.02	0.02
(1,2606)	1:A:92:THR:HA	1:A:129:VAL:HG21	1	0.01	0.01
(1,2606)	1:A:92:THR:HA	1:A:129:VAL:HG22	1	0.01	0.01
(1,2606)	1:A:92:THR:HA	1:A:129:VAL:HG23	1	0.01	0.01
(1,2588)	1:A:124:LEU:HD21	1:A:132:PHE:HE1	1	0.06	0.06
(1,2588)	1:A:124:LEU:HD22	1:A:132:PHE:HE1	1	0.06	0.06
(1,2588)	1:A:124:LEU:HD23	1:A:132:PHE:HE1	1	0.06	0.06
(1,2585)	1:A:115:ILE:HD11	1:A:117:LEU:HD21	1	0.02	0.02
(1,2585)	1:A:115:ILE:HD11	1:A:117:LEU:HD22	1	0.02	0.02
(1,2585)	1:A:115:ILE:HD11	1:A:117:LEU:HD23	1	0.02	0.02
(1,2585)	1:A:115:ILE:HD12	1:A:117:LEU:HD21	1	0.02	0.02
(1,2585)	1:A:115:ILE:HD12	1:A:117:LEU:HD22	1	0.02	0.02
(1,2585)	1:A:115:ILE:HD12	1:A:117:LEU:HD23	1	0.02	0.02
(1,2585)	1:A:115:ILE:HD13	1:A:117:LEU:HD21	1	0.02	0.02
(1,2585)	1:A:115:ILE:HD13	1:A:117:LEU:HD22	1	0.02	0.02
(1,2585)	1:A:115:ILE:HD13	1:A:117:LEU:HD23	1	0.02	0.02
(1,2582)	1:A:117:LEU:HD11	1:A:141:GLY:HA3	1	0.02	0.02
(1,2582)	1:A:117:LEU:HD12	1:A:141:GLY:HA3	1	0.02	0.02



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,2582)	1:A:117:LEU:HD13	1:A:141:GLY:HA3	1	0.02	0.02
(1,2570)	1:A:110:TYR:HD1	1:A:115:ILE:HG21	1	1.66	1.66
(1,2570)	1:A:110:TYR:HD1	1:A:115:ILE:HG22	1	1.66	1.66
(1,2570)	1:A:110:TYR:HD1	1:A:115:ILE:HG23	1	1.66	1.66
(1,2555)	1:A:106:THR:HG21	1:A:145:TRP:HZ2	1	0.04	0.04
(1,2555)	1:A:106:THR:HG22	1:A:145:TRP:HZ2	1	0.04	0.04
(1,2555)	1:A:106:THR:HG23	1:A:145:TRP:HZ2	1	0.04	0.04
(1,2554)	1:A:102:LEU:HD21	1:A:105:LYS:HE2	1	0.03	0.03
(1,2554)	1:A:102:LEU:HD21	1:A:105:LYS:HE3	1	0.03	0.03
(1,2554)	1:A:102:LEU:HD22	1:A:105:LYS:HE2	1	0.03	0.03
(1,2554)	1:A:102:LEU:HD22	1:A:105:LYS:HE3	1	0.03	0.03
(1,2554)	1:A:102:LEU:HD23	1:A:105:LYS:HE2	1	0.03	0.03
(1,2554)	1:A:102:LEU:HD23	1:A:105:LYS:HE3	1	0.03	0.03
(1,2529)	1:A:97:ILE:HD11	1:A:115:ILE:HD11	1	0.01	0.01
(1,2529)	1:A:97:ILE:HD11	1:A:115:ILE:HD12	1	0.01	0.01
(1,2529)	1:A:97:ILE:HD11	1:A:115:ILE:HD13	1	0.01	0.01
(1,2529)	1:A:97:ILE:HD12	1:A:115:ILE:HD11	1	0.01	0.01
(1,2529)	1:A:97:ILE:HD12	1:A:115:ILE:HD12	1	0.01	0.01
(1,2529)	1:A:97:ILE:HD12	1:A:115:ILE:HD13	1	0.01	0.01
(1,2529)	1:A:97:ILE:HD13	1:A:115:ILE:HD11	1	0.01	0.01
(1,2529)	1:A:97:ILE:HD13	1:A:115:ILE:HD12	1	0.01	0.01
(1,2529)	1:A:97:ILE:HD13	1:A:115:ILE:HD13	1	0.01	0.01
(1,2522)	1:A:97:ILE:HD11	1:A:142:LEU:HB2	1	0.05	0.05
(1,2522)	1:A:97:ILE:HD12	1:A:142:LEU:HB2	1	0.05	0.05
(1,2522)	1:A:97:ILE:HD13	1:A:142:LEU:HB2	1	0.05	0.05
(1,25)	1:A:8:ARG:HA	1:A:11:SER:H	1	0.02	0.02
(1,2495)	1:A:92:THR:HA	1:A:129:VAL:HG11	1	0.06	0.06
(1,2495)	1:A:92:THR:HA	1:A:129:VAL:HG12	1	0.06	0.06
(1,2495)	1:A:92:THR:HA	1:A:129:VAL:HG13	1	0.06	0.06
(1,2468)	1:A:84:PHE:HE1	1:A:86:ILE:HD11	1	0.78	0.78
(1,2468)	1:A:84:PHE:HE1	1:A:86:ILE:HD12	1	0.78	0.78
(1,2468)	1:A:84:PHE:HE1	1:A:86:ILE:HD13	1	0.78	0.78
(1,2460)	1:A:54:PHE:HB3	1:A:82:ILE:HD11	1	0.04	0.04
(1,2460)	1:A:54:PHE:HB3	1:A:82:ILE:HD12	1	0.04	0.04
(1,2460)	1:A:54:PHE:HB3	1:A:82:ILE:HD13	1	0.04	0.04
(1,2447)	1:A:76:LEU:HD11	1:A:161:HIS:HB2	1	0.04	0.04
(1,2447)	1:A:76:LEU:HD12	1:A:161:HIS:HB2	1	0.04	0.04
(1,2447)	1:A:76:LEU:HD13	1:A:161:HIS:HB2	1	0.04	0.04
(1,2436)	1:A:72:ILE:HD11	1:A:77:LYS:HE2	1	0.01	0.01
(1,2436)	1:A:72:ILE:HD12	1:A:77:LYS:HE2	1	0.01	0.01
(1,2436)	1:A:72:ILE:HD13	1:A:77:LYS:HE2	1	0.01	0.01
(1,2429)	1:A:70:TRP:HD1	1:A:72:ILE:HD11	1	0.03	0.03



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,2429)	1:A:70:TRP:HD1	1:A:72:ILE:HD12	1	0.03	0.03
(1,2429)	1:A:70:TRP:HD1	1:A:72:ILE:HD13	1	0.03	0.03
(1,2414)	1:A:22:PRO:HA	1:A:63:THR:HG21	1	0.01	0.01
(1,2414)	1:A:22:PRO:HA	1:A:63:THR:HG22	1	0.01	0.01
(1,2414)	1:A:22:PRO:HA	1:A:63:THR:HG23	1	0.01	0.01
(1,2404)	1:A:56:LEU:HD11	1:A:67:GLY:HA3	1	0.01	0.01
(1,2404)	1:A:56:LEU:HD12	1:A:67:GLY:HA3	1	0.01	0.01
(1,2404)	1:A:56:LEU:HD13	1:A:67:GLY:HA3	1	0.01	0.01
(1,237)	1:A:54:PHE:HB3	1:A:55:ARG:H	1	0.01	0.01
(1,2353)	1:A:16:LEU:HD21	1:A:38:SER:HA	1	0.06	0.06
(1,2353)	1:A:16:LEU:HD22	1:A:38:SER:HA	1	0.06	0.06
(1,2353)	1:A:16:LEU:HD23	1:A:38:SER:HA	1	0.06	0.06
(1,2307)	1:A:18:THR:HG21	1:A:31:ARG:HB3	1	0.04	0.04
(1,2307)	1:A:18:THR:HG22	1:A:31:ARG:HB3	1	0.04	0.04
(1,2307)	1:A:18:THR:HG23	1:A:31:ARG:HB3	1	0.04	0.04
(1,2302)	1:A:16:LEU:HD11	1:A:133:GLY:HA2	1	0.69	0.69
(1,2302)	1:A:16:LEU:HD12	1:A:133:GLY:HA2	1	0.69	0.69
(1,2302)	1:A:16:LEU:HD13	1:A:133:GLY:HA2	1	0.69	0.69
(1,2298)	1:A:16:LEU:HD21	1:A:133:GLY:HA2	1	1.09	1.09
(1,2298)	1:A:16:LEU:HD22	1:A:133:GLY:HA2	1	1.09	1.09
(1,2298)	1:A:16:LEU:HD23	1:A:133:GLY:HA2	1	1.09	1.09
(1,2267)	1:A:10:VAL:HA	1:A:13:ILE:HD11	1	0.01	0.01
(1,2267)	1:A:10:VAL:HA	1:A:13:ILE:HD12	1	0.01	0.01
(1,2267)	1:A:10:VAL:HA	1:A:13:ILE:HD13	1	0.01	0.01
(1,2262)	1:A:13:ILE:HG21	1:A:38:SER:HB2	1	0.06	0.06
(1,2262)	1:A:13:ILE:HG21	1:A:38:SER:HB3	1	0.06	0.06
(1,2262)	1:A:13:ILE:HG22	1:A:38:SER:HB2	1	0.06	0.06
(1,2262)	1:A:13:ILE:HG22	1:A:38:SER:HB3	1	0.06	0.06
(1,2262)	1:A:13:ILE:HG23	1:A:38:SER:HB2	1	0.06	0.06
(1,2262)	1:A:13:ILE:HG23	1:A:38:SER:HB3	1	0.06	0.06
(1,2253)	1:A:10:VAL:HG11	1:A:132:PHE:HE1	1	0.54	0.54
(1,2253)	1:A:10:VAL:HG12	1:A:132:PHE:HE1	1	0.54	0.54
(1,2253)	1:A:10:VAL:HG13	1:A:132:PHE:HE1	1	0.54	0.54
(1,224)	1:A:51:ASN:H	1:A:51:ASN:HB2	1	0.17	0.17
(1,2217)	1:A:153:LEU:HA	1:A:153:LEU:HD11	1	0.24	0.24
(1,2217)	1:A:153:LEU:HA	1:A:153:LEU:HD12	1	0.24	0.24
(1,2217)	1:A:153:LEU:HA	1:A:153:LEU:HD13	1	0.24	0.24
(1,2148)	1:A:75:LEU:HA	1:A:75:LEU:HD11	1	0.01	0.01
(1,2148)	1:A:75:LEU:HA	1:A:75:LEU:HD12	1	0.01	0.01
(1,2148)	1:A:75:LEU:HA	1:A:75:LEU:HD13	1	0.01	0.01
(1,2121)	1:A:27:LEU:HA	1:A:27:LEU:HD11	1	0.2	0.2
(1,2121)	1:A:27:LEU:HA	1:A:27:LEU:HD12	1	0.2	0.2



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

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,2121)	1:A:27:LEU:HA	1:A:27:LEU:HD13	1	0.2	0.2
(1,2085)	1:A:70:TRP:HD1	1:A:77:LYS:HD2	1	0.05	0.05
(1,2079)	1:A:71:TYR:HD1	1:A:150:ILE:HB	1	0.38	0.38
(1,2071)	1:A:121:PHE:HE1	1:A:125:TRP:HZ3	1	0.04	0.04
(1,2065)	1:A:71:TYR:HB2	1:A:80:PHE:HE1	1	1.07	1.07
(1,2065)	1:A:71:TYR:HB3	1:A:80:PHE:HE1	1	1.07	1.07
(1,2059)	1:A:128:ASN:HB3	1:A:132:PHE:HE1	1	0.01	0.01
(1,2057)	1:A:64:ARG:HB2	1:A:66:PHE:HE1	1	1.07	1.07
(1,2052)	1:A:42:TYR:HE1	1:A:46:ASN:HD22	1	0.35	0.35
(1,2049)	1:A:121:PHE:HE1	1:A:140:LEU:HB3	1	2.32	2.32
(1,2048)	1:A:121:PHE:HZ	1:A:125:TRP:HB3	1	0.01	0.01
(1,2039)	1:A:53:TRP:HZ2	1:A:139:ALA:HA	1	0.02	0.02
(1,1985)	1:A:131:LYS:H	1:A:131:LYS:HD3	1	0.09	0.09
(1,1981)	1:A:131:LYS:H	1:A:131:LYS:HG3	1	0.02	0.02
(1,1977)	1:A:111:ARG:H	1:A:111:ARG:HG3	1	0.02	0.02
(1,1969)	1:A:66:PHE:HB3	1:A:83:GLU:HA	1	0.02	0.02
(1,1954)	1:A:127:ARG:HA	1:A:127:ARG:HG3	1	0.05	0.05
(1,1943)	1:A:24:ASP:HB3	1:A:27:LEU:HB2	1	0.02	0.02
(1,1938)	1:A:154:ILE:HA	1:A:159:ILE:HB	1	0.03	0.03
(1,193)	1:A:43:VAL:HA	1:A:45:ASN:H	1	0.01	0.01
(1,1929)	1:A:121:PHE:HE1	1:A:137:LEU:HA	1	2.23	2.23
(1,1921)	1:A:127:ARG:HB2	1:A:128:ASN:HD22	1	0.01	0.01
(1,1897)	1:A:117:LEU:HA	1:A:145:TRP:HD1	1	0.01	0.01
(1,1896)	1:A:110:TYR:HD1	1:A:115:ILE:HA	1	1.86	1.86
(1,1885)	1:A:90:TYR:HE1	1:A:95:PRO:HD3	1	0.01	0.01
(1,1865)	1:A:70:TRP:HD1	1:A:77:LYS:HD3	1	0.05	0.05
(1,1840)	1:A:66:PHE:HB2	1:A:83:GLU:HB2	1	0.03	0.03
(1,1825)	1:A:56:LEU:HG	1:A:65:TRP:HZ3	1	0.02	0.02
(1,1818)	1:A:46:ASN:HA	1:A:51:ASN:HB2	1	0.01	0.01
(1,1810)	1:A:41:ARG:HD2	1:A:44:GLU:HB3	1	0.04	0.04
(1,1803)	1:A:36:TYR:H	1:A:37:GLN:HG2	1	0.02	0.02
(1,1774)	1:A:16:LEU:HG	1:A:34:GLU:HB3	1	0.01	0.01
(1,1768)	1:A:15:VAL:HA	1:A:136:HIS:HE1	1	0.02	0.02
(1,1767)	1:A:13:ILE:HA	1:A:41:ARG:HB2	1	0.03	0.03
(1,1755)	1:A:3:ASP:HB2	1:A:6:THR:HB	1	0.03	0.03
(1,1755)	1:A:3:ASP:HB3	1:A:6:THR:HB	1	0.03	0.03
(1,1740)	1:A:162:LYS:HA	1:A:162:LYS:HE2	1	0.01	0.01
(1,1740)	1:A:162:LYS:HA	1:A:162:LYS:HE3	1	0.01	0.01
(1,1735)	1:A:156:LYS:HB2	1:A:156:LYS:HE2	1	0.05	0.05
(1,1735)	1:A:156:LYS:HB2	1:A:156:LYS:HE3	1	0.05	0.05
(1,1729)	1:A:156:LYS:HB2	1:A:156:LYS:HD2	1	0.06	0.06
(1,1728)	1:A:156:LYS:HA	1:A:156:LYS:HE2	1	0.02	0.02



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,1728)	1:A:156:LYS:HA	1:A:156:LYS:HE3	1	0.02	0.02
(1,1725)	1:A:156:LYS:HA	1:A:156:LYS:HG3	1	0.02	0.02
(1,1716)	1:A:142:LEU:HA	1:A:142:LEU:HG	1	0.25	0.25
(1,1713)	1:A:131:LYS:H	1:A:131:LYS:HD2	1	0.17	0.17
(1,169)	1:A:37:GLN:HA	1:A:41:ARG:H	1	0.04	0.04
(1,1671)	1:A:96:GLU:HG3	1:A:97:ILE:H	1	0.05	0.05
(1,1670)	1:A:96:GLU:HA	1:A:96:GLU:HG3	1	0.2	0.2
(1,1644)	1:A:64:ARG:HD3	1:A:65:TRP:H	1	0.01	0.01
(1,1629)	1:A:60:LYS:HA	1:A:60:LYS:HE2	1	0.14	0.14
(1,1629)	1:A:60:LYS:HA	1:A:60:LYS:HE3	1	0.14	0.14
(1,162)	1:A:38:SER:H	1:A:40:ILE:H	1	0.01	0.01
(1,1599)	1:A:37:GLN:H	1:A:37:GLN:HG3	1	0.03	0.03
(1,1598)	1:A:37:GLN:HG2	1:A:38:SER:H	1	0.02	0.02
(1,1595)	1:A:37:GLN:H	1:A:37:GLN:HG2	1	0.06	0.06
(1,1573)	1:A:26:GLU:H	1:A:26:GLU:HG2	1	0.02	0.02
(1,1573)	1:A:26:GLU:H	1:A:26:GLU:HG3	1	0.02	0.02
(1,1572)	1:A:25:ARG:HB3	1:A:25:ARG:HG2	1	0.01	0.01
(1,1566)	1:A:23:ARG:H	1:A:23:ARG:HD2	1	0.06	0.06
(1,1566)	1:A:23:ARG:H	1:A:23:ARG:HD3	1	0.06	0.06
(1,1565)	1:A:23:ARG:HA	1:A:23:ARG:HG3	1	0.01	0.01
(1,1554)	1:A:13:ILE:HA	1:A:14:PRO:HD2	1	0.01	0.01
(1,1539)	1:A:122:LYS:HA	1:A:126:ALA:H	1	0.02	0.02
(1,1503)	1:A:129:VAL:HA	1:A:131:LYS:H	1	0.05	0.05
(1,1499)	1:A:103:ASP:HA	1:A:105:LYS:H	1	0.08	0.08
(1,1488)	1:A:64:ARG:HA	1:A:85:ASP:HA	1	0.05	0.05
(1,147)	1:A:36:TYR:HB2	1:A:37:GLN:H	1	0.03	0.03
(1,1458)	1:A:23:ARG:HB3	1:A:24:ASP:HA	1	0.04	0.04
(1,1445)	1:A:4:GLU:HA	1:A:6:THR:H	1	0.01	0.01
(1,1439)	1:A:163:GLU:HB2	1:A:164:LYS:H	1	0.04	0.04
(1,1408)	1:A:117:LEU:HB2	1:A:118:THR:H	1	0.03	0.03
(1,1403)	1:A:116:CYS:H	1:A:116:CYS:HB3	1	0.04	0.04
(1,1389)	1:A:85:ASP:H	1:A:85:ASP:HB2	1	0.01	0.01
(1,1372)	1:A:45:ASN:HA	1:A:48:ASN:HB2	1	0.04	0.04
(1,1372)	1:A:45:ASN:HA	1:A:48:ASN:HB3	1	0.04	0.04
(1,1370)	1:A:45:ASN:HA	1:A:45:ASN:HB3	1	0.03	0.03
(1,1368)	1:A:41:ARG:HA	1:A:44:GLU:HB3	1	0.01	0.01
(1,1354)	1:A:38:SER:HA	1:A:41:ARG:HB3	1	0.07	0.07
(1,1350)	1:A:37:GLN:HA	1:A:40:ILE:H	1	0.03	0.03
(1,1333)	1:A:26:GLU:HA	1:A:29:VAL:HB	1	0.04	0.04
(1,1316)	1:A:12:GLU:HA	1:A:13:ILE:H	1	0.01	0.01
(1,1308)	1:A:6:THR:H	1:A:6:THR:HB	1	0.12	0.12
(1,1307)	1:A:6:THR:HA	1:A:9:VAL:HB	1	Continued on	0.01



Continued from previous page...

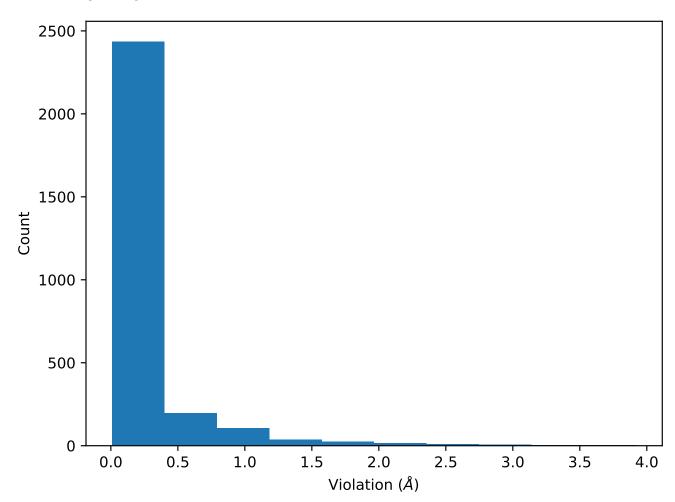
Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,1228)	1:A:27:LEU:HD11	1:A:30:GLN:H	1	0.1	0.1
(1,1228)	1:A:27:LEU:HD12	1:A:30:GLN:H	1	0.1	0.1
(1,1228)	1:A:27:LEU:HD13	1:A:30:GLN:H	1	0.1	0.1
(1,1212)	1:A:19:ASN:HD22	1:A:129:VAL:HG11	1	0.04	0.04
(1,1212)	1:A:19:ASN:HD22	1:A:129:VAL:HG12	1	0.04	0.04
(1,1212)	1:A:19:ASN:HD22	1:A:129:VAL:HG13	1	0.04	0.04
(1,1211)	1:A:19:ASN:HD21	1:A:129:VAL:HG11	1	0.01	0.01
(1,1211)	1:A:19:ASN:HD21	1:A:129:VAL:HG12	1	0.01	0.01
(1,1211)	1:A:19:ASN:HD21	1:A:129:VAL:HG13	1	0.01	0.01
(1,118)	1:A:32:LEU:HB3	1:A:33:LYS:H	1	0.02	0.02
(1,1163)	1:A:97:ILE:H	1:A:97:ILE:HD11	1	0.01	0.01
(1,1163)	1:A:97:ILE:H	1:A:97:ILE:HD12	1	0.01	0.01
(1,1163)	1:A:97:ILE:H	1:A:97:ILE:HD13	1	0.01	0.01
(1,1159)	1:A:89:THR:H	1:A:89:THR:HG21	1	0.02	0.02
(1,1159)	1:A:89:THR:H	1:A:89:THR:HG22	1	0.02	0.02
(1,1159)	1:A:89:THR:H	1:A:89:THR:HG23	1	0.02	0.02
(1,1156)	1:A:88:ILE:H	1:A:88:ILE:HD11	1	0.03	0.03
(1,1156)	1:A:88:ILE:H	1:A:88:ILE:HD12	1	0.03	0.03
(1,1156)	1:A:88:ILE:H	1:A:88:ILE:HD13	1	0.03	0.03
(1,1116)	1:A:127:ARG:H	1:A:127:ARG:HG3	1	0.01	0.01
(1,1108)	1:A:46:ASN:HD22	1:A:53:TRP:HD1	1	0.07	0.07
(1,1093)	1:A:116:CYS:H	1:A:145:TRP:HE1	1	0.03	0.03
(1,1086)	1:A:46:ASN:HD22	1:A:53:TRP:HE1	1	0.03	0.03
(1,1078)	1:A:121:PHE:HE1	1:A:140:LEU:H	1	2.96	2.96
(1,1073)	1:A:39:LEU:HG	1:A:135:ALA:H	1	0.01	0.01
(1,1063)	1:A:94:ALA:HA	1:A:125:TRP:HE1	1	0.04	0.04
(1,1038)	1:A:54:PHE:HB3	1:A:70:TRP:H	1	0.12	0.12
(1,1028)	1:A:65:TRP:HE1	1:A:86:ILE:HG12	1	0.01	0.01
(1,1018)	1:A:59:ASN:HD22	1:A:64:ARG:H	1	0.05	0.05
(1,1016)	1:A:59:ASN:HD21	1:A:64:ARG:H	1	0.05	0.05
(1,1011)	1:A:59:ASN:HD22	1:A:64:ARG:HB2	1	0.03	0.03
(1,1010)	1:A:59:ASN:HD22	1:A:64:ARG:HB3	1	0.04	0.04
(1,1009)	1:A:59:ASN:HD21	1:A:64:ARG:HB2	1	0.03	0.03
(1,1007)	1:A:59:ASN:H	1:A:66:PHE:HE1	1	0.15	0.15
(1,1001)	1:A:46:ASN:HD22	1:A:53:TRP:H	1	0.02	0.02



8.8 All distance violations

8.8.1 Histogram : Distribution of distance violations

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



8.8.2 Table: All distance violations

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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,2091)	1:A:110:TYR:HE1	1:A:115:ILE:H	19	3.92
(1,2058)	1:A:64:ARG:HD3	1:A:66:PHE:HE1	15	3.71
(1,3316)	1:A:71:TYR:HE1	1:A:151:PRO:HG2	2	3.63
(1,3448)	1:A:110:TYR:HD1	1:A:114:LYS:HD2	19	3.47
(1,2031)	1:A:71:TYR:HE1	1:A:151:PRO:HG2	2	3.44
(1,2022)	1:A:32:LEU:HB3	1:A:36:TYR:HE1	15	3.4
(1,2022)	1:A:32:LEU:HB3	1:A:36:TYR:HE1	1	3.19



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,2022)	1:A:32:LEU:HB3	1:A:36:TYR:HE1	10	3.15
(1,3315)	1:A:71:TYR:HE1	1:A:151:PRO:HB2	2	2.99
(1,2021)	1:A:32:LEU:HB2	1:A:36:TYR:HE1	10	2.97
(1,2021)	1:A:32:LEU:HB2	1:A:36:TYR:HE1	15	2.96
(1,1078)	1:A:121:PHE:HE1	1:A:140:LEU:H	10	2.96
(1,3316)	1:A:71:TYR:HE1	1:A:151:PRO:HG2	11	2.91
(1,2021)	1:A:32:LEU:HB2	1:A:36:TYR:HE1	1	2.84
(1,3316)	1:A:71:TYR:HE1	1:A:151:PRO:HG2	4	2.76
(1,3315)	1:A:71:TYR:HE1	1:A:151:PRO:HB2	20	2.72
(1,2031)	1:A:71:TYR:HE1	1:A:151:PRO:HG2	11	2.72
(1,1934)	1:A:71:TYR:HE1	1:A:147:ALA:HA	2	2.67
(1,1828)	1:A:54:PHE:HE1	1:A:56:LEU:HG	8	2.6
(1,2022)	1:A:32:LEU:HB3	1:A:36:TYR:HE1	17	2.58
(1,2031)	1:A:71:TYR:HE1	1:A:151:PRO:HG2	4	2.57
(1,2044)	1:A:110:TYR:HE1	1:A:116:CYS:HA	7	2.52
(1,3315)	1:A:71:TYR:HE1	1:A:151:PRO:HB2	11	2.44
(1,3284)	1:A:64:ARG:HD2	1:A:66:PHE:HE1	15	2.4
(1,3315)	1:A:71:TYR:HE1	1:A:151:PRO:HB2	9	2.34
(1,3315)	1:A:71:TYR:HE1	1:A:151:PRO:HB2	4	2.32
(1,2049)	1:A:121:PHE:HE1	1:A:140:LEU:HB3	10	2.32
(1,3316)	1:A:71:TYR:HE1	1:A:151:PRO:HG2	1	2.29
(1,1929)	1:A:121:PHE:HE1	1:A:137:LEU:HA	10	2.23
(1,2087)	1:A:71:TYR:HE1	1:A:150:ILE:HG13	20	2.21
(1,3315)	1:A:71:TYR:HE1	1:A:151:PRO:HB2	1	2.2
(1,2021)	1:A:32:LEU:HB2	1:A:36:TYR:HE1	2	2.17
(1,2021)	1:A:32:LEU:HB2	1:A:36:TYR:HE1	13	2.12
(1,2031)	1:A:71:TYR:HE1	1:A:151:PRO:HG2	1	2.1
(1,2030)	1:A:71:TYR:HE1	1:A:73:HIS:HB3	19	2.03
(1,2050)	1:A:64:ARG:HD2	1:A:66:PHE:HE1	15	2.02
(1,3316)	1:A:71:TYR:HE1	1:A:151:PRO:HG2	20	2.0
(1,2091)	1:A:110:TYR:HE1	1:A:115:ILE:H	12	2.0
(1,2030)	1:A:71:TYR:HE1	1:A:73:HIS:HB3	2	2.0
(1,2022)	1:A:32:LEU:HB3	1:A:36:TYR:HE1	2	1.97
(1,1936)	1:A:71:TYR:HE1	1:A:151:PRO:HG3	2	1.97
(1,2022)	1:A:32:LEU:HB3	1:A:36:TYR:HE1	13	1.93
(1,2021)	1:A:32:LEU:HB2	1:A:36:TYR:HE1	17	1.92
(1,3316)	1:A:71:TYR:HE1	1:A:151:PRO:HG2	19	1.89
(1,3282)	1:A:64:ARG:HG2	1:A:66:PHE:HE1	15	1.89
(1,1934)	1:A:71:TYR:HE1	1:A:147:ALA:HA	20	1.88
(1,1896)	1:A:110:TYR:HD1	1:A:115:ILE:HA	19	1.86
(1,2977)	1:A:110:TYR:HE1	1:A:115:ILE:HG21	19	1.85
(1,2977)	1:A:110:TYR:HE1	1:A:115:ILE:HG22	19	1.85



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,2977)	1:A:110:TYR:HE1	1:A:115:ILE:HG23	19	1.85
(1,3399)	1:A:96:GLU:HB2	1:A:114:LYS:HB2	8	1.83
(1,2031)	1:A:71:TYR:HE1	1:A:151:PRO:HG2	20	1.81
(1,2091)	1:A:110:TYR:HE1	1:A:115:ILE:H	8	1.71
(1,2031)	1:A:71:TYR:HE1	1:A:151:PRO:HG2	19	1.7
(1,2570)	1:A:110:TYR:HD1	1:A:115:ILE:HG21	19	1.66
(1,2570)	1:A:110:TYR:HD1	1:A:115:ILE:HG22	19	1.66
(1,2570)	1:A:110:TYR:HD1	1:A:115:ILE:HG23	19	1.66
(1,2021)	1:A:32:LEU:HB2	1:A:36:TYR:HE1	20	1.63
(1,3448)	1:A:110:TYR:HD1	1:A:114:LYS:HD2	12	1.61
(1,2022)	1:A:32:LEU:HB3	1:A:36:TYR:HE1	5	1.61
(1,638)	1:A:58:SER:H	1:A:62:GLY:HA3	3	1.6
(1,638)	1:A:58:SER:H	1:A:62:GLY:HA3	11	1.6
(1,3316)	1:A:71:TYR:HE1	1:A:151:PRO:HG2	6	1.6
(1,2044)	1:A:110:TYR:HE1	1:A:116:CYS:HA	19	1.6
(1,3316)	1:A:71:TYR:HE1	1:A:151:PRO:HG2	9	1.59
(1,1017)	1:A:64:ARG:H	1:A:66:PHE:HE1	15	1.59
(1,638)	1:A:58:SER:H	1:A:62:GLY:HA3	17	1.58
(1,1858)	1:A:73:HIS:HB2	1:A:78:TYR:HE1	8	1.57
(1,1076)	1:A:42:TYR:HE1	1:A:139:ALA:H	13	1.54
(1,3315)	1:A:71:TYR:HE1	1:A:151:PRO:HB2	6	1.52
(1,1828)	1:A:54:PHE:HE1	1:A:56:LEU:HG	16	1.51
(1,2021)	1:A:32:LEU:HB2	1:A:36:TYR:HE1	9	1.5
(1,2044)	1:A:110:TYR:HE1	1:A:116:CYS:HA	10	1.47
(1,3022)	1:A:121:PHE:HE1	1:A:140:LEU:HB2	10	1.45
(1,2022)	1:A:32:LEU:HB3	1:A:36:TYR:HE1	20	1.44
(1,3399)	1:A:96:GLU:HB2	1:A:114:LYS:HB2	19	1.43
(1,3176)	1:A:41:ARG:HG2	1:A:45:ASN:HD22	1	1.42
(1,3315)	1:A:71:TYR:HE1	1:A:151:PRO:HB2	5	1.41
(1,2031)	1:A:71:TYR:HE1	1:A:151:PRO:HG2	6	1.41
(1,638)	1:A:58:SER:H	1:A:62:GLY:HA3	5	1.4
(1,2031)	1:A:71:TYR:HE1	1:A:151:PRO:HG2	9	1.4
(1,3315)	1:A:71:TYR:HE1	1:A:151:PRO:HB2	19	1.39
(1,2044)	1:A:110:TYR:HE1	1:A:116:CYS:HA	17	1.34
(1,3176)	1:A:41:ARG:HG2	1:A:45:ASN:HD22	15	1.31
(1,638)	1:A:58:SER:H	1:A:62:GLY:HA3	14	1.3
(1,2022)	1:A:32:LEU:HB3	1:A:36:TYR:HE1	9	1.3
(1,2058)	1:A:64:ARG:HD3	1:A:66:PHE:HE1	8	1.29
(1,1111)	1:A:128:ASN:HD22	1:A:132:PHE:HE1	15	1.29
(1,1828)	1:A:54:PHE:HE1	1:A:56:LEU:HG	18	1.28
(1,3132)	1:A:30:GLN:HE22	1:A:34:GLU:HG2	4	1.27
(1,2030)	1:A:71:TYR:HE1	1:A:73:HIS:HB3	18	1.27



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,2022)	1:A:32:LEU:HB3	1:A:36:TYR:HE1	19	1.27
(1,970)	1:A:28:TRP:HE1	1:A:62:GLY:HA2	17	1.26
(1,3315)	1:A:71:TYR:HE1	1:A:151:PRO:HB2	13	1.25
(1,1925)	1:A:42:TYR:HE1	1:A:135:ALA:HA	13	1.23
(1,638)	1:A:58:SER:H	1:A:62:GLY:HA3	18	1.22
(1,2021)	1:A:32:LEU:HB2	1:A:36:TYR:HE1	16	1.22
(1,1936)	1:A:71:TYR:HE1	1:A:151:PRO:HG3	11	1.21
(1,1858)	1:A:73:HIS:HB2	1:A:78:TYR:HE1	6	1.21
(1,3449)	1:A:110:TYR:HE1	1:A:114:LYS:HB2	19	1.2
(1,638)	1:A:58:SER:H	1:A:62:GLY:HA3	7	1.19
(1,3447)	1:A:110:TYR:HD1	1:A:114:LYS:HG2	19	1.19
(1,3132)	1:A:30:GLN:HE22	1:A:34:GLU:HG2	3	1.19
(1,1936)	1:A:71:TYR:HE1	1:A:151:PRO:HG3	4	1.19
(1,3132)	1:A:30:GLN:HE22	1:A:34:GLU:HG2	1	1.16
(1,1796)	1:A:32:LEU:HG	1:A:36:TYR:HE1	16	1.15
(1,638)	1:A:58:SER:H	1:A:62:GLY:HA3	9	1.14
(1,3197)	1:A:51:ASN:H	1:A:52:ASP:HB2	20	1.14
(1,2021)	1:A:32:LEU:HB2	1:A:36:TYR:HE1	12	1.14
(1,1864)	1:A:76:LEU:HG	1:A:78:TYR:HE1	5	1.14
(1,3319)	1:A:72:ILE:HG12	1:A:77:LYS:HE2	12	1.13
(1,2022)	1:A:32:LEU:HB3	1:A:36:TYR:HE1	16	1.13
(1,1076)	1:A:42:TYR:HE1	1:A:139:ALA:H	20	1.12
(1,970)	1:A:28:TRP:HE1	1:A:62:GLY:HA2	2	1.11
(1,638)	1:A:58:SER:H	1:A:62:GLY:HA3	13	1.11
(1,638)	1:A:58:SER:H	1:A:62:GLY:HA3	10	1.1
(1,2298)	1:A:16:LEU:HD21	1:A:133:GLY:HA2	10	1.09
(1,2298)	1:A:16:LEU:HD22	1:A:133:GLY:HA2	10	1.09
(1,2298)	1:A:16:LEU:HD23	1:A:133:GLY:HA2	10	1.09
(1,3319)	1:A:72:ILE:HG12	1:A:77:LYS:HE2	11	1.08
(1,2091)	1:A:110:TYR:HE1	1:A:115:ILE:H	6	1.08
(1,2022)	1:A:32:LEU:HB3	1:A:36:TYR:HE1	12	1.08
(1,3319)	1:A:72:ILE:HG12	1:A:77:LYS:HE2	14	1.07
(1,2065)	1:A:71:TYR:HB2	1:A:80:PHE:HE1	12	1.07
(1,2065)	1:A:71:TYR:HB3	1:A:80:PHE:HE1	12	1.07
(1,2057)	1:A:64:ARG:HB2	1:A:66:PHE:HE1	15	1.07
(1,2044)	1:A:110:TYR:HE1	1:A:116:CYS:HA	12	1.07
(1,1828)	1:A:54:PHE:HE1	1:A:56:LEU:HG	19	1.06
(1,970)	1:A:28:TRP:HE1	1:A:62:GLY:HA2	14	1.05
(1,3319)	1:A:72:ILE:HG12	1:A:77:LYS:HE2	10	1.05
(1,2091)	1:A:110:TYR:HE1	1:A:115:ILE:H	16	1.05
(1,2073)	1:A:32:LEU:HB2	1:A:36:TYR:HD1	15	1.05
(1,2030)	1:A:71:TYR:HE1	1:A:73:HIS:HB3	5	1.03



Continued from previous page...

· · /	1:A:41:ARG:HG2	1 A AF ACALITAGO		
(1,3132)		1:A:45:ASN:HD22	18	1.01
	1:A:30:GLN:HE22	1:A:34:GLU:HG2	10	1.01
(1,3319)	1:A:72:ILE:HG12	1:A:77:LYS:HE2	9	1.0
(1,3301)	1:A:68:LYS:HD2	1:A:80:PHE:H	7	1.0
(1,2091)	1:A:110:TYR:HE1	1:A:115:ILE:H	2	1.0
(1,970)	1:A:28:TRP:HE1	1:A:62:GLY:HA2	12	0.99
(1,3399)	1:A:96:GLU:HB2	1:A:114:LYS:HB2	17	0.99
(1,3175)	1:A:41:ARG:HG2	1:A:45:ASN:HD21	15	0.99
(1,970)	1:A:28:TRP:HE1	1:A:62:GLY:HA2	7	0.98
(1,3190)	1:A:47:LYS:H	1:A:52:ASP:HB2	20	0.98
(1,3065)	1:A:19:ASN:HB3	1:A:91:PRO:HB2	9	0.98
(1,2727)	1:A:71:TYR:HE1	1:A:154:ILE:HD11	11	0.98
(1,2727)	1:A:71:TYR:HE1	1:A:154:ILE:HD12	11	0.98
(1,2727)	1:A:71:TYR:HE1	1:A:154:ILE:HD13	11	0.98
(1,3294)	1:A:68:LYS:HB2	1:A:70:TRP:HZ2	2	0.97
(1,3197)	1:A:51:ASN:H	1:A:52:ASP:HB2	6	0.97
(1,2091)	1:A:110:TYR:HE1	1:A:115:ILE:H	17	0.97
(1,3073)	1:A:20:ALA:H	1:A:91:PRO:HG2	9	0.96
(1,3301)	1:A:68:LYS:HD2	1:A:80:PHE:H	5	0.95
(1,3132)	1:A:30:GLN:HE22	1:A:34:GLU:HG2	15	0.95
(1,3399)	1:A:96:GLU:HB2	1:A:114:LYS:HB2	1	0.94
(1,3315)	1:A:71:TYR:HE1	1:A:151:PRO:HB2	15	0.94
(1,638)	1:A:58:SER:H	1:A:62:GLY:HA3	8	0.93
(1,2091)	1:A:110:TYR:HE1	1:A:115:ILE:H	20	0.93
(1,970)	1:A:28:TRP:HE1	1:A:62:GLY:HA2	3	0.92
(1,970)	1:A:28:TRP:HE1	1:A:62:GLY:HA2	10	0.92
(1,3446)	1:A:110:TYR:HD1	1:A:114:LYS:HB2	13	0.92
(1,3314)	1:A:71:TYR:HE1	1:A:73:HIS:HB2	2	0.92
(1,1934)	1:A:71:TYR:HE1	1:A:147:ALA:HA	9	0.92
(1,1925)	1:A:42:TYR:HE1	1:A:135:ALA:HA	11	0.92
(1,3400)	1:A:96:GLU:HB2	1:A:114:LYS:HG2	9	0.91
(1,3319)	1:A:72:ILE:HG12	1:A:77:LYS:HE2	15	0.91
(1,3132)	1:A:30:GLN:HE22	1:A:34:GLU:HG2	14	0.91
(1,970)	1:A:28:TRP:HE1	1:A:62:GLY:HA2	1	0.9
(1,970)	1:A:28:TRP:HE1	1:A:62:GLY:HA2	5	0.9
(1,3132)	1:A:30:GLN:HE22	1:A:34:GLU:HG2	17	0.9
(1,2073)	1:A:32:LEU:HB2	1:A:36:TYR:HD1	1	0.9
(1,970)	1:A:28:TRP:HE1	1:A:62:GLY:HA2	11	0.89
(1,970)	1:A:28:TRP:HE1	1:A:62:GLY:HA2	18	0.89
(1,970)	1:A:28:TRP:HE1	1:A:62:GLY:HA2	19	0.89
(1,638)	1:A:58:SER:H	1:A:62:GLY:HA3	19	0.89
(1,3176)	1:A:41:ARG:HG2	1:A:45:ASN:HD22	12	0.89



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1076)	1:A:42:TYR:HE1	1:A:139:ALA:H	3	0.89
(1,3132)	1:A:30:GLN:HE22	1:A:34:GLU:HG2	7	0.88
(1,2021)	1:A:32:LEU:HB2	1:A:36:TYR:HE1	19	0.88
(1,1864)	1:A:76:LEU:HG	1:A:78:TYR:HE1	20	0.88
(1,2073)	1:A:32:LEU:HB2	1:A:36:TYR:HD1	10	0.87
(1,1936)	1:A:71:TYR:HE1	1:A:151:PRO:HG3	1	0.87
(1,3314)	1:A:71:TYR:HE1	1:A:73:HIS:HB2	19	0.86
(1,3254)	1:A:58:SER:HB2	1:A:62:GLY:HA3	3	0.86
(1,3254)	1:A:58:SER:HB2	1:A:62:GLY:HA3	17	0.86
(1,1858)	1:A:73:HIS:HB2	1:A:78:TYR:HE1	10	0.86
(1,3190)	1:A:47:LYS:H	1:A:52:ASP:HB2	14	0.85
(1,3176)	1:A:41:ARG:HG2	1:A:45:ASN:HD22	6	0.85
(1,1924)	1:A:42:TYR:HD1	1:A:135:ALA:HA	11	0.84
(1,638)	1:A:58:SER:H	1:A:62:GLY:HA3	16	0.83
(1,3140)	1:A:32:LEU:HD11	1:A:36:TYR:HE1	13	0.83
(1,3140)	1:A:32:LEU:HD12	1:A:36:TYR:HE1	13	0.83
(1,3140)	1:A:32:LEU:HD13	1:A:36:TYR:HE1	13	0.83
(1,1934)	1:A:71:TYR:HE1	1:A:147:ALA:HA	5	0.83
(1,3294)	1:A:68:LYS:HB2	1:A:70:TRP:HZ2	12	0.82
(1,3132)	1:A:30:GLN:HE22	1:A:34:GLU:HG2	9	0.82
(1,2725)	1:A:71:TYR:HD1	1:A:154:ILE:HD11	11	0.82
(1,2725)	1:A:71:TYR:HD1	1:A:154:ILE:HD12	11	0.82
(1,2725)	1:A:71:TYR:HD1	1:A:154:ILE:HD13	11	0.82
(1,2030)	1:A:71:TYR:HE1	1:A:73:HIS:HB3	20	0.82
(1,1924)	1:A:42:TYR:HD1	1:A:135:ALA:HA	13	0.82
(1,3176)	1:A:41:ARG:HG2	1:A:45:ASN:HD22	17	0.81
(1,2021)	1:A:32:LEU:HB2	1:A:36:TYR:HE1	14	0.81
(1,1925)	1:A:42:TYR:HE1	1:A:135:ALA:HA	10	0.81
(1,3254)	1:A:58:SER:HB2	1:A:62:GLY:HA3	14	0.8
(1,3132)	1:A:30:GLN:HE22	1:A:34:GLU:HG2	19	0.8
(1,2727)	1:A:71:TYR:HE1	1:A:154:ILE:HD11	2	0.8
(1,2727)	1:A:71:TYR:HE1	1:A:154:ILE:HD12	2	0.8
(1,2727)	1:A:71:TYR:HE1	1:A:154:ILE:HD13	2	0.8
(1,1934)	1:A:71:TYR:HE1	1:A:147:ALA:HA	11	0.8
(1,970)	1:A:28:TRP:HE1	1:A:62:GLY:HA2	4	0.79
(1,3400)	1:A:96:GLU:HB2	1:A:114:LYS:HG2	3	0.79
(1,3254)	1:A:58:SER:HB2	1:A:62:GLY:HA3	11	0.79
(1,3187)	1:A:44:GLU:HG2	1:A:48:ASN:HD22	16	0.79
(1,2021)	1:A:32:LEU:HB2	1:A:36:TYR:HE1	4	0.79
(1,2468)	1:A:84:PHE:HE1	1:A:86:ILE:HD11	3	0.78
(1,2468)	1:A:84:PHE:HE1	1:A:86:ILE:HD12	3	0.78
(1,2468)	1:A:84:PHE:HE1	1:A:86:ILE:HD13	3	0.78



Continued from previous page...

(1,3254) 1:A:58:SER:HB2 1:A:62:GLY:HA3 16 0.7 (1,3079) 1:A:21:GLY:HA2 1:A:23:ARG:HB2 8 0.7 (1,2977) 1:A:110:TYR:HE1 1:A:115:ILE:HG21 8 0.7 (1,2977) 1:A:110:TYR:HE1 1:A:115:ILE:HG22 8 0.7 (1,2977) 1:A:110:TYR:HE1 1:A:115:ILE:HG23 8 0.7 (1,3299) 1:A:68:LYS:HG2 1:A:82:ILE:H 9 0.7 (1,3132) 1:A:30:GLN:HE22 1:A:34:GLU:HG2 8 0.7 (1,2030) 1:A:71:TYR:HE1 1:A:73:HIS:HB3 11 0.7 (1,1084) 1:A:53:TRP:HE1 1:A:71:TYR:HE1 3 0.7 (1,970) 1:A:28:TRP:HE1 1:A:62:GLY:HA2 15 0.7 (1,638) 1:A:58:SER:H 1:A:62:GLY:HA3 2 0.7 (1,638) 1:A:58:SER:H 1:A:62:GLY:HA3 15 0.7	77 76 76 76 76 76 75 75 75 75 74
(1,3079) 1:A:21:GLY:HA2 1:A:23:ARG:HB2 8 0.5 (1,2977) 1:A:110:TYR:HE1 1:A:115:ILE:HG21 8 0.5 (1,2977) 1:A:110:TYR:HE1 1:A:115:ILE:HG22 8 0.5 (1,2977) 1:A:110:TYR:HE1 1:A:115:ILE:HG23 8 0.5 (1,3299) 1:A:68:LYS:HG2 1:A:82:ILE:H 9 0.5 (1,3132) 1:A:30:GLN:HE22 1:A:34:GLU:HG2 8 0.5 (1,2030) 1:A:71:TYR:HE1 1:A:73:HIS:HB3 11 0.5 (1,1084) 1:A:53:TRP:HE1 1:A:71:TYR:HE1 3 0.5 (1,970) 1:A:28:TRP:HE1 1:A:62:GLY:HA2 15 0.5 (1,638) 1:A:58:SER:H 1:A:62:GLY:HA3 2 0.5 (1,638) 1:A:58:SER:H 1:A:62:GLY:HA3 15 0.5	76 76 76 76 75 75 75 75
(1,2977) 1:A:110:TYR:HE1 1:A:115:ILE:HG21 8 0.5 (1,2977) 1:A:110:TYR:HE1 1:A:115:ILE:HG22 8 0.5 (1,2977) 1:A:110:TYR:HE1 1:A:115:ILE:HG23 8 0.5 (1,3299) 1:A:68:LYS:HG2 1:A:82:ILE:H 9 0.5 (1,3132) 1:A:30:GLN:HE22 1:A:34:GLU:HG2 8 0.5 (1,2030) 1:A:71:TYR:HE1 1:A:73:HIS:HB3 11 0.5 (1,1084) 1:A:53:TRP:HE1 1:A:71:TYR:HE1 3 0.5 (1,970) 1:A:28:TRP:HE1 1:A:62:GLY:HA2 15 0.5 (1,638) 1:A:58:SER:H 1:A:62:GLY:HA3 2 0.5 (1,638) 1:A:58:SER:H 1:A:62:GLY:HA3 15 0.5	76 76 76 75 75 75 75
(1,2977) 1:A:110:TYR:HE1 1:A:115:ILE:HG22 8 0.' (1,2977) 1:A:110:TYR:HE1 1:A:115:ILE:HG23 8 0.' (1,3299) 1:A:68:LYS:HG2 1:A:82:ILE:H 9 0.' (1,3132) 1:A:30:GLN:HE22 1:A:34:GLU:HG2 8 0.' (1,2030) 1:A:71:TYR:HE1 1:A:73:HIS:HB3 11 0.' (1,1084) 1:A:53:TRP:HE1 1:A:71:TYR:HE1 3 0.' (1,970) 1:A:28:TRP:HE1 1:A:62:GLY:HA2 15 0.' (1,638) 1:A:58:SER:H 1:A:62:GLY:HA3 2 0.' (1,638) 1:A:58:SER:H 1:A:62:GLY:HA3 15 0.'	76 76 75 75 75 75 75
(1,2977) 1:A:110:TYR:HE1 1:A:115:ILE:HG23 8 0.6 (1,3299) 1:A:68:LYS:HG2 1:A:82:ILE:H 9 0.6 (1,3132) 1:A:30:GLN:HE22 1:A:34:GLU:HG2 8 0.6 (1,2030) 1:A:71:TYR:HE1 1:A:73:HIS:HB3 11 0.6 (1,1084) 1:A:53:TRP:HE1 1:A:71:TYR:HE1 3 0.6 (1,970) 1:A:28:TRP:HE1 1:A:62:GLY:HA2 15 0.6 (1,638) 1:A:58:SER:H 1:A:62:GLY:HA3 2 0.6 (1,638) 1:A:58:SER:H 1:A:62:GLY:HA3 15 0.6	76 75 75 75 75 75
(1,3299) 1:A:68:LYS:HG2 1:A:82:ILE:H 9 0.5 (1,3132) 1:A:30:GLN:HE22 1:A:34:GLU:HG2 8 0.5 (1,2030) 1:A:71:TYR:HE1 1:A:73:HIS:HB3 11 0.5 (1,1084) 1:A:53:TRP:HE1 1:A:71:TYR:HE1 3 0.5 (1,970) 1:A:28:TRP:HE1 1:A:62:GLY:HA2 15 0.5 (1,638) 1:A:58:SER:H 1:A:62:GLY:HA3 2 0.5 (1,638) 1:A:58:SER:H 1:A:62:GLY:HA3 15 0.5	75 75 75 75 75
(1,3132) 1:A:30:GLN:HE22 1:A:34:GLU:HG2 8 0.6 (1,2030) 1:A:71:TYR:HE1 1:A:73:HIS:HB3 11 0.6 (1,1084) 1:A:53:TRP:HE1 1:A:71:TYR:HE1 3 0.6 (1,970) 1:A:28:TRP:HE1 1:A:62:GLY:HA2 15 0.6 (1,638) 1:A:58:SER:H 1:A:62:GLY:HA3 2 0.6 (1,638) 1:A:58:SER:H 1:A:62:GLY:HA3 15 0.6	75 75 75 74
(1,2030) 1:A:71:TYR:HE1 1:A:73:HIS:HB3 11 0.' (1,1084) 1:A:53:TRP:HE1 1:A:71:TYR:HE1 3 0.' (1,970) 1:A:28:TRP:HE1 1:A:62:GLY:HA2 15 0.' (1,638) 1:A:58:SER:H 1:A:62:GLY:HA3 2 0.' (1,638) 1:A:58:SER:H 1:A:62:GLY:HA3 15 0.'	75 75 74
(1,1084) 1:A:53:TRP:HE1 1:A:71:TYR:HE1 3 0.' (1,970) 1:A:28:TRP:HE1 1:A:62:GLY:HA2 15 0.' (1,638) 1:A:58:SER:H 1:A:62:GLY:HA3 2 0.' (1,638) 1:A:58:SER:H 1:A:62:GLY:HA3 15 0.'	75 74
(1,970) 1:A:28:TRP:HE1 1:A:62:GLY:HA2 15 0.' (1,638) 1:A:58:SER:H 1:A:62:GLY:HA3 2 0.' (1,638) 1:A:58:SER:H 1:A:62:GLY:HA3 15 0.'	74
(1,638) 1:A:58:SER:H 1:A:62:GLY:HA3 2 0.7 (1,638) 1:A:58:SER:H 1:A:62:GLY:HA3 15 0.7	
(1,638) 1:A:58:SER:H 1:A:62:GLY:HA3 15 0.7	74
(1.0150)	74
(1,3176) 1:A:41:ARG:HG2 1:A:45:ASN:HD22 11 0.	74
(1,3176) 1:A:41:ARG:HG2 1:A:45:ASN:HD22 19 0.	74
(1,3131) 1:A:30:GLN:HE21 1:A:34:GLU:HG2 3 0.	74
(1,3073) 1:A:20:ALA:H 1:A:91:PRO:HG2 16 0.	74
(1,1934) 1:A:71:TYR:HE1 1:A:147:ALA:HA 15 0.	74
(1,1470) 1:A:58:SER:HB3 1:A:62:GLY:HA3 5 0.	74
(1,3263) 1:A:59:ASN:HD22 1:A:61:GLU:HG2 4 0.	73
(1,3132) 1:A:30:GLN:HE22 1:A:34:GLU:HG2 16 0.	73
(1,1925) 1:A:42:TYR:HE1 1:A:135:ALA:HA 7 0.	73
(1,1470) 1:A:58:SER:HB3 1:A:62:GLY:HA3 18 0.	73
(1,1470) 1:A:58:SER:HB3 1:A:62:GLY:HA3 19 0.	73
(1,970) 1:A:28:TRP:HE1 1:A:62:GLY:HA2 16 0.	72
(1,3209) 1:A:55:ARG:HG2 1:A:70:TRP:HZ3 19 0.	72
(1,3007) 1:A:132:PHE:HE1 1:A:140:LEU:HG 20 0.	72
(1,2087) 1:A:71:TYR:HE1 1:A:150:ILE:HG13 4 0.	72
(1,2030) 1:A:71:TYR:HE1 1:A:73:HIS:HB3 8 0.	72
(1,1925) 1:A:42:TYR:HE1 1:A:135:ALA:HA 3 0.	72
(1,1470) 1:A:58:SER:HB3 1:A:62:GLY:HA3 15 0.	72
(1,3132) 1:A:30:GLN:HE22 1:A:34:GLU:HG2 20 0.	71
(1,1470) 1:A:58:SER:HB3 1:A:62:GLY:HA3 9 0.	71
(1,1469) 1:A:58:SER:HB2 1:A:62:GLY:HA3 3 0.	71
(1,1469) 1:A:58:SER:HB2 1:A:62:GLY:HA3 17 0.	71
(1,1076) 1:A:42:TYR:HE1 1:A:139:ALA:H 10 0.	71
(1,3132) 1:A:30:GLN:HE22 1:A:34:GLU:HG2 2 0.	.7
(1,1912) 1:A:124:LEU:HG 1:A:132:PHE:HE1 15 0.	.7
(1,1470) 1:A:58:SER:HB3 1:A:62:GLY:HA3 10 0.	.7
(1,3177) 1:A:41:ARG:HD2 1:A:44:GLU:H 6 0.	69
(1,2302) 1:A:16:LEU:HD11 1:A:133:GLY:HA2 10 0.	69
(1,2302) 1:A:16:LEU:HD12 1:A:133:GLY:HA2 10 0.0	



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

(1,2302) 1:A:16;LEU:HD13 1:A:13;CLY:HA2 10 0.69 (1,2022) 1:A:32;LEU:HB3 1:A:36;TYR:HE1 1:A:36;TYR:HE1 14 0.69 (1,3399) 1:A:96;GLU:HB2 1:A:114;LYS:HB2 5 0.66 (1,3399) 1:A:96;GLU:HB2 1:A:114;LYS:HB2 7 0.66 (1,3319) 1:A:72;ILE:HG12 1:A:71;XS:HE2 6 0.66 (1,3188) 1:A:46;ASN:HA 1:A:51;ASN:HB2 20 0.66 (1,3132) 1:A:30;GLN:HE21 1:A:31;GLU:HG2 6 0.66 (1,3132) 1:A:30;GLN:HE21 1:A:33;ACH 7 0.66 (1,1076) 1:A:42;TYR:HE1 1:A:34;GLU:HG2 9 0.65 (1,2683) 1:A:58;PHE:HE1 1:A:146;LEU:HD21 19 0.65 (1,2683) 1:A:80;PHE:HE1 1:A:146;LEU:HD22 19 0.65 (1,2683) 1:A:34;CLU:HC2 19 0.65 (1,2683) 1:A:34;CLU:HC2 19 0.65 (1,2683) 1:A:34;CLU:HC2 19 0.65 </th <th>Key</th> <th>Atom-1</th> <th>Atom-2</th> <th>Model</th> <th>Violation (Å)</th>	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,2022) 1:A:32:LEU:HB3 1:A:36:TYR:HE1 14 0.69 (1,3399) 1:A:96:GLU:HB2 1:A:114:LYS:HB2 5 0.66 (1,3399) 1:A:96:GLU:HB2 1:A:114:LYS:HB2 7 0.66 (1,3319) 1:A:72:ILE:HG12 1:A:71:VS:HE2 6 0.66 (1,3188) 1:A:46:ASN:HA 1:A:51:ASN:HB2 20 0.66 (1,3132) 1:A:30:GLN:HE22 1:A:34:GLU:HG2 6 0.66 (1,006) 1:A:42:TYR:HE1 1:A:33:ALA:H 7 0.66 (1,638) 1:A:58:SER:H 1:A:62:GLY:HA3 4 0.65 (1,2683) 1:A:80:PHE:HE1 1:A:34:GLU:HG2 9 0.65 (1,2683) 1:A:80:PHE:HE1 1:A:146:LEU:HD22 19 0.65 (1,2683) 1:A:80:PHE:HE1 1:A:146:LEU:HD23 19 0.65 (1,2683) 1:A:80:PHE:HE1 1:A:146:LEU:HD23 19 0.65 (1,2683) 1:A:30:PHE:HE1 1:A:146:LEU:HD23 19 0.65 (1,3491) 1:A:34:GLU:H 1	(1,2302)	1:A:16:LEU:HD13	1:A:133:GLY:HA2	10	0.69
(1,3399)	(1,2030)	1:A:71:TYR:HE1	1:A:73:HIS:HB3	4	0.69
(1,3399)	(1,2022)	1:A:32:LEU:HB3	1:A:36:TYR:HE1	14	0.69
(1,3319)	(1,3399)	1:A:96:GLU:HB2	1:A:114:LYS:HB2	5	0.66
(1,3188) 1:A:36:GAN:HA 1:A:51:ASN:HB2 20 0.66 (1,3132) 1:A:30:GLN:HE22 1:A:34:GLU:HG2 6 0.66 (1,076) 1:A:42:TYR:HE1 1:A:39:ALA:H 7 0.66 (1,638) 1:A:58:SER:H 1:A:62:GLY:HA3 4 0.65 (1,3131) 1:A:30:GLN:HE21 1:A:34:GLU:HG2 9 0.65 (1,2683) 1:A:80:PHE:HE1 1:A:146:LEU:HD21 19 0.65 (1,2683) 1:A:80:PHE:HE1 1:A:146:LEU:HD22 19 0.65 (1,2683) 1:A:80:PHE:HE1 1:A:146:LEU:HD23 19 0.65 (1,2683) 1:A:80:PHE:HE1 1:A:146:LEU:HD23 19 0.65 (1,2683) 1:A:42:TYR:HE1 1:A:146:LEU:HD23 19 0.65 (1,1469) 1:A:58:SER:HB2 1:A:62:GLY:HA3 14 0.65 (1,3131) 1:A:30:GLN:HE21 1:A:34:GLU:HG2 1 0.64 (1,3131) 1:A:30:GLN:HE21 1:A:34:GLU:HG2 1 0.64 (1,3131) 1:A:30:GLN:HE21	(1,3399)	1:A:96:GLU:HB2	1:A:114:LYS:HB2	7	0.66
(1,3132) 1:A:30:GLN:HE22 1:A:34:GLU:HG2 6 0.66 (1,1076) 1:A:42:TYR:HE1 1:A:139:ALA:H 7 0.66 (1,638) 1:A:58:SER:H 1:A:62:GLY:HA3 4 0.65 (1,3131) 1:A:30:GLN:HE21 1:A:34:GLU:HG2 9 0.65 (1,2683) 1:A:80:PHE:HE1 1:A:146:LEU:HD21 19 0.65 (1,2683) 1:A:80:PHE:HE1 1:A:146:LEU:HD23 19 0.65 (1,2683) 1:A:42:TYR:HE1 1:A:146:LEU:HD23 19 0.65 (1,2683) 1:A:42:TYR:HE1 1:A:148:JS:ALA:HA 4 0.65 (1,1925) 1:A:42:TYR:HE1 1:A:62:GLY:HA3 14 0.65 (1,3447) 1:A:110:TYR:HD1 1:A:614:LU:HG2 16 0.64 (1,3131) 1:A:30:GLN:HE21 1:A:34:GLU:HG2 1 0.64 (1,3131) 1:A:30:GLN:HE21 1:A:34:GLU:HG2 1 0.64 (1,3131) 1:A:30:GLN:HE21 1:A:34:GLU:HG2 1 0.64 (1,3479) 1:A:21:GLY:HA2 <td< td=""><td>(1,3319)</td><td>1:A:72:ILE:HG12</td><td>1:A:77:LYS:HE2</td><td>6</td><td>0.66</td></td<>	(1,3319)	1:A:72:ILE:HG12	1:A:77:LYS:HE2	6	0.66
(1,1076) 1:A:42:TYR:HE1 1:A:139:ALA:H 7 0.66 (1,638) 1:A:58:SER:H 1:A:62:GLY:HA3 4 0.65 (1,3131) 1:A:30:GLN:HE21 1:A:34:GLU:HG2 9 0.65 (1,2683) 1:A:80:PHE:HE1 1:A:146:LEU:HD21 19 0.65 (1,2683) 1:A:80:PHE:HE1 1:A:146:LEU:HD22 19 0.65 (1,2683) 1:A:80:PHE:HE1 1:A:146:LEU:HD22 19 0.65 (1,2683) 1:A:80:PHE:HE1 1:A:146:LEU:HD22 19 0.65 (1,1925) 1:A:42:TYR:HE1 1:A:146:LEU:HD23 19 0.65 (1,1926) 1:A:58:SER:HB2 1:A:62:GLY:HA3 14 0.65 (1,1469) 1:A:58:SER:HB2 1:A:62:GLY:HA3 14 0.65 (1,3447) 1:A:110:TYR:HD1 1:A:14:LYS:HG2 16 0.64 (1,3131) 1:A:30:GLN:HE21 1:A:34:GLU:HG2 1 0.64 (1,3131) 1:A:30:GLN:HE21 1:A:34:GLU:HG2 4 0.64 (1,3079) 1:A:21:GLY:HA2 1:A:23:ARG:HB2 10 0.64 (1,1469) 1:A:58:SER:HB2 1:A:62:GLY:HA3 11 0.64 (1,1469) 1:A:58:SER:HB2 1:A:62:GLY:HA3 11 0.64 (1,13079) 1:A:21:GLY:HA2 1:A:23:ARG:HB2 4 0.63 (1,2683) 1:A:80:PHE:HE1 1:A:146:LEU:HD21 2 0.63 (1,2683) 1:A:80:PHE:HE1 1:A:146:LEU:HD22 2 0.63 (1,2683) 1:A:80:PHE:HE1 1:A:146:LEU:HD22 2 0.63 (1,2683) 1:A:80:PHE:HE1 1:A:146:LEU:HD23 2 0.63 (1,2022) 1:A:32:LEU:HB3 1:A:36:TYR:HE1 6 0.62 (1,1092) 1:A:32:LEU:HB3 1:A:36:TYR:HE1 6 0.62 (1,1092) 1:A:32:LEU:HB3 1:A:36:TYR:HE1 4 0.61 (1,1936) 1:A:71:TYR:HE1 1:A:151:PRO:HG3 20 0.61 (1,196) 1:A:58:SER:HB2 1:A:62:GLY:HA3 16 0.61 (1,1970) 1:A:28:TRP:HE1 1:A:158:VAL:HG1 5 0.6 (1,3439) 1:A:105:LYS:HB2 1:A:158:VAL:HG1 5 0.6	(1,3188)	1:A:46:ASN:HA	1:A:51:ASN:HB2	20	0.66
(1,638) 1:A:58:SER:H 1:A:62:GLY:HA3 4 0.65 (1,3131) 1:A:30:GLN:HE21 1:A:34:GLU:HG2 9 0.65 (1,2683) 1:A:80:PHE:HE1 1:A:146:LEU:HD21 19 0.65 (1,2683) 1:A:80:PHE:HE1 1:A:146:LEU:HD23 19 0.65 (1,2683) 1:A:80:PHE:HE1 1:A:146:LEU:HD23 19 0.65 (1,2683) 1:A:80:PHE:HE1 1:A:146:LEU:HD23 19 0.65 (1,3125) 1:A:42:TYR:HE1 1:A:146:LEU:HD23 19 0.65 (1,1492) 1:A:42:TYR:HE1 1:A:135:ALA:HA 4 0.65 (1,3447) 1:A:110:TYR:HD1 1:A:141:LYS:HG2 16 0.64 (1,3447) 1:A:110:TYR:HD1 1:A:141:LYS:HG2 1 0.64 (1,3447) 1:A:135:ALE:GLY:HA2 1:A:34:GLU:HG2 1 0.64 (1,3131) 1:A:30:GLN:HE21 1:A:34:GLU:HG2 4 0.64 (1,3131) 1:A:30:GLN:HE21 1:A:34:GLU:HG2 4 0.64 (1,3079) 1:A:21:GLY:HA2	(1,3132)	1:A:30:GLN:HE22	1:A:34:GLU:HG2	6	0.66
(1,3131) 1:A:30:GLN:HE21 1:A:34:GLU:HG2 9 0.65 (1,2683) 1:A:80:PHE:HE1 1:A:146:LEU:HD21 19 0.65 (1,2683) 1:A:80:PHE:HE1 1:A:46:LEU:HD22 19 0.65 (1,2683) 1:A:80:PHE:HE1 1:A:146:LEU:HD23 19 0.65 (1,1925) 1:A:42:TYR:HE1 1:A:135:ALA:HA 4 0.65 (1,1469) 1:A:58:SER:HB2 1:A:62:GLY:HA3 14 0.65 (1,3447) 1:A:110:TYR:HD1 1:A:114:LYS:HG2 16 0.64 (1,3131) 1:A:30:GLN:HE21 1:A:34:GLU:HG2 1 0.64 (1,3131) 1:A:30:GLN:HE21 1:A:34:GLU:HG2 4 0.64 (1,3131) 1:A:30:GLN:HE21 1:A:34:GLU:HG2 4 0.64 (1,3131) 1:A:30:GLN:HE21 1:A:34:GLU:HG2 1 0.64 (1,3131) 1:A:30:GLN:HE21 1:A:34:GLU:HG2 1 0.64 (1,3079) 1:A:21:GLY:HA2 1:A:32:ARG:HB2 10 0.64 (1,2683) 1:A:80:PHE:HE1	(1,1076)	1:A:42:TYR:HE1	1:A:139:ALA:H	7	0.66
(1,2683) 1:A:80:PHE:HE1 1:A:146:LEU:HD21 19 0.65 (1,2683) 1:A:80:PHE:HE1 1:A:146:LEU:HD22 19 0.65 (1,2683) 1:A:80:PHE:HE1 1:A:146:LEU:HD23 19 0.65 (1,1925) 1:A:42:TYR:HE1 1:A:135:ALA:HA 4 0.65 (1,1469) 1:A:58:SER:HB2 1:A:62:GLY:HA3 14 0.65 (1,3447) 1:A:110:TYR:HD1 1:A:14:LYS:HG2 16 0.64 (1,3447) 1:A:30:GLN:HE21 1:A:34:GLU:HG2 1 0.64 (1,3131) 1:A:30:GLN:HE21 1:A:34:GLU:HG2 1 0.64 (1,3131) 1:A:30:GLN:HE21 1:A:34:GLU:HG2 4 0.64 (1,3079) 1:A:21:GLY:HA2 1:A:36:GLY:HA3 11 0.64 (1,1469) 1:A:58:SER:HB2 1:A:62:GLY:HA3 11 0.64 (1,3079) 1:A:21:GLY:HA2 1:A:46:LEU:HD21 2 0.63 (1,2683) 1:A:80:PHE:HE1 1:A:146:LEU:HD21 2 0.63 (1,2683) 1:A:36:GLY:HE1	(1,638)	1:A:58:SER:H	1:A:62:GLY:HA3	4	0.65
(1,2683) 1:A:80:PHE:HE1 1:A:146:LEU:HD22 19 0.65 (1,2683) 1:A:80:PHE:HE1 1:A:146:LEU:HD23 19 0.65 (1,1925) 1:A:42:TYR:HE1 1:A:135:ALA:HA 4 0.65 (1,1469) 1:A:58:SER:HB2 1:A:62:GLY:HA3 14 0.65 (1,3447) 1:A:110:TYR:HD1 1:A:114:LYS:HG2 16 0.64 (1,3131) 1:A:30:GLN:HE21 1:A:34:GLU:HG2 1 0.64 (1,3131) 1:A:30:GLN:HE21 1:A:34:GLU:HG2 4 0.64 (1,3131) 1:A:30:GLN:HE21 1:A:34:GLU:HG2 4 0.64 (1,3079) 1:A:21:GLY:HA2 1:A:23:ARG:HB2 10 0.64 (1,3079) 1:A:21:GLY:HA2 1:A:62:GLY:HA3 11 0.64 (1,3079) 1:A:21:GLY:HA2 1:A:46:LEU:HD21 2 0.63 (1,2683) 1:A:80:PHE:HE1 1:A:146:LEU:HD21 2 0.63 (1,2683) 1:A:80:PHE:HE1 1:A:146:LEU:HD23 2 0.63 (1,2683) 1:A:32:LEU:HB3	(1,3131)	1:A:30:GLN:HE21	1:A:34:GLU:HG2	9	0.65
(1,2683) 1:A:80:PHE:HE1 1:A:146:LEU:HD23 19 0.65 (1,1925) 1:A:42:TYR:HE1 1:A:135:ALA:HA 4 0.65 (1,1469) 1:A:58:SER:HB2 1:A:62:GLY:HA3 14 0.65 (1,3447) 1:A:110:TYR:HD1 1:A:114:LYS:HG2 16 0.64 (1,3131) 1:A:30:GLN:HE21 1:A:34:GLU:HG2 1 0.64 (1,3131) 1:A:30:GLN:HE21 1:A:34:GLU:HG2 4 0.64 (1,3079) 1:A:21:GLY:HA2 1:A:23:ARG:HB2 10 0.64 (1,3079) 1:A:21:GLY:HA2 1:A:62:GLY:HA3 11 0.63 (1,2683) 1:A:80:PHE:HE1 1:A:146:LEU:HD21 2 0.63 (1,2683) 1:A:80:PHE:HE1 1:A:146:LEU:HD23 2 0.63 (1,3177) 1:A:3:4:GEU:HB3	(1,2683)	1:A:80:PHE:HE1	1:A:146:LEU:HD21	19	0.65
(1,1925) 1:A:42:TYR:HE1 1:A:135:ALA:HA 4 0.65 (1,1469) 1:A:58:SER:HB2 1:A:62:GLY:HA3 14 0.65 (1,3447) 1:A:110:TYR:HD1 1:A:114:LYS:HG2 16 0.64 (1,3131) 1:A:30:GLN:HE21 1:A:34:GLU:HG2 1 0.64 (1,3131) 1:A:30:GLN:HE21 1:A:34:GLU:HG2 4 0.64 (1,3079) 1:A:21:GLY:HA2 1:A:23:ARG:HB2 10 0.64 (1,1469) 1:A:58:SER:HB2 1:A:62:GLY:HA3 11 0.64 (1,3079) 1:A:21:GLY:HA2 1:A:23:ARG:HB2 4 0.63 (1,2683) 1:A:80:PHE:HE1 1:A:146:LEU:HD21 2 0.63 (1,2683) 1:A:80:PHE:HE1 1:A:146:LEU:HD22 2 0.63 (1,2683) 1:A:36:PHE:HE1 1:A:146:LEU:HD23 2 0.63 (1,2683) 1:A:36:PHE:HE1 1:A:146:LEU:HD23 2 0.63 (1,2022) 1:A:32:LEU:HB3 1:A:36:TYR:HE1 6 0.62 (1,3022) 1:A:32:EU:HB3	(1,2683)	1:A:80:PHE:HE1	1:A:146:LEU:HD22	19	0.65
(1,1469) 1:A:58:SER:HB2 1:A:62:GLY:HA3 14 0.65 (1,3447) 1:A:110:TYR:HD1 1:A:114:LYS:HG2 16 0.64 (1,3131) 1:A:30:GLN:HE21 1:A:34:GLU:HG2 1 0.64 (1,3131) 1:A:30:GLN:HE21 1:A:34:GLU:HG2 4 0.64 (1,3079) 1:A:21:GLY:HA2 1:A:62:GLY:HA3 11 0.64 (1,3079) 1:A:21:GLY:HA2 1:A:62:GLY:HA3 11 0.64 (1,3079) 1:A:80:PHE:HE1 1:A:146:LEU:HD21 2 0.63 (1,2683) 1:A:80:PHE:HE1 1:A:146:LEU:HD22 2 0.63 (1,2683) 1:A:80:PHE:HE1 1:A:146:LEU:HD23 2 0.63 (1,2683) 1:A:80:PHE:HE1 1:A:146:LEU:HD23 2 0.63 (1,2083) 1:A:32:LEU:HB3 1:A:36:TYR:HE1 6 0.62 (1,3177) 1:A:32:LEU:HB3 1:A:36:TYR:HE1 12 0.62 (1,1084) 1:A:32:LEU:HB3 1:A:36:TYR:HE1 4 0.61 (1,1936) 1:A:7:TYR:HE1 <td< td=""><td>(1,2683)</td><td>1:A:80:PHE:HE1</td><td>1:A:146:LEU:HD23</td><td>19</td><td>0.65</td></td<>	(1,2683)	1:A:80:PHE:HE1	1:A:146:LEU:HD23	19	0.65
(1,3447) 1:A:110:TYR:HD1 1:A:114:LYS:HG2 16 0.64 (1,3131) 1:A:30:GLN:HE21 1:A:34:GLU:HG2 1 0.64 (1,3131) 1:A:30:GLN:HE21 1:A:34:GLU:HG2 4 0.64 (1,3079) 1:A:21:GLY:HA2 1:A:62:GLY:HA3 11 0.64 (1,3079) 1:A:21:GLY:HA2 1:A:62:GLY:HA3 11 0.64 (1,3079) 1:A:21:GLY:HA2 1:A:23:ARG:HB2 4 0.63 (1,2683) 1:A:80:PHE:HE1 1:A:146:LEU:HD21 2 0.63 (1,2683) 1:A:80:PHE:HE1 1:A:146:LEU:HD22 2 0.63 (1,2683) 1:A:80:PHE:HE1 1:A:146:LEU:HD23 2 0.63 (1,2683) 1:A:38:PHE:HE1 1:A:44:GLU:H 11 0.62 (1,2022) 1:A:32:LEU:HB3 1:A:36:TYR:HE1 6 0.62 (1,1084) 1:A:32:LEU:HB3 1:A:36:TYR:HE1 12 0.62 (1,2022) 1:A:32:LEU:HB3 1:A:36:TYR:HE1 1 0.61 (1,1828) 1:A:54:PHE:HE1 1:	(1,1925)	1:A:42:TYR:HE1	1:A:135:ALA:HA	4	0.65
(1,3131) 1:A:30:GLN:HE21 1:A:34:GLU:HG2 4 0.64 (1,3131) 1:A:30:GLN:HE21 1:A:34:GLU:HG2 4 0.64 (1,3079) 1:A:21:GLY:HA2 1:A:23:ARG:HB2 10 0.64 (1,1469) 1:A:58:SER:HB2 1:A:62:GLY:HA3 11 0.64 (1,3079) 1:A:21:GLY:HA2 1:A:23:ARG:HB2 4 0.63 (1,2683) 1:A:80:PHE:HE1 1:A:146:LEU:HD21 2 0.63 (1,2683) 1:A:80:PHE:HE1 1:A:146:LEU:HD22 2 0.63 (1,2683) 1:A:80:PHE:HE1 1:A:146:LEU:HD23 2 0.63 (1,2683) 1:A:32:LEU:HB3 1:A:36:TYR:HE1 1 0.62 (1,3022) 1:A:332:LEU:HB3	(1,1469)	1:A:58:SER:HB2	1:A:62:GLY:HA3	14	0.65
(1,3131) 1:A:30:GLN:HE21 1:A:34:GLU:HG2 4 0.64 (1,3079) 1:A:21:GLY:HA2 1:A:23:ARG:HB2 10 0.64 (1,1469) 1:A:58:SER:HB2 1:A:62:GLY:HA3 11 0.64 (1,3079) 1:A:21:GLY:HA2 1:A:23:ARG:HB2 4 0.63 (1,2683) 1:A:80:PHE:HE1 1:A:146:LEU:HD21 2 0.63 (1,2683) 1:A:80:PHE:HE1 1:A:146:LEU:HD22 2 0.63 (1,2683) 1:A:80:PHE:HE1 1:A:146:LEU:HD23 2 0.63 (1,2683) 1:A:80:PHE:HE1 1:A:146:LEU:HD23 2 0.63 (1,2683) 1:A:80:PHE:HE1 1:A:146:LEU:HD23 2 0.63 (1,2683) 1:A:80:PHE:HE1 1:A:44:GLU:H 11 0.62 (1,2683) 1:A:41:ARG:HD2 1:A:44:GLU:H 11 0.62 (1,2683) 1:A:41:ARG:HD2 1:A:44:GLU:H 11 0.62 (1,368) 1:A:41:ARG:HD2 1:A:44:GLU:H 11 0.62 (1,10202) 1:A:32:LEU:HB3 1:A:36	(1,3447)	1:A:110:TYR:HD1	1:A:114:LYS:HG2	16	0.64
(1,3079) 1:A:21:GLY:HA2 1:A:23:ARG:HB2 10 0.64 (1,1469) 1:A:58:SER:HB2 1:A:62:GLY:HA3 11 0.64 (1,3079) 1:A:21:GLY:HA2 1:A:23:ARG:HB2 4 0.63 (1,2683) 1:A:80:PHE:HE1 1:A:146:LEU:HD21 2 0.63 (1,2683) 1:A:80:PHE:HE1 1:A:146:LEU:HD23 2 0.63 (1,2683) 1:A:80:PHE:HE1 1:A:44:GLU:H 11 0.62 (1,2683) 1:A:34:ARG:HD2 1:A:44:GLU:H 11 0.62 (1,2683) 1:A:34:PHE:HE1 1:A:36:TYR:HE1 6 0.62 (1,2022) 1:A:32:LEU:HB3 1:A:36:TYR:HE1 12 0.62 (1,1084) 1:A:53:TRP:HE1 1:A:151:PRO:HG3 20 0.61 (1,1936) 1:A:71:TYR:HE1 1:A:56:LEU:HG 20 0.61 (1,1828) 1:A:54:PHE:HE1 1:A:65:LEU:HG 20 0.61 (1,1796) 1:A:32:LEU:HG 1:A:62:GLY:HA3 16 0.61 (1,3439) 1:A:105:LYS:HB2 1:A:62:	(1,3131)	1:A:30:GLN:HE21	1:A:34:GLU:HG2	1	0.64
(1,1469) 1:A:58:SER:HB2 1:A:62:GLY:HA3 11 0.64 (1,3079) 1:A:21:GLY:HA2 1:A:23:ARG:HB2 4 0.63 (1,2683) 1:A:80:PHE:HE1 1:A:146:LEU:HD21 2 0.63 (1,2683) 1:A:80:PHE:HE1 1:A:146:LEU:HD22 2 0.63 (1,2683) 1:A:80:PHE:HE1 1:A:146:LEU:HD23 2 0.63 (1,3177) 1:A:41:ARG:HD2 1:A:44:GLU:H 11 0.62 (1,2022) 1:A:32:LEU:HB3 1:A:36:TYR:HE1 6 0.62 (1,1084) 1:A:53:TRP:HE1 1:A:71:TYR:HE1 12 0.62 (1,2022) 1:A:32:LEU:HB3 1:A:36:TYR:HE1 4 0.61 (1,1936) 1:A:71:TYR:HE1 1:A:56:LEU:HG 20 0.61 (1,1828) 1:A:54:PHE:HE1 1:A:62:GLY:HA3 16 0.61 (1,1796) 1:A:32:LEU:HG 1:A:62:GLY:HA3 16 0.61 (1,3439) 1:A:105:LYS:HB2 1:A:158:VAL:HG11 5 0.6 (1,3439) 1:A:105:LYS:HB2 1:A:	(1,3131)	1:A:30:GLN:HE21	1:A:34:GLU:HG2	4	0.64
(1,3079) 1:A:21:GLY:HA2 1:A:23:ARG:HB2 4 0.63 (1,2683) 1:A:80:PHE:HE1 1:A:146:LEU:HD21 2 0.63 (1,2683) 1:A:80:PHE:HE1 1:A:146:LEU:HD22 2 0.63 (1,2683) 1:A:80:PHE:HE1 1:A:146:LEU:HD23 2 0.63 (1,2683) 1:A:41:ARG:HD2 1:A:44:GLU:H 11 0.62 (1,3177) 1:A:41:ARG:HD2 1:A:44:GLU:H 11 0.62 (1,2022) 1:A:32:LEU:HB3 1:A:36:TYR:HE1 6 0.62 (1,1084) 1:A:53:TRP:HE1 1:A:151:PRO:HG3 20 0.61 (1,1936) 1:A:71:TYR:HE1 1:A:56:LEU:HG 20 0.61 (1,1828) 1:A:54:PHE:HE1 1:A:56:LEU:HG 20 0.61 (1,1796) 1:A:32:LEU:HG 1:A:62:GLY:HA3 16 0.61 (1,3439) 1:A:105:LYS:HB2 1:A:158:VAL:HG11 5 0.6 (1,3439) 1:A:105:LYS:HB2 1:A:158:VAL:HG13 5 0.6 (1,3439) 1:A:7:ARG:HG2 1:A:8:	(1,3079)	1:A:21:GLY:HA2	1:A:23:ARG:HB2	10	0.64
(1,2683) 1:A:80:PHE:HE1 1:A:146:LEU:HD21 2 0.63 (1,2683) 1:A:80:PHE:HE1 1:A:146:LEU:HD22 2 0.63 (1,2683) 1:A:80:PHE:HE1 1:A:146:LEU:HD23 2 0.63 (1,3177) 1:A:41:ARG:HD2 1:A:44:GLU:H 11 0.62 (1,2022) 1:A:32:LEU:HB3 1:A:36:TYR:HE1 6 0.62 (1,1084) 1:A:53:TRP:HE1 1:A:71:TYR:HE1 12 0.62 (1,2022) 1:A:32:LEU:HB3 1:A:36:TYR:HE1 4 0.61 (1,1936) 1:A:71:TYR:HE1 1:A:151:PRO:HG3 20 0.61 (1,1936) 1:A:71:TYR:HE1 1:A:56:LEU:HG 20 0.61 (1,1988) 1:A:54:PHE:HE1 1:A:56:LEU:HG 20 0.61 (1,1796) 1:A:32:LEU:HG 1:A:62:GLY:HA3 16 0.61 (1,1469) 1:A:28:TRP:HE1 1:A:62:GLY:HA3 16 0.61 (1,3439) 1:A:105:LYS:HB2 1:A:158:VAL:HG11 5 0.6 (1,3439) 1:A:105:LYS:HB2 1:A	(1,1469)	1:A:58:SER:HB2	1:A:62:GLY:HA3	11	0.64
(1,2683) 1:A:80:PHE:HE1 1:A:146:LEU:HD22 2 0.63 (1,2683) 1:A:80:PHE:HE1 1:A:146:LEU:HD23 2 0.63 (1,3177) 1:A:41:ARG:HD2 1:A:44:GLU:H 11 0.62 (1,2022) 1:A:32:LEU:HB3 1:A:36:TYR:HE1 6 0.62 (1,1084) 1:A:53:TRP:HE1 1:A:71:TYR:HE1 12 0.62 (1,2022) 1:A:32:LEU:HB3 1:A:36:TYR:HE1 4 0.61 (1,1936) 1:A:71:TYR:HE1 1:A:151:PRO:HG3 20 0.61 (1,1828) 1:A:54:PHE:HE1 1:A:56:LEU:HG 20 0.61 (1,1796) 1:A:32:LEU:HG 1:A:36:TYR:HE1 10 0.61 (1,1469) 1:A:58:SER:HB2 1:A:62:GLY:HA3 16 0.61 (1,3439) 1:A:105:LYS:HB2 1:A:158:VAL:HG11 5 0.6 (1,3439) 1:A:105:LYS:HB2 1:A:158:VAL:HG12 5 0.6 (1,3439) 1:A:105:LYS:HB2 1:A:158:VAL:HG13 5 0.6 (1,3042) 1:A:7:ARG:HG2 1:A	(1,3079)	1:A:21:GLY:HA2	1:A:23:ARG:HB2	4	0.63
(1,2683) 1:A:80:PHE:HE1 1:A:146:LEU:HD23 2 0.63 (1,3177) 1:A:41:ARG:HD2 1:A:44:GLU:H 11 0.62 (1,2022) 1:A:32:LEU:HB3 1:A:36:TYR:HE1 6 0.62 (1,1084) 1:A:53:TRP:HE1 1:A:71:TYR:HE1 12 0.62 (1,2022) 1:A:32:LEU:HB3 1:A:36:TYR:HE1 4 0.61 (1,1936) 1:A:71:TYR:HE1 1:A:151:PRO:HG3 20 0.61 (1,1828) 1:A:54:PHE:HE1 1:A:56:LEU:HG 20 0.61 (1,1796) 1:A:32:LEU:HG 1:A:36:TYR:HE1 10 0.61 (1,1469) 1:A:58:SER:HB2 1:A:62:GLY:HA3 16 0.61 (1,970) 1:A:28:TRP:HE1 1:A:62:GLY:HA2 13 0.6 (1,3439) 1:A:105:LYS:HB2 1:A:158:VAL:HG11 5 0.6 (1,3439) 1:A:105:LYS:HB2 1:A:158:VAL:HG13 5 0.6 (1,3042) 1:A:7:ARG:HG2 1:A:8:ARG:H 13 0.6 (1,2091) 1:A:110:TYR:HE1 1:A:64:ARG:HD2 3 0.59 (1,3131) 1:A:64:ARG:HB2	(1,2683)	1:A:80:PHE:HE1	1:A:146:LEU:HD21	2	0.63
(1,3177) 1:A:41:ARG:HD2 1:A:44:GLU:H 11 0.62 (1,2022) 1:A:32:LEU:HB3 1:A:36:TYR:HE1 6 0.62 (1,1084) 1:A:53:TRP:HE1 1:A:71:TYR:HE1 12 0.62 (1,2022) 1:A:32:LEU:HB3 1:A:36:TYR:HE1 4 0.61 (1,1936) 1:A:71:TYR:HE1 1:A:151:PRO:HG3 20 0.61 (1,1828) 1:A:54:PHE:HE1 1:A:56:LEU:HG 20 0.61 (1,1796) 1:A:32:LEU:HG 1:A:36:TYR:HE1 10 0.61 (1,1469) 1:A:58:SER:HB2 1:A:62:GLY:HA3 16 0.61 (1,970) 1:A:28:TRP:HE1 1:A:62:GLY:HA2 13 0.6 (1,3439) 1:A:105:LYS:HB2 1:A:158:VAL:HG11 5 0.6 (1,3439) 1:A:105:LYS:HB2 1:A:158:VAL:HG12 5 0.6 (1,3042) 1:A:7:ARG:HG2 1:A:8:ARG:H 13 0.6 (1,3042) 1:A:7:ARG:HG2 1:A:8:ARG:H 13 0.6 (1,3079) 1:A:64:ARG:HB2 1:A:64:ARG:HD2 <td>(1,2683)</td> <td>1:A:80:PHE:HE1</td> <td>1:A:146:LEU:HD22</td> <td>2</td> <td>0.63</td>	(1,2683)	1:A:80:PHE:HE1	1:A:146:LEU:HD22	2	0.63
(1,2022) 1:A:32:LEU:HB3 1:A:36:TYR:HE1 6 0.62 (1,1084) 1:A:53:TRP:HE1 1:A:71:TYR:HE1 12 0.62 (1,2022) 1:A:32:LEU:HB3 1:A:36:TYR:HE1 4 0.61 (1,1936) 1:A:71:TYR:HE1 1:A:151:PRO:HG3 20 0.61 (1,1828) 1:A:54:PHE:HE1 1:A:56:LEU:HG 20 0.61 (1,1796) 1:A:32:LEU:HG 1:A:36:TYR:HE1 10 0.61 (1,1469) 1:A:58:SER:HB2 1:A:62:GLY:HA3 16 0.61 (1,970) 1:A:28:TRP:HE1 1:A:62:GLY:HA2 13 0.6 (1,3439) 1:A:105:LYS:HB2 1:A:158:VAL:HG11 5 0.6 (1,3439) 1:A:105:LYS:HB2 1:A:158:VAL:HG12 5 0.6 (1,3439) 1:A:105:LYS:HB2 1:A:158:VAL:HG13 5 0.6 (1,3042) 1:A:7:ARG:HG2 1:A:8:ARG:H 13 0.6 (1,3042) 1:A:10:TYR:HE1 1:A:15:ILE:H 1 0.6 (1,3279) 1:A:64:ARG:HB2 1:A:64:ARG:HD2 3 0.59 (1,3131) 1:A:33:GLN:HE21 <t< td=""><td>(1,2683)</td><td>1:A:80:PHE:HE1</td><td>1:A:146:LEU:HD23</td><td>2</td><td>0.63</td></t<>	(1,2683)	1:A:80:PHE:HE1	1:A:146:LEU:HD23	2	0.63
(1,1084) 1:A:53:TRP:HE1 1:A:71:TYR:HE1 12 0.62 (1,2022) 1:A:32:LEU:HB3 1:A:36:TYR:HE1 4 0.61 (1,1936) 1:A:71:TYR:HE1 1:A:151:PRO:HG3 20 0.61 (1,1828) 1:A:54:PHE:HE1 1:A:56:LEU:HG 20 0.61 (1,1796) 1:A:32:LEU:HG 1:A:36:TYR:HE1 10 0.61 (1,1469) 1:A:58:SER:HB2 1:A:62:GLY:HA3 16 0.61 (1,970) 1:A:28:TRP:HE1 1:A:62:GLY:HA2 13 0.6 (1,3439) 1:A:105:LYS:HB2 1:A:158:VAL:HG11 5 0.6 (1,3439) 1:A:105:LYS:HB2 1:A:158:VAL:HG12 5 0.6 (1,3439) 1:A:105:LYS:HB2 1:A:158:VAL:HG13 5 0.6 (1,3042) 1:A:7:ARG:HG2 1:A:8:ARG:H 13 0.6 (1,3042) 1:A:110:TYR:HE1 1:A:15:ILE:H 1 0.6 (1,3079) 1:A:64:ARG:HB2 1:A:64:ARG:HD2 3 0.59 (1,3131) 1:A:30:GLN:HE21 1:A:34:GLU:	(1,3177)	1:A:41:ARG:HD2	1:A:44:GLU:H	11	0.62
(1,2022) 1:A:32:LEU:HB3 1:A:36:TYR:HE1 4 0.61 (1,1936) 1:A:71:TYR:HE1 1:A:151:PRO:HG3 20 0.61 (1,1828) 1:A:54:PHE:HE1 1:A:56:LEU:HG 20 0.61 (1,1796) 1:A:32:LEU:HG 1:A:36:TYR:HE1 10 0.61 (1,1469) 1:A:58:SER:HB2 1:A:62:GLY:HA3 16 0.61 (1,970) 1:A:28:TRP:HE1 1:A:62:GLY:HA2 13 0.6 (1,3439) 1:A:105:LYS:HB2 1:A:158:VAL:HG11 5 0.6 (1,3439) 1:A:105:LYS:HB2 1:A:158:VAL:HG12 5 0.6 (1,3439) 1:A:105:LYS:HB2 1:A:158:VAL:HG13 5 0.6 (1,3439) 1:A:105:LYS:HB2 1:A:158:VAL:HG13 5 0.6 (1,3042) 1:A:7:ARG:HG2 1:A:8:ARG:H 13 0.6 (1,3042) 1:A:7:ARG:HG2 1:A:8:ARG:H 1 0.6 (1,3079) 1:A:64:ARG:HB2 1:A:64:ARG:HD2 3 0.59 (1,3131) 1:A:30:GLN:HE21 1:A:34:GLU:HG2 16 0.59	(1,2022)	1:A:32:LEU:HB3	1:A:36:TYR:HE1	6	0.62
(1,1936) 1:A:71:TYR:HE1 1:A:151:PRO:HG3 20 0.61 (1,1828) 1:A:54:PHE:HE1 1:A:56:LEU:HG 20 0.61 (1,1796) 1:A:32:LEU:HG 1:A:36:TYR:HE1 10 0.61 (1,1469) 1:A:58:SER:HB2 1:A:62:GLY:HA3 16 0.61 (1,970) 1:A:28:TRP:HE1 1:A:62:GLY:HA2 13 0.6 (1,3439) 1:A:105:LYS:HB2 1:A:158:VAL:HG11 5 0.6 (1,3439) 1:A:105:LYS:HB2 1:A:158:VAL:HG12 5 0.6 (1,3439) 1:A:105:LYS:HB2 1:A:158:VAL:HG13 5 0.6 (1,3439) 1:A:7:ARG:HG2 1:A:8:ARG:H 13 0.6 (1,3042) 1:A:7:ARG:HG2 1:A:8:ARG:H 13 0.6 (1,3042) 1:A:110:TYR:HE1 1:A:115:ILE:H 1 0.6 (1,3091) 1:A:64:ARG:HB2 1:A:64:ARG:HD2 3 0.59 (1,3131) 1:A:30:GLN:HE21 1:A:34:GLU:HG2 16 0.59	(1,1084)	1:A:53:TRP:HE1	1:A:71:TYR:HE1	12	0.62
(1,1828) 1:A:54:PHE:HE1 1:A:56:LEU:HG 20 0.61 (1,1796) 1:A:32:LEU:HG 1:A:36:TYR:HE1 10 0.61 (1,1469) 1:A:58:SER:HB2 1:A:62:GLY:HA3 16 0.61 (1,970) 1:A:28:TRP:HE1 1:A:62:GLY:HA2 13 0.6 (1,3439) 1:A:105:LYS:HB2 1:A:158:VAL:HG11 5 0.6 (1,3439) 1:A:105:LYS:HB2 1:A:158:VAL:HG12 5 0.6 (1,3439) 1:A:105:LYS:HB2 1:A:158:VAL:HG13 5 0.6 (1,3439) 1:A:105:LYS:HB2 1:A:8:ARG:H 13 0.6 (1,3042) 1:A:7:ARG:HG2 1:A:8:ARG:H 13 0.6 (1,3042) 1:A:10:TYR:HE1 1:A:115:ILE:H 1 0.6 (1,3091) 1:A:64:ARG:HB2 1:A:64:ARG:HD2 3 0.59 (1,3131) 1:A:30:GLN:HE21 1:A:34:GLU:HG2 16 0.59	(1,2022)	1:A:32:LEU:HB3	1:A:36:TYR:HE1	4	0.61
(1,1796) 1:A:32:LEU:HG 1:A:36:TYR:HE1 10 0.61 (1,1469) 1:A:58:SER:HB2 1:A:62:GLY:HA3 16 0.61 (1,970) 1:A:28:TRP:HE1 1:A:62:GLY:HA2 13 0.6 (1,3439) 1:A:105:LYS:HB2 1:A:158:VAL:HG11 5 0.6 (1,3439) 1:A:105:LYS:HB2 1:A:158:VAL:HG12 5 0.6 (1,3439) 1:A:105:LYS:HB2 1:A:158:VAL:HG13 5 0.6 (1,3439) 1:A:105:LYS:HB2 1:A:8:ARG:H 13 0.6 (1,3042) 1:A:7:ARG:HG2 1:A:8:ARG:H 13 0.6 (1,3042) 1:A:110:TYR:HE1 1:A:115:ILE:H 1 0.6 (1,3091) 1:A:64:ARG:HB2 1:A:64:ARG:HD2 3 0.59 (1,3131) 1:A:30:GLN:HE21 1:A:34:GLU:HG2 16 0.59	(1,1936)	1:A:71:TYR:HE1	1:A:151:PRO:HG3	20	0.61
(1,1469) 1:A:58:SER:HB2 1:A:62:GLY:HA3 16 0.61 (1,970) 1:A:28:TRP:HE1 1:A:62:GLY:HA2 13 0.6 (1,3439) 1:A:105:LYS:HB2 1:A:158:VAL:HG11 5 0.6 (1,3439) 1:A:105:LYS:HB2 1:A:158:VAL:HG12 5 0.6 (1,3439) 1:A:105:LYS:HB2 1:A:158:VAL:HG13 5 0.6 (1,3042) 1:A:7:ARG:HG2 1:A:8:ARG:H 13 0.6 (1,2091) 1:A:110:TYR:HE1 1:A:115:ILE:H 1 0.6 (1,3279) 1:A:64:ARG:HB2 1:A:64:ARG:HD2 3 0.59 (1,3131) 1:A:30:GLN:HE21 1:A:34:GLU:HG2 16 0.59	(1,1828)	1:A:54:PHE:HE1	1:A:56:LEU:HG	20	0.61
(1,970) 1:A:28:TRP:HE1 1:A:62:GLY:HA2 13 0.6 (1,3439) 1:A:105:LYS:HB2 1:A:158:VAL:HG11 5 0.6 (1,3439) 1:A:105:LYS:HB2 1:A:158:VAL:HG12 5 0.6 (1,3439) 1:A:105:LYS:HB2 1:A:158:VAL:HG13 5 0.6 (1,3042) 1:A:7:ARG:HG2 1:A:8:ARG:H 13 0.6 (1,2091) 1:A:110:TYR:HE1 1:A:115:ILE:H 1 0.6 (1,3279) 1:A:64:ARG:HB2 1:A:64:ARG:HD2 3 0.59 (1,3131) 1:A:30:GLN:HE21 1:A:34:GLU:HG2 16 0.59	(1,1796)	1:A:32:LEU:HG	1:A:36:TYR:HE1	10	0.61
(1,3439) 1:A:105:LYS:HB2 1:A:158:VAL:HG11 5 0.6 (1,3439) 1:A:105:LYS:HB2 1:A:158:VAL:HG12 5 0.6 (1,3439) 1:A:105:LYS:HB2 1:A:158:VAL:HG13 5 0.6 (1,3042) 1:A:7:ARG:HG2 1:A:8:ARG:H 13 0.6 (1,2091) 1:A:110:TYR:HE1 1:A:115:ILE:H 1 0.6 (1,3279) 1:A:64:ARG:HB2 1:A:64:ARG:HD2 3 0.59 (1,3131) 1:A:30:GLN:HE21 1:A:34:GLU:HG2 16 0.59	(1,1469)	1:A:58:SER:HB2	1:A:62:GLY:HA3	16	0.61
(1,3439) 1:A:105:LYS:HB2 1:A:158:VAL:HG12 5 0.6 (1,3439) 1:A:105:LYS:HB2 1:A:158:VAL:HG13 5 0.6 (1,3042) 1:A:7:ARG:HG2 1:A:8:ARG:H 13 0.6 (1,2091) 1:A:110:TYR:HE1 1:A:115:ILE:H 1 0.6 (1,3279) 1:A:64:ARG:HB2 1:A:64:ARG:HD2 3 0.59 (1,3131) 1:A:30:GLN:HE21 1:A:34:GLU:HG2 16 0.59	(1,970)	1:A:28:TRP:HE1	1:A:62:GLY:HA2	13	0.6
(1,3439) 1:A:105:LYS:HB2 1:A:158:VAL:HG13 5 0.6 (1,3042) 1:A:7:ARG:HG2 1:A:8:ARG:H 13 0.6 (1,2091) 1:A:110:TYR:HE1 1:A:115:ILE:H 1 0.6 (1,3279) 1:A:64:ARG:HB2 1:A:64:ARG:HD2 3 0.59 (1,3131) 1:A:30:GLN:HE21 1:A:34:GLU:HG2 16 0.59	(1,3439)	1:A:105:LYS:HB2	1:A:158:VAL:HG11	5	0.6
(1,3439) 1:A:105:LYS:HB2 1:A:158:VAL:HG13 5 0.6 (1,3042) 1:A:7:ARG:HG2 1:A:8:ARG:H 13 0.6 (1,2091) 1:A:110:TYR:HE1 1:A:115:ILE:H 1 0.6 (1,3279) 1:A:64:ARG:HB2 1:A:64:ARG:HD2 3 0.59 (1,3131) 1:A:30:GLN:HE21 1:A:34:GLU:HG2 16 0.59	(1,3439)	1:A:105:LYS:HB2	1:A:158:VAL:HG12	5	0.6
(1,2091) 1:A:110:TYR:HE1 1:A:115:ILE:H 1 0.6 (1,3279) 1:A:64:ARG:HB2 1:A:64:ARG:HD2 3 0.59 (1,3131) 1:A:30:GLN:HE21 1:A:34:GLU:HG2 16 0.59		1:A:105:LYS:HB2	1:A:158:VAL:HG13	5	0.6
(1,3279) 1:A:64:ARG:HB2 1:A:64:ARG:HD2 3 0.59 (1,3131) 1:A:30:GLN:HE21 1:A:34:GLU:HG2 16 0.59	(1,3042)	1:A:7:ARG:HG2	1:A:8:ARG:H	13	0.6
(1,3131) 1:A:30:GLN:HE21 1:A:34:GLU:HG2 16 0.59	(1,2091)	1:A:110:TYR:HE1	1:A:115:ILE:H	1	0.6
	(1,3279)	1:A:64:ARG:HB2	1:A:64:ARG:HD2	3	0.59
	(1,3131)	1:A:30:GLN:HE21	1:A:34:GLU:HG2	16	0.59
	(1,1076)	1:A:42:TYR:HE1	1:A:139:ALA:H	11	0.59



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,970)	1:A:28:TRP:HE1	1:A:62:GLY:HA2	20	0.58
(1,3140)	1:A:32:LEU:HD11	1:A:36:TYR:HE1	20	0.58
(1,3140)	1:A:32:LEU:HD12	1:A:36:TYR:HE1	20	0.58
(1,3140)	1:A:32:LEU:HD13	1:A:36:TYR:HE1	20	0.58
(1,1924)	1:A:42:TYR:HD1	1:A:135:ALA:HA	4	0.58
(1,3444)	1:A:109:MET:HG2	1:A:115:ILE:HA	10	0.57
(1,3316)	1:A:71:TYR:HE1	1:A:151:PRO:HG2	17	0.57
(1,3079)	1:A:21:GLY:HA2	1:A:23:ARG:HB2	13	0.57
(1,638)	1:A:58:SER:H	1:A:62:GLY:HA3	6	0.56
(1,3319)	1:A:72:ILE:HG12	1:A:77:LYS:HE2	4	0.56
(1,3079)	1:A:21:GLY:HA2	1:A:23:ARG:HB2	12	0.56
(1,3073)	1:A:20:ALA:H	1:A:91:PRO:HG2	14	0.56
(1,2021)	1:A:32:LEU:HB2	1:A:36:TYR:HE1	6	0.56
(1,3312)	1:A:70:TRP:HD1	1:A:77:LYS:HD2	8	0.55
(1,3254)	1:A:58:SER:HB2	1:A:62:GLY:HA3	20	0.55
(1,3079)	1:A:21:GLY:HA2	1:A:23:ARG:HB2	7	0.55
(1,2044)	1:A:110:TYR:HE1	1:A:116:CYS:HA	8	0.55
(1,1470)	1:A:58:SER:HB3	1:A:62:GLY:HA3	7	0.55
(1,3079)	1:A:21:GLY:HA2	1:A:23:ARG:HB2	17	0.54
(1,2253)	1:A:10:VAL:HG11	1:A:132:PHE:HE1	15	0.54
(1,2253)	1:A:10:VAL:HG12	1:A:132:PHE:HE1	15	0.54
(1,2253)	1:A:10:VAL:HG13	1:A:132:PHE:HE1	15	0.54
(1,2029)	1:A:71:TYR:HE1	1:A:73:HIS:HB2	2	0.54
(1,1925)	1:A:42:TYR:HE1	1:A:135:ALA:HA	15	0.54
(1,1864)	1:A:76:LEU:HG	1:A:78:TYR:HE1	4	0.54
(1,3319)	1:A:72:ILE:HG12	1:A:77:LYS:HE2	1	0.53
(1,2030)	1:A:71:TYR:HE1	1:A:73:HIS:HB3	14	0.53
(1,1828)	1:A:54:PHE:HE1	1:A:56:LEU:HG	15	0.53
(1,970)	1:A:28:TRP:HE1	1:A:62:GLY:HA2	9	0.52
(1,1864)	1:A:76:LEU:HG	1:A:78:TYR:HE1	12	0.52
(1,1796)	1:A:32:LEU:HG	1:A:36:TYR:HE1	15	0.52
(1,3294)	1:A:68:LYS:HB2	1:A:70:TRP:HZ2	13	0.51
(1,3147)	1:A:32:LEU:HD11	1:A:65:TRP:HZ2	4	0.51
(1,3147)	1:A:32:LEU:HD12	1:A:65:TRP:HZ2	4	0.51
(1,3147)	1:A:32:LEU:HD13	1:A:65:TRP:HZ2	4	0.51
(1,3074)	1:A:20:ALA:H	1:A:91:PRO:HD2	11	0.51
(1,3001)	1:A:84:PHE:HE1	1:A:97:ILE:HB	4	0.51
(1,1925)	1:A:42:TYR:HE1	1:A:135:ALA:HA	16	0.51
(1,3230)	1:A:56:LEU:HD11	1:A:67:GLY:HA2	14	0.5
(1,3230)	1:A:56:LEU:HD12	1:A:67:GLY:HA2	14	0.5
(1,3230)	1:A:56:LEU:HD13	1:A:67:GLY:HA2	14	0.5
(1,3186)	1:A:44:GLU:HG2	1:A:48:ASN:HD21	16	0.5



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,3124)	1:A:28:TRP:HE1	1:A:61:GLU:HG2	14	0.5
(1,3074)	1:A:20:ALA:H	1:A:91:PRO:HD2	16	0.5
(1,1925)	1:A:42:TYR:HE1	1:A:135:ALA:HA	20	0.5
(1,1924)	1:A:42:TYR:HD1	1:A:135:ALA:HA	3	0.5
(1,1828)	1:A:54:PHE:HE1	1:A:56:LEU:HG	9	0.5
(1,638)	1:A:58:SER:H	1:A:62:GLY:HA3	20	0.49
(1,3312)	1:A:70:TRP:HD1	1:A:77:LYS:HD2	13	0.49
(1,3079)	1:A:21:GLY:HA2	1:A:23:ARG:HB2	1	0.49
(1,3042)	1:A:7:ARG:HG2	1:A:8:ARG:H	1	0.49
(1,2725)	1:A:71:TYR:HD1	1:A:154:ILE:HD11	4	0.49
(1,2725)	1:A:71:TYR:HD1	1:A:154:ILE:HD12	4	0.49
(1,2725)	1:A:71:TYR:HD1	1:A:154:ILE:HD13	4	0.49
(1,3476)	1:A:122:LYS:HB3	1:A:123:PRO:HD2	7	0.48
(1,3464)	1:A:119:ASP:HA	1:A:122:LYS:HG2	4	0.48
(1,3267)	1:A:60:LYS:HB2	1:A:61:GLU:H	19	0.48
(1,3078)	1:A:21:GLY:H	1:A:24:ASP:HB2	8	0.48
(1,2029)	1:A:71:TYR:HE1	1:A:73:HIS:HB2	19	0.48
(1,1925)	1:A:42:TYR:HE1	1:A:135:ALA:HA	6	0.48
(1,640)	1:A:59:ASN:H	1:A:62:GLY:HA3	19	0.47
(1,638)	1:A:58:SER:H	1:A:62:GLY:HA3	12	0.47
(1,3476)	1:A:122:LYS:HB3	1:A:123:PRO:HD2	8	0.47
(1,3476)	1:A:122:LYS:HB3	1:A:123:PRO:HD2	17	0.47
(1,3319)	1:A:72:ILE:HG12	1:A:77:LYS:HE2	17	0.47
(1,3210)	1:A:55:ARG:HG2	1:A:70:TRP:HH2	19	0.47
(1,3197)	1:A:51:ASN:H	1:A:52:ASP:HB2	17	0.47
(1,3079)	1:A:21:GLY:HA2	1:A:23:ARG:HB2	16	0.47
(1,3053)	1:A:15:VAL:HG11	1:A:131:LYS:HD2	10	0.47
(1,3053)	1:A:15:VAL:HG12	1:A:131:LYS:HD2	10	0.47
(1,3053)	1:A:15:VAL:HG13	1:A:131:LYS:HD2	10	0.47
(1,640)	1:A:59:ASN:H	1:A:62:GLY:HA3	15	0.46
(1,3316)	1:A:71:TYR:HE1	1:A:151:PRO:HG2	5	0.46
(1,3175)	1:A:41:ARG:HG2	1:A:45:ASN:HD21	18	0.46
(1,3078)	1:A:21:GLY:H	1:A:24:ASP:HB2	6	0.46
(1,3078)	1:A:21:GLY:H	1:A:24:ASP:HB2	11	0.46
(1,3549)	1:A:164:LYS:HB2	1:A:165:CYS:H	11	0.45
(1,3488)	1:A:127:ARG:HB2	1:A:128:ASN:HD22	6	0.45
(1,3448)	1:A:110:TYR:HD1	1:A:114:LYS:HD2	13	0.45
(1,3284)	1:A:64:ARG:HD2	1:A:66:PHE:HE1	7	0.45
(1,3267)	1:A:60:LYS:HB2	1:A:61:GLU:H	12	0.45
(1,3124)	1:A:28:TRP:HE1	1:A:61:GLU:HG2	5	0.45
(1,3079)	1:A:21:GLY:HA2	1:A:23:ARG:HB2	2	0.45
(1,3078)	1:A:21:GLY:H	1:A:24:ASP:HB2	20	0.45



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,3074)	1:A:20:ALA:H	1:A:91:PRO:HD2	9	0.45
(1,3074)	1:A:20:ALA:H	1:A:91:PRO:HD2	19	0.45
(1,3073)	1:A:20:ALA:H	1:A:91:PRO:HG2	15	0.45
(1,2683)	1:A:80:PHE:HE1	1:A:146:LEU:HD21	9	0.45
(1,2683)	1:A:80:PHE:HE1	1:A:146:LEU:HD22	9	0.45
(1,2683)	1:A:80:PHE:HE1	1:A:146:LEU:HD23	9	0.45
(1,3549)	1:A:164:LYS:HB2	1:A:165:CYS:H	1	0.44
(1,3186)	1:A:44:GLU:HG2	1:A:48:ASN:HD21	20	0.44
(1,3074)	1:A:20:ALA:H	1:A:91:PRO:HD2	6	0.44
(1,3267)	1:A:60:LYS:HB2	1:A:61:GLU:H	17	0.43
(1,3150)	1:A:33:LYS:H	1:A:34:GLU:HG2	18	0.43
(1,1924)	1:A:42:TYR:HD1	1:A:135:ALA:HA	7	0.43
(1,3493)	1:A:131:LYS:H	1:A:131:LYS:HD2	4	0.42
(1,3132)	1:A:30:GLN:HE22	1:A:34:GLU:HG2	12	0.42
(1,3131)	1:A:30:GLN:HE21	1:A:34:GLU:HG2	17	0.42
(1,3072)	1:A:20:ALA:H	1:A:91:PRO:HB2	9	0.42
(1,3079)	1:A:21:GLY:HA2	1:A:23:ARG:HB2	20	0.41
(1,3074)	1:A:20:ALA:H	1:A:91:PRO:HD2	15	0.41
(1,2091)	1:A:110:TYR:HE1	1:A:115:ILE:H	7	0.41
(1,2021)	1:A:32:LEU:HB2	1:A:36:TYR:HE1	5	0.41
(1,970)	1:A:28:TRP:HE1	1:A:62:GLY:HA2	8	0.4
(1,3399)	1:A:96:GLU:HB2	1:A:114:LYS:HB2	18	0.4
(1,3282)	1:A:64:ARG:HG2	1:A:66:PHE:HE1	7	0.4
(1,3267)	1:A:60:LYS:HB2	1:A:61:GLU:H	5	0.4
(1,3267)	1:A:60:LYS:HB2	1:A:61:GLU:H	14	0.4
(1,3187)	1:A:44:GLU:HG2	1:A:48:ASN:HD22	18	0.4
(1,3079)	1:A:21:GLY:HA2	1:A:23:ARG:HB2	9	0.4
(1,2091)	1:A:110:TYR:HE1	1:A:115:ILE:H	5	0.4
(1,1925)	1:A:42:TYR:HE1	1:A:135:ALA:HA	8	0.4
(1,1469)	1:A:58:SER:HB2	1:A:62:GLY:HA3	20	0.4
(1,3398)	1:A:96:GLU:H	1:A:96:GLU:HG2	6	0.39
(1,3252)	1:A:58:SER:HB2	1:A:59:ASN:H	14	0.39
(1,3187)	1:A:44:GLU:HG2	1:A:48:ASN:HD22	11	0.39
(1,3108)	1:A:24:ASP:HB2	1:A:27:LEU:HD21	1	0.39
(1,3108)	1:A:24:ASP:HB2	1:A:27:LEU:HD22	1	0.39
(1,3108)	1:A:24:ASP:HB2	1:A:27:LEU:HD23	1	0.39
(1,3079)	1:A:21:GLY:HA2	1:A:23:ARG:HB2	3	0.39
(1,3074)	1:A:20:ALA:H	1:A:91:PRO:HD2	3	0.39
(1,3065)	1:A:19:ASN:HB3	1:A:91:PRO:HB2	4	0.39
(1,1924)	1:A:42:TYR:HD1	1:A:135:ALA:HA	10	0.39
(1,1796)	1:A:32:LEU:HG	1:A:36:TYR:HE1	4	0.39
(1,2725)	1:A:71:TYR:HD1	1:A:154:ILE:HD11	2	0.38



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,2725)	1:A:71:TYR:HD1	1:A:154:ILE:HD12	2	0.38
(1,2725)	1:A:71:TYR:HD1	1:A:154:ILE:HD13	2	0.38
(1,2079)	1:A:71:TYR:HD1	1:A:150:ILE:HB	20	0.38
(1,2031)	1:A:71:TYR:HE1	1:A:151:PRO:HG2	17	0.38
(1,1796)	1:A:32:LEU:HG	1:A:36:TYR:HE1	2	0.38
(1,3475)	1:A:122:LYS:HB2	1:A:123:PRO:HD2	13	0.37
(1,3183)	1:A:44:GLU:H	1:A:44:GLU:HG2	11	0.37
(1,3072)	1:A:20:ALA:H	1:A:91:PRO:HB2	16	0.37
(1,3252)	1:A:58:SER:HB2	1:A:59:ASN:H	20	0.36
(1,3199)	1:A:51:ASN:HB2	1:A:51:ASN:HD22	6	0.36
(1,3199)	1:A:51:ASN:HB2	1:A:51:ASN:HD22	20	0.36
(1,3190)	1:A:47:LYS:H	1:A:52:ASP:HB2	4	0.36
(1,2725)	1:A:71:TYR:HD1	1:A:154:ILE:HD11	13	0.36
(1,2725)	1:A:71:TYR:HD1	1:A:154:ILE:HD12	13	0.36
(1,2725)	1:A:71:TYR:HD1	1:A:154:ILE:HD13	13	0.36
(1,2073)	1:A:32:LEU:HB2	1:A:36:TYR:HD1	13	0.36
(1,1864)	1:A:76:LEU:HG	1:A:78:TYR:HE1	15	0.36
(1,1090)	1:A:71:TYR:H	1:A:80:PHE:HE1	5	0.36
(1,970)	1:A:28:TRP:HE1	1:A:62:GLY:HA2	6	0.35
(1,3549)	1:A:164:LYS:HB2	1:A:165:CYS:H	3	0.35
(1,3453)	1:A:114:LYS:H	1:A:114:LYS:HB2	9	0.35
(1,3447)	1:A:110:TYR:HD1	1:A:114:LYS:HG2	13	0.35
(1,3328)	1:A:76:LEU:HD21	1:A:164:LYS:HG2	3	0.35
(1,3328)	1:A:76:LEU:HD22	1:A:164:LYS:HG2	3	0.35
(1,3328)	1:A:76:LEU:HD23	1:A:164:LYS:HG2	3	0.35
(1,3252)	1:A:58:SER:HB2	1:A:59:ASN:H	1	0.35
(1,3199)	1:A:51:ASN:HB2	1:A:51:ASN:HD22	1	0.35
(1,3199)	1:A:51:ASN:HB2	1:A:51:ASN:HD22	3	0.35
(1,3199)	1:A:51:ASN:HB2	1:A:51:ASN:HD22	4	0.35
(1,3199)	1:A:51:ASN:HB2	1:A:51:ASN:HD22	17	0.35
(1,3144)	1:A:32:LEU:HD11	1:A:62:GLY:HA2	4	0.35
(1,3144)	1:A:32:LEU:HD12	1:A:62:GLY:HA2	4	0.35
(1,3144)	1:A:32:LEU:HD13	1:A:62:GLY:HA2	4	0.35
(1,3079)	1:A:21:GLY:HA2	1:A:23:ARG:HB2	19	0.35
(1,3072)	1:A:20:ALA:H	1:A:91:PRO:HB2	14	0.35
(1,3016)	1:A:125:TRP:HH2	1:A:133:GLY:HA3	8	0.35
(1,2052)	1:A:42:TYR:HE1	1:A:46:ASN:HD22	9	0.35
(1,1090)	1:A:71:TYR:H	1:A:80:PHE:HE1	12	0.35
(1,3252)	1:A:58:SER:HB2	1:A:59:ASN:H	3	0.34
(1,3252)	1:A:58:SER:HB2	1:A:59:ASN:H	11	0.34
(1,3199)	1:A:51:ASN:HB2	1:A:51:ASN:HD22	15	0.34
(1,3199)	1:A:51:ASN:HB2	1:A:51:ASN:HD22	18	0.34



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,3088)	1:A:22:PRO:HB2	1:A:28:TRP:HZ2	3	0.34
(1,3078)	1:A:21:GLY:H	1:A:24:ASP:HB2	18	0.34
(1,2841)	1:A:94:ALA:HB1	1:A:121:PHE:HE1	2	0.34
(1,2841)	1:A:94:ALA:HB2	1:A:121:PHE:HE1	2	0.34
(1,2841)	1:A:94:ALA:HB3	1:A:121:PHE:HE1	2	0.34
(1,2091)	1:A:110:TYR:HE1	1:A:115:ILE:H	13	0.34
(1,1017)	1:A:64:ARG:H	1:A:66:PHE:HE1	7	0.34
(1,640)	1:A:59:ASN:H	1:A:62:GLY:HA3	2	0.33
(1,3354)	1:A:84:PHE:HB2	1:A:97:ILE:HA	6	0.33
(1,3252)	1:A:58:SER:HB2	1:A:59:ASN:H	13	0.33
(1,3199)	1:A:51:ASN:HB2	1:A:51:ASN:HD22	12	0.33
(1,3175)	1:A:41:ARG:HG2	1:A:45:ASN:HD21	19	0.33
(1,3079)	1:A:21:GLY:HA2	1:A:23:ARG:HB2	14	0.33
(1,2725)	1:A:71:TYR:HD1	1:A:154:ILE:HD11	6	0.33
(1,2725)	1:A:71:TYR:HD1	1:A:154:ILE:HD12	6	0.33
(1,2725)	1:A:71:TYR:HD1	1:A:154:ILE:HD13	6	0.33
(1,2683)	1:A:80:PHE:HE1	1:A:146:LEU:HD21	13	0.33
(1,2683)	1:A:80:PHE:HE1	1:A:146:LEU:HD22	13	0.33
(1,2683)	1:A:80:PHE:HE1	1:A:146:LEU:HD23	13	0.33
(1,1924)	1:A:42:TYR:HD1	1:A:135:ALA:HA	8	0.33
(1,3454)	1:A:114:LYS:H	1:A:114:LYS:HG2	18	0.32
(1,3267)	1:A:60:LYS:HB2	1:A:61:GLU:H	1	0.32
(1,3254)	1:A:58:SER:HB2	1:A:62:GLY:HA3	13	0.32
(1,3230)	1:A:56:LEU:HD11	1:A:67:GLY:HA2	2	0.32
(1,3230)	1:A:56:LEU:HD12	1:A:67:GLY:HA2	2	0.32
(1,3230)	1:A:56:LEU:HD13	1:A:67:GLY:HA2	2	0.32
(1,3199)	1:A:51:ASN:HB2	1:A:51:ASN:HD22	7	0.32
(1,3199)	1:A:51:ASN:HB2	1:A:51:ASN:HD22	11	0.32
(1,3199)	1:A:51:ASN:HB2	1:A:51:ASN:HD22	14	0.32
(1,3199)	1:A:51:ASN:HB2	1:A:51:ASN:HD22	19	0.32
(1,3183)	1:A:44:GLU:H	1:A:44:GLU:HG2	2	0.32
(1,3183)	1:A:44:GLU:H	1:A:44:GLU:HG2	20	0.32
(1,3154)	1:A:33:LYS:HG2	1:A:36:TYR:HD1	13	0.32
(1,3088)	1:A:22:PRO:HB2	1:A:28:TRP:HZ2	8	0.32
(1,3078)	1:A:21:GLY:H	1:A:24:ASP:HB2	9	0.32
(1,1796)	1:A:32:LEU:HG	1:A:36:TYR:HE1	1	0.32
(1,3273)	1:A:61:GLU:HA	1:A:61:GLU:HG2	6	0.31
(1,3214)	1:A:56:LEU:HA	1:A:67:GLY:HA2	14	0.31
(1,3199)	1:A:51:ASN:HB2	1:A:51:ASN:HD22	16	0.31
(1,3184)	1:A:44:GLU:HA	1:A:44:GLU:HG2	11	0.31
(1,3184)	1:A:44:GLU:HA	1:A:44:GLU:HG2	20	0.31
(1,3183)	1:A:44:GLU:H	1:A:44:GLU:HG2	8	0.31



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,3176)	1:A:41:ARG:HG2	1:A:45:ASN:HD22	4	0.31
(1,3088)	1:A:22:PRO:HB2	1:A:28:TRP:HZ2	5	0.31
(1,3060)	1:A:19:ASN:HA	1:A:91:PRO:HB2	9	0.31
(1,1022)	1:A:65:TRP:HE1	1:A:84:PHE:HE1	3	0.31
(1,3476)	1:A:122:LYS:HB3	1:A:123:PRO:HD2	16	0.3
(1,3433)	1:A:103:ASP:H	1:A:103:ASP:HB2	4	0.3
(1,3319)	1:A:72:ILE:HG12	1:A:77:LYS:HE2	13	0.3
(1,3304)	1:A:69:CYS:HB2	1:A:70:TRP:H	14	0.3
(1,3088)	1:A:22:PRO:HB2	1:A:28:TRP:HZ2	14	0.3
(1,3088)	1:A:22:PRO:HB2	1:A:28:TRP:HZ2	18	0.3
(1,3072)	1:A:20:ALA:H	1:A:91:PRO:HB2	6	0.3
(1,1924)	1:A:42:TYR:HD1	1:A:135:ALA:HA	20	0.3
(1,3497)	1:A:135:ALA:HA	1:A:138:MET:HB2	20	0.29
(1,3488)	1:A:127:ARG:HB2	1:A:128:ASN:HD22	11	0.29
(1,3252)	1:A:58:SER:HB2	1:A:59:ASN:H	16	0.29
(1,3190)	1:A:47:LYS:H	1:A:52:ASP:HB2	17	0.29
(1,3184)	1:A:44:GLU:HA	1:A:44:GLU:HG2	6	0.29
(1,3183)	1:A:44:GLU:H	1:A:44:GLU:HG2	6	0.29
(1,3065)	1:A:19:ASN:HB3	1:A:91:PRO:HB2	14	0.29
(1,3451)	1:A:111:ARG:HA	1:A:111:ARG:HG2	7	0.28
(1,3399)	1:A:96:GLU:HB2	1:A:114:LYS:HB2	20	0.28
(1,3312)	1:A:70:TRP:HD1	1:A:77:LYS:HD2	9	0.28
(1,3304)	1:A:69:CYS:HB2	1:A:70:TRP:H	19	0.28
(1,3200)	1:A:52:ASP:H	1:A:52:ASP:HB2	17	0.28
(1,3184)	1:A:44:GLU:HA	1:A:44:GLU:HG2	2	0.28
(1,3183)	1:A:44:GLU:H	1:A:44:GLU:HG2	1	0.28
(1,3183)	1:A:44:GLU:H	1:A:44:GLU:HG2	9	0.28
(1,3079)	1:A:21:GLY:HA2	1:A:23:ARG:HB2	15	0.28
(1,3068)	1:A:19:ASN:HD21	1:A:129:VAL:HG11	20	0.28
(1,3068)	1:A:19:ASN:HD21	1:A:129:VAL:HG12	20	0.28
(1,3068)	1:A:19:ASN:HD21	1:A:129:VAL:HG13	20	0.28
(1,3038)	1:A:4:GLU:HA	1:A:7:ARG:HG2	15	0.28
(1,2977)	1:A:110:TYR:HE1	1:A:115:ILE:HG21	20	0.28
(1,2977)	1:A:110:TYR:HE1	1:A:115:ILE:HG22	20	0.28
(1,2977)	1:A:110:TYR:HE1	1:A:115:ILE:HG23	20	0.28
(1,1924)	1:A:42:TYR:HD1	1:A:135:ALA:HA	16	0.28
(1,3545)	1:A:163:GLU:HB2	1:A:164:LYS:H	11	0.27
(1,3520)	1:A:149:GLU:HA	1:A:149:GLU:HG2	7	0.27
(1,3433)	1:A:103:ASP:H	1:A:103:ASP:HB2	19	0.27
(1,3304)	1:A:69:CYS:HB2	1:A:70:TRP:H	2	0.27
(1,3273)	1:A:61:GLU:HA	1:A:61:GLU:HG2	7	0.27
(1,3079)	1:A:21:GLY:HA2	1:A:23:ARG:HB2	6	0.27



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

(1,2031) 1:A:71:TYR:HE1 1:A:151:PRO:HG2 5 0.27 (1,1924) 1:A:42:TYR:HD1 1:A:135:ALA:HA 15 0.27 (1,549) 1:A:12:GLU:HA 1:A:12:GLU:HG3 6 0.27 (1,640) 1:A:59:ASN:H 1:A:62:GLY:HA3 11 0.26 (1,3497) 1:A:135:ALA:HA 1:A:138:MET:HB2 11 0.26 (1,3433) 1:A:103:ASP:H 1:A:103:ASP:HB2 17 0.26 (1,3375) 1:A:88:ILE:H 1:A:88:ILE:HG12 13 0.26 (1,3326) 1:A:76:LEU:HD12 1:A:161:HIS:HB2 9 0.26 (1,3326) 1:A:76:LEU:HD13 1:A:161:HIS:HB2 9 0.26 (1,3276) 1:A:61:GLU:HG2 1:A:63:THR:HG21 19 0.26 (1,3276) 1:A:61:GLU:HG2 1:A:63:THR:HG22 19 0.26 (1,3276) 1:A:61:GLU:HG2 1:A:63:THR:HG22 19 0.26 (1,3276) 1:A:61:GLU:HG2 1:A:63:THR:HG22 19 0.26 (1,3276) 1:A:61:GLU:HG2 1:	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1549) 1:A:12:GLU:HA 1:A:12:GLU:HG3 6 0.27 (1,640) 1:A:59:ASN:H 1:A:62:GLY:HA3 11 0.26 (1,3497) 1:A:135:ALA:HA 1:A:138:MET:HB2 11 0.26 (1,3433) 1:A:103:ASP:H 1:A:103:ASP:HB2 17 0.26 (1,3375) 1:A:88:ILE:H 1:A:103:ASP:HB2 17 0.26 (1,3375) 1:A:88:ILE:H 1:A:88:ILE:HG12 13 0.26 (1,3326) 1:A:76:LEU:HD11 1:A:161:HIS:HB2 9 0.26 (1,3326) 1:A:76:LEU:HD12 1:A:161:HIS:HB2 9 0.26 (1,3326) 1:A:76:LEU:HD13 1:A:161:HIS:HB2 9 0.26 (1,3276) 1:A:61:GLU:HG2 1:A:63:THR:HG21 19 0.26 (1,3276) 1:A:61:GLU:HG2 1:A:63:THR:HG22 19 0.26 (1,3276) 1:A:61:GLU:HG2 1:A:63:THR:HG23 19 0.26 (1,3276) 1:A:61:GLU:HG2 1:A:63:THR:HG23 19 0.26 (1,3244) 1:A:56:LEU:HA 1:A:67:GIX:HA2 4 0.26 (1,3200) 1:A:52:ASP:H 1:A:52:ASP:HB2 14 0.26 (1,3200) 1:A:52:ASP:H 1:A:52:ASP:HB2 14 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG21 1:A:44:GLU:HG2 9 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG21 1:A:44:GLU:HG2 9 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG23 1:A:44:GLU:HG2 9 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG23 1:A:44:GLU:HG2 9 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG23 1:A:44:GLU:HG2 17 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG23 1:A:42:GLU:HG2 17 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG23 1:A:42:GLU:HG2 17 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG23 1:A:44:GLU:HG2 17 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG23 1:A:42:GLU:HG2 17 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG23 1:A:42:GLU:HG3 17 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG24 III 17 0.26 (1,3130) 1:A:23:ARG:H 1.A:23:ARG:HG 1 0.26 (1,3130) 1:A:23:ARG:H 1	(1,2031)	1:A:71:TYR:HE1	1:A:151:PRO:HG2	5	0.27
(1,3497) 1:A:59:ASN:H 1:A:62:GLY:HA3 11 0.26 (1,3497) 1:A:135:ALA:HA 1:A:138:MET:HB2 11 0.26 (1,3493) 1:A:103:ASP:H 1:A:103:ASP:HB2 17 0.26 (1,3375) 1:A:88:ILE:H 1:A:88:ILE:HG12 13 0.26 (1,3375) 1:A:76:LEU:HD11 1:A:161:HIS:HB2 9 0.26 (1,3326) 1:A:76:LEU:HD12 1:A:161:HIS:HB2 9 0.26 (1,3326) 1:A:76:LEU:HD13 1:A:161:HIS:HB2 9 0.26 (1,3276) 1:A:61:GLU:HG2 1:A:63:THR:HG21 19 0.26 (1,3276) 1:A:61:GLU:HG2 1:A:63:THR:HG21 19 0.26 (1,3276) 1:A:61:GLU:HG2 1:A:63:THR:HG23 19 0.26 (1,3276) 1:A:61:GLU:HG2 1:A:63:THR:HG23 19 0.26 (1,3276) 1:A:56:LEU:HA 1:A:67:GLY:HA2 4 0.26 (1,3200) 1:A:55:ASP:H 1:A:52:ASP:HB2 14 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG21 1:A:44:GLU:HG2 9 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG21 1:A:44:GLU:HG2 9 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG21 1:A:44:GLU:HG2 9 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG23 1:A:44:GLU:HG2 9 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG23 1:A:44:GLU:HG2 17 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG21 1:A:32:LEU:HD11 17 0.26 (1,3183) 1:A:28:TRP:HE1 1:A:32:LEU:HD11 17 0.26 (1,3183) 1:A:28:TRP:HE1 1:A:32:LEU:HD11 17 0.26 (1,3123) 1:A:28:TRP:HE1 1:A:32:LEU:HD11 17 0.26 (1,3123) 1:A:28:TRP:HE1 1:A:32:LEU:HD11 17 0.26 (1,3123) 1:A:28:TRP:HE1 1:A:32:LEU:HD11 17 0.26 (1,344) 1:A:94:ALA:HB3 1:A:121:PHE:HE1 4 0.26 (1,2841) 1:A:94:ALA:HB3 1:A:121:PHE:HE1 4 0.26 (1,2841) 1:A:94:ALA:HB3 1:A:121:PHE:HE1 4 0.26 (1,344) 1:A:94:ALA:HB3 1:A:121:PHE:HE1 1 0.26 (1,3434) 1:A:124:LEU:HG 1:A:132:PHE:HE1 1 0.25 (1,3343) 1:A:28:TRP:HE1 1:A:32:LEU:HD11 17 0.26 (1,3434) 1:A:194:ALA:HB3 1:A:121:PHE:HE1 1 0.25 (1,3434) 1:A:194:ALA:HB3 1:A:121:PHE:HE1 1 0.25 (1,3434) 1:A:194:ALA:HB3 1:A:194:PHE:HE1 1 0.25 (1,3434) 1:A:194:ALA:HB3 1:A:194:PHE:HE1 1 0.25 (1,3345) 1:A:181:ASP:H 1:A:994:ALA:HG11 7 0.25 (1,3345) 1:A:81:ASP:H 1:A:994:ALA:HG11 7 0.25 (1,3345	(1,1924)	1:A:42:TYR:HD1	1:A:135:ALA:HA	15	0.27
(1,343) 1:A:103:ASP:H 1:A:103:ASP:HB2 17 0.26 (1,343) 1:A:103:ASP:H 1:A:103:ASP:HB2 17 0.26 (1,3375) 1:A:88:ILE:H 1:A:88:ILE:HG12 13 0.26 (1,3326) 1:A:76:LEU:HD11 1:A:161:HIS:HB2 9 0.26 (1,3326) 1:A:76:LEU:HD11 1:A:161:HIS:HB2 9 0.26 (1,3326) 1:A:76:LEU:HD13 1:A:161:HIS:HB2 9 0.26 (1,3326) 1:A:76:LEU:HD13 1:A:161:HIS:HB2 9 0.26 (1,3276) 1:A:61:GLU:HG2 1:A:63:THR:HG21 19 0.26 (1,3276) 1:A:61:GLU:HG2 1:A:63:THR:HG21 19 0.26 (1,3276) 1:A:61:GLU:HG2 1:A:63:THR:HG22 19 0.26 (1,3276) 1:A:61:GLU:HG2 1:A:63:THR:HG22 19 0.26 (1,3276) 1:A:61:GLU:HG2 1:A:63:THR:HG23 19 0.26 (1,3200) 1:A:52:ASP:H 1:A:52:ASP:HB2 14 0.26 (1,3200) 1:A:52:ASP:H 1:A:52:ASP:HB2 14 0.26 (1,3200) 1:A:40:ILE:HG21 1:A:44:GLU:HG2 9 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG21 1:A:44:GLU:HG2 9 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG22 1:A:44:GLU:HG2 9 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG22 1:A:44:GLU:HG2 9 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG23 1:A:44:GLU:HG2 9 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG23 1:A:44:GLU:HG2 17 0.26 (1,3180) 1:A:28:TRP:HE1 1:A:37:GLN:HE21 10 0.26 (1,3180) 1:A:28:TRP:HE1 1:A:37:GLN:HE21 10 0.26 (1,3180) 1:A:28:TRP:HE1 1:A:32:LEU:HD11 17 0.26 (1,3183) 1:A:28:TRP:HE1 1:A:32:LEU:HD12 17 0.26 (1,3183) 1:A:28:TRP:HE1 1:A:32:LEU:HD11 17 0.26 (1,3183) 1:A:28:TRP:HE1 1:A:32:LEU:HD12 17 0.26 (1,3183) 1:A:28:TRP:HE1 1:A:32:LEU:HD12 17 0.26 (1,3183) 1:A:28:TRP:HE1 1:A:32:LEU:HD11 17 0.26 (1,3183) 1:A:28:TRP:HE1 1:A:32:LEU:HD11 17 0.26 (1,3183) 1:A:28:TRP:HE1 1:A:32:LEU:HD11 17 0.26 (1,3183) 1:A:48:IASP:H 1:A:99:VAL:HG11 7 0.25 (1,3343) 1:A:48:IASP:H 1:A:99:VAL:HG11 7 0.25 (1,	(1,1549)	1:A:12:GLU:HA	1:A:12:GLU:HG3	6	0.27
(1,3433) 1:A:103:ASP:H 1:A:88:ILE:H 1:A:88:ILE:HG12 13 0.26 (1,3375) 1:A:88:ILE:H 1:A:88:ILE:HG12 13 0.26 (1,3326) 1:A:76:LEU:HD11 1:A:161:HIS:HB2 9 0.26 (1,3326) 1:A:76:LEU:HD13 1:A:161:HIS:HB2 9 0.26 (1,3326) 1:A:61:GLU:HG2 1:A:63:THR:HG21 19 0.26 (1,3276) 1:A:61:GLU:HG2 1:A:63:THR:HG21 19 0.26 (1,3276) 1:A:61:GLU:HG2 1:A:63:THR:HG22 19 0.26 (1,3276) 1:A:61:GLU:HG2 1:A:63:THR:HG23 19 0.26 (1,3200) 1:A:52:ASP:H 1:A:52:ASP:HB2 4 0.26 (1,3200) 1:A:52:ASP:H 1:A:52:ASP:HB2 20 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG21 1:A:44:GLU:HG2 9 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG22 1:A:44:GLU:HG2 9 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG23 1:A:44:GLU:HG2 17 0.26 (1,3170) 1:A	(1,640)	1:A:59:ASN:H	1:A:62:GLY:HA3	11	0.26
(1,3375) 1:A:88:ILE:H 1:A:88:ILE:HG12 13 0.26 (1,3326) 1:A:76:LEU:HD11 1:A:161:HIS:HB2 9 0.26 (1,3326) 1:A:76:LEU:HD12 1:A:161:HIS:HB2 9 0.26 (1,3326) 1:A:76:LEU:HD13 1:A:161:HIS:HB2 9 0.26 (1,3276) 1:A:61:GLU:HG2 1:A:63:THR:HG21 19 0.26 (1,3276) 1:A:61:GLU:HG2 1:A:63:THR:HG23 19 0.26 (1,3276) 1:A:61:GLU:HG2 1:A:63:THR:HG23 19 0.26 (1,3276) 1:A:61:GLU:HG2 1:A:63:THR:HG23 19 0.26 (1,3200) 1:A:55:ASP:H 1:A:65:GLY:HA2 4 0.26 (1,3200) 1:A:52:ASP:H 1:A:52:ASP:HB2 20 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG21 1:A:44:GLU:HG2 9 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG21 1:A:44:GLU:HG2 9 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG23 1:A:44:GLU:HG2 17 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG23 <td< td=""><td>(1,3497)</td><td>1:A:135:ALA:HA</td><td>1:A:138:MET:HB2</td><td>11</td><td>0.26</td></td<>	(1,3497)	1:A:135:ALA:HA	1:A:138:MET:HB2	11	0.26
(1,3326) 1:A:76:LEU:HD11 1:A:161:HIS:HB2 9 0.26 (1,3326) 1:A:76:LEU:HD12 1:A:161:HIS:HB2 9 0.26 (1,3326) 1:A:76:LEU:HD13 1:A:161:HIS:HB2 9 0.26 (1,3276) 1:A:61:GLU:HG2 1:A:63:THR:HG21 19 0.26 (1,3276) 1:A:61:GLU:HG2 1:A:63:THR:HG22 19 0.26 (1,3276) 1:A:61:GLU:HG2 1:A:63:THR:HG22 19 0.26 (1,3276) 1:A:61:GLU:HG2 1:A:63:THR:HG23 19 0.26 (1,3276) 1:A:61:GLU:HG2 1:A:63:THR:HG23 19 0.26 (1,3200) 1:A:52:ASP:H 1:A:56:ASP:HB2 14 0.26 (1,3200) 1:A:52:ASP:H 1:A:52:ASP:HB2 14 0.26 (1,3200) 1:A:52:ASP:H 1:A:52:ASP:HB2 20 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG21 1:A:44:GLU:HG2 9 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG21 1:A:44:GLU:HG2 9 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG23 1:A:44:GLU:HG2 9 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG21 1:A:44:GLU:HG2 9 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG21 1:A:44:GLU:HG2 17 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG21 1:A:34:GLU:HG2 17 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG21 1:A:34:GLU:HG2 17 0.26 (1,3123) 1:A:28:TRP:HE1 1:A:32:LEU:HD11 17 0.26 (1,3131) 1:A:28:TRP:HE1 1:A:32:LEU:HD11 17 0.26 (1,3123) 1:A:28:TRP:HE1 1:A:32:LEU:HD11 17 0.26 (1,314) 1:A:94:ALA:HB1 1:A:121:PHE:HE1 4 0.26 (1,2841) 1:A:94:ALA:HB2 1:A:194:PHE:HE1 7 0.26 (1,3550) 1:A:164:LYS:HG2 1:A:165:CYS:H 4 0.25 (1,3543) 1:A:161:HIS:HB2 1:A:199:VAL:HG1 7 0.25 (1,3345) 1:A:181:ASP:H 1:A:199:VAL:HG1 7 0.25 (1,3345) 1:A:181	(1,3433)	1:A:103:ASP:H	1:A:103:ASP:HB2	17	0.26
(1,3326) 1:A:76:LEU:HD12 1:A:161:HIS:HB2 9 0.26 (1,3326) 1:A:76:LEU:HD13 1:A:161:HIS:HB2 9 0.26 (1,3276) 1:A:61:GLU:HG2 1:A:63:THR:HG21 19 0.26 (1,3276) 1:A:61:GLU:HG2 1:A:63:THR:HG22 19 0.26 (1,3276) 1:A:61:GLU:HG2 1:A:63:THR:HG23 19 0.26 (1,3276) 1:A:61:GLU:HG2 1:A:63:THR:HG23 19 0.26 (1,3276) 1:A:56:LEU:HA 1:A:67:GLY:HA2 4 0.26 (1,3200) 1:A:52:ASP:H 1:A:52:ASP:HB2 14 0.26 (1,3200) 1:A:52:ASP:H 1:A:52:ASP:HB2 20 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG21 1:A:44:GLU:HG2 9 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG21 1:A:44:GLU:HG2 9 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG23 1:A:44:GLU:HG2 9 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG23 1:A:44:GLU:HG2 9 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG21 1:A:44:GLU:HG2 17 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG21 1:A:44:GLU:HG2 17 0.26 (1,3170) 1:A:30:ILE:HG21 1:A:44:GLU:HG2 17 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG21 1:A:44:GLU:HG2 17 0.26 (1,3170) 1:A:20:ILE:HG21 1:A:44:GLU:HG2 17 0.26 (1,3170) 1:A:20:ILE:HG21 1:A:34:GLU:HG2 17 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG21 1:A:34:GLU:HG2 17 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG23 1:A:44:GLU:HG2 17 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG23 1:A:44:GLU:HG2 17 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG23 1:A:41:GLU:HG2 17 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG23 1:A:41:GLU:HG2 17 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG23 1:A:41:GLU:HG2 17 0.26 (1,3183) 1:A:28:TRP:HE1 1:A:32:LEU:HD11 17 0.26 (1,3183) 1:A:28:TRP:HE1 1:A:32:LEU:HD11 17 0.26 (1,3123) 1:A:28:TRP:HE1 1:A:32:LEU:HD11 17 0.26 (1,3123) 1:A:28:TRP:HE1 1:A:32:LEU:HD12 17 0.26 (1,3123) 1:A:28:TRP:HE1 1:A:32:LEU:HD14 17 0.26 (1,3143) 1:A:28:TRP:HE1 1:A:32:LEU:HD14 17 0.26 (1,3143) 1:A:28:TRP:HE1 1:A:32:LEU:HD14 17 0.26 (1,3143) 1:A:28:TRP:HE1 1:A:32:LEU:HD14 17 0.26 (1,3144) 1:A:94:ALA:HB1 1:A:12:PHE:HE1 4 0.26 (1,344) 1:A:94:ALA:HB1 1:A:12:PHE:HE1 4 0.26 (1,344) 1:A:94:ALA:HB2 1:A:12:PHE:HE1 4 0.26 (1,3550) 1:A:16:HIS:HB2 1:A:18:PHE:HE1 7 0.26 (1,3543) 1:A:16:HIS:HB2 1:A:19:PHE:HE1 7 0.25 (1,3344) 1:A:105:LYS:H 1:A:199:VAL:HG13 7 0.25 (1,3345) 1:A:81:ASP:H 1:A:99:VAL:HG13 7 0.25 (1,3345) 1:	(1,3375)	1:A:88:ILE:H	1:A:88:ILE:HG12	13	0.26
(1,3326) 1:A:76:LEU:HD13 1:A:161:HIS:HB2 9 0.26 (1,3276) 1:A:61:GLU:HG2 1:A:63:THR:HG21 19 0.26 (1,3276) 1:A:61:GLU:HG2 1:A:63:THR:HG22 19 0.26 (1,3276) 1:A:61:GLU:HG2 1:A:63:THR:HG23 19 0.26 (1,3276) 1:A:61:GLU:HG2 1:A:63:THR:HG23 19 0.26 (1,3200) 1:A:56:LEU:HA 1:A:67:GLY:HA2 4 0.26 (1,3200) 1:A:52:ASP:H 1:A:52:ASP:HB2 14 0.26 (1,3200) 1:A:40:ILE:HG21 1:A:44:GLU:HG2 9 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG21 1:A:44:GLU:HG2 9 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG23 1:A:44:GLU:HG2 17 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG21 1:A:44:GLU:HG2 17 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG22 1:A:44:GLU:HG2 17 0.26 (1,3131) 1:A:30:GLN:HG2 1:A:37:GLN:HB22 10 0.26 (1,3131) 1:A:38:TRP:HE1 <	(1,3326)	1:A:76:LEU:HD11	1:A:161:HIS:HB2	9	0.26
(1,3276) 1:A:61:GLU:HG2 1:A:63:THR:HG21 19 0.26 (1,3276) 1:A:61:GLU:HG2 1:A:63:THR:HG22 19 0.26 (1,3276) 1:A:61:GLU:HG2 1:A:63:THR:HG23 19 0.26 (1,3276) 1:A:61:GLU:HG2 1:A:63:THR:HG23 19 0.26 (1,3214) 1:A:65:LSP:H 1:A:67:GLY:HA2 4 0.26 (1,3200) 1:A:52:ASP:H 1:A:52:ASP:HB2 14 0.26 (1,3170) 1:A:44:GLU:HG21 1:A:44:GLU:HG2 9 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG23 1:A:44:GLU:HG2 9 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG23 1:A:44:GLU:HG2 9 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG23 1:A:44:GLU:HG2 17 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG23 1:A:44:GLU:HG2 17 0.26 (1,3170) 1:A:30:ILE:HG23 1:A:44:GLU:HG2 17 0.26 (1,3170) 1:A:34:FHB23 1:A:44:GLU:HG2 17 0.26 (1,3171) 1:A:36:GLN:HG2 10	(1,3326)	1:A:76:LEU:HD12	1:A:161:HIS:HB2	9	0.26
(1,3276) 1:A:61:GLU:HG2 1:A:63:THR:HG22 19 0.26 (1,3276) 1:A:61:GLU:HG2 1:A:63:THR:HG23 19 0.26 (1,3214) 1:A:56:LEU:HA 1:A:67:GLY:HA2 4 0.26 (1,3200) 1:A:52:ASP:H 1:A:52:ASP:HB2 14 0.26 (1,3200) 1:A:52:ASP:H 1:A:52:ASP:HB2 20 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG21 1:A:44:GLU:HG2 9 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG22 1:A:44:GLU:HG2 9 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG23 1:A:44:GLU:HG2 9 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG21 1:A:44:GLU:HG2 9 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG23 1:A:44:GLU:HG2 17 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG23 1:A:44:GLU:HG2 17 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG23 1:A:44:GLU:HG2 17 0.26 (1,3170) 1:A:37:GLN:HG2 1:A:37:GLN:HG2 17 0.26 (1,3131) 1:A:30:GLN:HG2 1:A	(1,3326)	1:A:76:LEU:HD13	1:A:161:HIS:HB2	9	0.26
(1,3276) 1:A:61:GLU:HG2 1:A:63:THR:HG23 19 0.26 (1,3214) 1:A:56:LEU:HA 1:A:67:GLY:HA2 4 0.26 (1,3200) 1:A:52:ASP:H 1:A:52:ASP:HB2 14 0.26 (1,3200) 1:A:52:ASP:H 1:A:52:ASP:HB2 20 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG21 1:A:44:GLU:HG2 9 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG22 1:A:44:GLU:HG2 9 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG23 1:A:44:GLU:HG2 9 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG21 1:A:44:GLU:HG2 17 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG22 1:A:44:GLU:HG2 17 0.26 (1,3170) 1:A:37:GLN:HG21 1:A:37:GLN:HE22 10 0.26 (1,3165) 1:A:37:GLN:HG23 1:A:44:GLU:HG2 17 0.26 (1,3131) 1:A:30:GLN:HE21 1:A:37:GLN:HE22 10 0.26 (1,3123) 1:A:28:TRP:HE1 1:A:32:LEU:HD11 17 0.26 (1,3123) 1:A:28:TRP:HE1 <td< td=""><td>(1,3276)</td><td>1:A:61:GLU:HG2</td><td>1:A:63:THR:HG21</td><td>19</td><td>0.26</td></td<>	(1,3276)	1:A:61:GLU:HG2	1:A:63:THR:HG21	19	0.26
(1,3214) 1:A:56:LEU:HA 1:A:67:GLY:HA2 4 0.26 (1,3200) 1:A:52:ASP:H 1:A:52:ASP:HB2 14 0.26 (1,3200) 1:A:52:ASP:H 1:A:52:ASP:HB2 20 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG21 1:A:44:GLU:HG2 9 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG22 1:A:44:GLU:HG2 9 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG23 1:A:44:GLU:HG2 17 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG22 1:A:44:GLU:HG2 17 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG23 1:A:44:GLU:HG2 17 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG23 1:A:44:GLU:HG2 17 0.26 (1,3170) 1:A:37:GLN:HG21 1:A:37:GLN:HE22 10 0.26 (1,3131) 1:A:30:GLN:HE21 1:A:37:GLN:HE22 10 0.26 (1,3123) 1:A:28:TRP:HE1 1:A:33:LEU:HD11 17 0.26 (1,3123) 1:A:28:TRP:HE1 1:A:32:LEU:HD12 17 0.26 (1,3123) 1:A:23:ARG:H	(1,3276)	1:A:61:GLU:HG2	1:A:63:THR:HG22	19	0.26
(1,3200) 1:A:52:ASP:H 1:A:52:ASP:HB2 14 0.26 (1,3200) 1:A:52:ASP:H 1:A:52:ASP:HB2 20 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG21 1:A:44:GLU:HG2 9 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG22 1:A:44:GLU:HG2 9 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG21 1:A:44:GLU:HG2 9 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG21 1:A:44:GLU:HG2 17 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG22 1:A:44:GLU:HG2 17 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG23 1:A:44:GLU:HG2 17 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG23 1:A:44:GLU:HG2 17 0.26 (1,3165) 1:A:37:GLN:HG2 1:A:37:GLN:HE22 10 0.26 (1,3131) 1:A:30:GLN:HE21 1:A:32:GLU:HG2 10 0.26 (1,3123) 1:A:28:TRP:HE1 1:A:32:LEU:HD11 17 0.26 (1,3123) 1:A:28:TRP:HE1 1:A:32:LEU:HD12 17 0.26 (1,3123) 1:A:28:TRP:HE1 <t< td=""><td>(1,3276)</td><td>1:A:61:GLU:HG2</td><td>1:A:63:THR:HG23</td><td>19</td><td>0.26</td></t<>	(1,3276)	1:A:61:GLU:HG2	1:A:63:THR:HG23	19	0.26
(1,3200) 1:A:52:ASP:H 1:A:52:ASP:HB2 20 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG21 1:A:44:GLU:HG2 9 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG22 1:A:44:GLU:HG2 9 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG23 1:A:44:GLU:HG2 17 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG21 1:A:44:GLU:HG2 17 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG22 1:A:44:GLU:HG2 17 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG23 1:A:44:GLU:HG2 17 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG23 1:A:44:GLU:HG2 17 0.26 (1,3165) 1:A:37:GLN:HG2 10 0.26 (1,3131) 1:A:30:GLN:HG2 10 0.26 (1,3131) 1:A:28:TRP:HE1 1:A:32:LEU:HD12 17 0.26 (1,3123) 1:A:28:TRP:HE1 1:A:32:LEU:HD13 17 0.26 (1,3123) 1:A:28:TRP:HE1 1:A:32:LEU:HD13 17 0.26 (1,3123) 1:A:28:ARG:H 1:A:23:ARG:HG2 6 0.26	(1,3214)	1:A:56:LEU:HA	1:A:67:GLY:HA2	4	0.26
(1,3170) 1:A:40:ILE:HG21 1:A:44:GLU:HG2 9 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG22 1:A:44:GLU:HG2 9 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG23 1:A:44:GLU:HG2 9 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG21 1:A:44:GLU:HG2 17 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG22 1:A:44:GLU:HG2 17 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG23 1:A:44:GLU:HG2 17 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG23 1:A:44:GLU:HG2 17 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG23 1:A:44:GLU:HG2 10 0.26 (1,3165) 1:A:37:GLN:HG2 1:A:37:GLN:HE22 10 0.26 (1,3131) 1:A:30:GLN:HE21 1:A:34:GLU:HG2 10 0.26 (1,3131) 1:A:28:TRP:HE1 1:A:32:LEU:HD1 17 0.26 (1,3123) 1:A:28:TRP:HE1 1:A:32:LEU:HD12 17 0.26 (1,3123) 1:A:28:ARG:H 1:A:32:LEU:HD13 17 0.26 (1,3100) 1:A:29:ALA:HB1	(1,3200)	1:A:52:ASP:H	1:A:52:ASP:HB2	14	0.26
(1,3170) 1:A:40:ILE:HG22 1:A:44:GLU:HG2 9 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG23 1:A:44:GLU:HG2 9 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG21 1:A:44:GLU:HG2 17 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG22 1:A:44:GLU:HG2 17 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG23 1:A:44:GLU:HG2 17 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG23 1:A:44:GLU:HG2 17 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG23 1:A:44:GLU:HG2 17 0.26 (1,3165) 1:A:37:GLN:HG2 1:A:37:GLN:HG22 10 0.26 (1,3131) 1:A:30:GLN:HE21 1:A:37:GLN:HG22 10 0.26 (1,3131) 1:A:30:GLN:HE21 1:A:37:GLN:HG2 10 0.26 (1,3131) 1:A:30:GLN:HE21 1:A:33:GLN:HG2 10 0.26 (1,3123) 1:A:28:TRP:HE1 1:A:32:LEU:HD11 17 0.26 (1,3123) 1:A:28:TRP:HE1 1:A:32:LEU:HD13 17 0.26 (1,3100) 1:A:23:ARG:H	(1,3200)	1:A:52:ASP:H	1:A:52:ASP:HB2	20	0.26
(1,3170) 1:A:40:ILE:HG23 1:A:44:GLU:HG2 9 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG21 1:A:44:GLU:HG2 17 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG22 1:A:44:GLU:HG2 17 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG23 1:A:44:GLU:HG2 17 0.26 (1,3170) 1:A:30:ILE:HG23 1:A:44:GLU:HG2 17 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG23 1:A:44:GLU:HG2 10 0.26 (1,3165) 1:A:30:ILE:HG23 1:A:44:GLU:HG2 10 0.26 (1,3165) 1:A:30:ILE:HG23 1:A:44:GLU:HG2 10 0.26 (1,3165) 1:A:30:ILE:HG23 1:A:43:GLU:HG2 10 0.26 (1,3123) 1:A:28:TRP:HE1 1:A:32:LEU:HD11 17 0.26 (1,3123) 1:A:28:TRP:HE1 1:A:23:LEU:HD12 17 0.26 (1,3123) 1:A:28:TRP:HE1 1:A:23:LEU:HD13 17 0.26 (1,3123) 1:A:28:TRP:HE1 1:A:23:LEU:HD13 17 0.26 (1,3100) 1:A:42:3:ARG:H	(1,3170)	1:A:40:ILE:HG21	1:A:44:GLU:HG2	9	0.26
(1,3170) 1:A:40:ILE:HG21 1:A:44:GLU:HG2 17 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG22 1:A:44:GLU:HG2 17 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG23 1:A:44:GLU:HG2 17 0.26 (1,3165) 1:A:37:GLN:HG2 1:A:37:GLN:HE22 10 0.26 (1,3131) 1:A:30:GLN:HE21 1:A:34:GLU:HG2 10 0.26 (1,3123) 1:A:28:TRP:HE1 1:A:32:LEU:HD11 17 0.26 (1,3123) 1:A:28:TRP:HE1 1:A:32:LEU:HD12 17 0.26 (1,3123) 1:A:28:TRP:HE1 1:A:32:LEU:HD13 17 0.26 (1,3123) 1:A:28:TRP:HE1 1:A:32:LEU:HD13 17 0.26 (1,3120) 1:A:23:ARG:H 1:A:23:ARG:HG2 6 0.26 (1,2841) 1:A:94:ALA:HB1 1:A:121:PHE:HE1 4 0.26 (1,2841) 1:A:94:ALA:HB3 1:A:121:PHE:HE1 4 0.26 (1,3541) 1:A:124:LEU:HG 1:A:132:PHE:HE1 7 0.26 (1,3543) 1:A:164:LYS:HG2	(1,3170)	1:A:40:ILE:HG22	1:A:44:GLU:HG2	9	0.26
(1,3170) 1:A:40:ILE:HG22 1:A:44:GLU:HG2 17 0.26 (1,3170) 1:A:40:ILE:HG23 1:A:44:GLU:HG2 17 0.26 (1,3165) 1:A:37:GLN:HG2 1:A:37:GLN:HE22 10 0.26 (1,3131) 1:A:30:GLN:HE21 1:A:34:GLU:HG2 10 0.26 (1,3123) 1:A:28:TRP:HE1 1:A:32:LEU:HD11 17 0.26 (1,3123) 1:A:28:TRP:HE1 1:A:32:LEU:HD12 17 0.26 (1,3123) 1:A:28:TRP:HE1 1:A:32:LEU:HD13 17 0.26 (1,3123) 1:A:28:TRP:HE1 1:A:32:LEU:HD13 17 0.26 (1,3123) 1:A:28:TRP:HE1 1:A:32:LEU:HD13 17 0.26 (1,3120) 1:A:23:ARG:H 1:A:32:LEU:HD13 17 0.26 (1,2841) 1:A:94:ALA:HB1 1:A:121:PHE:HE1 4 0.26 (1,2841) 1:A:94:ALA:HB2 1:A:121:PHE:HE1 4 0.26 (1,2841) 1:A:124:LEU:HG 1:A:132:PHE:HE1 7 0.26 (1,1912) 1:A:164:LYS:HG2	(1,3170)	1:A:40:ILE:HG23	1:A:44:GLU:HG2	9	0.26
(1,3170) 1:A:40:ILE:HG23 1:A:44:GLU:HG2 17 0.26 (1,3165) 1:A:37:GLN:HG2 1:A:37:GLN:HE22 10 0.26 (1,3131) 1:A:30:GLN:HE21 1:A:34:GLU:HG2 10 0.26 (1,3123) 1:A:28:TRP:HE1 1:A:32:LEU:HD11 17 0.26 (1,3123) 1:A:28:TRP:HE1 1:A:32:LEU:HD12 17 0.26 (1,3123) 1:A:28:TRP:HE1 1:A:32:LEU:HD13 17 0.26 (1,3123) 1:A:28:TRP:HE1 1:A:32:LEU:HD13 17 0.26 (1,3100) 1:A:23:ARG:H 1:A:23:ARG:HG2 6 0.26 (1,2841) 1:A:94:ALA:HB1 1:A:121:PHE:HE1 4 0.26 (1,2841) 1:A:94:ALA:HB2 1:A:121:PHE:HE1 4 0.26 (1,2841) 1:A:94:ALA:HB3 1:A:121:PHE:HE1 4 0.26 (1,384) 1:A:124:LEU:HG 1:A:132:PHE:HE1 7 0.26 (1,1912) 1:A:164:LYS:HG2 1:A:165:CYS:H 4 0.25 (1,3540) 1:A:161:HIS:HB2 <td< td=""><td>(1,3170)</td><td>1:A:40:ILE:HG21</td><td>1:A:44:GLU:HG2</td><td>17</td><td>0.26</td></td<>	(1,3170)	1:A:40:ILE:HG21	1:A:44:GLU:HG2	17	0.26
(1,3165) 1:A:37:GLN:HG2 1:A:37:GLN:HE22 10 0.26 (1,3131) 1:A:30:GLN:HE21 1:A:34:GLU:HG2 10 0.26 (1,3123) 1:A:28:TRP:HE1 1:A:32:LEU:HD11 17 0.26 (1,3123) 1:A:28:TRP:HE1 1:A:32:LEU:HD12 17 0.26 (1,3123) 1:A:28:TRP:HE1 1:A:32:LEU:HD13 17 0.26 (1,3100) 1:A:23:ARG:H 1:A:32:ARG:HG2 6 0.26 (1,2841) 1:A:94:ALA:HB1 1:A:121:PHE:HE1 4 0.26 (1,2841) 1:A:94:ALA:HB2 1:A:121:PHE:HE1 4 0.26 (1,2841) 1:A:94:ALA:HB3 1:A:121:PHE:HE1 4 0.26 (1,3841) 1:A:129:GLU:HG 1:A:132:PHE:HE1 7 0.26 (1,1912) 1:A:12:GLU:HG 1:A:165:CYS:H 4 0.25 (1,3550) 1:A:164:LYS:HG2 1:A:165:CYS:H 4 0.25 (1,3343) 1:A:161:HIS:HB2 1:A:162:LYS:HB2 4 0.25 (1,3345) 1:A:81:ASP:H 1:A:9	(1,3170)	1:A:40:ILE:HG22	1:A:44:GLU:HG2	17	0.26
(1,3131) 1:A:30:GLN:HE21 1:A:34:GLU:HG2 10 0.26 (1,3123) 1:A:28:TRP:HE1 1:A:32:LEU:HD11 17 0.26 (1,3123) 1:A:28:TRP:HE1 1:A:32:LEU:HD12 17 0.26 (1,3123) 1:A:28:TRP:HE1 1:A:32:LEU:HD13 17 0.26 (1,3100) 1:A:23:ARG:H 1:A:23:ARG:HG2 6 0.26 (1,2841) 1:A:94:ALA:HB1 1:A:121:PHE:HE1 4 0.26 (1,2841) 1:A:94:ALA:HB2 1:A:121:PHE:HE1 4 0.26 (1,2841) 1:A:94:ALA:HB3 1:A:121:PHE:HE1 4 0.26 (1,2841) 1:A:194:ALA:HB3 1:A:121:PHE:HE1 7 0.26 (1,3841) 1:A:124:LEU:HG 1:A:132:PHE:HE1 7 0.26 (1,1912) 1:A:12:GLU:HA 1:A:12:GLU:HG3 16 0.26 (1,3549) 1:A:164:LYS:HG2 1:A:165:CYS:H 4 0.25 (1,3543) 1:A:161:HIS:HB2 1:A:162:LYS:H 15 0.25 (1,3343) 1:A:96:GLU:HB2 1:	(1,3170)	1:A:40:ILE:HG23	1:A:44:GLU:HG2	17	0.26
(1,3123) 1:A:28:TRP:HE1 1:A:32:LEU:HD11 17 0.26 (1,3123) 1:A:28:TRP:HE1 1:A:32:LEU:HD12 17 0.26 (1,3123) 1:A:28:TRP:HE1 1:A:32:LEU:HD13 17 0.26 (1,3100) 1:A:23:ARG:H 1:A:23:ARG:HG2 6 0.26 (1,2841) 1:A:94:ALA:HB1 1:A:121:PHE:HE1 4 0.26 (1,2841) 1:A:94:ALA:HB2 1:A:121:PHE:HE1 4 0.26 (1,2841) 1:A:94:ALA:HB3 1:A:121:PHE:HE1 4 0.26 (1,2841) 1:A:194:LEU:HG 1:A:132:PHE:HE1 7 0.26 (1,1912) 1:A:124:LEU:HG 1:A:132:PHE:HE1 7 0.26 (1,1549) 1:A:12:GLU:HA 1:A:12:GLU:HG3 16 0.26 (1,3550) 1:A:164:LYS:HG2 1:A:165:CYS:H 4 0.25 (1,3434) 1:A:105:LYS:H 1:A:105:LYS:HB2 4 0.25 (1,3343) 1:A:99:CH 1:A:14:LYS:HB2 11 0.25 (1,3345) 1:A:81:ASP:H 1:A:99:VAL:H	(1,3165)	1:A:37:GLN:HG2	1:A:37:GLN:HE22	10	0.26
(1,3123) 1:A:28:TRP:HE1 1:A:32:LEU:HD12 17 0.26 (1,3123) 1:A:28:TRP:HE1 1:A:32:LEU:HD13 17 0.26 (1,3100) 1:A:23:ARG:H 1:A:23:ARG:HG2 6 0.26 (1,2841) 1:A:94:ALA:HB1 1:A:121:PHE:HE1 4 0.26 (1,2841) 1:A:94:ALA:HB2 1:A:121:PHE:HE1 4 0.26 (1,2841) 1:A:94:ALA:HB3 1:A:121:PHE:HE1 4 0.26 (1,2841) 1:A:194:ALA:HB3 1:A:121:PHE:HE1 4 0.26 (1,2841) 1:A:194:ALA:HB3 1:A:121:PHE:HE1 7 0.26 (1,1912) 1:A:124:LEU:HG 1:A:132:PHE:HE1 7 0.26 (1,1549) 1:A:12:GLU:HA 1:A:12:GLU:HG3 16 0.26 (1,3550) 1:A:164:LYS:HG2 1:A:165:CYS:H 4 0.25 (1,3543) 1:A:161:HIS:HB2 1:A:162:LYS:H 15 0.25 (1,3434) 1:A:96:GLU:HB2 1:A:114:LYS:HB2 11 0.25 (1,3345) 1:A:81:ASP:H 1:A:	(1,3131)	1:A:30:GLN:HE21	1:A:34:GLU:HG2	10	0.26
(1,3123) 1:A:28:TRP:HE1 1:A:32:LEU:HD13 17 0.26 (1,3100) 1:A:23:ARG:H 1:A:23:ARG:HG2 6 0.26 (1,2841) 1:A:94:ALA:HB1 1:A:121:PHE:HE1 4 0.26 (1,2841) 1:A:94:ALA:HB2 1:A:121:PHE:HE1 4 0.26 (1,2841) 1:A:94:ALA:HB3 1:A:121:PHE:HE1 4 0.26 (1,2841) 1:A:94:ALA:HB3 1:A:121:PHE:HE1 7 0.26 (1,2841) 1:A:124:LEU:HG 1:A:132:PHE:HE1 7 0.26 (1,1912) 1:A:124:LEU:HG 1:A:132:PHE:HE1 7 0.26 (1,1949) 1:A:122:GLU:HG 1:A:132:GLU:HG3 16 0.26 (1,3550) 1:A:164:LYS:HG2 1:A:165:CYS:H 4 0.25 (1,3543) 1:A:161:HIS:HB2 1:A:162:LYS:H 15 0.25 (1,3434) 1:A:105:LYS:H 1:A:105:LYS:HB2 4 0.25 (1,3345) 1:A:81:ASP:H 1:A:99:VAL:HG11 7 0.25 (1,3345) 1:A:81:ASP:H 1:A:99:VA	(1,3123)	1:A:28:TRP:HE1	1:A:32:LEU:HD11	17	0.26
(1,3100) 1:A:23:ARG:H 1:A:23:ARG:HG2 6 0.26 (1,2841) 1:A:94:ALA:HB1 1:A:121:PHE:HE1 4 0.26 (1,2841) 1:A:94:ALA:HB2 1:A:121:PHE:HE1 4 0.26 (1,2841) 1:A:94:ALA:HB3 1:A:121:PHE:HE1 4 0.26 (1,2841) 1:A:94:ALA:HB3 1:A:121:PHE:HE1 7 0.26 (1,1912) 1:A:124:LEU:HG 1:A:132:PHE:HE1 7 0.26 (1,1949) 1:A:12:GLU:HA 1:A:12:GLU:HG3 16 0.26 (1,3550) 1:A:164:LYS:HG2 1:A:165:CYS:H 4 0.25 (1,3543) 1:A:161:HIS:HB2 1:A:162:LYS:H 15 0.25 (1,3434) 1:A:105:LYS:H 1:A:105:LYS:HB2 4 0.25 (1,3399) 1:A:81:ASP:H 1:A:99:VAL:HG11 7 0.25 (1,3345) 1:A:81:ASP:H 1:A:99:VAL:HG13 7 0.25 (1,3345) 1:A:81:ASP:H 1:A:99:VAL:HG13 7 0.25 (1,3319) 1:A:72:ILE:HG12 1:A:77:LYS:HE	(1,3123)	1:A:28:TRP:HE1	1:A:32:LEU:HD12	17	0.26
(1,2841) 1:A:94:ALA:HB1 1:A:121:PHE:HE1 4 0.26 (1,2841) 1:A:94:ALA:HB2 1:A:121:PHE:HE1 4 0.26 (1,2841) 1:A:94:ALA:HB3 1:A:121:PHE:HE1 4 0.26 (1,2841) 1:A:94:ALA:HB3 1:A:121:PHE:HE1 4 0.26 (1,1912) 1:A:124:LEU:HG 1:A:132:PHE:HE1 7 0.26 (1,1949) 1:A:12:GLU:HA 1:A:12:GLU:HG3 16 0.26 (1,3549) 1:A:164:LYS:HG2 1:A:165:CYS:H 4 0.25 (1,3543) 1:A:164:LYS:HB2 1:A:162:LYS:H 15 0.25 (1,3434) 1:A:105:LYS:H 1:A:105:LYS:HB2 4 0.25 (1,3399) 1:A:96:GLU:HB2 1:A:114:LYS:HB2 11 0.25 (1,3345) 1:A:81:ASP:H 1:A:99:VAL:HG11 7 0.25 (1,3345) 1:A:81:ASP:H 1:A:99:VAL:HG13 7 0.25 (1,3319) 1:A:72:ILE:HG12 1:A:77:LYS:HE2 19 0.25	(1,3123)	1:A:28:TRP:HE1	1:A:32:LEU:HD13	17	0.26
(1,2841) 1:A:94:ALA:HB2 1:A:121:PHE:HE1 4 0.26 (1,2841) 1:A:94:ALA:HB3 1:A:121:PHE:HE1 4 0.26 (1,1912) 1:A:124:LEU:HG 1:A:132:PHE:HE1 7 0.26 (1,1549) 1:A:12:GLU:HA 1:A:12:GLU:HG3 16 0.26 (1,3550) 1:A:164:LYS:HG2 1:A:165:CYS:H 4 0.25 (1,3543) 1:A:161:HIS:HB2 1:A:162:LYS:H 15 0.25 (1,3434) 1:A:105:LYS:H 1:A:105:LYS:HB2 4 0.25 (1,3399) 1:A:96:GLU:HB2 1:A:114:LYS:HB2 11 0.25 (1,3345) 1:A:81:ASP:H 1:A:99:VAL:HG11 7 0.25 (1,3345) 1:A:81:ASP:H 1:A:99:VAL:HG12 7 0.25 (1,3345) 1:A:81:ASP:H 1:A:99:VAL:HG13 7 0.25 (1,3319) 1:A:72:ILE:HG12 1:A:77:LYS:HE2 19 0.25	(1,3100)	1:A:23:ARG:H	1:A:23:ARG:HG2	6	0.26
(1,2841) 1:A:94:ALA:HB3 1:A:121:PHE:HE1 4 0.26 (1,1912) 1:A:124:LEU:HG 1:A:132:PHE:HE1 7 0.26 (1,1549) 1:A:12:GLU:HA 1:A:12:GLU:HG3 16 0.26 (1,3550) 1:A:164:LYS:HG2 1:A:165:CYS:H 4 0.25 (1,3543) 1:A:161:HIS:HB2 1:A:162:LYS:H 15 0.25 (1,3434) 1:A:105:LYS:H 1:A:105:LYS:HB2 4 0.25 (1,3399) 1:A:96:GLU:HB2 1:A:114:LYS:HB2 11 0.25 (1,3345) 1:A:81:ASP:H 1:A:99:VAL:HG11 7 0.25 (1,3345) 1:A:81:ASP:H 1:A:99:VAL:HG12 7 0.25 (1,3345) 1:A:81:ASP:H 1:A:99:VAL:HG13 7 0.25 (1,3319) 1:A:72:ILE:HG12 1:A:77:LYS:HE2 19 0.25	(1,2841)	1:A:94:ALA:HB1	1:A:121:PHE:HE1	4	0.26
(1,1912) 1:A:124:LEU:HG 1:A:132:PHE:HE1 7 0.26 (1,1549) 1:A:12:GLU:HA 1:A:12:GLU:HG3 16 0.26 (1,3550) 1:A:164:LYS:HG2 1:A:165:CYS:H 4 0.25 (1,3543) 1:A:161:HIS:HB2 1:A:162:LYS:H 15 0.25 (1,3434) 1:A:105:LYS:H 1:A:105:LYS:HB2 4 0.25 (1,3399) 1:A:96:GLU:HB2 1:A:114:LYS:HB2 11 0.25 (1,3345) 1:A:81:ASP:H 1:A:99:VAL:HG11 7 0.25 (1,3345) 1:A:81:ASP:H 1:A:99:VAL:HG12 7 0.25 (1,3345) 1:A:81:ASP:H 1:A:99:VAL:HG13 7 0.25 (1,3319) 1:A:72:ILE:HG12 1:A:77:LYS:HE2 19 0.25	(1,2841)	1:A:94:ALA:HB2	1:A:121:PHE:HE1	4	0.26
(1,1549) 1:A:12:GLU:HA 1:A:12:GLU:HG3 16 0.26 (1,3550) 1:A:164:LYS:HG2 1:A:165:CYS:H 4 0.25 (1,3543) 1:A:161:HIS:HB2 1:A:162:LYS:H 15 0.25 (1,3434) 1:A:105:LYS:H 1:A:105:LYS:HB2 4 0.25 (1,3399) 1:A:96:GLU:HB2 1:A:114:LYS:HB2 11 0.25 (1,3345) 1:A:81:ASP:H 1:A:99:VAL:HG11 7 0.25 (1,3345) 1:A:81:ASP:H 1:A:99:VAL:HG12 7 0.25 (1,3345) 1:A:81:ASP:H 1:A:99:VAL:HG13 7 0.25 (1,3319) 1:A:72:ILE:HG12 1:A:77:LYS:HE2 19 0.25	(1,2841)	1:A:94:ALA:HB3	1:A:121:PHE:HE1	4	0.26
(1,1549) 1:A:12:GLU:HA 1:A:12:GLU:HG3 16 0.26 (1,3550) 1:A:164:LYS:HG2 1:A:165:CYS:H 4 0.25 (1,3543) 1:A:161:HIS:HB2 1:A:162:LYS:H 15 0.25 (1,3434) 1:A:105:LYS:H 1:A:105:LYS:HB2 4 0.25 (1,3399) 1:A:96:GLU:HB2 1:A:114:LYS:HB2 11 0.25 (1,3345) 1:A:81:ASP:H 1:A:99:VAL:HG11 7 0.25 (1,3345) 1:A:81:ASP:H 1:A:99:VAL:HG12 7 0.25 (1,3345) 1:A:81:ASP:H 1:A:99:VAL:HG13 7 0.25 (1,3319) 1:A:72:ILE:HG12 1:A:77:LYS:HE2 19 0.25	(1,1912)	1:A:124:LEU:HG	1:A:132:PHE:HE1	7	0.26
(1,3543) 1:A:161:HIS:HB2 1:A:162:LYS:H 15 0.25 (1,3434) 1:A:105:LYS:H 1:A:105:LYS:HB2 4 0.25 (1,3399) 1:A:96:GLU:HB2 1:A:114:LYS:HB2 11 0.25 (1,3345) 1:A:81:ASP:H 1:A:99:VAL:HG11 7 0.25 (1,3345) 1:A:81:ASP:H 1:A:99:VAL:HG12 7 0.25 (1,3345) 1:A:81:ASP:H 1:A:99:VAL:HG13 7 0.25 (1,3319) 1:A:72:ILE:HG12 1:A:77:LYS:HE2 19 0.25		1:A:12:GLU:HA	1:A:12:GLU:HG3	16	0.26
(1,3543) 1:A:161:HIS:HB2 1:A:162:LYS:H 15 0.25 (1,3434) 1:A:105:LYS:H 1:A:105:LYS:HB2 4 0.25 (1,3399) 1:A:96:GLU:HB2 1:A:114:LYS:HB2 11 0.25 (1,3345) 1:A:81:ASP:H 1:A:99:VAL:HG11 7 0.25 (1,3345) 1:A:81:ASP:H 1:A:99:VAL:HG12 7 0.25 (1,3345) 1:A:81:ASP:H 1:A:99:VAL:HG13 7 0.25 (1,3319) 1:A:72:ILE:HG12 1:A:77:LYS:HE2 19 0.25		1:A:164:LYS:HG2	1:A:165:CYS:H	4	0.25
(1,3399) 1:A:96:GLU:HB2 1:A:114:LYS:HB2 11 0.25 (1,3345) 1:A:81:ASP:H 1:A:99:VAL:HG11 7 0.25 (1,3345) 1:A:81:ASP:H 1:A:99:VAL:HG12 7 0.25 (1,3345) 1:A:81:ASP:H 1:A:99:VAL:HG13 7 0.25 (1,3319) 1:A:72:ILE:HG12 1:A:77:LYS:HE2 19 0.25	· · /	1:A:161:HIS:HB2	1:A:162:LYS:H	15	0.25
(1,3345) 1:A:81:ASP:H 1:A:99:VAL:HG11 7 0.25 (1,3345) 1:A:81:ASP:H 1:A:99:VAL:HG12 7 0.25 (1,3345) 1:A:81:ASP:H 1:A:99:VAL:HG13 7 0.25 (1,3319) 1:A:72:ILE:HG12 1:A:77:LYS:HE2 19 0.25	(1,3434)	1:A:105:LYS:H	1:A:105:LYS:HB2	4	0.25
(1,3345) 1:A:81:ASP:H 1:A:99:VAL:HG12 7 0.25 (1,3345) 1:A:81:ASP:H 1:A:99:VAL:HG13 7 0.25 (1,3319) 1:A:72:ILE:HG12 1:A:77:LYS:HE2 19 0.25	(1,3399)	1:A:96:GLU:HB2	1:A:114:LYS:HB2	11	0.25
(1,3345) 1:A:81:ASP:H 1:A:99:VAL:HG12 7 0.25 (1,3345) 1:A:81:ASP:H 1:A:99:VAL:HG13 7 0.25 (1,3319) 1:A:72:ILE:HG12 1:A:77:LYS:HE2 19 0.25	(1,3345)	1:A:81:ASP:H	1:A:99:VAL:HG11	7	0.25
(1,3345) 1:A:81:ASP:H 1:A:99:VAL:HG13 7 0.25 (1,3319) 1:A:72:ILE:HG12 1:A:77:LYS:HE2 19 0.25	· · /	1:A:81:ASP:H	1:A:99:VAL:HG12	7	0.25
	(1,3345)	1:A:81:ASP:H	1:A:99:VAL:HG13	7	0.25
	(1,3319)	1:A:72:ILE:HG12	1:A:77:LYS:HE2	19	0.25
(1,3316)	(1,3316)	1:A:71:TYR:HE1	1:A:151:PRO:HG2	15	0.25



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,3190)	1:A:47:LYS:H	1:A:52:ASP:HB2	13	0.25
(1,3150)	1:A:33:LYS:H	1:A:34:GLU:HG2	3	0.25
(1,3119)	1:A:28:TRP:HB2	1:A:29:VAL:H	15	0.25
(1,3078)	1:A:21:GLY:H	1:A:24:ASP:HB2	5	0.25
(1,3016)	1:A:125:TRP:HH2	1:A:133:GLY:HA3	5	0.25
(1,1936)	1:A:71:TYR:HE1	1:A:151:PRO:HG3	9	0.25
(1,1864)	1:A:76:LEU:HG	1:A:78:TYR:HE1	11	0.25
(1,1716)	1:A:142:LEU:HA	1:A:142:LEU:HG	12	0.25
(1,3540)	1:A:160:GLN:HB2	1:A:161:HIS:H	1	0.24
(1,3375)	1:A:88:ILE:H	1:A:88:ILE:HG12	17	0.24
(1,3183)	1:A:44:GLU:H	1:A:44:GLU:HG2	17	0.24
(1,3088)	1:A:22:PRO:HB2	1:A:28:TRP:HZ2	19	0.24
(1,2217)	1:A:153:LEU:HA	1:A:153:LEU:HD11	8	0.24
(1,2217)	1:A:153:LEU:HA	1:A:153:LEU:HD12	8	0.24
(1,2217)	1:A:153:LEU:HA	1:A:153:LEU:HD13	8	0.24
(1,3470)	1:A:122:LYS:H	1:A:122:LYS:HG2	4	0.23
(1,3470)	1:A:122:LYS:H	1:A:122:LYS:HG2	13	0.23
(1,3454)	1:A:114:LYS:H	1:A:114:LYS:HG2	6	0.23
(1,3448)	1:A:110:TYR:HD1	1:A:114:LYS:HD2	16	0.23
(1,3328)	1:A:76:LEU:HD21	1:A:164:LYS:HG2	19	0.23
(1,3328)	1:A:76:LEU:HD22	1:A:164:LYS:HG2	19	0.23
(1,3328)	1:A:76:LEU:HD23	1:A:164:LYS:HG2	19	0.23
(1,3119)	1:A:28:TRP:HB2	1:A:29:VAL:H	7	0.23
(1,3079)	1:A:21:GLY:HA2	1:A:23:ARG:HB2	11	0.23
(1,2683)	1:A:80:PHE:HE1	1:A:146:LEU:HD21	7	0.23
(1,2683)	1:A:80:PHE:HE1	1:A:146:LEU:HD22	7	0.23
(1,2683)	1:A:80:PHE:HE1	1:A:146:LEU:HD23	7	0.23
(1,1711)	1:A:131:LYS:H	1:A:131:LYS:HG2	4	0.23
(1,697)	1:A:133:GLY:HA2	1:A:136:HIS:H	6	0.22
(1,3497)	1:A:135:ALA:HA	1:A:138:MET:HB2	10	0.22
(1,3476)	1:A:122:LYS:HB3	1:A:123:PRO:HD2	20	0.22
(1,3470)	1:A:122:LYS:H	1:A:122:LYS:HG2	18	0.22
(1,3304)	1:A:69:CYS:HB2	1:A:70:TRP:H	6	0.22
(1,3119)	1:A:28:TRP:HB2	1:A:29:VAL:H	3	0.22
(1,3101)	1:A:23:ARG:HA	1:A:23:ARG:HG2	6	0.22
(1,3088)	1:A:22:PRO:HB2	1:A:28:TRP:HZ2	16	0.22
(1,3016)	1:A:125:TRP:HH2	1:A:133:GLY:HA3	19	0.22
(1,2683)	1:A:80:PHE:HE1	1:A:146:LEU:HD21	8	0.22
(1,2683)	1:A:80:PHE:HE1	1:A:146:LEU:HD22	8	0.22
(1,2683)	1:A:80:PHE:HE1	1:A:146:LEU:HD23	8	0.22
(1,1084)	1:A:53:TRP:HE1	1:A:71:TYR:HE1	18	0.22
(1,1076)	1:A:42:TYR:HE1	1:A:139:ALA:H	9	0.22



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1041)	1:A:76:LEU:H	1:A:78:TYR:HE1	10	0.22
(1,3470)	1:A:122:LYS:H	1:A:122:LYS:HG2	1	0.21
(1,3399)	1:A:96:GLU:HB2	1:A:114:LYS:HB2	10	0.21
(1,3200)	1:A:52:ASP:H	1:A:52:ASP:HB2	6	0.21
(1,3190)	1:A:47:LYS:H	1:A:52:ASP:HB2	6	0.21
(1,3136)	1:A:32:LEU:HA	1:A:32:LEU:HD11	16	0.21
(1,3136)	1:A:32:LEU:HA	1:A:32:LEU:HD12	16	0.21
(1,3136)	1:A:32:LEU:HA	1:A:32:LEU:HD13	16	0.21
(1,3131)	1:A:30:GLN:HE21	1:A:34:GLU:HG2	2	0.21
(1,3131)	1:A:30:GLN:HE21	1:A:34:GLU:HG2	18	0.21
(1,3119)	1:A:28:TRP:HB2	1:A:29:VAL:H	17	0.21
(1,3053)	1:A:15:VAL:HG11	1:A:131:LYS:HD2	19	0.21
(1,3053)	1:A:15:VAL:HG12	1:A:131:LYS:HD2	19	0.21
(1,3053)	1:A:15:VAL:HG13	1:A:131:LYS:HD2	19	0.21
(1,2977)	1:A:110:TYR:HE1	1:A:115:ILE:HG21	7	0.21
(1,2977)	1:A:110:TYR:HE1	1:A:115:ILE:HG22	7	0.21
(1,2977)	1:A:110:TYR:HE1	1:A:115:ILE:HG23	7	0.21
(1,2022)	1:A:32:LEU:HB3	1:A:36:TYR:HE1	7	0.21
(1,1936)	1:A:71:TYR:HE1	1:A:151:PRO:HG3	6	0.21
(1,1041)	1:A:76:LEU:H	1:A:78:TYR:HE1	5	0.21
(1,1022)	1:A:65:TRP:HE1	1:A:84:PHE:HE1	6	0.21
(1,640)	1:A:59:ASN:H	1:A:62:GLY:HA3	3	0.2
(1,3546)	1:A:164:LYS:H	1:A:164:LYS:HB2	1	0.2
(1,3337)	1:A:78:TYR:HE1	1:A:159:ILE:HG12	16	0.2
(1,3308)	1:A:70:TRP:HB2	1:A:71:TYR:H	17	0.2
(1,3190)	1:A:47:LYS:H	1:A:52:ASP:HB2	8	0.2
(1,3184)	1:A:44:GLU:HA	1:A:44:GLU:HG2	7	0.2
(1,3180)	1:A:41:ARG:HD2	1:A:45:ASN:HD22	13	0.2
(1,3119)	1:A:28:TRP:HB2	1:A:29:VAL:H	4	0.2
(1,3078)	1:A:21:GLY:H	1:A:24:ASP:HB2	1	0.2
(1,2121)	1:A:27:LEU:HA	1:A:27:LEU:HD11	1	0.2
(1,2121)	1:A:27:LEU:HA	1:A:27:LEU:HD12	1	0.2
(1,2121)	1:A:27:LEU:HA	1:A:27:LEU:HD13	1	0.2
(1,1670)	1:A:96:GLU:HA	1:A:96:GLU:HG3	19	0.2
(1,890)	1:A:105:LYS:H	1:A:105:LYS:HG2	9	0.19
(1,697)	1:A:133:GLY:HA2	1:A:136:HIS:H	10	0.19
(1,640)	1:A:59:ASN:H	1:A:62:GLY:HA3	10	0.19
(1,3549)	1:A:164:LYS:HB2	1:A:165:CYS:H	8	0.19
(1,3545)	1:A:163:GLU:HB2	1:A:164:LYS:H	9	0.19
(1,3543)	1:A:161:HIS:HB2	1:A:162:LYS:H	3	0.19
(1,3497)	1:A:135:ALA:HA	1:A:138:MET:HB2	13	0.19
(1,3485)	1:A:127:ARG:H	1:A:127:ARG:HG2	15	0.19



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,3470)	1:A:122:LYS:H	1:A:122:LYS:HG2	2	0.19
(1,3449)	1:A:110:TYR:HE1	1:A:114:LYS:HB2	13	0.19
(1,3308)	1:A:70:TRP:HB2	1:A:71:TYR:H	14	0.19
(1,3292)	1:A:68:LYS:HA	1:A:68:LYS:HD2	1	0.19
(1,3267)	1:A:60:LYS:HB2	1:A:61:GLU:H	4	0.19
(1,3201)	1:A:53:TRP:HB2	1:A:70:TRP:H	13	0.19
(1,3184)	1:A:44:GLU:HA	1:A:44:GLU:HG2	19	0.19
(1,3119)	1:A:28:TRP:HB2	1:A:29:VAL:H	5	0.19
(1,2091)	1:A:110:TYR:HE1	1:A:115:ILE:H	14	0.19
(1,640)	1:A:59:ASN:H	1:A:62:GLY:HA3	9	0.18
(1,387)	1:A:103:ASP:HA	1:A:104:GLY:H	4	0.18
(1,387)	1:A:103:ASP:HA	1:A:104:GLY:H	5	0.18
(1,387)	1:A:103:ASP:HA	1:A:104:GLY:H	11	0.18
(1,387)	1:A:103:ASP:HA	1:A:104:GLY:H	17	0.18
(1,3546)	1:A:164:LYS:H	1:A:164:LYS:HB2	9	0.18
(1,3540)	1:A:160:GLN:HB2	1:A:161:HIS:H	17	0.18
(1,3475)	1:A:122:LYS:HB2	1:A:123:PRO:HD2	4	0.18
(1,3399)	1:A:96:GLU:HB2	1:A:114:LYS:HB2	12	0.18
(1,3316)	1:A:71:TYR:HE1	1:A:151:PRO:HG2	13	0.18
(1,3292)	1:A:68:LYS:HA	1:A:68:LYS:HD2	3	0.18
(1,3292)	1:A:68:LYS:HA	1:A:68:LYS:HD2	18	0.18
(1,3267)	1:A:60:LYS:HB2	1:A:61:GLU:H	7	0.18
(1,3136)	1:A:32:LEU:HA	1:A:32:LEU:HD11	4	0.18
(1,3136)	1:A:32:LEU:HA	1:A:32:LEU:HD12	4	0.18
(1,3136)	1:A:32:LEU:HA	1:A:32:LEU:HD13	4	0.18
(1,3119)	1:A:28:TRP:HB2	1:A:29:VAL:H	8	0.18
(1,3109)	1:A:24:ASP:HB2	1:A:28:TRP:H	20	0.18
(1,2089)	1:A:73:HIS:H	1:A:78:TYR:HE1	8	0.18
(1,2073)	1:A:32:LEU:HB2	1:A:36:TYR:HD1	2	0.18
(1,2021)	1:A:32:LEU:HB2	1:A:36:TYR:HE1	18	0.18
(1,195)	1:A:44:GLU:HB2	1:A:45:ASN:H	8	0.18
(1,1936)	1:A:71:TYR:HE1	1:A:151:PRO:HG3	19	0.18
(1,1859)	1:A:73:HIS:HB3	1:A:78:TYR:HE1	8	0.18
(1,1084)	1:A:53:TRP:HE1	1:A:71:TYR:HE1	10	0.18
(1,1084)	1:A:53:TRP:HE1	1:A:71:TYR:HE1	14	0.18
(1,640)	1:A:59:ASN:H	1:A:62:GLY:HA3	6	0.17
(1,387)	1:A:103:ASP:HA	1:A:104:GLY:H	19	0.17
(1,3487)	1:A:127:ARG:HB2	1:A:128:ASN:H	14	0.17
(1,3434)	1:A:105:LYS:H	1:A:105:LYS:HB2	13	0.17
(1,3398)	1:A:96:GLU:H	1:A:96:GLU:HG2	10	0.17
(1,3398)	1:A:96:GLU:H	1:A:96:GLU:HG2	16	0.17
(1,3367)	1:A:87:PRO:HG2	1:A:90:TYR:H	9	0.17



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,3304)	1:A:69:CYS:HB2	1:A:70:TRP:H	7	0.17
(1,3304)	1:A:69:CYS:HB2	1:A:70:TRP:H	13	0.17
(1,3214)	1:A:56:LEU:HA	1:A:67:GLY:HA2	13	0.17
(1,3180)	1:A:41:ARG:HD2	1:A:45:ASN:HD22	6	0.17
(1,3177)	1:A:41:ARG:HD2	1:A:44:GLU:H	20	0.17
(1,3154)	1:A:33:LYS:HG2	1:A:36:TYR:HD1	20	0.17
(1,3150)	1:A:33:LYS:H	1:A:34:GLU:HG2	1	0.17
(1,3131)	1:A:30:GLN:HE21	1:A:34:GLU:HG2	14	0.17
(1,3119)	1:A:28:TRP:HB2	1:A:29:VAL:H	19	0.17
(1,3079)	1:A:21:GLY:HA2	1:A:23:ARG:HB2	5	0.17
(1,3073)	1:A:20:ALA:H	1:A:91:PRO:HG2	11	0.17
(1,2841)	1:A:94:ALA:HB1	1:A:121:PHE:HE1	7	0.17
(1,2841)	1:A:94:ALA:HB2	1:A:121:PHE:HE1	7	0.17
(1,2841)	1:A:94:ALA:HB3	1:A:121:PHE:HE1	7	0.17
(1,224)	1:A:51:ASN:H	1:A:51:ASN:HB2	10	0.17
(1,195)	1:A:44:GLU:HB2	1:A:45:ASN:H	1	0.17
(1,195)	1:A:44:GLU:HB2	1:A:45:ASN:H	17	0.17
(1,1925)	1:A:42:TYR:HE1	1:A:135:ALA:HA	9	0.17
(1,1713)	1:A:131:LYS:H	1:A:131:LYS:HD2	4	0.17
(1,1469)	1:A:58:SER:HB2	1:A:62:GLY:HA3	13	0.17
(1,1041)	1:A:76:LEU:H	1:A:78:TYR:HE1	15	0.17
(1,1000)	1:A:53:TRP:H	1:A:53:TRP:HD1	1	0.17
(1,1)	1:A:3:ASP:HA	1:A:4:GLU:H	9	0.17
(1,648)	1:A:62:GLY:HA3	1:A:64:ARG:H	9	0.16
(1,3524)	1:A:156:LYS:H	1:A:156:LYS:HG2	14	0.16
(1,3323)	1:A:72:ILE:HD11	1:A:77:LYS:HE2	17	0.16
(1,3323)	1:A:72:ILE:HD12	1:A:77:LYS:HE2	17	0.16
(1,3323)	1:A:72:ILE:HD13	1:A:77:LYS:HE2	17	0.16
(1,3279)	1:A:64:ARG:HB2	1:A:64:ARG:HD2	12	0.16
(1,3188)	1:A:46:ASN:HA	1:A:51:ASN:HB2	1	0.16
(1,3180)	1:A:41:ARG:HD2	1:A:45:ASN:HD22	11	0.16
(1,3166)	1:A:37:GLN:HG2	1:A:38:SER:H	15	0.16
(1,3131)	1:A:30:GLN:HE21	1:A:34:GLU:HG2	15	0.16
(1,3119)	1:A:28:TRP:HB2	1:A:29:VAL:H	1	0.16
(1,3119)	1:A:28:TRP:HB2	1:A:29:VAL:H	18	0.16
(1,3060)	1:A:19:ASN:HA	1:A:91:PRO:HB2	5	0.16
(1,3016)	1:A:125:TRP:HH2	1:A:133:GLY:HA3	6	0.16
(1,3016)	1:A:125:TRP:HH2	1:A:133:GLY:HA3	12	0.16
(1,2841)	1:A:94:ALA:HB1	1:A:121:PHE:HE1	3	0.16
(1,2841)	1:A:94:ALA:HB2	1:A:121:PHE:HE1	3	0.16
(1,2841)	1:A:94:ALA:HB3	1:A:121:PHE:HE1	3	0.16
(1,2727)	1:A:71:TYR:HE1	1:A:154:ILE:HD11	13	0.16



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,2727)	1:A:71:TYR:HE1	1:A:154:ILE:HD12	13	0.16
(1,2727)	1:A:71:TYR:HE1	1:A:154:ILE:HD13	13	0.16
(1,1828)	1:A:54:PHE:HE1	1:A:56:LEU:HG	4	0.16
(1,1669)	1:A:96:GLU:HA	1:A:96:GLU:HG2	15	0.16
(1,891)	1:A:105:LYS:H	1:A:105:LYS:HG3	10	0.15
(1,663)	1:A:83:GLU:H	1:A:98:ALA:H	11	0.15
(1,372)	1:A:96:GLU:HA	1:A:97:ILE:H	2	0.15
(1,3540)	1:A:160:GLN:HB2	1:A:161:HIS:H	5	0.15
(1,3540)	1:A:160:GLN:HB2	1:A:161:HIS:H	19	0.15
(1,3524)	1:A:156:LYS:H	1:A:156:LYS:HG2	1	0.15
(1,3485)	1:A:127:ARG:H	1:A:127:ARG:HG2	16	0.15
(1,3454)	1:A:114:LYS:H	1:A:114:LYS:HG2	1	0.15
(1,3304)	1:A:69:CYS:HB2	1:A:70:TRP:H	17	0.15
(1,3190)	1:A:47:LYS:H	1:A:52:ASP:HB2	9	0.15
(1,3188)	1:A:46:ASN:HA	1:A:51:ASN:HB2	6	0.15
(1,3180)	1:A:41:ARG:HD2	1:A:45:ASN:HD22	1	0.15
(1,3168)	1:A:40:ILE:H	1:A:40:ILE:HG12	16	0.15
(1,3149)	1:A:33:LYS:H	1:A:33:LYS:HG2	8	0.15
(1,3123)	1:A:28:TRP:HE1	1:A:32:LEU:HD11	3	0.15
(1,3123)	1:A:28:TRP:HE1	1:A:32:LEU:HD12	3	0.15
(1,3123)	1:A:28:TRP:HE1	1:A:32:LEU:HD13	3	0.15
(1,3119)	1:A:28:TRP:HB2	1:A:29:VAL:H	16	0.15
(1,3089)	1:A:22:PRO:HB2	1:A:63:THR:HG21	5	0.15
(1,3089)	1:A:22:PRO:HB2	1:A:63:THR:HG22	5	0.15
(1,3089)	1:A:22:PRO:HB2	1:A:63:THR:HG23	5	0.15
(1,2977)	1:A:110:TYR:HE1	1:A:115:ILE:HG21	6	0.15
(1,2977)	1:A:110:TYR:HE1	1:A:115:ILE:HG22	6	0.15
(1,2977)	1:A:110:TYR:HE1	1:A:115:ILE:HG23	6	0.15
(1,2022)	1:A:32:LEU:HB3	1:A:36:TYR:HE1	18	0.15
(1,195)	1:A:44:GLU:HB2	1:A:45:ASN:H	9	0.15
(1,1090)	1:A:71:TYR:H	1:A:80:PHE:HE1	9	0.15
(1,1084)	1:A:53:TRP:HE1	1:A:71:TYR:HE1	16	0.15
(1,1007)	1:A:59:ASN:H	1:A:66:PHE:HE1	15	0.15
(1,1)	1:A:3:ASP:HA	1:A:4:GLU:H	15	0.15
(1,3549)	1:A:164:LYS:HB2	1:A:165:CYS:H	9	0.14
(1,3524)	1:A:156:LYS:H	1:A:156:LYS:HG2	3	0.14
(1,3485)	1:A:127:ARG:H	1:A:127:ARG:HG2	13	0.14
(1,3476)	1:A:122:LYS:HB3	1:A:123:PRO:HD2	6	0.14
(1,3474)	1:A:122:LYS:HA	1:A:122:LYS:HD2	19	0.14
(1,3451)	1:A:111:ARG:HA	1:A:111:ARG:HG2	14	0.14
(1,3333)	1:A:77:LYS:HB2	1:A:77:LYS:HE2	5	0.14
(1,3292)	1:A:68:LYS:HA	1:A:68:LYS:HD2	7	0.14



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,3280)	1:A:64:ARG:HB3	1:A:64:ARG:HD2	11	0.14
(1,3253)	1:A:58:SER:HB2	1:A:62:GLY:H	20	0.14
(1,3252)	1:A:58:SER:HB2	1:A:59:ASN:H	2	0.14
(1,3249)	1:A:57:GLU:HG2	1:A:58:SER:H	11	0.14
(1,3249)	1:A:57:GLU:HG2	1:A:58:SER:H	14	0.14
(1,3119)	1:A:28:TRP:HB2	1:A:29:VAL:H	12	0.14
(1,3074)	1:A:20:ALA:H	1:A:91:PRO:HD2	5	0.14
(1,3065)	1:A:19:ASN:HB3	1:A:91:PRO:HB2	13	0.14
(1,2995)	1:A:68:LYS:HD2	1:A:70:TRP:HZ2	8	0.14
(1,2977)	1:A:110:TYR:HE1	1:A:115:ILE:HG21	1	0.14
(1,2977)	1:A:110:TYR:HE1	1:A:115:ILE:HG22	1	0.14
(1,2977)	1:A:110:TYR:HE1	1:A:115:ILE:HG23	1	0.14
(1,2727)	1:A:71:TYR:HE1	1:A:154:ILE:HD11	4	0.14
(1,2727)	1:A:71:TYR:HE1	1:A:154:ILE:HD12	4	0.14
(1,2727)	1:A:71:TYR:HE1	1:A:154:ILE:HD13	4	0.14
(1,195)	1:A:44:GLU:HB2	1:A:45:ASN:H	20	0.14
(1,1629)	1:A:60:LYS:HA	1:A:60:LYS:HE2	19	0.14
(1,1629)	1:A:60:LYS:HA	1:A:60:LYS:HE3	19	0.14
(1,1582)	1:A:30:GLN:HB2	1:A:30:GLN:HE21	1	0.14
(1,1582)	1:A:30:GLN:HB3	1:A:30:GLN:HE21	1	0.14
(1,891)	1:A:105:LYS:H	1:A:105:LYS:HG3	2	0.13
(1,587)	1:A:167:GLN:H	1:A:167:GLN:HB3	1	0.13
(1,3550)	1:A:164:LYS:HG2	1:A:165:CYS:H	12	0.13
(1,3524)	1:A:156:LYS:H	1:A:156:LYS:HG2	9	0.13
(1,3524)	1:A:156:LYS:H	1:A:156:LYS:HG2	13	0.13
(1,3497)	1:A:135:ALA:HA	1:A:138:MET:HB2	2	0.13
(1,343)	1:A:83:GLU:HB2	1:A:84:PHE:H	3	0.13
(1,3282)	1:A:64:ARG:HG2	1:A:66:PHE:HE1	8	0.13
(1,3175)	1:A:41:ARG:HG2	1:A:45:ASN:HD21	12	0.13
(1,3168)	1:A:40:ILE:H	1:A:40:ILE:HG12	5	0.13
(1,3119)	1:A:28:TRP:HB2	1:A:29:VAL:H	10	0.13
(1,260)	1:A:60:LYS:HB3	1:A:61:GLU:H	5	0.13
(1,1582)	1:A:30:GLN:HB2	1:A:30:GLN:HE21	8	0.13
(1,1582)	1:A:30:GLN:HB3	1:A:30:GLN:HE21	8	0.13
(1,1552)	1:A:12:GLU:H	1:A:12:GLU:HG3	16	0.13
(1,3551)	1:A:167:GLN:H	1:A:167:GLN:HB2	8	0.12
(1,3545)	1:A:163:GLU:HB2	1:A:164:LYS:H	10	0.12
(1,3544)	1:A:163:GLU:H	1:A:163:GLU:HB2	16	0.12
(1,3524)	1:A:156:LYS:H	1:A:156:LYS:HG2	19	0.12
(1,3497)	1:A:135:ALA:HA	1:A:138:MET:HB2	8	0.12
(1,3485)	1:A:127:ARG:H	1:A:127:ARG:HG2	11	0.12
(1,3449)	1:A:110:TYR:HE1	1:A:114:LYS:HB2	16	0.12



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,3367)	1:A:87:PRO:HG2	1:A:90:TYR:H	16	0.12
(1,333)	1:A:81:ASP:H	1:A:81:ASP:HB2	9	0.12
(1,3326)	1:A:76:LEU:HD11	1:A:161:HIS:HB2	15	0.12
(1,3326)	1:A:76:LEU:HD12	1:A:161:HIS:HB2	15	0.12
(1,3326)	1:A:76:LEU:HD13	1:A:161:HIS:HB2	15	0.12
(1,3308)	1:A:70:TRP:HB2	1:A:71:TYR:H	11	0.12
(1,3308)	1:A:70:TRP:HB2	1:A:71:TYR:H	15	0.12
(1,3294)	1:A:68:LYS:HB2	1:A:70:TRP:HZ2	8	0.12
(1,3183)	1:A:44:GLU:H	1:A:44:GLU:HG2	19	0.12
(1,3154)	1:A:33:LYS:HG2	1:A:36:TYR:HD1	4	0.12
(1,3154)	1:A:33:LYS:HG2	1:A:36:TYR:HD1	12	0.12
(1,3119)	1:A:28:TRP:HB2	1:A:29:VAL:H	2	0.12
(1,3119)	1:A:28:TRP:HB2	1:A:29:VAL:H	11	0.12
(1,3119)	1:A:28:TRP:HB2	1:A:29:VAL:H	13	0.12
(1,3119)	1:A:28:TRP:HB2	1:A:29:VAL:H	20	0.12
(1,3096)	1:A:22:PRO:HD2	1:A:86:ILE:HG21	9	0.12
(1,3096)	1:A:22:PRO:HD2	1:A:86:ILE:HG22	9	0.12
(1,3096)	1:A:22:PRO:HD2	1:A:86:ILE:HG23	9	0.12
(1,2091)	1:A:110:TYR:HE1	1:A:115:ILE:H	11	0.12
(1,195)	1:A:44:GLU:HB2	1:A:45:ASN:H	2	0.12
(1,1308)	1:A:6:THR:H	1:A:6:THR:HB	16	0.12
(1,1090)	1:A:71:TYR:H	1:A:80:PHE:HE1	11	0.12
(1,1038)	1:A:54:PHE:HB3	1:A:70:TRP:H	5	0.12
(1,890)	1:A:105:LYS:H	1:A:105:LYS:HG2	3	0.11
(1,652)	1:A:56:LEU:HA	1:A:66:PHE:H	7	0.11
(1,648)	1:A:62:GLY:HA3	1:A:64:ARG:H	7	0.11
(1,3621)	1:A:135:ALA:O	1:A:139:ALA:H	2	0.11
(1,3617)	1:A:120:HIS:O	1:A:124:LEU:H	20	0.11
(1,3550)	1:A:164:LYS:HG2	1:A:165:CYS:H	17	0.11
(1,3548)	1:A:164:LYS:HA	1:A:164:LYS:HG2	1	0.11
(1,3548)	1:A:164:LYS:HA	1:A:164:LYS:HG2	9	0.11
(1,3540)	1:A:160:GLN:HB2	1:A:161:HIS:H	10	0.11
(1,3485)	1:A:127:ARG:H	1:A:127:ARG:HG2	8	0.11
(1,3454)	1:A:114:LYS:H	1:A:114:LYS:HG2	17	0.11
(1,343)	1:A:83:GLU:HB2	1:A:84:PHE:H	6	0.11
(1,3399)	1:A:96:GLU:HB2	1:A:114:LYS:HB2	14	0.11
(1,3319)	1:A:72:ILE:HG12	1:A:77:LYS:HE2	20	0.11
(1,3308)	1:A:70:TRP:HB2	1:A:71:TYR:H	9	0.11
(1,3304)	1:A:69:CYS:HB2	1:A:70:TRP:H	15	0.11
(1,3279)	1:A:64:ARG:HB2	1:A:64:ARG:HD2	2	0.11
(1,3214)	1:A:56:LEU:HA	1:A:67:GLY:HA2	2	0.11
(1,3168)	1:A:40:ILE:H	1:A:40:ILE:HG12	17	0.11



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,3131)	1:A:30:GLN:HE21	1:A:34:GLU:HG2	7	0.11
(1,3119)	1:A:28:TRP:HB2	1:A:29:VAL:H	6	0.11
(1,3079)	1:A:21:GLY:HA2	1:A:23:ARG:HB2	18	0.11
(1,3073)	1:A:20:ALA:H	1:A:91:PRO:HG2	6	0.11
(1,3065)	1:A:19:ASN:HB3	1:A:91:PRO:HB2	2	0.11
(1,260)	1:A:60:LYS:HB3	1:A:61:GLU:H	13	0.11
(1,190)	1:A:41:ARG:HA	1:A:45:ASN:H	13	0.11
(1,1864)	1:A:76:LEU:HG	1:A:78:TYR:HE1	3	0.11
(1,1823)	1:A:56:LEU:HG	1:A:65:TRP:HE3	12	0.11
(1,1786)	1:A:23:ARG:HB2	1:A:88:ILE:HA	10	0.11
(1,1582)	1:A:30:GLN:HB2	1:A:30:GLN:HE21	3	0.11
(1,1582)	1:A:30:GLN:HB3	1:A:30:GLN:HE21	3	0.11
(1,1470)	1:A:58:SER:HB3	1:A:62:GLY:HA3	12	0.11
(1,1082)	1:A:46:ASN:HD21	1:A:53:TRP:HE1	4	0.11
(1,1000)	1:A:53:TRP:H	1:A:53:TRP:HD1	6	0.11
(1,96)	1:A:27:LEU:HA	1:A:30:GLN:H	7	0.1
(1,640)	1:A:59:ASN:H	1:A:62:GLY:HA3	13	0.1
(1,3631)	1:A:149:GLU:O	1:A:153:LEU:H	1	0.1
(1,3621)	1:A:135:ALA:O	1:A:139:ALA:H	3	0.1
(1,353)	1:A:85:ASP:HB2	1:A:86:ILE:H	3	0.1
(1,3524)	1:A:156:LYS:H	1:A:156:LYS:HG2	7	0.1
(1,3487)	1:A:127:ARG:HB2	1:A:128:ASN:H	2	0.1
(1,3485)	1:A:127:ARG:H	1:A:127:ARG:HG2	5	0.1
(1,3485)	1:A:127:ARG:H	1:A:127:ARG:HG2	6	0.1
(1,3476)	1:A:122:LYS:HB3	1:A:123:PRO:HD2	19	0.1
(1,3474)	1:A:122:LYS:HA	1:A:122:LYS:HD2	3	0.1
(1,3454)	1:A:114:LYS:H	1:A:114:LYS:HG2	7	0.1
(1,3353)	1:A:84:PHE:HB2	1:A:85:ASP:H	6	0.1
(1,3279)	1:A:64:ARG:HB2	1:A:64:ARG:HD2	11	0.1
(1,3249)	1:A:57:GLU:HG2	1:A:58:SER:H	10	0.1
(1,3168)	1:A:40:ILE:H	1:A:40:ILE:HG12	3	0.1
(1,195)	1:A:44:GLU:HB2	1:A:45:ASN:H	6	0.1
(1,195)	1:A:44:GLU:HB2	1:A:45:ASN:H	11	0.1
(1,1912)	1:A:124:LEU:HG	1:A:132:PHE:HE1	14	0.1
(1,1795)	1:A:28:TRP:HD1	1:A:32:LEU:HG	5	0.1
(1,141)	1:A:35:GLU:HB3	1:A:36:TYR:H	9	0.1
(1,1328)	1:A:25:ARG:HB3	1:A:26:GLU:H	4	0.1
(1,1228)	1:A:27:LEU:HD11	1:A:30:GLN:H	1	0.1
(1,1228)	1:A:27:LEU:HD12	1:A:30:GLN:H	1	0.1
(1,1228)	1:A:27:LEU:HD13	1:A:30:GLN:H	1	0.1
(1,1006)	1:A:57:GLU:H	1:A:65:TRP:HB3	20	0.1
(1,947)	1:A:160:GLN:H	1:A:160:GLN:HG2	17	0.09



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,890)	1:A:105:LYS:H	1:A:105:LYS:HG2	2	0.09
(1,652)	1:A:56:LEU:HA	1:A:66:PHE:H	5	0.09
(1,559)	1:A:158:VAL:HB	1:A:159:ILE:H	16	0.09
(1,403)	1:A:113:GLY:H	1:A:114:LYS:H	10	0.09
(1,3617)	1:A:120:HIS:O	1:A:124:LEU:H	9	0.09
(1,3617)	1:A:120:HIS:O	1:A:124:LEU:H	10	0.09
(1,3607)	1:A:53:TRP:O	1:A:70:TRP:H	13	0.09
(1,3545)	1:A:163:GLU:HB2	1:A:164:LYS:H	5	0.09
(1,3485)	1:A:127:ARG:H	1:A:127:ARG:HG2	2	0.09
(1,3485)	1:A:127:ARG:H	1:A:127:ARG:HG2	3	0.09
(1,3485)	1:A:127:ARG:H	1:A:127:ARG:HG2	17	0.09
(1,3485)	1:A:127:ARG:H	1:A:127:ARG:HG2	19	0.09
(1,343)	1:A:83:GLU:HB2	1:A:84:PHE:H	12	0.09
(1,3333)	1:A:77:LYS:HB2	1:A:77:LYS:HE2	9	0.09
(1,3284)	1:A:64:ARG:HD2	1:A:66:PHE:HE1	8	0.09
(1,3280)	1:A:64:ARG:HB3	1:A:64:ARG:HD2	2	0.09
(1,3254)	1:A:58:SER:HB2	1:A:62:GLY:HA3	1	0.09
(1,3252)	1:A:58:SER:HB2	1:A:59:ASN:H	17	0.09
(1,3092)	1:A:22:PRO:HG2	1:A:86:ILE:HB	15	0.09
(1,3092)	1:A:22:PRO:HG2	1:A:86:ILE:HB	20	0.09
(1,3070)	1:A:19:ASN:HD21	1:A:130:PRO:HD2	4	0.09
(1,3041)	1:A:7:ARG:H	1:A:7:ARG:HG2	15	0.09
(1,1985)	1:A:131:LYS:H	1:A:131:LYS:HD3	11	0.09
(1,196)	1:A:44:GLU:HB3	1:A:45:ASN:H	16	0.09
(1,1786)	1:A:23:ARG:HB2	1:A:88:ILE:HA	6	0.09
(1,1582)	1:A:30:GLN:HB2	1:A:30:GLN:HE21	14	0.09
(1,1582)	1:A:30:GLN:HB3	1:A:30:GLN:HE21	14	0.09
(1,1582)	1:A:30:GLN:HB2	1:A:30:GLN:HE21	19	0.09
(1,1582)	1:A:30:GLN:HB3	1:A:30:GLN:HE21	19	0.09
(1,155)	1:A:37:GLN:HB3	1:A:38:SER:H	10	0.09
(1,1382)	1:A:57:GLU:HB2	1:A:58:SER:H	7	0.09
(1,113)	1:A:29:VAL:HA	1:A:33:LYS:H	12	0.09
(1,1042)	1:A:72:ILE:HG13	1:A:78:TYR:H	12	0.09
(1,1035)	1:A:53:TRP:HE3	1:A:70:TRP:H	13	0.09
(1,967)	1:A:20:ALA:H	1:A:91:PRO:HD2	11	0.08
(1,951)	1:A:162:LYS:HG2	1:A:163:GLU:H	4	0.08
(1,951)	1:A:162:LYS:HG3	1:A:163:GLU:H	4	0.08
(1,846)	1:A:61:GLU:H	1:A:61:GLU:HG3	11	0.08
(1,845)	1:A:61:GLU:H	1:A:61:GLU:HG2	7	0.08
(1,763)	1:A:23:ARG:H	1:A:23:ARG:HG2	6	0.08
(1,697)	1:A:133:GLY:HA2	1:A:136:HIS:H	12	0.08
(1,563)	1:A:159:ILE:HB	1:A:160:GLN:H	9	0.08



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,563)	1:A:159:ILE:HB	1:A:160:GLN:H	19	0.08
(1,3621)	1:A:135:ALA:O	1:A:139:ALA:H	13	0.08
(1,3621)	1:A:135:ALA:O	1:A:139:ALA:H	19	0.08
(1,3617)	1:A:120:HIS:O	1:A:124:LEU:H	5	0.08
(1,3617)	1:A:120:HIS:O	1:A:124:LEU:H	8	0.08
(1,3617)	1:A:120:HIS:O	1:A:124:LEU:H	13	0.08
(1,3524)	1:A:156:LYS:H	1:A:156:LYS:HG2	6	0.08
(1,3488)	1:A:127:ARG:HB2	1:A:128:ASN:HD22	4	0.08
(1,3485)	1:A:127:ARG:H	1:A:127:ARG:HG2	4	0.08
(1,3356)	1:A:84:PHE:HB2	1:A:98:ALA:H	6	0.08
(1,3312)	1:A:70:TRP:HD1	1:A:77:LYS:HD2	19	0.08
(1,3308)	1:A:70:TRP:HB2	1:A:71:TYR:H	6	0.08
(1,3308)	1:A:70:TRP:HB2	1:A:71:TYR:H	16	0.08
(1,3290)	1:A:67:GLY:HA2	1:A:82:ILE:HD11	2	0.08
(1,3290)	1:A:67:GLY:HA2	1:A:82:ILE:HD12	2	0.08
(1,3290)	1:A:67:GLY:HA2	1:A:82:ILE:HD13	2	0.08
(1,3215)	1:A:56:LEU:HB2	1:A:57:GLU:H	1	0.08
(1,3199)	1:A:51:ASN:HB2	1:A:51:ASN:HD22	5	0.08
(1,3199)	1:A:51:ASN:HB2	1:A:51:ASN:HD22	8	0.08
(1,3199)	1:A:51:ASN:HB2	1:A:51:ASN:HD22	13	0.08
(1,3168)	1:A:40:ILE:H	1:A:40:ILE:HG12	12	0.08
(1,3168)	1:A:40:ILE:H	1:A:40:ILE:HG12	13	0.08
(1,2725)	1:A:71:TYR:HD1	1:A:154:ILE:HD11	20	0.08
(1,2725)	1:A:71:TYR:HD1	1:A:154:ILE:HD12	20	0.08
(1,2725)	1:A:71:TYR:HD1	1:A:154:ILE:HD13	20	0.08
(1,260)	1:A:60:LYS:HB3	1:A:61:GLU:H	14	0.08
(1,2579)	1:A:117:LEU:HD21	1:A:141:GLY:HA3	16	0.08
(1,2579)	1:A:117:LEU:HD22	1:A:141:GLY:HA3	16	0.08
(1,2579)	1:A:117:LEU:HD23	1:A:141:GLY:HA3	16	0.08
(1,2058)	1:A:64:ARG:HD3	1:A:66:PHE:HE1	9	0.08
(1,1983)	1:A:131:LYS:HA	1:A:131:LYS:HD3	13	0.08
(1,1948)	1:A:46:ASN:HB2	1:A:52:ASP:HA	3	0.08
(1,1948)	1:A:46:ASN:HB3	1:A:52:ASP:HA	3	0.08
(1,1867)	1:A:70:TRP:HD1	1:A:79:GLU:HG2	14	0.08
(1,1867)	1:A:70:TRP:HD1	1:A:79:GLU:HG3	14	0.08
(1,1808)	1:A:41:ARG:HD3	1:A:45:ASN:HD22	1	0.08
(1,1779)	1:A:22:PRO:HA	1:A:28:TRP:HD1	2	0.08
(1,1711)	1:A:131:LYS:H	1:A:131:LYS:HG2	11	0.08
(1,1582)	1:A:30:GLN:HB2	1:A:30:GLN:HE21	7	0.08
(1,1582)	1:A:30:GLN:HB3	1:A:30:GLN:HE21	7	0.08
(1,1499)	1:A:103:ASP:HA	1:A:105:LYS:H	5	0.08
(1,1498)	1:A:98:ALA:HA	1:A:114:LYS:HA	17	0.08



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1438)	1:A:162:LYS:HA	1:A:163:GLU:H	6	0.08
(1,1360)	1:A:41:ARG:HA	1:A:44:GLU:H	8	0.08
(1,1076)	1:A:42:TYR:HE1	1:A:139:ALA:H	4	0.08
(1,1075)	1:A:53:TRP:HZ2	1:A:139:ALA:H	3	0.08
(1,1069)	1:A:127:ARG:HB2	1:A:128:ASN:HD21	6	0.08
(1,1)	1:A:3:ASP:HA	1:A:4:GLU:H	10	0.08
(1,978)	1:A:30:GLN:HE22	1:A:33:LYS:HD2	6	0.07
(1,978)	1:A:30:GLN:HE22	1:A:33:LYS:HD3	6	0.07
(1,967)	1:A:20:ALA:H	1:A:91:PRO:HD2	16	0.07
(1,891)	1:A:105:LYS:H	1:A:105:LYS:HG3	8	0.07
(1,86)	1:A:27:LEU:HB3	1:A:28:TRP:H	17	0.07
(1,638)	1:A:58:SER:H	1:A:62:GLY:HA3	1	0.07
(1,610)	1:A:23:ARG:H	1:A:88:ILE:HA	5	0.07
(1,609)	1:A:21:GLY:H	1:A:24:ASP:HB3	7	0.07
(1,580)	1:A:165:CYS:H	1:A:166:ASN:H	11	0.07
(1,578)	1:A:164:LYS:HB2	1:A:165:CYS:H	11	0.07
(1,3621)	1:A:135:ALA:O	1:A:139:ALA:H	8	0.07
(1,3621)	1:A:135:ALA:O	1:A:139:ALA:H	10	0.07
(1,3621)	1:A:135:ALA:O	1:A:139:ALA:H	11	0.07
(1,3621)	1:A:135:ALA:O	1:A:139:ALA:H	16	0.07
(1,3617)	1:A:120:HIS:O	1:A:124:LEU:H	2	0.07
(1,3617)	1:A:120:HIS:O	1:A:124:LEU:H	14	0.07
(1,3609)	1:A:73:HIS:H	1:A:76:LEU:O	13	0.07
(1,3577)	1:A:31:ARG:O	1:A:35:GLU:H	3	0.07
(1,3559)	1:A:4:GLU:O	1:A:8:ARG:H	16	0.07
(1,3545)	1:A:163:GLU:HB2	1:A:164:LYS:H	8	0.07
(1,3541)	1:A:160:GLN:HG2	1:A:161:HIS:H	8	0.07
(1,3540)	1:A:160:GLN:HB2	1:A:161:HIS:H	4	0.07
(1,3485)	1:A:127:ARG:H	1:A:127:ARG:HG2	20	0.07
(1,3476)	1:A:122:LYS:HB3	1:A:123:PRO:HD2	3	0.07
(1,3474)	1:A:122:LYS:HA	1:A:122:LYS:HD2	2	0.07
(1,344)	1:A:83:GLU:HB3	1:A:84:PHE:H	14	0.07
(1,3367)	1:A:87:PRO:HG2	1:A:90:TYR:H	14	0.07
(1,333)	1:A:81:ASP:H	1:A:81:ASP:HB2	5	0.07
(1,3308)	1:A:70:TRP:HB2	1:A:71:TYR:H	18	0.07
(1,3215)	1:A:56:LEU:HB2	1:A:57:GLU:H	10	0.07
(1,3199)	1:A:51:ASN:HB2	1:A:51:ASN:HD22	2	0.07
(1,3194)	1:A:47:LYS:HG3	1:A:52:ASP:HB3	3	0.07
(1,3168)	1:A:40:ILE:H	1:A:40:ILE:HG12	4	0.07
(1,3160)	1:A:35:GLU:HB2	1:A:36:TYR:H	20	0.07
(1,3149)	1:A:33:LYS:H	1:A:33:LYS:HG2	16	0.07
(1,3119)	1:A:28:TRP:HB2	1:A:29:VAL:H	14	0.07



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,3106)	1:A:24:ASP:HB2	1:A:27:LEU:H	13	0.07
(1,2996)	1:A:68:LYS:HD3	1:A:70:TRP:HZ2	2	0.07
(1,2877)	1:A:15:VAL:HG11	1:A:131:LYS:HD3	7	0.07
(1,2877)	1:A:15:VAL:HG12	1:A:131:LYS:HD3	7	0.07
(1,2877)	1:A:15:VAL:HG13	1:A:131:LYS:HD3	7	0.07
(1,2763)	1:A:76:LEU:HD21	1:A:163:GLU:HA	7	0.07
(1,2763)	1:A:76:LEU:HD22	1:A:163:GLU:HA	7	0.07
(1,2763)	1:A:76:LEU:HD23	1:A:163:GLU:HA	7	0.07
(1,260)	1:A:60:LYS:HB3	1:A:61:GLU:H	1	0.07
(1,2471)	1:A:28:TRP:HH2	1:A:86:ILE:HG21	2	0.07
(1,2471)	1:A:28:TRP:HH2	1:A:86:ILE:HG22	2	0.07
(1,2471)	1:A:28:TRP:HH2	1:A:86:ILE:HG23	2	0.07
(1,2426)	1:A:72:ILE:HG21	1:A:75:LEU:H	1	0.07
(1,2426)	1:A:72:ILE:HG22	1:A:75:LEU:H	1	0.07
(1,2426)	1:A:72:ILE:HG23	1:A:75:LEU:H	1	0.07
(1,2141)	1:A:56:LEU:HD11	1:A:57:GLU:H	14	0.07
(1,2141)	1:A:56:LEU:HD12	1:A:57:GLU:H	14	0.07
(1,2141)	1:A:56:LEU:HD13	1:A:57:GLU:H	14	0.07
(1,2050)	1:A:64:ARG:HD2	1:A:66:PHE:HE1	7	0.07
(1,196)	1:A:44:GLU:HB3	1:A:45:ASN:H	18	0.07
(1,1949)	1:A:125:TRP:HH2	1:A:137:LEU:HA	8	0.07
(1,1939)	1:A:10:VAL:HA	1:A:13:ILE:HG13	15	0.07
(1,1935)	1:A:150:ILE:HB	1:A:151:PRO:HD2	8	0.07
(1,1935)	1:A:150:ILE:HB	1:A:151:PRO:HD3	8	0.07
(1,1866)	1:A:70:TRP:HE3	1:A:79:GLU:HG2	9	0.07
(1,1866)	1:A:70:TRP:HE3	1:A:79:GLU:HG3	9	0.07
(1,1866)	1:A:70:TRP:HE3	1:A:79:GLU:HG2	10	0.07
(1,1866)	1:A:70:TRP:HE3	1:A:79:GLU:HG3	10	0.07
(1,1823)	1:A:56:LEU:HG	1:A:65:TRP:HE3	2	0.07
(1,1789)	1:A:24:ASP:HB2	1:A:27:LEU:HB3	1	0.07
(1,1666)	1:A:88:ILE:H	1:A:88:ILE:HG12	13	0.07
(1,1582)	1:A:30:GLN:HB2	1:A:30:GLN:HE21	18	0.07
(1,1582)	1:A:30:GLN:HB3	1:A:30:GLN:HE21	18	0.07
(1,1550)	1:A:12:GLU:H	1:A:12:GLU:HG2	19	0.07
(1,155)	1:A:37:GLN:HB3	1:A:38:SER:H	8	0.07
(1,155)	1:A:37:GLN:HB3	1:A:38:SER:H	12	0.07
(1,1438)	1:A:162:LYS:HA	1:A:163:GLU:H	12	0.07
(1,141)	1:A:35:GLU:HB3	1:A:36:TYR:H	14	0.07
(1,1400)	1:A:111:ARG:HA	1:A:112:GLY:H	18	0.07
(1,137)	1:A:32:LEU:HA	1:A:36:TYR:H	15	0.07
(1,1354)	1:A:38:SER:HA	1:A:41:ARG:HB3	11	0.07
(1,1343)	1:A:34:GLU:HA	1:A:37:GLN:HB3	9	0.07



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1108)	1:A:46:ASN:HD22	1:A:53:TRP:HD1	11	0.07
(1,1090)	1:A:71:TYR:H	1:A:80:PHE:HE1	2	0.07
(1,1076)	1:A:42:TYR:HE1	1:A:139:ALA:H	15	0.07
(1,1066)	1:A:124:LEU:HA	1:A:128:ASN:HD21	18	0.07
(1,1042)	1:A:72:ILE:HG13	1:A:78:TYR:H	3	0.07
(1,1042)	1:A:72:ILE:HG13	1:A:78:TYR:H	18	0.07
(1,999)	1:A:44:GLU:HG2	1:A:48:ASN:HD21	16	0.06
(1,998)	1:A:44:GLU:HG3	1:A:48:ASN:HD21	4	0.06
(1,829)	1:A:51:ASN:HB3	1:A:51:ASN:HD22	2	0.06
(1,828)	1:A:51:ASN:HB2	1:A:51:ASN:HD22	6	0.06
(1,828)	1:A:51:ASN:HB2	1:A:51:ASN:HD22	20	0.06
(1,815)	1:A:45:ASN:HB2	1:A:45:ASN:HD22	18	0.06
(1,815)	1:A:45:ASN:HB2	1:A:45:ASN:HD22	19	0.06
(1,780)	1:A:32:LEU:H	1:A:32:LEU:HG	5	0.06
(1,771)	1:A:25:ARG:HG3	1:A:26:GLU:H	19	0.06
(1,767)	1:A:25:ARG:H	1:A:25:ARG:HG2	1	0.06
(1,764)	1:A:23:ARG:H	1:A:23:ARG:HG3	17	0.06
(1,759)	1:A:19:ASN:HB3	1:A:19:ASN:HD22	20	0.06
(1,712)	1:A:153:LEU:HA	1:A:156:LYS:H	1	0.06
(1,697)	1:A:133:GLY:HA2	1:A:136:HIS:H	20	0.06
(1,640)	1:A:59:ASN:H	1:A:62:GLY:HA3	5	0.06
(1,640)	1:A:59:ASN:H	1:A:62:GLY:HA3	8	0.06
(1,633)	1:A:47:LYS:HA	1:A:51:ASN:H	7	0.06
(1,627)	1:A:46:ASN:HA	1:A:49:ALA:H	10	0.06
(1,613)	1:A:23:ARG:HA	1:A:25:ARG:H	9	0.06
(1,610)	1:A:23:ARG:H	1:A:88:ILE:HA	6	0.06
(1,610)	1:A:23:ARG:H	1:A:88:ILE:HA	11	0.06
(1,609)	1:A:21:GLY:H	1:A:24:ASP:HB3	16	0.06
(1,579)	1:A:164:LYS:HB3	1:A:165:CYS:H	16	0.06
(1,578)	1:A:164:LYS:HB2	1:A:165:CYS:H	1	0.06
(1,563)	1:A:159:ILE:HB	1:A:160:GLN:H	16	0.06
(1,435)	1:A:123:PRO:HA	1:A:125:TRP:H	13	0.06
(1,405)	1:A:114:LYS:H	1:A:114:LYS:HB3	10	0.06
(1,384)	1:A:103:ASP:H	1:A:103:ASP:HB2	4	0.06
(1,3629)	1:A:146:LEU:O	1:A:150:ILE:H	1	0.06
(1,3629)	1:A:146:LEU:O	1:A:150:ILE:H	6	0.06
(1,3625)	1:A:141:GLY:O	1:A:145:TRP:H	16	0.06
(1,3622)	1:A:135:ALA:O	1:A:139:ALA:N	3	0.06
(1,3617)	1:A:120:HIS:O	1:A:124:LEU:H	6	0.06
(1,3617)	1:A:120:HIS:O	1:A:124:LEU:H	15	0.06
(1,3617)	1:A:120:HIS:O	1:A:124:LEU:H	19	0.06
(1,3615)	1:A:83:GLU:O	1:A:98:ALA:H	19	0.06



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,3611)	1:A:69:CYS:O	1:A:80:PHE:H	2	0.06
(1,3607)	1:A:53:TRP:O	1:A:70:TRP:H	16	0.06
(1,3589)	1:A:39:LEU:O	1:A:43:VAL:H	2	0.06
(1,3589)	1:A:39:LEU:O	1:A:43:VAL:H	8	0.06
(1,3568)	1:A:24:ASP:O	1:A:28:TRP:N	17	0.06
(1,3563)	1:A:6:THR:O	1:A:10:VAL:H	8	0.06
(1,3540)	1:A:160:GLN:HB2	1:A:161:HIS:H	8	0.06
(1,3466)	1:A:121:PHE:HB2	1:A:122:LYS:H	10	0.06
(1,3453)	1:A:114:LYS:H	1:A:114:LYS:HB2	3	0.06
(1,3453)	1:A:114:LYS:H	1:A:114:LYS:HB2	13	0.06
(1,344)	1:A:83:GLU:HB3	1:A:84:PHE:H	17	0.06
(1,3340)	1:A:80:PHE:HB2	1:A:99:VAL:HG11	17	0.06
(1,3340)	1:A:80:PHE:HB2	1:A:99:VAL:HG12	17	0.06
(1,3340)	1:A:80:PHE:HB2	1:A:99:VAL:HG13	17	0.06
(1,333)	1:A:81:ASP:H	1:A:81:ASP:HB2	16	0.06
(1,3308)	1:A:70:TRP:HB2	1:A:71:TYR:H	4	0.06
(1,3304)	1:A:69:CYS:HB2	1:A:70:TRP:H	3	0.06
(1,3252)	1:A:58:SER:HB2	1:A:59:ASN:H	8	0.06
(1,3168)	1:A:40:ILE:H	1:A:40:ILE:HG12	19	0.06
(1,3160)	1:A:35:GLU:HB2	1:A:36:TYR:H	17	0.06
(1,3119)	1:A:28:TRP:HB2	1:A:29:VAL:H	9	0.06
(1,3109)	1:A:24:ASP:HB2	1:A:28:TRP:H	2	0.06
(1,3109)	1:A:24:ASP:HB2	1:A:28:TRP:H	19	0.06
(1,3065)	1:A:19:ASN:HB3	1:A:91:PRO:HB2	10	0.06
(1,2923)	1:A:18:THR:HG21	1:A:27:LEU:HD11	8	0.06
(1,2923)	1:A:18:THR:HG21	1:A:27:LEU:HD12	8	0.06
(1,2923)	1:A:18:THR:HG21	1:A:27:LEU:HD13	8	0.06
(1,2923)	1:A:18:THR:HG22	1:A:27:LEU:HD11	8	0.06
(1,2923)	1:A:18:THR:HG22	1:A:27:LEU:HD12	8	0.06
(1,2923)	1:A:18:THR:HG22	1:A:27:LEU:HD13	8	0.06
(1,2923)	1:A:18:THR:HG23	1:A:27:LEU:HD11	8	0.06
(1,2923)	1:A:18:THR:HG23	1:A:27:LEU:HD12	8	0.06
(1,2923)	1:A:18:THR:HG23	1:A:27:LEU:HD13	8	0.06
(1,2763)	1:A:76:LEU:HD21	1:A:163:GLU:HA	11	0.06
(1,2763)	1:A:76:LEU:HD22	1:A:163:GLU:HA	11	0.06
(1,2763)	1:A:76:LEU:HD23	1:A:163:GLU:HA	11	0.06
(1,2712)	1:A:106:THR:HB	1:A:153:LEU:HD11	10	0.06
(1,2712)	1:A:106:THR:HB	1:A:153:LEU:HD12	10	0.06
(1,2712)	1:A:106:THR:HB	1:A:153:LEU:HD13	10	0.06
(1,2600)	1:A:129:VAL:HG11	1:A:130:PRO:HA	16	0.06
(1,2600)	1:A:129:VAL:HG12	1:A:130:PRO:HA	16	0.06
(1,2600)	1:A:129:VAL:HG13	1:A:130:PRO:HA	16	0.06



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,2588)	1:A:124:LEU:HD21	1:A:132:PHE:HE1	20	0.06
(1,2588)	1:A:124:LEU:HD22	1:A:132:PHE:HE1	20	0.06
(1,2588)	1:A:124:LEU:HD23	1:A:132:PHE:HE1	20	0.06
(1,252)	1:A:58:SER:HB2	1:A:59:ASN:H	14	0.06
(1,2495)	1:A:92:THR:HA	1:A:129:VAL:HG11	11	0.06
(1,2495)	1:A:92:THR:HA	1:A:129:VAL:HG12	11	0.06
(1,2495)	1:A:92:THR:HA	1:A:129:VAL:HG13	11	0.06
(1,2442)	1:A:74:ASP:HB3	1:A:154:ILE:HG21	14	0.06
(1,2442)	1:A:74:ASP:HB3	1:A:154:ILE:HG22	14	0.06
(1,2442)	1:A:74:ASP:HB3	1:A:154:ILE:HG23	14	0.06
(1,2409)	1:A:32:LEU:HD11	1:A:61:GLU:HA	6	0.06
(1,2409)	1:A:32:LEU:HD12	1:A:61:GLU:HA	6	0.06
(1,2409)	1:A:32:LEU:HD13	1:A:61:GLU:HA	6	0.06
(1,2409)	1:A:32:LEU:HD11	1:A:61:GLU:HA	14	0.06
(1,2409)	1:A:32:LEU:HD12	1:A:61:GLU:HA	14	0.06
(1,2409)	1:A:32:LEU:HD13	1:A:61:GLU:HA	14	0.06
(1,2387)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:47:LYS:HE2	11	0.06
(1,2387)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:47:LYS:HE3	11	0.06
(1,2387)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:47:LYS:HE2	11	0.06
(1,2387)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:47:LYS:HE3	11	0.06
(1,2387)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:47:LYS:HE2	11	0.06
(1,2387)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:47:LYS:HE3	11	0.06
(1,2353)	1:A:16:LEU:HD21	1:A:38:SER:HA	8	0.06
(1,2353)	1:A:16:LEU:HD22	1:A:38:SER:HA	8	0.06
(1,2353)	1:A:16:LEU:HD23	1:A:38:SER:HA	8	0.06
(1,2331)	1:A:26:GLU:HG2	1:A:27:LEU:HD21	4	0.06
(1,2331)	1:A:26:GLU:HG2	1:A:27:LEU:HD22	4	0.06
(1,2331)	1:A:26:GLU:HG2	1:A:27:LEU:HD23	4	0.06
(1,2331)	1:A:26:GLU:HG3	1:A:27:LEU:HD21	4	0.06
(1,2331)	1:A:26:GLU:HG3	1:A:27:LEU:HD22	4	0.06
(1,2331)	1:A:26:GLU:HG3	1:A:27:LEU:HD23	4	0.06
(1,2331)	1:A:26:GLU:HG2	1:A:27:LEU:HD21	15	0.06
(1,2331)	1:A:26:GLU:HG2	1:A:27:LEU:HD22	15	0.06
(1,2331)	1:A:26:GLU:HG2	1:A:27:LEU:HD23	15	0.06
(1,2331)	1:A:26:GLU:HG3	1:A:27:LEU:HD21	15	0.06
(1,2331)	1:A:26:GLU:HG3	1:A:27:LEU:HD22	15	0.06
(1,2331)	1:A:26:GLU:HG3	1:A:27:LEU:HD23	15	0.06
(1,2262)	1:A:13:ILE:HG21	1:A:38:SER:HB2	6	0.06
(1,2262)	1:A:13:ILE:HG21	1:A:38:SER:HB3	6	0.06
(1,2262)	1:A:13:ILE:HG22	1:A:38:SER:HB2	6	0.06
(1,2262)	1:A:13:ILE:HG22	1:A:38:SER:HB3	6	0.06
(-;)	1.A.13.1DD.11G22	1.A.30.5ER.11D3	0	0.00



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,2262)	1:A:13:ILE:HG23	1:A:38:SER:HB3	6	0.06
(1,2031)	1:A:71:TYR:HE1	1:A:151:PRO:HG2	15	0.06
(1,1991)	1:A:84:PHE:HB3	1:A:97:ILE:HA	11	0.06
(1,197)	1:A:45:ASN:H	1:A:45:ASN:HB3	3	0.06
(1,1906)	1:A:122:LYS:HB2	1:A:123:PRO:HD3	17	0.06
(1,190)	1:A:41:ARG:HA	1:A:45:ASN:H	12	0.06
(1,1789)	1:A:24:ASP:HB2	1:A:27:LEU:HB3	19	0.06
(1,1779)	1:A:22:PRO:HA	1:A:28:TRP:HD1	12	0.06
(1,1729)	1:A:156:LYS:HB2	1:A:156:LYS:HD2	5	0.06
(1,1595)	1:A:37:GLN:H	1:A:37:GLN:HG2	15	0.06
(1,1582)	1:A:30:GLN:HB2	1:A:30:GLN:HE21	15	0.06
(1,1582)	1:A:30:GLN:HB3	1:A:30:GLN:HE21	15	0.06
(1,1566)	1:A:23:ARG:H	1:A:23:ARG:HD2	6	0.06
(1,1566)	1:A:23:ARG:H	1:A:23:ARG:HD3	6	0.06
(1,1552)	1:A:12:GLU:H	1:A:12:GLU:HG3	6	0.06
(1,155)	1:A:37:GLN:HB3	1:A:38:SER:H	7	0.06
(1,1498)	1:A:98:ALA:HA	1:A:114:LYS:HA	10	0.06
(1,1438)	1:A:162:LYS:HA	1:A:163:GLU:H	15	0.06
(1,1438)	1:A:162:LYS:HA	1:A:163:GLU:H	18	0.06
(1,1422)	1:A:127:ARG:H	1:A:127:ARG:HB3	7	0.06
(1,1400)	1:A:111:ARG:HA	1:A:112:GLY:H	13	0.06
(1,1397)	1:A:101:GLU:H	1:A:101:GLU:HB3	7	0.06
(1,1360)	1:A:41:ARG:HA	1:A:44:GLU:H	16	0.06
(1,1360)	1:A:41:ARG:HA	1:A:44:GLU:H	18	0.06
(1,1343)	1:A:34:GLU:HA	1:A:37:GLN:HB3	2	0.06
(1,1339)	1:A:32:LEU:HB2	1:A:33:LYS:H	7	0.06
(1,1337)	1:A:32:LEU:H	1:A:32:LEU:HB3	4	0.06
(1,1337)	1:A:32:LEU:H	1:A:32:LEU:HB3	16	0.06
(1,1257)	1:A:70:TRP:H	1:A:146:LEU:HD11	5	0.06
(1,1257)	1:A:70:TRP:H	1:A:146:LEU:HD12	5	0.06
(1,1257)	1:A:70:TRP:H	1:A:146:LEU:HD13	5	0.06
(1,1111)	1:A:128:ASN:HD22	1:A:132:PHE:HE1	14	0.06
(1,1109)	1:A:46:ASN:HD22	1:A:51:ASN:HD22	2	0.06
(1,1075)	1:A:53:TRP:HZ2	1:A:139:ALA:H	1	0.06
(1,1075)	1:A:53:TRP:HZ2	1:A:139:ALA:H	2	0.06
(1,1075)	1:A:53:TRP:HZ2	1:A:139:ALA:H	13	0.06
(1,1072)	1:A:133:GLY:H	1:A:136:HIS:HE1	1	0.06
(1,1069)	1:A:127:ARG:HB2	1:A:128:ASN:HD21	11	0.06
(1,1042)	1:A:72:ILE:HG13	1:A:78:TYR:H	2	0.06
(1,1042)	1:A:72:ILE:HG13	1:A:78:TYR:H	8	0.06
(1,1035)	1:A:53:TRP:HE3	1:A:70:TRP:H	3	0.06
(1,1000)	1:A:53:TRP:H	1:A:53:TRP:HD1	20	0.06



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,998)	1:A:44:GLU:HG3	1:A:48:ASN:HD21	3	0.05
(1,996)	1:A:45:ASN:HA	1:A:48:ASN:HD21	6	0.05
(1,993)	1:A:46:ASN:HD21	1:A:51:ASN:HD22	15	0.05
(1,965)	1:A:20:ALA:H	1:A:28:TRP:HE3	6	0.05
(1,891)	1:A:105:LYS:H	1:A:105:LYS:HG3	9	0.05
(1,829)	1:A:51:ASN:HB3	1:A:51:ASN:HD22	10	0.05
(1,828)	1:A:51:ASN:HB2	1:A:51:ASN:HD22	1	0.05
(1,828)	1:A:51:ASN:HB2	1:A:51:ASN:HD22	3	0.05
(1,828)	1:A:51:ASN:HB2	1:A:51:ASN:HD22	4	0.05
(1,828)	1:A:51:ASN:HB2	1:A:51:ASN:HD22	17	0.05
(1,771)	1:A:25:ARG:HG3	1:A:26:GLU:H	15	0.05
(1,759)	1:A:19:ASN:HB3	1:A:19:ASN:HD22	7	0.05
(1,719)	1:A:57:GLU:H	1:A:66:PHE:H	7	0.05
(1,693)	1:A:133:GLY:H	1:A:136:HIS:H	19	0.05
(1,658)	1:A:71:TYR:H	1:A:79:GLU:HA	3	0.05
(1,633)	1:A:47:LYS:HA	1:A:51:ASN:H	10	0.05
(1,613)	1:A:23:ARG:HA	1:A:25:ARG:H	6	0.05
(1,60)	1:A:23:ARG:H	1:A:23:ARG:HB3	12	0.05
(1,60)	1:A:23:ARG:H	1:A:23:ARG:HB3	17	0.05
(1,574)	1:A:163:GLU:H	1:A:163:GLU:HB3	14	0.05
(1,404)	1:A:114:LYS:H	1:A:114:LYS:HB2	9	0.05
(1,403)	1:A:113:GLY:H	1:A:114:LYS:H	18	0.05
(1,396)	1:A:106:THR:HA	1:A:107:ALA:H	12	0.05
(1,3629)	1:A:146:LEU:O	1:A:150:ILE:H	10	0.05
(1,3625)	1:A:141:GLY:O	1:A:145:TRP:H	14	0.05
(1,3621)	1:A:135:ALA:O	1:A:139:ALA:H	4	0.05
(1,3621)	1:A:135:ALA:O	1:A:139:ALA:H	6	0.05
(1,3621)	1:A:135:ALA:O	1:A:139:ALA:H	12	0.05
(1,3617)	1:A:120:HIS:O	1:A:124:LEU:H	1	0.05
(1,3617)	1:A:120:HIS:O	1:A:124:LEU:H	3	0.05
(1,3617)	1:A:120:HIS:O	1:A:124:LEU:H	11	0.05
(1,3615)	1:A:83:GLU:O	1:A:98:ALA:H	17	0.05
(1,3608)	1:A:53:TRP:O	1:A:70:TRP:N	13	0.05
(1,3603)	1:A:55:ARG:O	1:A:68:LYS:H	16	0.05
(1,3595)	1:A:43:VAL:O	1:A:47:LYS:H	12	0.05
(1,3585)	1:A:36:TYR:O	1:A:40:ILE:H	12	0.05
(1,3583)	1:A:35:GLU:O	1:A:39:LEU:H	11	0.05
(1,3583)	1:A:35:GLU:O	1:A:39:LEU:H	16	0.05
(1,3583)	1:A:35:GLU:O	1:A:39:LEU:H	20	0.05
(1,3577)	1:A:31:ARG:O	1:A:35:GLU:H	11	0.05
(1,3575)	1:A:30:GLN:O	1:A:34:GLU:H	20	0.05
(1,3544)	1:A:163:GLU:H	1:A:163:GLU:HB2	2	0.05



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,3543)	1:A:161:HIS:HB2	1:A:162:LYS:H	14	0.05
(1,3524)	1:A:156:LYS:H	1:A:156:LYS:HG2	10	0.05
(1,3508)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:145:TRP:HE3	20	0.05
(1,3508)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:145:TRP:HE3	20	0.05
(1,3508)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:145:TRP:HE3	20	0.05
(1,3487)	1:A:127:ARG:HB2	1:A:128:ASN:H	19	0.05
(1,3485)	1:A:127:ARG:H	1:A:127:ARG:HG2	14	0.05
(1,3474)	1:A:122:LYS:HA	1:A:122:LYS:HD2	9	0.05
(1,3474)	1:A:122:LYS:HA	1:A:122:LYS:HD2	17	0.05
(1,3308)	1:A:70:TRP:HB2	1:A:71:TYR:H	20	0.05
(1,3304)	1:A:69:CYS:HB2	1:A:70:TRP:H	9	0.05
(1,3268)	1:A:60:LYS:HB2	1:A:61:GLU:HG2	7	0.05
(1,3227)	1:A:56:LEU:HD11	1:A:66:PHE:H	2	0.05
(1,3227)	1:A:56:LEU:HD12	1:A:66:PHE:H	2	0.05
(1,3227)	1:A:56:LEU:HD13	1:A:66:PHE:H	2	0.05
(1,3227)	1:A:56:LEU:HD11	1:A:66:PHE:H	12	0.05
(1,3227)	1:A:56:LEU:HD12	1:A:66:PHE:H	12	0.05
(1,3227)	1:A:56:LEU:HD13	1:A:66:PHE:H	12	0.05
(1,3168)	1:A:40:ILE:H	1:A:40:ILE:HG12	10	0.05
(1,3160)	1:A:35:GLU:HB2	1:A:36:TYR:H	6	0.05
(1,3088)	1:A:22:PRO:HB2	1:A:28:TRP:HZ2	17	0.05
(1,3065)	1:A:19:ASN:HB3	1:A:91:PRO:HB2	19	0.05
(1,3053)	1:A:15:VAL:HG11	1:A:131:LYS:HD2	15	0.05
(1,3053)	1:A:15:VAL:HG12	1:A:131:LYS:HD2	15	0.05
(1,3053)	1:A:15:VAL:HG13	1:A:131:LYS:HD2	15	0.05
(1,293)	1:A:69:CYS:HB2	1:A:70:TRP:H	14	0.05
(1,2823)	1:A:56:LEU:HD21	1:A:65:TRP:HB3	20	0.05
(1,2823)	1:A:56:LEU:HD22	1:A:65:TRP:HB3	20	0.05
(1,2823)	1:A:56:LEU:HD23	1:A:65:TRP:HB3	20	0.05
(1,2806)	1:A:109:MET:HE1	1:A:145:TRP:HZ2	12	0.05
(1,2806)	1:A:109:MET:HE2	1:A:145:TRP:HZ2	12	0.05
(1,2806)	1:A:109:MET:HE3	1:A:145:TRP:HZ2	12	0.05
(1,2770)	1:A:76:LEU:HD21	1:A:164:LYS:HE2	13	0.05
(1,2770)	1:A:76:LEU:HD21	1:A:164:LYS:HE3	13	0.05
(1,2770)	1:A:76:LEU:HD22	1:A:164:LYS:HE2	13	0.05
(1,2770)	1:A:76:LEU:HD22	1:A:164:LYS:HE3	13	0.05
(1,2770)	1:A:76:LEU:HD23	1:A:164:LYS:HE2	13	0.05
(1,2770)	1:A:76:LEU:HD23	1:A:164:LYS:HE3	13	0.05
(1,2712)	1:A:106:THR:HB	1:A:153:LEU:HD11	20	0.05
(1,2712)	1:A:106:THR:HB	1:A:153:LEU:HD12	20	0.05
(1,2712)	1:A:106:THR:HB	1:A:153:LEU:HD13	20	0.05
(1,2600)	1:A:129:VAL:HG11	1:A:130:PRO:HA	6	0.05



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,2600)	1:A:129:VAL:HG12	1:A:130:PRO:HA	6	0.05
(1,2600)	1:A:129:VAL:HG13	1:A:130:PRO:HA	6	0.05
(1,2579)	1:A:117:LEU:HD21	1:A:141:GLY:HA3	19	0.05
(1,2579)	1:A:117:LEU:HD22	1:A:141:GLY:HA3	19	0.05
(1,2579)	1:A:117:LEU:HD23	1:A:141:GLY:HA3	19	0.05
(1,2522)	1:A:97:ILE:HD11	1:A:142:LEU:HB2	20	0.05
(1,2522)	1:A:97:ILE:HD12	1:A:142:LEU:HB2	20	0.05
(1,2522)	1:A:97:ILE:HD13	1:A:142:LEU:HB2	20	0.05
(1,2331)	1:A:26:GLU:HG2	1:A:27:LEU:HD21	16	0.05
(1,2331)	1:A:26:GLU:HG2	1:A:27:LEU:HD22	16	0.05
(1,2331)	1:A:26:GLU:HG2	1:A:27:LEU:HD23	16	0.05
(1,2331)	1:A:26:GLU:HG3	1:A:27:LEU:HD21	16	0.05
(1,2331)	1:A:26:GLU:HG3	1:A:27:LEU:HD22	16	0.05
(1,2331)	1:A:26:GLU:HG3	1:A:27:LEU:HD23	16	0.05
(1,2141)	1:A:56:LEU:HD11	1:A:57:GLU:H	2	0.05
(1,2141)	1:A:56:LEU:HD12	1:A:57:GLU:H	2	0.05
(1,2141)	1:A:56:LEU:HD13	1:A:57:GLU:H	2	0.05
(1,2086)	1:A:70:TRP:HD1	1:A:72:ILE:HG12	17	0.05
(1,2085)	1:A:70:TRP:HD1	1:A:77:LYS:HD2	8	0.05
(1,197)	1:A:45:ASN:H	1:A:45:ASN:HB3	10	0.05
(1,197)	1:A:45:ASN:H	1:A:45:ASN:HB3	20	0.05
(1,1967)	1:A:70:TRP:HD1	1:A:77:LYS:HE3	1	0.05
(1,1954)	1:A:127:ARG:HA	1:A:127:ARG:HG3	7	0.05
(1,1953)	1:A:124:LEU:HA	1:A:127:ARG:HG3	15	0.05
(1,1906)	1:A:122:LYS:HB2	1:A:123:PRO:HD3	8	0.05
(1,190)	1:A:41:ARG:HA	1:A:45:ASN:H	4	0.05
(1,1865)	1:A:70:TRP:HD1	1:A:77:LYS:HD3	19	0.05
(1,1820)	1:A:47:LYS:HA	1:A:52:ASP:HB3	13	0.05
(1,1820)	1:A:47:LYS:HA	1:A:52:ASP:HB3	18	0.05
(1,1808)	1:A:41:ARG:HD3	1:A:45:ASN:HD22	5	0.05
(1,1808)	1:A:41:ARG:HD3	1:A:45:ASN:HD22	8	0.05
(1,1807)	1:A:41:ARG:HD2	1:A:45:ASN:HD22	13	0.05
(1,1804)	1:A:36:TYR:H	1:A:37:GLN:HG3	15	0.05
(1,1772)	1:A:15:VAL:HB	1:A:131:LYS:HB3	2	0.05
(1,1772)	1:A:15:VAL:HB	1:A:131:LYS:HB3	6	0.05
(1,1735)	1:A:156:LYS:HB2	1:A:156:LYS:HE2	13	0.05
(1,1735)	1:A:156:LYS:HB2	1:A:156:LYS:HE3	13	0.05
(1,1671)	1:A:96:GLU:HG3	1:A:97:ILE:H	19	0.05
(1,1666)	1:A:88:ILE:H	1:A:88:ILE:HG12	17	0.05
(1,1600)	1:A:37:GLN:HA	1:A:37:GLN:HG3	19	0.05
(1,155)	1:A:37:GLN:HB3	1:A:38:SER:H	19	0.05
(1,1503)	1:A:129:VAL:HA	1:A:131:LYS:H	1	0.05



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1488)	1:A:64:ARG:HA	1:A:85:ASP:HA	3	0.05
(1,1482)	1:A:74:ASP:HB2	1:A:76:LEU:H	16	0.05
(1,1427)	1:A:135:ALA:HA	1:A:138:MET:HB2	20	0.05
(1,1414)	1:A:121:PHE:HA	1:A:124:LEU:H	6	0.05
(1,1414)	1:A:121:PHE:HA	1:A:124:LEU:H	11	0.05
(1,1397)	1:A:101:GLU:H	1:A:101:GLU:HB3	8	0.05
(1,1382)	1:A:57:GLU:HB2	1:A:58:SER:H	14	0.05
(1,1369)	1:A:44:GLU:H	1:A:44:GLU:HB3	15	0.05
(1,1328)	1:A:25:ARG:HB3	1:A:26:GLU:H	3	0.05
(1,1328)	1:A:25:ARG:HB3	1:A:26:GLU:H	8	0.05
(1,1257)	1:A:70:TRP:H	1:A:146:LEU:HD11	9	0.05
(1,1257)	1:A:70:TRP:H	1:A:146:LEU:HD12	9	0.05
(1,1257)	1:A:70:TRP:H	1:A:146:LEU:HD13	9	0.05
(1,1213)	1:A:18:THR:HG21	1:A:20:ALA:H	7	0.05
(1,1213)	1:A:18:THR:HG22	1:A:20:ALA:H	7	0.05
(1,1213)	1:A:18:THR:HG23	1:A:20:ALA:H	7	0.05
(1,1075)	1:A:53:TRP:HZ2	1:A:139:ALA:H	6	0.05
(1,1018)	1:A:59:ASN:HD22	1:A:64:ARG:H	7	0.05
(1,1016)	1:A:59:ASN:HD21	1:A:64:ARG:H	12	0.05
(1,1014)	1:A:59:ASN:HD22	1:A:63:THR:H	18	0.05
(1,1000)	1:A:53:TRP:H	1:A:53:TRP:HD1	13	0.05
(1,993)	1:A:46:ASN:HD21	1:A:51:ASN:HD22	19	0.04
(1,90)	1:A:26:GLU:HA	1:A:29:VAL:H	17	0.04
(1,890)	1:A:105:LYS:H	1:A:105:LYS:HG2	8	0.04
(1,859)	1:A:75:LEU:H	1:A:75:LEU:HG	3	0.04
(1,845)	1:A:61:GLU:H	1:A:61:GLU:HG2	6	0.04
(1,840)	1:A:57:GLU:HG3	1:A:58:SER:H	4	0.04
(1,829)	1:A:51:ASN:HB3	1:A:51:ASN:HD22	9	0.04
(1,828)	1:A:51:ASN:HB2	1:A:51:ASN:HD22	15	0.04
(1,828)	1:A:51:ASN:HB2	1:A:51:ASN:HD22	18	0.04
(1,793)	1:A:37:GLN:HG3	1:A:37:GLN:HE22	3	0.04
(1,793)	1:A:37:GLN:HG3	1:A:37:GLN:HE22	4	0.04
(1,792)	1:A:37:GLN:HG2	1:A:37:GLN:HE22	10	0.04
(1,780)	1:A:32:LEU:H	1:A:32:LEU:HG	3	0.04
(1,780)	1:A:32:LEU:H	1:A:32:LEU:HG	8	0.04
(1,771)	1:A:25:ARG:HG3	1:A:26:GLU:H	1	0.04
(1,759)	1:A:19:ASN:HB3	1:A:19:ASN:HD22	6	0.04
(1,759)	1:A:19:ASN:HB3	1:A:19:ASN:HD22	15	0.04
(1,697)	1:A:133:GLY:HA2	1:A:136:HIS:H	7	0.04
(1,697)	1:A:133:GLY:HA2	1:A:136:HIS:H	14	0.04
(1,673)	1:A:64:ARG:HA	1:A:86:ILE:H	3	0.04
(1,646)	1:A:59:ASN:H	1:A:64:ARG:H	15	0.04



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,632)	1:A:49:ALA:HA	1:A:51:ASN:H	8	0.04
(1,627)	1:A:46:ASN:HA	1:A:49:ALA:H	12	0.04
(1,613)	1:A:23:ARG:HA	1:A:25:ARG:H	18	0.04
(1,610)	1:A:23:ARG:H	1:A:88:ILE:HA	9	0.04
(1,60)	1:A:23:ARG:H	1:A:23:ARG:HB3	4	0.04
(1,579)	1:A:164:LYS:HB3	1:A:165:CYS:H	1	0.04
(1,570)	1:A:161:HIS:HB2	1:A:162:LYS:H	15	0.04
(1,569)	1:A:161:HIS:HA	1:A:162:LYS:H	17	0.04
(1,563)	1:A:159:ILE:HB	1:A:160:GLN:H	5	0.04
(1,563)	1:A:159:ILE:HB	1:A:160:GLN:H	6	0.04
(1,559)	1:A:158:VAL:HB	1:A:159:ILE:H	5	0.04
(1,559)	1:A:158:VAL:HB	1:A:159:ILE:H	17	0.04
(1,403)	1:A:113:GLY:H	1:A:114:LYS:H	14	0.04
(1,403)	1:A:113:GLY:H	1:A:114:LYS:H	17	0.04
(1,385)	1:A:103:ASP:H	1:A:103:ASP:HB3	8	0.04
(1,379)	1:A:100:PRO:HB3	1:A:101:GLU:H	4	0.04
(1,3633)	1:A:150:ILE:O	1:A:154:ILE:H	18	0.04
(1,3632)	1:A:149:GLU:O	1:A:153:LEU:N	1	0.04
(1,3629)	1:A:146:LEU:O	1:A:150:ILE:H	7	0.04
(1,3625)	1:A:141:GLY:O	1:A:145:TRP:H	1	0.04
(1,3625)	1:A:141:GLY:O	1:A:145:TRP:H	11	0.04
(1,3621)	1:A:135:ALA:O	1:A:139:ALA:H	9	0.04
(1,3617)	1:A:120:HIS:O	1:A:124:LEU:H	18	0.04
(1,3611)	1:A:69:CYS:O	1:A:80:PHE:H	7	0.04
(1,3611)	1:A:69:CYS:O	1:A:80:PHE:H	8	0.04
(1,3607)	1:A:53:TRP:O	1:A:70:TRP:H	4	0.04
(1,3607)	1:A:53:TRP:O	1:A:70:TRP:H	18	0.04
(1,3603)	1:A:55:ARG:O	1:A:68:LYS:H	19	0.04
(1,3599)	1:A:57:GLU:O	1:A:66:PHE:H	5	0.04
(1,3591)	1:A:40:ILE:O	1:A:44:GLU:H	12	0.04
(1,3589)	1:A:39:LEU:O	1:A:43:VAL:H	11	0.04
(1,3589)	1:A:39:LEU:O	1:A:43:VAL:H	17	0.04
(1,3585)	1:A:36:TYR:O	1:A:40:ILE:H	16	0.04
(1,3585)	1:A:36:TYR:O	1:A:40:ILE:H	19	0.04
(1,3583)	1:A:35:GLU:O	1:A:39:LEU:H	18	0.04
(1,3568)	1:A:24:ASP:O	1:A:28:TRP:N	12	0.04
(1,3567)	1:A:24:ASP:O	1:A:28:TRP:H	17	0.04
(1,3565)	1:A:7:ARG:O	1:A:11:SER:H	7	0.04
(1,3559)	1:A:4:GLU:O	1:A:8:ARG:H	5	0.04
(1,3548)	1:A:164:LYS:HA	1:A:164:LYS:HG2	8	0.04
(1,3545)	1:A:163:GLU:HB2	1:A:164:LYS:H	12	0.04
(1,3540)	1:A:160:GLN:HB2	1:A:161:HIS:H	13	0.04



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,3485)	1:A:127:ARG:H	1:A:127:ARG:HG2	18	0.04
(1,3474)	1:A:122:LYS:HA	1:A:122:LYS:HD2	8	0.04
(1,3356)	1:A:84:PHE:HB2	1:A:98:ALA:H	3	0.04
(1,333)	1:A:81:ASP:H	1:A:81:ASP:HB2	14	0.04
(1,333)	1:A:81:ASP:H	1:A:81:ASP:HB2	17	0.04
(1,3308)	1:A:70:TRP:HB2	1:A:71:TYR:H	10	0.04
(1,3251)	1:A:58:SER:H	1:A:58:SER:HB2	10	0.04
(1,3217)	1:A:56:LEU:HB2	1:A:67:GLY:HA2	14	0.04
(1,3215)	1:A:56:LEU:HB2	1:A:57:GLU:H	7	0.04
(1,3214)	1:A:56:LEU:HA	1:A:67:GLY:HA2	1	0.04
(1,3200)	1:A:52:ASP:H	1:A:52:ASP:HB2	9	0.04
(1,3177)	1:A:41:ARG:HD2	1:A:44:GLU:H	7	0.04
(1,3170)	1:A:40:ILE:HG21	1:A:44:GLU:HG2	1	0.04
(1,3170)	1:A:40:ILE:HG22	1:A:44:GLU:HG2	1	0.04
(1,3170)	1:A:40:ILE:HG23	1:A:44:GLU:HG2	1	0.04
(1,3168)	1:A:40:ILE:H	1:A:40:ILE:HG12	7	0.04
(1,3168)	1:A:40:ILE:H	1:A:40:ILE:HG12	8	0.04
(1,3144)	1:A:32:LEU:HD11	1:A:62:GLY:HA2	7	0.04
(1,3144)	1:A:32:LEU:HD12	1:A:62:GLY:HA2	7	0.04
(1,3144)	1:A:32:LEU:HD13	1:A:62:GLY:HA2	7	0.04
(1,3109)	1:A:24:ASP:HB2	1:A:28:TRP:H	3	0.04
(1,3060)	1:A:19:ASN:HA	1:A:91:PRO:HB2	15	0.04
(1,2996)	1:A:68:LYS:HD3	1:A:70:TRP:HZ2	19	0.04
(1,2985)	1:A:28:TRP:HZ2	1:A:63:THR:HB	5	0.04
(1,2923)	1:A:18:THR:HG21	1:A:27:LEU:HD11	12	0.04
(1,2923)	1:A:18:THR:HG21	1:A:27:LEU:HD12	12	0.04
(1,2923)	1:A:18:THR:HG21	1:A:27:LEU:HD13	12	0.04
(1,2923)	1:A:18:THR:HG22	1:A:27:LEU:HD11	12	0.04
(1,2923)	1:A:18:THR:HG22	1:A:27:LEU:HD12	12	0.04
(1,2923)	1:A:18:THR:HG22	1:A:27:LEU:HD13	12	0.04
(1,2923)	1:A:18:THR:HG23	1:A:27:LEU:HD11	12	0.04
(1,2923)	1:A:18:THR:HG23	1:A:27:LEU:HD12	12	0.04
(1,2923)	1:A:18:THR:HG23	1:A:27:LEU:HD13	12	0.04
(1,29)	1:A:10:VAL:HA	1:A:11:SER:H	14	0.04
(1,29)	1:A:10:VAL:HA	1:A:11:SER:H	20	0.04
(1,2823)	1:A:56:LEU:HD21	1:A:65:TRP:HB3	19	0.04
(1,2823)	1:A:56:LEU:HD22	1:A:65:TRP:HB3	19	0.04
(1,2823)	1:A:56:LEU:HD23	1:A:65:TRP:HB3	19	0.04
(1,2816)	1:A:84:PHE:HZ	1:A:134:LEU:HD21	13	0.04
(1,2816)	1:A:84:PHE:HZ	1:A:134:LEU:HD22	13	0.04
(1,2816)	1:A:84:PHE:HZ	1:A:134:LEU:HD23	13	0.04
(1,2808)	1:A:102:LEU:H	1:A:109:MET:HE1	13	0.04



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,2808)	1:A:102:LEU:H	1:A:109:MET:HE2	13	0.04
(1,2808)	1:A:102:LEU:H	1:A:109:MET:HE3	13	0.04
(1,2798)	1:A:109:MET:HE1	1:A:115:ILE:HG21	4	0.04
(1,2798)	1:A:109:MET:HE1	1:A:115:ILE:HG22	4	0.04
(1,2798)	1:A:109:MET:HE1	1:A:115:ILE:HG23	4	0.04
(1,2798)	1:A:109:MET:HE2	1:A:115:ILE:HG21	4	0.04
(1,2798)	1:A:109:MET:HE2	1:A:115:ILE:HG22	4	0.04
(1,2798)	1:A:109:MET:HE2	1:A:115:ILE:HG23	4	0.04
(1,2798)	1:A:109:MET:HE3	1:A:115:ILE:HG21	4	0.04
(1,2798)	1:A:109:MET:HE3	1:A:115:ILE:HG22	4	0.04
(1,2798)	1:A:109:MET:HE3	1:A:115:ILE:HG23	4	0.04
(1,2765)	1:A:76:LEU:HD21	1:A:164:LYS:HB2	11	0.04
(1,2765)	1:A:76:LEU:HD22	1:A:164:LYS:HB2	11	0.04
(1,2765)	1:A:76:LEU:HD23	1:A:164:LYS:HB2	11	0.04
(1,2763)	1:A:76:LEU:HD21	1:A:163:GLU:HA	4	0.04
(1,2763)	1:A:76:LEU:HD22	1:A:163:GLU:HA	4	0.04
(1,2763)	1:A:76:LEU:HD23	1:A:163:GLU:HA	4	0.04
(1,2763)	1:A:76:LEU:HD21	1:A:163:GLU:HA	12	0.04
(1,2763)	1:A:76:LEU:HD22	1:A:163:GLU:HA	12	0.04
(1,2763)	1:A:76:LEU:HD23	1:A:163:GLU:HA	12	0.04
(1,2732)	1:A:78:TYR:HB3	1:A:154:ILE:HD11	20	0.04
(1,2732)	1:A:78:TYR:HB3	1:A:154:ILE:HD12	20	0.04
(1,2732)	1:A:78:TYR:HB3	1:A:154:ILE:HD13	20	0.04
(1,2680)	1:A:53:TRP:HE3	1:A:146:LEU:HD21	4	0.04
(1,2680)	1:A:53:TRP:HE3	1:A:146:LEU:HD22	4	0.04
(1,2680)	1:A:53:TRP:HE3	1:A:146:LEU:HD23	4	0.04
(1,262)	1:A:61:GLU:H	1:A:61:GLU:HB3	13	0.04
(1,260)	1:A:60:LYS:HB3	1:A:61:GLU:H	11	0.04
(1,259)	1:A:60:LYS:HB2	1:A:61:GLU:H	19	0.04
(1,2555)	1:A:106:THR:HG21	1:A:145:TRP:HZ2	9	0.04
(1,2555)	1:A:106:THR:HG22	1:A:145:TRP:HZ2	9	0.04
(1,2555)	1:A:106:THR:HG23	1:A:145:TRP:HZ2	9	0.04
(1,2460)	1:A:54:PHE:HB3	1:A:82:ILE:HD11	5	0.04
(1,2460)	1:A:54:PHE:HB3	1:A:82:ILE:HD12	5	0.04
(1,2460)	1:A:54:PHE:HB3	1:A:82:ILE:HD13	5	0.04
(1,2447)	1:A:76:LEU:HD11	1:A:161:HIS:HB2	9	0.04
(1,2447)	1:A:76:LEU:HD12	1:A:161:HIS:HB2	9	0.04
(1,2447)	1:A:76:LEU:HD13	1:A:161:HIS:HB2	9	0.04
(1,2426)	1:A:72:ILE:HG21	1:A:75:LEU:H	18	0.04
(1,2426)	1:A:72:ILE:HG22	1:A:75:LEU:H	18	0.04
(1,2426)	1:A:72:ILE:HG23	1:A:75:LEU:H	18	0.04
(1,2426)	1:A:72:ILE:HG21	1:A:75:LEU:H	20	0.04



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,2426)	1:A:72:ILE:HG22	1:A:75:LEU:H	20	0.04
(1,2426)	1:A:72:ILE:HG23	1:A:75:LEU:H	20	0.04
(1,2402)	1:A:56:LEU:HD21	1:A:65:TRP:HE3	20	0.04
(1,2402)	1:A:56:LEU:HD22	1:A:65:TRP:HE3	20	0.04
(1,2402)	1:A:56:LEU:HD23	1:A:65:TRP:HE3	20	0.04
(1,2358)	1:A:39:LEU:HD21	1:A:65:TRP:HZ3	4	0.04
(1,2358)	1:A:39:LEU:HD22	1:A:65:TRP:HZ3	4	0.04
(1,2358)	1:A:39:LEU:HD23	1:A:65:TRP:HZ3	4	0.04
(1,2331)	1:A:26:GLU:HG2	1:A:27:LEU:HD21	10	0.04
(1,2331)	1:A:26:GLU:HG2	1:A:27:LEU:HD22	10	0.04
(1,2331)	1:A:26:GLU:HG2	1:A:27:LEU:HD23	10	0.04
(1,2331)	1:A:26:GLU:HG3	1:A:27:LEU:HD21	10	0.04
(1,2331)	1:A:26:GLU:HG3	1:A:27:LEU:HD22	10	0.04
(1,2331)	1:A:26:GLU:HG3	1:A:27:LEU:HD23	10	0.04
(1,2307)	1:A:18:THR:HG21	1:A:31:ARG:HB3	6	0.04
(1,2307)	1:A:18:THR:HG22	1:A:31:ARG:HB3	6	0.04
(1,2307)	1:A:18:THR:HG23	1:A:31:ARG:HB3	6	0.04
(1,2086)	1:A:70:TRP:HD1	1:A:72:ILE:HG12	16	0.04
(1,2071)	1:A:121:PHE:HE1	1:A:125:TRP:HZ3	10	0.04
(1,206)	1:A:43:VAL:HA	1:A:47:LYS:H	18	0.04
(1,2022)	1:A:32:LEU:HB3	1:A:36:TYR:HE1	3	0.04
(1,202)	1:A:45:ASN:HB3	1:A:46:ASN:H	9	0.04
(1,202)	1:A:45:ASN:HB3	1:A:46:ASN:H	11	0.04
(1,1991)	1:A:84:PHE:HB3	1:A:97:ILE:HA	7	0.04
(1,197)	1:A:45:ASN:H	1:A:45:ASN:HB3	9	0.04
(1,197)	1:A:45:ASN:H	1:A:45:ASN:HB3	11	0.04
(1,197)	1:A:45:ASN:H	1:A:45:ASN:HB3	13	0.04
(1,197)	1:A:45:ASN:H	1:A:45:ASN:HB3	14	0.04
(1,197)	1:A:45:ASN:H	1:A:45:ASN:HB3	17	0.04
(1,1949)	1:A:125:TRP:HH2	1:A:137:LEU:HA	6	0.04
(1,1949)	1:A:125:TRP:HH2	1:A:137:LEU:HA	19	0.04
(1,1905)	1:A:122:LYS:HB3	1:A:123:PRO:HD2	7	0.04
(1,1890)	1:A:87:PRO:HG3	1:A:93:THR:HB	4	0.04
(1,1867)	1:A:70:TRP:HD1	1:A:79:GLU:HG2	4	0.04
(1,1867)	1:A:70:TRP:HD1	1:A:79:GLU:HG3	4	0.04
(1,1820)	1:A:47:LYS:HA	1:A:52:ASP:HB3	4	0.04
(1,1810)	1:A:41:ARG:HD2	1:A:44:GLU:HB3	18	0.04
(1,1795)	1:A:28:TRP:HD1	1:A:32:LEU:HG	8	0.04
(1,1779)	1:A:22:PRO:HA	1:A:28:TRP:HD1	5	0.04
(1,1779)	1:A:22:PRO:HA	1:A:28:TRP:HD1	18	0.04
(1,1772)	1:A:15:VAL:HB	1:A:131:LYS:HB3	3	0.04
(1,1772)		1:A:131:LYS:HB3		0.01



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,169)	1:A:37:GLN:HA	1:A:41:ARG:H	8	0.04
(1,1669)	1:A:96:GLU:HA	1:A:96:GLU:HG2	4	0.04
(1,1600)	1:A:37:GLN:HA	1:A:37:GLN:HG3	11	0.04
(1,1570)	1:A:25:ARG:HA	1:A:25:ARG:HG3	11	0.04
(1,1570)	1:A:25:ARG:HA	1:A:25:ARG:HG3	15	0.04
(1,1559)	1:A:17:LYS:H	1:A:17:LYS:HD2	1	0.04
(1,1559)	1:A:17:LYS:H	1:A:17:LYS:HD3	1	0.04
(1,1550)	1:A:12:GLU:H	1:A:12:GLU:HG2	14	0.04
(1,155)	1:A:37:GLN:HB3	1:A:38:SER:H	17	0.04
(1,1531)	1:A:124:LEU:HA	1:A:127:ARG:HB3	12	0.04
(1,1482)	1:A:74:ASP:HB2	1:A:76:LEU:H	15	0.04
(1,1458)	1:A:23:ARG:HB3	1:A:24:ASP:HA	20	0.04
(1,1439)	1:A:163:GLU:HB2	1:A:164:LYS:H	16	0.04
(1,143)	1:A:36:TYR:H	1:A:36:TYR:HB3	11	0.04
(1,1422)	1:A:127:ARG:H	1:A:127:ARG:HB3	12	0.04
(1,1412)	1:A:119:ASP:HA	1:A:122:LYS:HB3	16	0.04
(1,1403)	1:A:116:CYS:H	1:A:116:CYS:HB3	13	0.04
(1,1382)	1:A:57:GLU:HB2	1:A:58:SER:H	4	0.04
(1,1382)	1:A:57:GLU:HB2	1:A:58:SER:H	16	0.04
(1,1372)	1:A:45:ASN:HA	1:A:48:ASN:HB2	11	0.04
(1,1372)	1:A:45:ASN:HA	1:A:48:ASN:HB3	11	0.04
(1,137)	1:A:32:LEU:HA	1:A:36:TYR:H	5	0.04
(1,1369)	1:A:44:GLU:H	1:A:44:GLU:HB3	4	0.04
(1,1369)	1:A:44:GLU:H	1:A:44:GLU:HB3	5	0.04
(1,1369)	1:A:44:GLU:H	1:A:44:GLU:HB3	12	0.04
(1,1369)	1:A:44:GLU:H	1:A:44:GLU:HB3	14	0.04
(1,1360)	1:A:41:ARG:HA	1:A:44:GLU:H	7	0.04
(1,1339)	1:A:32:LEU:HB2	1:A:33:LYS:H	3	0.04
(1,1339)	1:A:32:LEU:HB2	1:A:33:LYS:H	8	0.04
(1,1333)	1:A:26:GLU:HA	1:A:29:VAL:HB	12	0.04
(1,1328)	1:A:25:ARG:HB3	1:A:26:GLU:H	2	0.04
(1,1317)	1:A:12:GLU:H	1:A:12:GLU:HB3	14	0.04
(1,1317)	1:A:12:GLU:H	1:A:12:GLU:HB3	20	0.04
(1,1304)	1:A:4:GLU:HA	1:A:7:ARG:H	16	0.04
(1,1257)	1:A:70:TRP:H	1:A:146:LEU:HD11	11	0.04
(1,1257)	1:A:70:TRP:H	1:A:146:LEU:HD12	11	0.04
(1,1257)	1:A:70:TRP:H	1:A:146:LEU:HD13	11	0.04
(1,1229)	1:A:18:THR:HG21	1:A:31:ARG:H	8	0.04
(1,1229)	1:A:18:THR:HG22	1:A:31:ARG:H	8	0.04
(1,1229)	1:A:18:THR:HG23	1:A:31:ARG:H	8	0.04
(1,1212)	1:A:19:ASN:HD22	1:A:129:VAL:HG11	5	0.04
(1,1212)	1:A:19:ASN:HD22	1:A:129:VAL:HG12	5	0.04



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1212)	1:A:19:ASN:HD22	1:A:129:VAL:HG13	5	0.04
(1,1085)	1:A:51:ASN:HD21	1:A:53:TRP:HE1	9	0.04
(1,1082)	1:A:46:ASN:HD21	1:A:53:TRP:HE1	3	0.04
(1,1079)	1:A:53:TRP:HH2	1:A:143:GLY:H	10	0.04
(1,1075)	1:A:53:TRP:HZ2	1:A:139:ALA:H	4	0.04
(1,1075)	1:A:53:TRP:HZ2	1:A:139:ALA:H	8	0.04
(1,1066)	1:A:124:LEU:HA	1:A:128:ASN:HD21	13	0.04
(1,1063)	1:A:94:ALA:HA	1:A:125:TRP:HE1	1	0.04
(1,1054)	1:A:94:ALA:H	1:A:125:TRP:HZ2	9	0.04
(1,1054)	1:A:94:ALA:H	1:A:125:TRP:HZ2	11	0.04
(1,1042)	1:A:72:ILE:HG13	1:A:78:TYR:H	1	0.04
(1,1042)	1:A:72:ILE:HG13	1:A:78:TYR:H	13	0.04
(1,1042)	1:A:72:ILE:HG13	1:A:78:TYR:H	15	0.04
(1,1042)	1:A:72:ILE:HG13	1:A:78:TYR:H	19	0.04
(1,1035)	1:A:53:TRP:HE3	1:A:70:TRP:H	1	0.04
(1,1010)	1:A:59:ASN:HD22	1:A:64:ARG:HB3	19	0.04
(1,1000)	1:A:53:TRP:H	1:A:53:TRP:HD1	4	0.04
(1,1)	1:A:3:ASP:HA	1:A:4:GLU:H	16	0.04
(1,990)	1:A:12:GLU:HB2	1:A:45:ASN:HD22	11	0.03
(1,90)	1:A:26:GLU:HA	1:A:29:VAL:H	19	0.03
(1,891)	1:A:105:LYS:H	1:A:105:LYS:HG3	3	0.03
(1,890)	1:A:105:LYS:H	1:A:105:LYS:HG2	10	0.03
(1,86)	1:A:27:LEU:HB3	1:A:28:TRP:H	12	0.03
(1,846)	1:A:61:GLU:H	1:A:61:GLU:HG3	20	0.03
(1,840)	1:A:57:GLU:HG3	1:A:58:SER:H	7	0.03
(1,840)	1:A:57:GLU:HG3	1:A:58:SER:H	14	0.03
(1,828)	1:A:51:ASN:HB2	1:A:51:ASN:HD22	12	0.03
(1,815)	1:A:45:ASN:HB2	1:A:45:ASN:HD22	12	0.03
(1,815)	1:A:45:ASN:HB2	1:A:45:ASN:HD22	13	0.03
(1,793)	1:A:37:GLN:HG3	1:A:37:GLN:HE22	15	0.03
(1,771)	1:A:25:ARG:HG3	1:A:26:GLU:H	11	0.03
(1,759)	1:A:19:ASN:HB3	1:A:19:ASN:HD22	18	0.03
(1,716)	1:A:156:LYS:HB2	1:A:158:VAL:H	14	0.03
(1,663)	1:A:83:GLU:H	1:A:98:ALA:H	8	0.03
(1,663)	1:A:83:GLU:H	1:A:98:ALA:H	18	0.03
(1,652)	1:A:56:LEU:HA	1:A:66:PHE:H	8	0.03
(1,652)	1:A:56:LEU:HA	1:A:66:PHE:H	19	0.03
(1,627)	1:A:46:ASN:HA	1:A:49:ALA:H	5	0.03
(1,627)	1:A:46:ASN:HA	1:A:49:ALA:H	11	0.03
(1,610)	1:A:23:ARG:H	1:A:88:ILE:HA	4	0.03
(1,610)	1:A:23:ARG:H	1:A:88:ILE:HA	19	0.03
(1,610)	1:A:23:ARG:H	1:A:88:ILE:HA	20	0.03



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,608)	1:A:21:GLY:H	1:A:24:ASP:HB2	8	0.03
(1,60)	1:A:23:ARG:H	1:A:23:ARG:HB3	8	0.03
(1,60)	1:A:23:ARG:H	1:A:23:ARG:HB3	13	0.03
(1,574)	1:A:163:GLU:H	1:A:163:GLU:HB3	7	0.03
(1,457)	1:A:131:LYS:H	1:A:131:LYS:HB3	10	0.03
(1,454)	1:A:128:ASN:H	1:A:129:VAL:H	9	0.03
(1,435)	1:A:123:PRO:HA	1:A:125:TRP:H	11	0.03
(1,391)	1:A:105:LYS:H	1:A:105:LYS:HB2	4	0.03
(1,384)	1:A:103:ASP:H	1:A:103:ASP:HB2	19	0.03
(1,3632)	1:A:149:GLU:O	1:A:153:LEU:N	15	0.03
(1,3631)	1:A:149:GLU:O	1:A:153:LEU:H	19	0.03
(1,3629)	1:A:146:LEU:O	1:A:150:ILE:H	11	0.03
(1,3627)	1:A:142:LEU:O	1:A:146:LEU:H	2	0.03
(1,3625)	1:A:141:GLY:O	1:A:145:TRP:H	20	0.03
(1,3621)	1:A:135:ALA:O	1:A:139:ALA:H	14	0.03
(1,3621)	1:A:135:ALA:O	1:A:139:ALA:H	18	0.03
(1,3617)	1:A:120:HIS:O	1:A:124:LEU:H	4	0.03
(1,3617)	1:A:120:HIS:O	1:A:124:LEU:H	7	0.03
(1,3617)	1:A:120:HIS:O	1:A:124:LEU:H	17	0.03
(1,3611)	1:A:69:CYS:O	1:A:80:PHE:H	12	0.03
(1,3609)	1:A:73:HIS:H	1:A:76:LEU:O	2	0.03
(1,3607)	1:A:53:TRP:O	1:A:70:TRP:H	12	0.03
(1,3601)	1:A:67:GLY:H	1:A:82:ILE:O	5	0.03
(1,3599)	1:A:57:GLU:O	1:A:66:PHE:H	9	0.03
(1,3599)	1:A:57:GLU:O	1:A:66:PHE:H	19	0.03
(1,3595)	1:A:43:VAL:O	1:A:47:LYS:H	17	0.03
(1,3593)	1:A:41:ARG:O	1:A:45:ASN:H	17	0.03
(1,3592)	1:A:40:ILE:O	1:A:44:GLU:N	17	0.03
(1,3591)	1:A:40:ILE:O	1:A:44:GLU:H	4	0.03
(1,3591)	1:A:40:ILE:O	1:A:44:GLU:H	6	0.03
(1,3591)	1:A:40:ILE:O	1:A:44:GLU:H	10	0.03
(1,3587)	1:A:37:GLN:O	1:A:41:ARG:H	16	0.03
(1,3585)	1:A:36:TYR:O	1:A:40:ILE:H	3	0.03
(1,3585)	1:A:36:TYR:O	1:A:40:ILE:H	4	0.03
(1,3585)	1:A:36:TYR:O	1:A:40:ILE:H	10	0.03
(1,3583)	1:A:35:GLU:O	1:A:39:LEU:H	2	0.03
(1,3583)	1:A:35:GLU:O	1:A:39:LEU:H	5	0.03
(1,3581)	1:A:34:GLU:O	1:A:38:SER:H	9	0.03
(1,3581)	1:A:34:GLU:O	1:A:38:SER:H	20	0.03
(1,3579)	1:A:32:LEU:O	1:A:36:TYR:H	4	0.03
(1,3575)	1:A:30:GLN:O	1:A:34:GLU:H	12	0.03
(1,3573)	1:A:28:TRP:O	1:A:32:LEU:H	5	0.03



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

(1,3569) 1:A:25:ARG:O 1:A:29:VAL:H 14 0.03 (1,3565) 1:A:24:ASP:O 1:A:28:TRP:N 16 0.03 (1,3565) 1:A:7:ARG:O 1:A:11:SER:H 17 0.03 (1,3565) 1:A:7:ARG:O 1:A:11:SER:H 19 0.03 (1,3563) 1:A:6:THR:O 1:A:10:VAL:H 17 0.03 (1,3554) 1:A:4:GLU:O 1:A:8:ARG:H 12 0.03 (1,3545) 1:A:16:GLU:HB2 1:A:16:LYS:H 16 0.03 (1,3533) 1:A:3:CASP:HB2 1:A:128:LYS:H 16 0.03 (1,3487) 1:A:127:ARG:HB2 1:A:128:ASH:H 9 0.03 (1,3476) 1:A:122:LYS:HB3 1:A:123:PRO:HD2 14 0.03 (1,3476) 1:A:122:LYS:HB3 1:A:123:PRO:HD2 15 0.03 (1,3476) 1:A:3:6:GLU:HB3 1:A:42:2:LYS:HB3 1:A:42:2:DY:HB2 15 0.03 (1,3449) 1:A:3:6:GLU:HB2 1:A:48:PHE:H 9 0.03 (1,3165) 1:A:44:GLU:HB2 <	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,3565) 1:A:7:ARG:O 1:A:11:SER:H 17 0.03 (1,3565) 1:A:7:ARG:O 1:A:11:SER:H 19 0.03 (1,3563) 1:A:6:THR:O 1:A:10:VAL:H 17 0.03 (1,3559) 1:A:4:GLU:O 1:A:16:A:RARG:H 12 0.03 (1,3545) 1:A:16:GLU:HB2 1:A:16:LE:H 9 0.03 (1,3457) 1:A:127:ARG:HB2 1:A:128:ASN:H 9 0.03 (1,3476) 1:A:122:LYS:HB3 1:A:123:PRO:HD2 14 0.03 (1,3476) 1:A:122:LYS:HB3 1:A:123:PRO:HD2 14 0.03 (1,3476) 1:A:122:LYS:HB3 1:A:128:ASN:HD2 15 0.03 (1,3476) 1:A:122:LYS:HB3 1:A:128:PRO:HD2 15 0.03 (1,344) 1:A:126:GLU:HB3 1:A:128:ASN:HD2 15 0.03 (1,3344) 1:A:36:GLU:HB3 1:A:48:SASP:H 9 0.03 (1,3353) 1:A:48:49HE:HB2 1:A:85:ASP:H 3 0.03 (1,322) 1:A:78:TYR:HB2 15	(1,3569)	1:A:25:ARG:O	1:A:29:VAL:H	14	0.03
(1,3565) 1:A:7:ARG:O 1:A:11:SER:H 19 0.03 (1,3563) 1:A:6:THR:O 1:A:10:VAL:H 17 0.03 (1,3559) 1:A:4:GLU:O 1:A:8:ARG:H 12 0.03 (1,3545) 1:A:163:GLU:HB2 1:A:164:LYS:H 16 0.03 (1,353) 1:A:55:ASP:HB2 1:A:16:LE:H 9 0.03 (1,3476) 1:A:122:LYS:HB3 1:A:123:PRO:HD2 14 0.03 (1,3476) 1:A:122:LYS:HB3 1:A:123:PRO:HD2 15 0.03 (1,3476) 1:A:122:LYS:HB3 1:A:123:PRO:HD2 15 0.03 (1,3476) 1:A:122:LYS:HB3 1:A:123:PRO:HD2 15 0.03 (1,3476) 1:A:129:GLU:HB3 1:A:42:BY:HE:H 9 0.03 (1,3476) 1:A:43:GLU:HB3 1:A:42:BY:HE:H 9 0.03 (1,3476) 1:A:43:GLU:HB3 1:A:45:GU:HG2 20 0.03 (1,3398) 1:A:49:GLU:HB2 1:A:48:ASN:HD2 15 0.03 (1,3166) 1:A:44:GLU:HG2 1:A:48:ASN:HD21 </td <td>(1,3568)</td> <td>1:A:24:ASP:O</td> <td>1:A:28:TRP:N</td> <td>16</td> <td>0.03</td>	(1,3568)	1:A:24:ASP:O	1:A:28:TRP:N	16	0.03
(1,3563) 1:A:6:THR:O 1:A:10:VAL:H 17 0.03 (1,3559) 1:A:4:GLU:O 1:A:8:ARG:H 12 0.03 (1,3545) 1:A:163:GLU:HB2 1:A:164:LYS:H 16 0.03 (1,353) 1:A:85:ASP:HB2 1:A:128:ASN:H 9 0.03 (1,3476) 1:A:122:LYS:HB3 1:A:123:PRO:HD2 14 0.03 (1,3476) 1:A:122:LYS:HB3 1:A:123:PRO:HD2 15 0.03 (1,3476) 1:A:48:3S:LU:HB3 1:A:42:3:PRO:HD2 15 0.03 (1,3353) 1:A:48:BE:HB3 1:A:96:GLU:HB3 1:A:49:GLU:HG2 20 0.03 (1,3251) 1:A:58:SER:H 1:A:58:SER:HB2 15 0.03 (1,3166) 1:A	(1,3565)	1:A:7:ARG:O	1:A:11:SER:H	17	0.03
(1,3559) 1:A:4:GLU:O 1:A:8:ARG:H 12 0.03 (1,3545) 1:A:163:GLU:HB2 1:A:164:LYS:H 16 0.03 (1,353) 1:A:85:ASP:HB2 1:A:168:GLE:H 9 0.03 (1,3487) 1:A:127:ARG:HB2 1:A:123:PRO:HD2 14 0.03 (1,3476) 1:A:122:LYS:HB3 1:A:123:PRO:HD2 15 0.03 (1,3476) 1:A:38:GLU:HB3 1:A:48:PHE:H 9 0.03 (1,344) 1:A:83:GLU:HB3 1:A:49:G.GLU:HG2 20 0.03 (1,3398) 1:A:96:GLU:H 1:A:96:GLU:HG2 20 0.03 (1,3353) 1:A:48:HBB2 1:A:58:SER:HB2 15 0.03 (1,3251) 1:A:58:SER:H 1:A:58:SER:HB2 15 0.03 (1,3251) 1:A:78:TYR:H 1:A:78:TYR:HB2 9 0.03 (1,3168) 1:A:44:GLU:HG2 1:A:48:ASN:HD21 7 0.03 (1,3168) 1:A:40:ILE:H 1:A:40:ILE:HG12 2 0.03 (1,3168) 1:A:40:ILE:H 1:A:40:ILE:HG12	(1,3565)	1:A:7:ARG:O	1:A:11:SER:H	19	0.03
(1,3545) 1:A:163:GLU:HB2 1:A:164:LYS:H 16 0.03 (1,353) 1:A:85:ASP:HB2 1:A:86:ILE:H 9 0.03 (1,3487) 1:A:127:ARG:HB2 1:A:128:ASN:H 9 0.03 (1,3476) 1:A:122:LYS:HB3 1:A:123:PRO:HD2 14 0.03 (1,3476) 1:A:122:LYS:HB3 1:A:123:PRO:HD2 15 0.03 (1,3476) 1:A:122:LYS:HB3 1:A:123:PRO:HD2 15 0.03 (1,3476) 1:A:48:GLU:HB3 1:A:28:PHE:H 9 0.03 (1,3476) 1:A:48:GLU:HB3 1:A:48:PHE:H 9 0.03 (1,3398) 1:A:96:GLU:H 1:A:96:GLU:HG2 20 0.03 (1,3353) 1:A:84:PHE:HB2 1 0.03 (1,3251) 1:A:58:SEE:H 1 0.03 (1,322) 1:A:78:TYR:H 1:A:78:TYR:HB2 9 0.03 (1,3186) 1:A:44:GLU:HG2 1:A:48:ASN:HD21 7 0.03 (1,3168) 1:A:40:ILE:H 1:A:40:ILE:HG12 2 0.03 (1,3168) 1:	(1,3563)	1:A:6:THR:O	1:A:10:VAL:H	17	0.03
(1,353) 1:A:85:ASP:HB2 1:A:66:ILE:H 9 0.03 (1,3487) 1:A:127:ARG:HB2 1:A:128:ASN:H 9 0.03 (1,3476) 1:A:122:LYS:HB3 1:A:123:PRO:HD2 14 0.03 (1,3476) 1:A:122:LYS:HB3 1:A:123:PRO:HD2 15 0.03 (1,3476) 1:A:83:GU:HB3 1:A:429:PRO:HD2 15 0.03 (1,3476) 1:A:83:GU:HB3 1:A:4296:GU:HG2 20 0.03 (1,3444) 1:A:84:PHE:HB2 1:A:85:ASP:H 3 0.03 (1,3353) 1:A:84:PHE:HB2 1:A:85:SSER:HB2 15 0.03 (1,322) 1:A:78:TYR:H 1:A:78:TYR:HB2 9 0.03 (1,3186) 1:A:44:GLU:HG2 1:A:48:ASN:HD21 7 0.03 (1,3186) 1:A:44:GLU:HG2 1:A:48:ASN:HD21 8 0.03 (1,3168) 1:A:40:ILE:H 1:A:40:ILE:HG12 9 0.03 (1,3168) 1:A:40:ILE:H 1:A:40:ILE:HG12 9 0.03 (1,3169) 1:A:33:ISY:H 1:A:40:ILE:HG12	(1,3559)	1:A:4:GLU:O	1:A:8:ARG:H	12	0.03
(1,3487) 1:A:127:ARG:HB2 1:A:128:ASN:H 9 0.03 (1,3476) 1:A:122:LYS:HB3 1:A:123:PRO:HD2 14 0.03 (1,3476) 1:A:122:LYS:HB3 1:A:123:PRO:HD2 15 0.03 (1,344) 1:A:83:GLU:HB3 1:A:484:PHE:H 9 0.03 (1,3398) 1:A:96:GLU:H 1:A:96:GLU:HG2 20 0.03 (1,3353) 1:A:48:PHE:HB2 1:A:48:SS-SER:H 3 0.03 (1,3251) 1:A:58:SER:H 1:A:58:SER:HB2 15 0.03 (1,322) 1:A:78:TYR:H 1:A:78:TYR:HB2 9 0.03 (1,3186) 1:A:44:GLU:HG2 1:A:48:ASN:HD21 7 0.03 (1,3168) 1:A:40:ILE:H 1:A:40:ILE:HG12 2 0.03 (1,3168) 1:A:40:ILE:H 1:A:40:ILE:HG12 9 0.03 (1,3168) 1:A:36:TN:HG2 1:A:38:SER:H 12 0.03 (1,3160) 1:A:37:GLU:HB2 1:A:38:SER:H 12 0.03 (1,3160) 1:A:37:GEN:HG2 1:A:36:TYR:H	(1,3545)	1:A:163:GLU:HB2	1:A:164:LYS:H	16	0.03
(1,3476) 1:A:122:LYS:HB3 1:A:123:PRO:HD2 14 0.03 (1,3476) 1:A:122:LYS:HB3 1:A:123:PRO:HD2 15 0.03 (1,344) 1:A:83:GLU:HB3 1:A:84:PHE:H 9 0.03 (1,3398) 1:A:96:GLU:H 1:A:85:ASP:H 3 0.03 (1,3353) 1:A:84:PHE:HB2 1:A:85:ASP:H 3 0.03 (1,3251) 1:A:58:SER:H 1:A:58:SER:HB2 15 0.03 (1,322) 1:A:78:TYR:H 1:A:78:TYR:HB2 9 0.03 (1,3186) 1:A:44:GLU:HG2 1:A:48:ASN:HD21 7 0.03 (1,3168) 1:A:40:ILE:H 1:A:40:ILE:HG12 2 0.03 (1,3168) 1:A:40:ILE:H 1:A:40:ILE:HG12 9 0.03 (1,3168) 1:A:40:ILE:H 1:A:40:ILE:HG12 11 0.03 (1,3168) 1:A:37:GLN:HG2 1:A:38:SER:H 12 0.03 (1,3169) 1:A:33:SLYS:HB2 1:A:33:LYS:HB2 1:A:00:BLE:HB2 10.03 (1,3149) 1:A:33:LYS:H 1:A:33:LYS:	(1,353)	1:A:85:ASP:HB2	1:A:86:ILE:H	9	0.03
(1,3476) 1:A:122:LYS:HB3 1:A:123:PRO:HD2 15 0.03 (1,344) 1:A:83:GLU:HB3 1:A:84:PHE:H 9 0.03 (1,3398) 1:A:96:GLU:H 1:A:96:GLU:HG2 20 0.03 (1,3353) 1:A:84:PHE:HB2 1:A:85:ASP:H 3 0.03 (1,3251) 1:A:58:SER:H 1:A:58:SER:HB2 15 0.03 (1,322) 1:A:78:TYR:H 1:A:78:TYR:HB2 9 0.03 (1,3186) 1:A:44:GLU:HG2 1:A:48:ASN:HD21 7 0.03 (1,3186) 1:A:44:GLU:HG2 1:A:48:ASN:HD21 18 0.03 (1,3188) 1:A:40:ILE:H 1:A:40:ILE:HG12 2 0.03 (1,3168) 1:A:40:ILE:H 1:A:40:ILE:HG12 9 0.03 (1,3168) 1:A:40:ILE:H 1:A:40:ILE:HG12 11 0.03 (1,3168) 1:A:40:ILE:H 1:A:40:ILE:HG12 1 0.03 (1,3160) 1:A:37:GLN:HG2 1:A:38:TRH:H 12 0.03 (1,3149) 1:A:33:IYS:H 1:A:36:TYR:H	(1,3487)	1:A:127:ARG:HB2	1:A:128:ASN:H	9	0.03
(1,344) 1:A:83:GLU:HB3 1:A:84:PHE:H 9 0.03 (1,3398) 1:A:96:GLU:H 1:A:96:GLU:HG2 20 0.03 (1,3353) 1:A:84:PHE:HB2 1:A:85:ASP:H 3 0.03 (1,3251) 1:A:58:SER:H 1:A:58:SER:HB2 15 0.03 (1,322) 1:A:78:TYR:H 1:A:78:TYR:HB2 9 0.03 (1,3186) 1:A:44:GLU:HG2 1:A:48:ASN:HD21 7 0.03 (1,3186) 1:A:44:GLU:HG2 1:A:48:ASN:HD21 18 0.03 (1,3168) 1:A:40:ILE:H 1:A:40:ILE:HG12 2 0.03 (1,3168) 1:A:40:ILE:H 1:A:40:ILE:HG12 9 0.03 (1,3168) 1:A:40:ILE:H 1:A:40:ILE:HG12 11 0.03 (1,3168) 1:A:40:ILE:H 1:A:40:ILE:HG12 11 0.03 (1,3168) 1:A:40:ILE:H 1:A:40:ILE:HG12 11 0.03 (1,3160) 1:A:33:IVS:HB2 1:A:33:IVS:HB2 1:A:36:TYR:H 14 0.03 (1,3149) 1:A:33:IVS:H	(1,3476)	1:A:122:LYS:HB3	1:A:123:PRO:HD2	14	0.03
(1,3398) 1:A:96:GLU:H 1:A:96:GLU:HG2 20 0.03 (1,3353) 1:A:84:PHE:HB2 1:A:85:ASP:H 3 0.03 (1,3251) 1:A:58:SER:H 1:A:58:SER:HB2 15 0.03 (1,322) 1:A:78:TYR:H 1:A:78:TYR:HB2 9 0.03 (1,3186) 1:A:44:GLU:HG2 1:A:48:ASN:HD21 7 0.03 (1,3168) 1:A:40:ILE:H 1:A:40:ILE:HG12 2 0.03 (1,3168) 1:A:40:ILE:H 1:A:40:ILE:HG12 9 0.03 (1,3168) 1:A:40:ILE:H 1:A:40:ILE:HG12 9 0.03 (1,3168) 1:A:40:ILE:H 1:A:40:ILE:HG12 9 0.03 (1,3168) 1:A:40:ILE:H 1:A:40:ILE:HG12 11 0.03 (1,3166) 1:A:37:GLN:HG2 1:A:38:SER:H 12 0.03 (1,3160) 1:A:35:GLU:HB2 1:A:36:TYR:H 14 0.03 (1,3149) 1:A:33:LYS:H 1:A:24:ASP:HB2 3 0.03 (1,3062) 1:A:19:ASN:HB2 1:A:91:PRO:HB2 <	(1,3476)	1:A:122:LYS:HB3	1:A:123:PRO:HD2	15	0.03
(1,3353) 1:A:84:PHE:HB2 1:A:85:ASP:H 3 0.03 (1,3251) 1:A:58:SER:H 1:A:58:SER:HB2 15 0.03 (1,322) 1:A:78:TYR:H 1:A:78:TYR:HB2 9 0.03 (1,3186) 1:A:44:GLU:HG2 1:A:48:ASN:HD21 7 0.03 (1,3168) 1:A:40:ILE:H 1:A:40:ILE:HG12 2 0.03 (1,3168) 1:A:40:ILE:H 1:A:40:ILE:HG12 9 0.03 (1,3168) 1:A:40:ILE:H 1:A:40:ILE:HG12 1 0.03 (1,3168) 1:A:40:ILE:H 1:A:40:ILE:HG12 1 0.03 (1,3160) 1:A:37:GLN:HG2 1:A:38:SER:H 12 0.03 (1,3160) 1:A:35:GLU:HB2 1:A:36:TYR:H 14 0.03 (1,3149) 1:A:33:LYS:H 1:A:33:LYS:HG2 11 0.03 (1,3078) 1:A:2:2:GLY:H 1:A:49:PRO:HB2 3 0.03 (1,3062) 1:A:19:ASN:HB2 1:A:19:PRO:HB2 9 0.03 (1,3062) 1:A:6:EYS:HD2 1:A:70:TRP:HZ2 <	(1,344)	1:A:83:GLU:HB3	1:A:84:PHE:H	9	0.03
(1,3251) 1:A:58:SER:H 1:A:58:SER:HB2 15 0.03 (1,322) 1:A:78:TYR:H 1:A:78:TYR:HB2 9 0.03 (1,3186) 1:A:44:GLU:HG2 1:A:48:ASN:HD21 7 0.03 (1,3186) 1:A:40:ILE:H 1:A:40:ILE:HG12 2 0.03 (1,3168) 1:A:40:ILE:H 1:A:40:ILE:HG12 9 0.03 (1,3168) 1:A:40:ILE:H 1:A:40:ILE:HG12 11 0.03 (1,3168) 1:A:40:ILE:H 1:A:40:ILE:HG12 11 0.03 (1,3166) 1:A:37:GLN:HG2 1:A:38:SER:H 12 0.03 (1,3160) 1:A:35:GLU:HB2 1:A:36:TYR:H 14 0.03 (1,3169) 1:A:35:GLU:HB2 1:A:33:LYS:HG2 11 0.03 (1,3169) 1:A:33:LYS:H 1:A:33:LYS:HG2 11 0.03 (1,3169) 1:A:33:LYS:H 1:A:33:LYS:HG2 11 0.03 (1,3169) 1:A:33:LYS:HB2 1:A:33:LYS:HG2 11 0.03 (1,3169) 1:A:33:LYS:HB2 1:A:34:LEU:HB2	(1,3398)	1:A:96:GLU:H	1:A:96:GLU:HG2	20	0.03
(1,3251) 1:A:58:SER:H 1:A:58:SER:HB2 15 0.03 (1,322) 1:A:78:TYR:H 1:A:78:TYR:HB2 9 0.03 (1,3186) 1:A:44:GLU:HG2 1:A:48:ASN:HD21 7 0.03 (1,3186) 1:A:40:ILE:H 1:A:40:ILE:HG12 2 0.03 (1,3168) 1:A:40:ILE:H 1:A:40:ILE:HG12 9 0.03 (1,3168) 1:A:40:ILE:H 1:A:40:ILE:HG12 11 0.03 (1,3168) 1:A:40:ILE:H 1:A:40:ILE:HG12 11 0.03 (1,3166) 1:A:37:GLN:HG2 1:A:38:SER:H 12 0.03 (1,3160) 1:A:35:GLU:HB2 1:A:36:TYR:H 14 0.03 (1,3169) 1:A:35:GLU:HB2 1:A:33:LYS:HG2 11 0.03 (1,3169) 1:A:33:LYS:H 1:A:33:LYS:HG2 11 0.03 (1,3169) 1:A:33:LYS:H 1:A:33:LYS:HG2 11 0.03 (1,3169) 1:A:33:LYS:HB2 1:A:33:LYS:HG2 11 0.03 (1,3169) 1:A:33:LYS:HB2 1:A:34:LEU:HB2	(1,3353)	1:A:84:PHE:HB2	1:A:85:ASP:H	3	0.03
(1,3186) 1:A:44:GLU:HG2 1:A:48:ASN:HD21 7 0.03 (1,3186) 1:A:44:GLU:HG2 1:A:48:ASN:HD21 18 0.03 (1,3168) 1:A:40:ILE:H 1:A:40:ILE:HG12 2 0.03 (1,3168) 1:A:40:ILE:H 1:A:40:ILE:HG12 9 0.03 (1,3168) 1:A:40:ILE:H 1:A:40:ILE:HG12 11 0.03 (1,3166) 1:A:37:GLN:HG2 1:A:38:SER:H 12 0.03 (1,3160) 1:A:35:GLU:HB2 1:A:36:TYR:H 14 0.03 (1,3149) 1:A:33:LYS:H 1:A:33:LYS:HG2 11 0.03 (1,3078) 1:A:21:GLY:H 1:A:24:ASP:HB2 3 0.03 (1,3062) 1:A:19:ASN:HB2 1:A:91:PRO:HB2 9 0.03 (1,3004) 1:A:125:TRP:HZ3 1:A:70:TRP:HB2 18 0.03 (1,2995) 1:A:68:LYS:HD2 1:A:70:TRP:HZ2 19 0.03 (1,2985) 1:A:69:CYS:HB2 1:A:70:TRP:H 19 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG21 1:A:27:LEU:HD11<	(1,3251)	1:A:58:SER:H	1:A:58:SER:HB2	15	0.03
(1,3186) 1:A:44:GLU:HG2 1:A:48:ASN:HD21 18 0.03 (1,3168) 1:A:40:ILE:H 1:A:40:ILE:HG12 2 0.03 (1,3168) 1:A:40:ILE:H 1:A:40:ILE:HG12 9 0.03 (1,3168) 1:A:40:ILE:H 1:A:40:ILE:HG12 11 0.03 (1,3166) 1:A:37:GLN:HG2 1:A:38:SER:H 12 0.03 (1,3160) 1:A:35:GLU:HB2 1:A:36:TYR:H 14 0.03 (1,3149) 1:A:33:LYS:H 1:A:36:TYR:H 14 0.03 (1,3078) 1:A:21:GLY:H 1:A:39:PRO:HB2 11 0.03 (1,3062) 1:A:19:ASN:HB2 1:A:91:PRO:HB2 9 0.03 (1,3004) 1:A:125:TRP:HZ3 1:A:137:LEU:HB2 18 0.03 (1,2995) 1:A:68:LYS:HD2 1:A:70:TRP:HZ2 19 0.03 (1,2995) 1:A:69:CYS:HB2 1:A:70:TRP:H 19 0.03 (1,2993) 1:A:18:THR:HG21 1:A:27:LEU:HD11 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG21 1:A:27:LEU:HD1	(1,322)	1:A:78:TYR:H	1:A:78:TYR:HB2	9	0.03
(1,3168) 1:A:40:ILE:H 1:A:40:ILE:HG12 2 0.03 (1,3168) 1:A:40:ILE:H 1:A:40:ILE:HG12 9 0.03 (1,3168) 1:A:40:ILE:H 1:A:40:ILE:HG12 11 0.03 (1,3166) 1:A:37:GLN:HG2 1:A:38:SER:H 12 0.03 (1,3160) 1:A:35:GLU:HB2 1:A:36:TYR:H 14 0.03 (1,3149) 1:A:33:LYS:H 1:A:33:LYS:HG2 11 0.03 (1,3078) 1:A:21:GLY:H 1:A:24:ASP:HB2 3 0.03 (1,3062) 1:A:19:ASN:HB2 1:A:91:PRO:HB2 9 0.03 (1,3004) 1:A:19:ASN:HB2 1:A:91:PRO:HB2 9 0.03 (1,2995) 1:A:68:LYS:HD2 1:A:63:THR:HB2 18 0.03 (1,2985) 1:A:28:TRP:HZ2 1:A:63:THR:HB 4 0.03 (1,2993) 1:A:69:CYS:HB2 1:A:70:TRP:H 19 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG21 1:A:27:LEU:HD11 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG22 1:A:27:LEU:HD12 <td>(1,3186)</td> <td>1:A:44:GLU:HG2</td> <td>1:A:48:ASN:HD21</td> <td>7</td> <td>0.03</td>	(1,3186)	1:A:44:GLU:HG2	1:A:48:ASN:HD21	7	0.03
(1,3168) 1:A:40:ILE:H 1:A:40:ILE:HG12 9 0.03 (1,3168) 1:A:40:ILE:H 1:A:40:ILE:HG12 11 0.03 (1,3166) 1:A:37:GLN:HG2 1:A:38:SER:H 12 0.03 (1,3160) 1:A:35:GLU:HB2 1:A:36:TYR:H 14 0.03 (1,3149) 1:A:33:LYS:H 1:A:33:LYS:HG2 11 0.03 (1,3078) 1:A:21:GLY:H 1:A:24:ASP:HB2 3 0.03 (1,3062) 1:A:19:ASN:HB2 1:A:91:PRO:HB2 9 0.03 (1,3062) 1:A:19:ASN:HB2 1:A:91:PRO:HB2 9 0.03 (1,3004) 1:A:19:ASN:HB2 1:A:91:PRO:HB2 18 0.03 (1,2995) 1:A:68:LYS:HD2 1:A:70:TRP:HZ2 19 0.03 (1,2985) 1:A:69:CYS:HB2 1:A:63:THR:HB 4 0.03 (1,2993) 1:A:69:CYS:HB2 1:A:27:LEU:HD11 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG21 1:A:27:LEU:HD12 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG22 1:A:27:LEU:HD1	(1,3186)	1:A:44:GLU:HG2	1:A:48:ASN:HD21	18	0.03
(1,3168) 1:A:40:ILE:H 1:A:40:ILE:HG12 11 0.03 (1,3166) 1:A:37:GLN:HG2 1:A:38:SER:H 12 0.03 (1,3160) 1:A:35:GLU:HB2 1:A:36:TYR:H 14 0.03 (1,3149) 1:A:33:LYS:H 1:A:33:LYS:HG2 11 0.03 (1,3078) 1:A:21:GLY:H 1:A:24:ASP:HB2 3 0.03 (1,3062) 1:A:19:ASN:HB2 1:A:91:PRO:HB2 9 0.03 (1,3004) 1:A:125:TRP:HZ3 1:A:137:LEU:HB2 18 0.03 (1,2995) 1:A:68:LYS:HD2 1:A:70:TRP:HZ2 19 0.03 (1,2985) 1:A:28:TRP:HZ2 1:A:63:THR:HB 4 0.03 (1,293) 1:A:69:CYS:HB2 1:A:70:TRP:H 19 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG21 1:A:27:LEU:HD11 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG21 1:A:27:LEU:HD13 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG22 1:A:27:LEU:HD11 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG23 1:A:27:LE	(1,3168)	1:A:40:ILE:H	1:A:40:ILE:HG12	2	0.03
(1,3166) 1:A:37:GLN:HG2 1:A:38:SER:H 12 0.03 (1,3160) 1:A:35:GLU:HB2 1:A:36:TYR:H 14 0.03 (1,3149) 1:A:33:LYS:H 1:A:33:LYS:HG2 11 0.03 (1,3078) 1:A:21:GLY:H 1:A:24:ASP:HB2 3 0.03 (1,3062) 1:A:19:ASN:HB2 1:A:91:PRO:HB2 9 0.03 (1,3004) 1:A:125:TRP:HZ3 1:A:137:LEU:HB2 18 0.03 (1,2995) 1:A:68:LYS:HD2 1:A:70:TRP:HZ2 19 0.03 (1,2995) 1:A:68:LYS:HD2 1:A:63:THR:HB 4 0.03 (1,2993) 1:A:69:CYS:HB2 1:A:70:TRP:H 19 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG21 1:A:27:LEU:HD11 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG21 1:A:27:LEU:HD12 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG22 1:A:27:LEU:HD13 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG22 1:A:27:LEU:HD12 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG23 1:A:2	(1,3168)	1:A:40:ILE:H	1:A:40:ILE:HG12	9	0.03
(1,3160) 1:A:35:GLU:HB2 1:A:36:TYR:H 14 0.03 (1,3149) 1:A:33:LYS:H 1:A:33:LYS:HG2 11 0.03 (1,3078) 1:A:21:GLY:H 1:A:24:ASP:HB2 3 0.03 (1,3062) 1:A:19:ASN:HB2 1:A:91:PRO:HB2 9 0.03 (1,3004) 1:A:125:TRP:HZ3 1:A:137:LEU:HB2 18 0.03 (1,2995) 1:A:68:LYS:HD2 1:A:70:TRP:HZ2 19 0.03 (1,2985) 1:A:28:TRP:HZ2 1:A:63:THR:HB 4 0.03 (1,293) 1:A:69:CYS:HB2 1:A:70:TRP:H 19 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG21 1:A:27:LEU:HD11 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG21 1:A:27:LEU:HD12 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG22 1:A:27:LEU:HD11 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG22 1:A:27:LEU:HD12 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG23 1:A:27:LEU:HD11 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG23 1:	(1,3168)	1:A:40:ILE:H	1:A:40:ILE:HG12	11	0.03
(1,3149) 1:A:33:LYS:H 1:A:33:LYS:HG2 11 0.03 (1,3078) 1:A:21:GLY:H 1:A:24:ASP:HB2 3 0.03 (1,3062) 1:A:19:ASN:HB2 1:A:91:PRO:HB2 9 0.03 (1,3004) 1:A:125:TRP:HZ3 1:A:137:LEU:HB2 18 0.03 (1,2995) 1:A:68:LYS:HD2 1:A:70:TRP:HZ2 19 0.03 (1,2985) 1:A:28:TRP:HZ2 1:A:63:THR:HB 4 0.03 (1,293) 1:A:69:CYS:HB2 1:A:70:TRP:H 19 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG21 1:A:27:LEU:HD11 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG21 1:A:27:LEU:HD12 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG22 1:A:27:LEU:HD11 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG22 1:A:27:LEU:HD12 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG23 1:A:27:LEU:HD13 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG23 1:A:27:LEU:HD11 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG23 1:A:27:LEU:HD12 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:H	(1,3166)	1:A:37:GLN:HG2	1:A:38:SER:H	12	0.03
(1,3078) 1:A:21:GLY:H 1:A:24:ASP:HB2 3 0.03 (1,3062) 1:A:19:ASN:HB2 1:A:91:PRO:HB2 9 0.03 (1,3004) 1:A:125:TRP:HZ3 1:A:137:LEU:HB2 18 0.03 (1,2995) 1:A:68:LYS:HD2 1:A:70:TRP:HZ2 19 0.03 (1,2985) 1:A:28:TRP:HZ2 1:A:63:THR:HB 4 0.03 (1,293) 1:A:69:CYS:HB2 1:A:70:TRP:H 19 0.03 (1,293) 1:A:18:THR:HG21 1:A:27:LEU:HD11 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG21 1:A:27:LEU:HD12 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG22 1:A:27:LEU:HD11 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG22 1:A:27:LEU:HD12 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG23 1:A:27:LEU:HD11 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG23 1:A:27:LEU:HD12 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG23 1:A:27:LEU:HD12 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG23	(1,3160)	1:A:35:GLU:HB2	1:A:36:TYR:H	14	0.03
(1,3062) 1:A:19:ASN:HB2 1:A:91:PRO:HB2 9 0.03 (1,3004) 1:A:125:TRP:HZ3 1:A:137:LEU:HB2 18 0.03 (1,2995) 1:A:68:LYS:HD2 1:A:70:TRP:HZ2 19 0.03 (1,2985) 1:A:28:TRP:HZ2 1:A:63:THR:HB 4 0.03 (1,293) 1:A:69:CYS:HB2 1:A:70:TRP:H 19 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG21 1:A:27:LEU:HD11 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG21 1:A:27:LEU:HD12 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG22 1:A:27:LEU:HD13 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG22 1:A:27:LEU:HD12 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG23 1:A:27:LEU:HD13 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG23 1:A:27:LEU:HD11 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG23 1:A:27:LEU:HD12 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG23 1:A:27:LEU:HD13 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG23	(1,3149)	1:A:33:LYS:H	1:A:33:LYS:HG2	11	0.03
(1,3004) 1:A:125:TRP:HZ3 1:A:137:LEU:HB2 18 0.03 (1,2995) 1:A:68:LYS:HD2 1:A:70:TRP:HZ2 19 0.03 (1,2985) 1:A:28:TRP:HZ2 1:A:63:THR:HB 4 0.03 (1,293) 1:A:69:CYS:HB2 1:A:70:TRP:H 19 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG21 1:A:27:LEU:HD11 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG21 1:A:27:LEU:HD12 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG22 1:A:27:LEU:HD13 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG22 1:A:27:LEU:HD12 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG22 1:A:27:LEU:HD12 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG23 1:A:27:LEU:HD11 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG23 1:A:27:LEU:HD12 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG23 1:A:27:LEU:HD12 11 0.03 (1,2865) 1:A:124:LEU:HD21 1:A:140:LEU:HB3 4 0.03 (1,2865) 1:A:124:LEU:HD22 1:A:140:LEU:HB3 4 0.03	(1,3078)	1:A:21:GLY:H	1:A:24:ASP:HB2	3	0.03
(1,2995) 1:A:68:LYS:HD2 1:A:70:TRP:HZ2 19 0.03 (1,2985) 1:A:28:TRP:HZ2 1:A:63:THR:HB 4 0.03 (1,293) 1:A:69:CYS:HB2 1:A:70:TRP:H 19 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG21 1:A:27:LEU:HD11 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG21 1:A:27:LEU:HD12 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG21 1:A:27:LEU:HD13 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG22 1:A:27:LEU:HD11 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG22 1:A:27:LEU:HD12 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG23 1:A:27:LEU:HD13 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG23 1:A:27:LEU:HD12 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG23 1:A:27:LEU:HD12 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG23 1:A:27:LEU:HD13 11 0.03 (1,2865) 1:A:124:LEU:HD21 1:A:140:LEU:HB3 4 0.03 (1,2865) 1:A:124:LEU:HD22 1:A:140:LEU:HB3 4 0.03	(1,3062)	1:A:19:ASN:HB2	1:A:91:PRO:HB2	9	0.03
(1,2985) 1:A:28:TRP:HZ2 1:A:63:THR:HB 4 0.03 (1,293) 1:A:69:CYS:HB2 1:A:70:TRP:H 19 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG21 1:A:27:LEU:HD11 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG21 1:A:27:LEU:HD12 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG21 1:A:27:LEU:HD13 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG22 1:A:27:LEU:HD11 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG22 1:A:27:LEU:HD12 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG23 1:A:27:LEU:HD13 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG23 1:A:27:LEU:HD11 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG23 1:A:27:LEU:HD12 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG23 1:A:27:LEU:HD13 11 0.03 (1,2865) 1:A:124:LEU:HD21 1:A:140:LEU:HB3 4 0.03 (1,2865) 1:A:124:LEU:HD22 1:A:140:LEU:HB3 4 0.03	(1,3004)	1:A:125:TRP:HZ3	1:A:137:LEU:HB2	18	0.03
(1,293) 1:A:69:CYS:HB2 1:A:70:TRP:H 19 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG21 1:A:27:LEU:HD11 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG21 1:A:27:LEU:HD12 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG21 1:A:27:LEU:HD13 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG22 1:A:27:LEU:HD11 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG22 1:A:27:LEU:HD12 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG23 1:A:27:LEU:HD13 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG23 1:A:27:LEU:HD11 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG23 1:A:27:LEU:HD12 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG23 1:A:27:LEU:HD13 11 0.03 (1,2865) 1:A:124:LEU:HD21 1:A:140:LEU:HB3 4 0.03 (1,2865) 1:A:124:LEU:HD22 1:A:140:LEU:HB3 4 0.03	(1,2995)	1:A:68:LYS:HD2	1:A:70:TRP:HZ2	19	0.03
(1,2923) 1:A:18:THR:HG21 1:A:27:LEU:HD11 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG21 1:A:27:LEU:HD12 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG21 1:A:27:LEU:HD13 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG22 1:A:27:LEU:HD11 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG22 1:A:27:LEU:HD12 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG23 1:A:27:LEU:HD13 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG23 1:A:27:LEU:HD11 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG23 1:A:27:LEU:HD12 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG23 1:A:27:LEU:HD12 11 0.03 (1,2865) 1:A:124:LEU:HD21 1:A:140:LEU:HB3 4 0.03 (1,2865) 1:A:124:LEU:HD22 1:A:140:LEU:HB3 4 0.03	(1,2985)	1:A:28:TRP:HZ2	1:A:63:THR:HB	4	0.03
(1,2923) 1:A:18:THR:HG21 1:A:27:LEU:HD12 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG21 1:A:27:LEU:HD13 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG22 1:A:27:LEU:HD11 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG22 1:A:27:LEU:HD12 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG22 1:A:27:LEU:HD13 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG23 1:A:27:LEU:HD11 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG23 1:A:27:LEU:HD12 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG23 1:A:27:LEU:HD13 11 0.03 (1,2865) 1:A:124:LEU:HD21 1:A:140:LEU:HB3 4 0.03 (1,2865) 1:A:124:LEU:HD22 1:A:140:LEU:HB3 4 0.03	(1,293)	1:A:69:CYS:HB2	1:A:70:TRP:H	19	0.03
(1,2923) 1:A:18:THR:HG21 1:A:27:LEU:HD13 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG22 1:A:27:LEU:HD11 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG22 1:A:27:LEU:HD12 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG22 1:A:27:LEU:HD13 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG23 1:A:27:LEU:HD11 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG23 1:A:27:LEU:HD12 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG23 1:A:27:LEU:HD13 11 0.03 (1,2865) 1:A:124:LEU:HD21 1:A:140:LEU:HB3 4 0.03 (1,2865) 1:A:124:LEU:HD22 1:A:140:LEU:HB3 4 0.03	(1,2923)	1:A:18:THR:HG21	1:A:27:LEU:HD11	11	0.03
(1,2923) 1:A:18:THR:HG22 1:A:27:LEU:HD11 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG22 1:A:27:LEU:HD12 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG22 1:A:27:LEU:HD13 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG23 1:A:27:LEU:HD11 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG23 1:A:27:LEU:HD12 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG23 1:A:27:LEU:HD13 11 0.03 (1,2865) 1:A:124:LEU:HD21 1:A:140:LEU:HB3 4 0.03 (1,2865) 1:A:124:LEU:HD22 1:A:140:LEU:HB3 4 0.03	(1,2923)	1:A:18:THR:HG21	1:A:27:LEU:HD12	11	0.03
(1,2923) 1:A:18:THR:HG22 1:A:27:LEU:HD12 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG22 1:A:27:LEU:HD13 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG23 1:A:27:LEU:HD11 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG23 1:A:27:LEU:HD12 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG23 1:A:27:LEU:HD13 11 0.03 (1,2865) 1:A:124:LEU:HD21 1:A:140:LEU:HB3 4 0.03 (1,2865) 1:A:124:LEU:HD22 1:A:140:LEU:HB3 4 0.03	(1,2923)	1:A:18:THR:HG21	1:A:27:LEU:HD13	11	0.03
(1,2923) 1:A:18:THR:HG22 1:A:27:LEU:HD13 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG23 1:A:27:LEU:HD11 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG23 1:A:27:LEU:HD12 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG23 1:A:27:LEU:HD13 11 0.03 (1,2865) 1:A:124:LEU:HD21 1:A:140:LEU:HB3 4 0.03 (1,2865) 1:A:124:LEU:HD22 1:A:140:LEU:HB3 4 0.03	(1,2923)	1:A:18:THR:HG22	1:A:27:LEU:HD11	11	0.03
(1,2923) 1:A:18:THR:HG23 1:A:27:LEU:HD11 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG23 1:A:27:LEU:HD12 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG23 1:A:27:LEU:HD13 11 0.03 (1,2865) 1:A:124:LEU:HD21 1:A:140:LEU:HB3 4 0.03 (1,2865) 1:A:124:LEU:HD22 1:A:140:LEU:HB3 4 0.03	(1,2923)	1:A:18:THR:HG22	1:A:27:LEU:HD12	11	0.03
(1,2923) 1:A:18:THR:HG23 1:A:27:LEU:HD12 11 0.03 (1,2923) 1:A:18:THR:HG23 1:A:27:LEU:HD13 11 0.03 (1,2865) 1:A:124:LEU:HD21 1:A:140:LEU:HB3 4 0.03 (1,2865) 1:A:124:LEU:HD22 1:A:140:LEU:HB3 4 0.03	(1,2923)	1:A:18:THR:HG22	1:A:27:LEU:HD13	11	0.03
(1,2923) 1:A:18:THR:HG23 1:A:27:LEU:HD13 11 0.03 (1,2865) 1:A:124:LEU:HD21 1:A:140:LEU:HB3 4 0.03 (1,2865) 1:A:124:LEU:HD22 1:A:140:LEU:HB3 4 0.03	, ,	1:A:18:THR:HG23	1:A:27:LEU:HD11	11	0.03
(1,2865) 1:A:124:LEU:HD21 1:A:140:LEU:HB3 4 0.03 (1,2865) 1:A:124:LEU:HD22 1:A:140:LEU:HB3 4 0.03	(1,2923)	1:A:18:THR:HG23	1:A:27:LEU:HD12	11	0.03
(1,2865) 1:A:124:LEU:HD22 1:A:140:LEU:HB3 4 0.03	(1,2923)	1:A:18:THR:HG23	1:A:27:LEU:HD13	11	0.03
	(1,2865)	1:A:124:LEU:HD21	1:A:140:LEU:HB3	4	0.03
(1.2865) 1.A.124·LEU·HD23 1.A.140·LEU·HB3 4 0.03	(1,2865)	1:A:124:LEU:HD22	1:A:140:LEU:HB3	4	0.03
(1,200) 1.11.121.1210.11220 1.11.110.1120.1120 1	(1,2865)	1:A:124:LEU:HD23	1:A:140:LEU:HB3	4	0.03



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

(1,2797) 1:A:106:THR:HG21 1:A:109:MET:HE2 20 0.03 (1,2797) 1:A:106:THR:HG21 1:A:109:MET:HE2 20 0.03 (1,2797) 1:A:106:THR:HG21 1:A:109:MET:HE3 20 0.03 (1,2797) 1:A:106:THR:HG22 1:A:109:MET:HE1 20 0.03 (1,2797) 1:A:106:THR:HG22 1:A:109:MET:HE3 20 0.03 (1,2797) 1:A:106:THR:HG23 1:A:109:MET:HE3 20 0.03 (1,2797) 1:A:106:THR:HG23 1:A:109:MET:HE2 20 0.03 (1,2797) 1:A:16:THR:HG23 1:A:109:MET:HE3 20 0.03 (1,2763) 1:A:76:LEU:HD21 1:A:166:PHE:H 2 0.03 (1,2763) 1:A:76:LEU:HD22 1:A:163:GLU:HA 9 0.03 (1,2732) 1:A:78	Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,2797) 1:A:106:THR:HG21 1:A:109:MET:HE3 20 0.03 (1,2797) 1:A:106:THR:HG22 1:A:109:MET:HE1 20 0.03 (1,2797) 1:A:106:THR:HG22 1:A:109:MET:HE2 20 0.03 (1,2797) 1:A:106:THR:HG23 1:A:109:MET:HE3 20 0.03 (1,2797) 1:A:106:THR:HG23 1:A:109:MET:HE2 20 0.03 (1,2797) 1:A:106:THR:HG23 1:A:109:MET:HE3 20 0.03 (1,2797) 1:A:66:THR:HG23 1:A:109:MET:HE3 20 0.03 (1,2797) 1:A:65:TRP:HB2 1:A:66:PHE:H 2 0.03 (1,2763) 1:A:76:LEU:HD21 1:A:163:GLU:HA 9 0.03 (1,2763) 1:A:76:LEU:HD23 1:A:163:GLU:HA 9 0.03 (1,2763) 1:A:78:TYR:HB3 1:A:154:ILE:HD11 6 0.03 (1,2732) 1:A:78:TYR:HB3 1:A:154:ILE:HD12 6 0.03 (1,2732) 1:A:78:TYR:HB3 1:A:154:ILE:HD13 6 0.03 (1,2732) 1:A:78:TYR:HB3	(1,2797)	1:A:106:THR:HG21	1:A:109:MET:HE1	20	0.03
(1,2797) 1:A:106:THR:HG22 1:A:109:MET:HE1 20 0.03 (1,2797) 1:A:106:THR:HG22 1:A:109:MET:HE2 20 0.03 (1,2797) 1:A:106:THR:HG23 1:A:109:MET:HE3 20 0.03 (1,2797) 1:A:106:THR:HG23 1:A:109:MET:HE1 20 0.03 (1,2797) 1:A:166:THR:HG23 1:A:109:MET:HE3 20 0.03 (1,2797) 1:A:166:THR:HG23 1:A:109:MET:HE3 20 0.03 (1,2797) 1:A:166:THR:HG23 1:A:109:MET:HE3 20 0.03 (1,2791) 1:A:66:TRP:HB2 1:A:66:PHE:H 2 0.03 (1,2763) 1:A:76:LEU:HD21 1:A:163:GLU:HA 9 0.03 (1,2763) 1:A:76:LEU:HD22 1:A:163:GLU:HA 9 0.03 (1,2763) 1:A:78:TYR:HB3 1:A:154:ILE:HD11 6 0.03 (1,2732) 1:A:78:TYR:HB3 1:A:154:ILE:HD12 6 0.03 (1,2732) 1:A:78:TYR:HB3 1:A:154:ILE:HD13 6 0.03 (1,2732) 1:A:78:TYR:HB	(1,2797)	1:A:106:THR:HG21	1:A:109:MET:HE2	20	0.03
(1,2797) 1:A:106:THR:HG22 1:A:109:MET:HE2 20 0.03 (1,2797) 1:A:106:THR:HG22 1:A:109:MET:HE3 20 0.03 (1,2797) 1:A:106:THR:HG23 1:A:109:MET:HE1 20 0.03 (1,2797) 1:A:106:THR:HG23 1:A:109:MET:HE1 20 0.03 (1,2797) 1:A:106:THR:HG23 1:A:109:MET:HE2 20 0.03 (1,2797) 1:A:106:THR:HG23 1:A:109:MET:HE3 20 0.03 (1,2797) 1:A:106:THR:HG23 1:A:109:MET:HE3 20 0.03 (1,2791) 1:A:65:TRP:HB2 1:A:66:PHE:H 2 0.03 (1,2763) 1:A:76:LEU:HD21 1:A:163:GLU:HA 9 0.03 (1,2763) 1:A:76:LEU:HD22 1:A:163:GLU:HA 9 0.03 (1,2763) 1:A:76:LEU:HD22 1:A:163:GLU:HA 9 0.03 (1,2763) 1:A:78:TYR:HB3 1:A:154:ILE:HD11 6 0.03 (1,2732) 1:A:78:TYR:HB3 1:A:154:ILE:HD11 6 0.03 (1,2732) 1:A:78:TYR:HB3 1:A:154:ILE:HD12 6 0.03 (1,2732) 1:A:78:TYR:HB3 1:A:154:ILE:HD13 6 0.03 (1,2732) 1:A:78:TYR:HB3 1:A:154:ILE:HD11 9 0.03 (1,2732) 1:A:78:TYR:HB3 1:A:154:ILE:HD11 9 0.03 (1,2732) 1:A:78:TYR:HB3 1:A:154:ILE:HD11 1 0 0.03 (1,2732) 1:A:78:TYR:HB3 1:A:154:ILE:HD11 1 0 0.03 (1,2732) 1:A:78:TYR:HB3 1:A:154:ILE:HD12 1 0.03 (1,2712) 1:A:106:THR:HB 1:A:153:LEU:HD11 1 12 0.03 (1,2712) 1:A:106:THR:HB 1:A:153:LEU:HD11 1 12 0.03 (1,2712) 1:A:106:THR:HB 1:A:153:LEU:HD11 1 12 0.03 (1,2600) 1:A:129:VAL:HG11 1:A:130:PRO:HA 20 0.03 (1,2600) 1:A:129:VAL:HG11 1:A:130:PRO:HA 20 0.03 (1,2554) 1:A:102:LEU:HD21 1:A:105:LVS:HE2 8 0.03 (1,2554) 1:A:102:LEU:HD22 1:A:105:LVS:HE2 8 0.03 (1,2554) 1:A:102:LEU:HD21 1:A:105:LVS:HE2 8 0.03 (1,2554) 1:A:102:LEU:HD22 1:A:105:LVS:HE3 8 0.03 (1,2554) 1:A:102:LEU:HD23 1:A:105:LVS:HE3 8 0.03 (1,2554) 1:A:102:LEU:HD23 1:A:105:LVS:HE	(1,2797)	1:A:106:THR:HG21	1:A:109:MET:HE3	20	0.03
(1,2797) 1:A:106:THR:HG22 1:A:109:MET:HE3 20 0.03 (1,2797) 1:A:106:THR:HG23 1:A:109:MET:HE1 20 0.03 (1,2797) 1:A:106:THR:HG23 1:A:109:MET:HE2 20 0.03 (1,2797) 1:A:106:THR:HG23 1:A:109:MET:HE3 20 0.03 (1,2793) 1:A:65:TRP:HB2 1:A:163:GLU:HA 9 0.03 (1,2763) 1:A:76:LEU:HD21 1:A:163:GLU:HA 9 0.03 (1,2763) 1:A:76:LEU:HD22 1:A:163:GLU:HA 9 0.03 (1,2763) 1:A:76:LEU:HD23 1:A:163:GLU:HA 9 0.03 (1,2763) 1:A:78:TYR:HB3 1:A:163:GLU:HA 9 0.03 (1,2732) 1:A:78:TYR:HB3 1:A:154:ILE:HD11 6 0.03 (1,2732) 1:A:78:TYR:HB3 1:A:154:ILE:HD13 6 0.03 (1,2732) 1:A:78:TYR:HB3 1:A:154:ILE:HD11 9 0.03 (1,2732) 1:A:78:TYR:HB3 1:A:154:ILE:HD13 9 0.03 (1,2732) 1:A:78:TYR:HB3	(1,2797)	1:A:106:THR:HG22	1:A:109:MET:HE1	20	0.03
(1,2797) 1:A:106:THR:HG23 1:A:109:MET:HE1 20 0.03 (1,2797) 1:A:106:THR:HG23 1:A:109:MET:HE2 20 0.03 (1,2797) 1:A:106:THR:HG23 1:A:109:MET:HE3 20 0.03 (1,2793) 1:A:65:TRP:HB2 1:A:166:PHE:H 2 0.03 (1,2763) 1:A:76:LEU:HD21 1:A:163:GLU:HA 9 0.03 (1,2763) 1:A:76:LEU:HD23 1:A:163:GLU:HA 9 0.03 (1,2763) 1:A:76:LEU:HD23 1:A:163:GLU:HA 9 0.03 (1,2763) 1:A:76:EU:HD23 1:A:163:GLU:HA 9 0.03 (1,2763) 1:A:76:EU:HD23 1:A:163:GLU:HA 9 0.03 (1,2732) 1:A:78:TYR:HB3 1:A:154:ILE:HD11 6 0.03 (1,2732) 1:A:78:TYR:HB3 1:A:154:ILE:HD13 6 0.03 (1,2732) 1:A:78:TYR:HB3 1:A:154:ILE:HD11 9 0.03 (1,2732) 1:A:78:TYR:HB3 1:A:154:ILE:HD13 9 0.03 (1,2732) 1:A:78:TYR:HB3	(1,2797)	1:A:106:THR:HG22	1:A:109:MET:HE2	20	0.03
(1,2797) 1:A:106:THR:HG23 1:A:109:MET:HE2 20 0.03 (1,2797) 1:A:106:THR:HG23 1:A:109:MET:HE3 20 0.03 (1,2763) 1:A:65:TRP:HB2 1:A:66:PHE:H 2 0.03 (1,2763) 1:A:76:LEU:HD21 1:A:163:GLU:HA 9 0.03 (1,2763) 1:A:76:LEU:HD22 1:A:163:GLU:HA 9 0.03 (1,2763) 1:A:76:LEU:HD23 1:A:154:ILE:HD11 6 0.03 (1,2732) 1:A:78:TYR:HB3 1:A:154:ILE:HD12 6 0.03 (1,2732) 1:A:78:TYR:HB3 1:A:154:ILE:HD13 6 0.03 (1,2732) 1:A:78:TYR:HB3 1:A:154:ILE:HD11 9 0.03 (1,2732) 1:A:78:TYR:HB3 1:A:154:ILE:HD11 9 0.03 (1,2732) 1:A:78:TYR:HB3 1:A:154:ILE:HD12 9 0.03 (1,2732) 1:A:78:TYR:HB3 1:A:154:ILE:HD11 9 0.03 (1,2732) 1:A:166:THR:HB 1:A:153:LEU:HD12 9 0.03 (1,2712) 1:A:106:THR:HB	(1,2797)	1:A:106:THR:HG22	1:A:109:MET:HE3	20	0.03
(1,2797) 1:A:106:THR:HG23 1:A:109:MET:HE3 20 0.03 (1,279) 1:A:65:TRP:HB2 1:A:66:PHE:H 2 0.03 (1,2763) 1:A:76:LEU:HD21 1:A:163:GLU:HA 9 0.03 (1,2763) 1:A:76:LEU:HD22 1:A:163:GLU:HA 9 0.03 (1,2763) 1:A:76:LEU:HD23 1:A:163:GLU:HA 9 0.03 (1,2763) 1:A:78:TYR:HB3 1:A:154:ILE:HD11 6 0.03 (1,2732) 1:A:78:TYR:HB3 1:A:154:ILE:HD12 6 0.03 (1,2732) 1:A:78:TYR:HB3 1:A:154:ILE:HD13 6 0.03 (1,2732) 1:A:78:TYR:HB3 1:A:154:ILE:HD12 9 0.03 (1,2732) 1:A:78:TYR:HB3 1:A:154:ILE:HD13 9 0.03 (1,2732) 1:A:78:TYR:HB3 1:A:154:ILE:HD13 9 0.03 (1,2732) 1:A:78:TYR:HB3 1:A:154:ILE:HD13 9 0.03 (1,2732) 1:A:106:THR:HB 1:A:154:ILE:HD11 12 0.03 (1,2712) 1:A:106:THR:HB	(1,2797)	1:A:106:THR:HG23	1:A:109:MET:HE1	20	0.03
(1,279) 1:A:65:TRP:HB2 1:A:66:PHE:H 2 0.03 (1,2763) 1:A:76:LEU:HD21 1:A:163:GLU:HA 9 0.03 (1,2763) 1:A:76:LEU:HD22 1:A:163:GLU:HA 9 0.03 (1,2763) 1:A:76:LEU:HD23 1:A:163:GLU:HA 9 0.03 (1,2732) 1:A:78:TYR:HB3 1:A:154:ILE:HD11 6 0.03 (1,2732) 1:A:78:TYR:HB3 1:A:154:ILE:HD12 6 0.03 (1,2732) 1:A:78:TYR:HB3 1:A:154:ILE:HD13 6 0.03 (1,2732) 1:A:78:TYR:HB3 1:A:154:ILE:HD11 9 0.03 (1,2732) 1:A:78:TYR:HB3 1:A:154:ILE:HD11 9 0.03 (1,2732) 1:A:78:TYR:HB3 1:A:154:ILE:HD13 9 0.03 (1,2732) 1:A:78:TYR:HB3 1:A:153:LEU:HD13 9 0.03 (1,2712) 1:A:106:THR:HB 1:A:153:LEU:HD13 9 0.03 (1,2712) 1:A:106:THR:HB 1:A:153:LEU:HD13 12 0.03 (1,2702) 1:A:106:THR:HB	(1,2797)	1:A:106:THR:HG23	1:A:109:MET:HE2	20	0.03
(1,2763) 1:A:76:LEU:HD21 1:A:163:GLU:HA 9 0.03 (1,2763) 1:A:76:LEU:HD22 1:A:163:GLU:HA 9 0.03 (1,2763) 1:A:76:LEU:HD23 1:A:163:GLU:HA 9 0.03 (1,2732) 1:A:78:TYR:HB3 1:A:154:ILE:HD11 6 0.03 (1,2732) 1:A:78:TYR:HB3 1:A:154:ILE:HD12 6 0.03 (1,2732) 1:A:78:TYR:HB3 1:A:154:ILE:HD13 6 0.03 (1,2732) 1:A:78:TYR:HB3 1:A:154:ILE:HD12 9 0.03 (1,2732) 1:A:78:TYR:HB3 1:A:154:ILE:HD13 9 0.03 (1,2712) 1:A:106:THR:HB 1:A:153:LEU:HD11 12 0.03 (1,2712) 1:A:106:THR:HB 1:A:153:LEU:HD13 12 0.03 (1,2600) 1:A:129:VAL:HG11	(1,2797)	1:A:106:THR:HG23	1:A:109:MET:HE3	20	0.03
(1,2763) 1:A:76:LEU:HD22 1:A:163:GLU:HA 9 0.03 (1,2763) 1:A:76:LEU:HD23 1:A:163:GLU:HA 9 0.03 (1,2732) 1:A:78:TYR:HB3 1:A:154:ILE:HD11 6 0.03 (1,2732) 1:A:78:TYR:HB3 1:A:154:ILE:HD12 6 0.03 (1,2732) 1:A:78:TYR:HB3 1:A:154:ILE:HD13 6 0.03 (1,2732) 1:A:78:TYR:HB3 1:A:154:ILE:HD11 9 0.03 (1,2732) 1:A:78:TYR:HB3 1:A:154:ILE:HD12 9 0.03 (1,2732) 1:A:78:TYR:HB3 1:A:154:ILE:HD13 9 0.03 (1,2732) 1:A:78:TYR:HB3 1:A:154:ILE:HD13 9 0.03 (1,2732) 1:A:106:THR:HB 1:A:153:LEU:HD11 12 0.03 (1,2712) 1:A:106:THR:HB 1:A:153:LEU:HD12 12 0.03 (1,2712) 1:A:106:THR:HB 1:A:153:LEU:HD12 12 0.03 (1,2600) 1:A:129:VAL:HG11 1:A:130:PRO:HA 20 0.03 (1,2600) 1:A:129:VAL:HG13 <td>(1,279)</td> <td>1:A:65:TRP:HB2</td> <td>1:A:66:PHE:H</td> <td>2</td> <td>0.03</td>	(1,279)	1:A:65:TRP:HB2	1:A:66:PHE:H	2	0.03
(1,2763) 1:A:76:LEU:HD23 1:A:163:GLU:HA 9 0.03 (1,2732) 1:A:78:TYR:HB3 1:A:154:ILE:HD11 6 0.03 (1,2732) 1:A:78:TYR:HB3 1:A:154:ILE:HD12 6 0.03 (1,2732) 1:A:78:TYR:HB3 1:A:154:ILE:HD13 6 0.03 (1,2732) 1:A:78:TYR:HB3 1:A:154:ILE:HD12 9 0.03 (1,2732) 1:A:78:TYR:HB3 1:A:154:ILE:HD12 9 0.03 (1,2732) 1:A:78:TYR:HB3 1:A:154:ILE:HD13 9 0.03 (1,2732) 1:A:106:THR:HB 1:A:153:LEU:HD11 12 0.03 (1,2712) 1:A:106:THR:HB 1:A:153:LEU:HD12 12 0.03 (1,2712) 1:A:106:THR:HB 1:A:153:LEU:HD12 12 0.03 (1,2712) 1:A:106:THR:HB 1:A:153:LEU:HD12 12 0.03 (1,2712) 1:A:106:THR:HB 1:A:153:LEU:HD13 12 0.03 (1,2600) 1:A:129:VAL:HG11 1:A:130:PRO:HA 20 0.03 (1,2600) 1:A:1402:LEU:HD2	(1,2763)	1:A:76:LEU:HD21	1:A:163:GLU:HA	9	0.03
(1,2732) 1:A:78:TYR:HB3 1:A:154:ILE:HD11 6 0.03 (1,2732) 1:A:78:TYR:HB3 1:A:154:ILE:HD12 6 0.03 (1,2732) 1:A:78:TYR:HB3 1:A:154:ILE:HD13 6 0.03 (1,2732) 1:A:78:TYR:HB3 1:A:154:ILE:HD11 9 0.03 (1,2732) 1:A:78:TYR:HB3 1:A:154:ILE:HD12 9 0.03 (1,2732) 1:A:78:TYR:HB3 1:A:154:ILE:HD13 9 0.03 (1,2712) 1:A:106:THR:HB 1:A:153:LEU:HD11 12 0.03 (1,2712) 1:A:106:THR:HB 1:A:153:LEU:HD12 12 0.03 (1,2712) 1:A:106:THR:HB 1:A:130:PRO:HA 20 0.03 (1,2600) 1:A:129:VAL:HG11 1:A:130:PRO:HA 20 0.03 (1,2600) 1:A:129:VAL:HG13 1:A:105:LYS:HE2 8 0.03 (1,2554) 1:A:102:LEU:HD21 1:A:105:LYS:HE2 8 0.03 (1,2554) 1:A:102:LEU:HD22 1:A:105:LYS:HE3 8 0.03 (1,2554) 1:A:102:LEU:HD23	(1,2763)	1:A:76:LEU:HD22	1:A:163:GLU:HA	9	0.03
(1,2732) 1:A:78:TYR:HB3 1:A:154:ILE:HD12 6 0.03 (1,2732) 1:A:78:TYR:HB3 1:A:154:ILE:HD13 6 0.03 (1,2732) 1:A:78:TYR:HB3 1:A:154:ILE:HD11 9 0.03 (1,2732) 1:A:78:TYR:HB3 1:A:154:ILE:HD12 9 0.03 (1,2732) 1:A:78:TYR:HB3 1:A:154:ILE:HD13 9 0.03 (1,2712) 1:A:106:THR:HB 1:A:153:LEU:HD11 12 0.03 (1,2712) 1:A:106:THR:HB 1:A:153:LEU:HD12 12 0.03 (1,2712) 1:A:106:THR:HB 1:A:153:LEU:HD12 12 0.03 (1,2702) 1:A:106:THR:HB 1:A:153:LEU:HD12 12 0.03 (1,2712) 1:A:106:THR:HB 1:A:153:LEU:HD13 12 0.03 (1,2600) 1:A:129:VAL:HG11 1:A:130:PRO:HA 20 0.03 (1,2600) 1:A:129:VAL:HG13 1:A:105:LYS:HE2 8 0.03 (1,2554) 1:A:102:LEU:HD21 1:A:105:LYS:HE3 8 0.03 (1,2554) 1:A:102:LEU:H	(1,2763)	1:A:76:LEU:HD23	1:A:163:GLU:HA	9	0.03
(1,2732) 1:A:78:TYR:HB3 1:A:154:ILE:HD13 6 0.03 (1,2732) 1:A:78:TYR:HB3 1:A:154:ILE:HD11 9 0.03 (1,2732) 1:A:78:TYR:HB3 1:A:154:ILE:HD12 9 0.03 (1,2732) 1:A:78:TYR:HB3 1:A:154:ILE:HD13 9 0.03 (1,2712) 1:A:106:THR:HB 1:A:153:LEU:HD11 12 0.03 (1,2712) 1:A:106:THR:HB 1:A:153:LEU:HD12 12 0.03 (1,2712) 1:A:106:THR:HB 1:A:153:LEU:HD13 12 0.03 (1,2712) 1:A:106:THR:HB 1:A:153:LEU:HD13 12 0.03 (1,2600) 1:A:129:VAL:HG11 1:A:130:PRO:HA 20 0.03 (1,2600) 1:A:129:VAL:HG12 1:A:130:PRO:HA 20 0.03 (1,2600) 1:A:102:LEU:HD21 1:A:105:LYS:HE2 8 0.03 (1,2554) 1:A:102:LEU:HD21 1:A:105:LYS:HE2 8 0.03 (1,2554) 1:A:102:LEU:HD22 1:A:105:LYS:HE3 8 0.03 (1,2554) 1:A:102:LEU:	(1,2732)	1:A:78:TYR:HB3	1:A:154:ILE:HD11	6	0.03
(1,2732) 1:A:78:TYR:HB3 1:A:154:ILE:HD11 9 0.03 (1,2732) 1:A:78:TYR:HB3 1:A:154:ILE:HD12 9 0.03 (1,2732) 1:A:78:TYR:HB3 1:A:154:ILE:HD13 9 0.03 (1,2712) 1:A:106:THR:HB 1:A:153:LEU:HD11 12 0.03 (1,2712) 1:A:106:THR:HB 1:A:153:LEU:HD12 12 0.03 (1,2712) 1:A:106:THR:HB 1:A:153:LEU:HD13 12 0.03 (1,2600) 1:A:129:VAL:HG11 1:A:130:PRO:HA 20 0.03 (1,2600) 1:A:129:VAL:HG12 1:A:130:PRO:HA 20 0.03 (1,2600) 1:A:129:VAL:HG13 1:A:130:PRO:HA 20 0.03 (1,2504) 1:A:102:LEU:HD21 1:A:105:LYS:HE2 8 0.03 (1,2554) 1:A:102:LEU:HD21 1:A:105:LYS:HE3 8 0.03 (1,2554) 1:A:102:LEU:HD22 1:A:105:LYS:HE3 8 0.03 (1,2554) 1:A:102:LEU:HD23 1:A:105:LYS:HE3 8 0.03 (1,2554) 1:A:153:EEU	(1,2732)	1:A:78:TYR:HB3	1:A:154:ILE:HD12	6	0.03
(1,2732) 1:A:78:TYR:HB3 1:A:154:ILE:HD12 9 0.03 (1,2732) 1:A:78:TYR:HB3 1:A:154:ILE:HD13 9 0.03 (1,2712) 1:A:106:THR:HB 1:A:153:LEU:HD11 12 0.03 (1,2712) 1:A:106:THR:HB 1:A:153:LEU:HD12 12 0.03 (1,2712) 1:A:106:THR:HB 1:A:153:LEU:HD13 12 0.03 (1,2600) 1:A:129:VAL:HG11 1:A:130:PRO:HA 20 0.03 (1,2600) 1:A:129:VAL:HG12 1:A:130:PRO:HA 20 0.03 (1,2600) 1:A:129:VAL:HG13 1:A:105:LYS:HE2 8 0.03 (1,2600) 1:A:129:VAL:HG13 1:A:105:LYS:HE2 8 0.03 (1,2554) 1:A:102:LEU:HD21 1:A:105:LYS:HE2 8 0.03 (1,2554) 1:A:102:LEU:HD22 1:A:105:LYS:HE3 8 0.03 (1,2554) 1:A:102:LEU:HD22 1:A:105:LYS:HE3 8 0.03 (1,2554) 1:A:102:LEU:HD23 1:A:105:LYS:HE3 8 0.03 (1,2554) 1:A:16:HD2	(1,2732)	1:A:78:TYR:HB3	1:A:154:ILE:HD13	6	0.03
(1,2732) 1:A:78:TYR:HB3 1:A:154:ILE:HD13 9 0.03 (1,2712) 1:A:106:THR:HB 1:A:153:LEU:HD11 12 0.03 (1,2712) 1:A:106:THR:HB 1:A:153:LEU:HD12 12 0.03 (1,2712) 1:A:106:THR:HB 1:A:153:LEU:HD13 12 0.03 (1,2600) 1:A:129:VAL:HG11 1:A:130:PRO:HA 20 0.03 (1,2600) 1:A:129:VAL:HG12 1:A:130:PRO:HA 20 0.03 (1,2600) 1:A:129:VAL:HG13 1:A:130:PRO:HA 20 0.03 (1,2600) 1:A:102:LEU:HD12 1:A:105:LYS:HE2 8 0.03 (1,2554) 1:A:102:LEU:HD21 1:A:105:LYS:HE3 8 0.03 (1,2554) 1:A:102:LEU:HD22 1:A:105:LYS:HE3 8 0.03 (1,2554) 1:A:102:LEU:HD23 1:A:105:LYS:HE3 8 0.03 (1,2554) 1:A:102:LEU:HD23 1:A:105:LYS:HE3 8 0.03 (1,2554) 1:A:102:LEU:HD23 1:A:105:LYS:HE3 8 0.03 (1,2554) 1:A:194:A	(1,2732)	1:A:78:TYR:HB3	1:A:154:ILE:HD11	9	0.03
(1,2712) 1:A:106:THR:HB 1:A:153:LEU:HD11 12 0.03 (1,2712) 1:A:106:THR:HB 1:A:153:LEU:HD12 12 0.03 (1,2712) 1:A:106:THR:HB 1:A:153:LEU:HD13 12 0.03 (1,2600) 1:A:129:VAL:HG11 1:A:130:PRO:HA 20 0.03 (1,2600) 1:A:129:VAL:HG12 1:A:130:PRO:HA 20 0.03 (1,2600) 1:A:129:VAL:HG13 1:A:130:PRO:HA 20 0.03 (1,2600) 1:A:102:LEU:HD21 1:A:105:LYS:HE2 8 0.03 (1,2554) 1:A:102:LEU:HD21 1:A:105:LYS:HE3 8 0.03 (1,2554) 1:A:102:LEU:HD22 1:A:105:LYS:HE2 8 0.03 (1,2554) 1:A:102:LEU:HD22 1:A:105:LYS:HE3 8 0.03 (1,2554) 1:A:102:LEU:HD23 1:A:105:LYS:HE3 8 0.03 (1,2554) 1:A:102:LEU:HD23 1:A:105:LYS:HE3 8 0.03 (1,2554) 1:A:102:LEU:HD23 1:A:105:LYS:HE3 8 0.03 (1,2554) 1:A:164:	(1,2732)	1:A:78:TYR:HB3	1:A:154:ILE:HD12	9	0.03
(1,2712) 1:A:106:THR:HB 1:A:153:LEU:HD12 12 0.03 (1,2712) 1:A:106:THR:HB 1:A:153:LEU:HD13 12 0.03 (1,2600) 1:A:129:VAL:HG11 1:A:130:PRO:HA 20 0.03 (1,2600) 1:A:129:VAL:HG12 1:A:130:PRO:HA 20 0.03 (1,2600) 1:A:129:VAL:HG13 1:A:130:PRO:HA 20 0.03 (1,2600) 1:A:102:LEU:HD21 1:A:105:LYS:HE2 8 0.03 (1,2554) 1:A:102:LEU:HD21 1:A:105:LYS:HE3 8 0.03 (1,2554) 1:A:102:LEU:HD22 1:A:105:LYS:HE3 8 0.03 (1,2554) 1:A:102:LEU:HD22 1:A:105:LYS:HE3 8 0.03 (1,2554) 1:A:102:LEU:HD23 1:A:105:LYS:HE2 8 0.03 (1,2554) 1:A:102:LEU:HD23 1:A:105:LYS:HE3 8 0.03 (1,2554) 1:A:194:ALA:HB1 1:A:159:ASN:H 20 0.03 (1,2505) 1:A:94:ALA:HB1 1:A:137:LEU:HB3 14 0.03 (1,2505) 1:A:94:ALA:	(1,2732)	1:A:78:TYR:HB3	1:A:154:ILE:HD13	9	0.03
(1,2712) 1:A:106:THR:HB 1:A:153:LEU:HD13 12 0.03 (1,2600) 1:A:129:VAL:HG11 1:A:130:PRO:HA 20 0.03 (1,2600) 1:A:129:VAL:HG12 1:A:130:PRO:HA 20 0.03 (1,2600) 1:A:129:VAL:HG13 1:A:130:PRO:HA 20 0.03 (1,2600) 1:A:102:LEU:HD21 1:A:105:LYS:HE2 8 0.03 (1,2554) 1:A:102:LEU:HD21 1:A:105:LYS:HE3 8 0.03 (1,2554) 1:A:102:LEU:HD22 1:A:105:LYS:HE3 8 0.03 (1,2554) 1:A:102:LEU:HD22 1:A:105:LYS:HE3 8 0.03 (1,2554) 1:A:102:LEU:HD23 1:A:105:LYS:HE3 8 0.03 (1,2554) 1:A:102:LEU:HD23 1:A:105:LYS:HE3 8 0.03 (1,2554) 1:A:102:LEU:HD23 1:A:105:LYS:HE3 8 0.03 (1,2505) 1:A:94:ALA:HB1 1:A:137:LEU:HB3 14 0.03 (1,2505) 1:A:94:ALA:HB2 1:A:137:LEU:HB3 14 0.03 (1,2444) 1:A:76:LEU	(1,2712)	1:A:106:THR:HB	1:A:153:LEU:HD11	12	0.03
(1,2600) 1:A:129:VAL:HG11 1:A:130:PRO:HA 20 0.03 (1,2600) 1:A:129:VAL:HG12 1:A:130:PRO:HA 20 0.03 (1,2600) 1:A:129:VAL:HG13 1:A:130:PRO:HA 20 0.03 (1,2554) 1:A:102:LEU:HD21 1:A:105:LYS:HE2 8 0.03 (1,2554) 1:A:102:LEU:HD21 1:A:105:LYS:HE3 8 0.03 (1,2554) 1:A:102:LEU:HD22 1:A:105:LYS:HE2 8 0.03 (1,2554) 1:A:102:LEU:HD22 1:A:105:LYS:HE3 8 0.03 (1,2554) 1:A:102:LEU:HD23 1:A:105:LYS:HE2 8 0.03 (1,2554) 1:A:102:LEU:HD23 1:A:105:LYS:HE3 8 0.03 (1,254) 1:A:164:LYS:HE3 8 0.03 (1,2554) 1:A:58:SER:HB2 1:A:59:ASN:H 20 0.03 (1,2505) 1:A:94:ALA:HB1 1:A:137:LEU:HB3 14 0.03 (1,2505) 1:A:94:ALA:HB3 1:A:137:LEU:HB3 14 0.03 (1,2444) 1:A:76:LEU:HD21 1:A:164:LYS:HA </td <td>(1,2712)</td> <td>1:A:106:THR:HB</td> <td>1:A:153:LEU:HD12</td> <td>12</td> <td>0.03</td>	(1,2712)	1:A:106:THR:HB	1:A:153:LEU:HD12	12	0.03
(1,2600) 1:A:129:VAL:HG12 1:A:130:PRO:HA 20 0.03 (1,2600) 1:A:129:VAL:HG13 1:A:130:PRO:HA 20 0.03 (1,2554) 1:A:102:LEU:HD21 1:A:105:LYS:HE2 8 0.03 (1,2554) 1:A:102:LEU:HD21 1:A:105:LYS:HE3 8 0.03 (1,2554) 1:A:102:LEU:HD22 1:A:105:LYS:HE2 8 0.03 (1,2554) 1:A:102:LEU:HD22 1:A:105:LYS:HE3 8 0.03 (1,2554) 1:A:102:LEU:HD23 1:A:105:LYS:HE2 8 0.03 (1,2554) 1:A:102:LEU:HD23 1:A:105:LYS:HE3 8 0.03 (1,2554) 1:A:102:LEU:HD23 1:A:105:LYS:HE3 8 0.03 (1,252) 1:A:58:SER:HB2 1:A:59:ASN:H 20 0.03 (1,2505) 1:A:94:ALA:HB1 1:A:137:LEU:HB3 14 0.03 (1,2505) 1:A:94:ALA:HB3 1:A:164:LYS:HA 20 0.03 (1,2444) 1:A:76:LEU:HD21 1:A:164:LYS:HA 20 0.03 (1,2444) 1:A:76:LEU:HD23 </td <td>(1,2712)</td> <td>1:A:106:THR:HB</td> <td>1:A:153:LEU:HD13</td> <td>12</td> <td>0.03</td>	(1,2712)	1:A:106:THR:HB	1:A:153:LEU:HD13	12	0.03
(1,2600) 1:A:129:VAL:HG13 1:A:130:PRO:HA 20 0.03 (1,2554) 1:A:102:LEU:HD21 1:A:105:LYS:HE2 8 0.03 (1,2554) 1:A:102:LEU:HD21 1:A:105:LYS:HE3 8 0.03 (1,2554) 1:A:102:LEU:HD22 1:A:105:LYS:HE2 8 0.03 (1,2554) 1:A:102:LEU:HD22 1:A:105:LYS:HE3 8 0.03 (1,2554) 1:A:102:LEU:HD23 1:A:105:LYS:HE2 8 0.03 (1,2554) 1:A:102:LEU:HD23 1:A:105:LYS:HE3 8 0.03 (1,2554) 1:A:102:LEU:HD23 1:A:105:LYS:HE3 8 0.03 (1,2554) 1:A:102:LEU:HD23 1:A:105:LYS:HE3 8 0.03 (1,2505) 1:A:58:SER:HB2 1:A:59:ASN:H 20 0.03 (1,2505) 1:A:94:ALA:HB1 1:A:137:LEU:HB3 14 0.03 (1,2505) 1:A:94:ALA:HB3 1:A:164:LYS:HA 20 0.03 (1,2444) 1:A:76:LEU:HD22 1:A:164:LYS:HA 20 0.03 (1,2444) 1:A:76:LEU:HD23<	(1,2600)	1:A:129:VAL:HG11	1:A:130:PRO:HA	20	0.03
(1,2554) 1:A:102:LEU:HD21 1:A:105:LYS:HE2 8 0.03 (1,2554) 1:A:102:LEU:HD21 1:A:105:LYS:HE3 8 0.03 (1,2554) 1:A:102:LEU:HD22 1:A:105:LYS:HE2 8 0.03 (1,2554) 1:A:102:LEU:HD22 1:A:105:LYS:HE3 8 0.03 (1,2554) 1:A:102:LEU:HD23 1:A:105:LYS:HE2 8 0.03 (1,2554) 1:A:102:LEU:HD23 1:A:105:LYS:HE3 8 0.03 (1,2505) 1:A:58:SER:HB2 1:A:159:ASN:H 20 0.03 (1,2505) 1:A:94:ALA:HB3 1:A:137:LEU:HB3 14 0.03 (1,2505) 1:A:94:ALA:HB3 1:A:164:LYS:HA 20 0.03 (1,2444) 1:A:76:LEU:HD21 1:A:164:LYS:HA 20 0.03 (1,2444) 1:A:76:LEU:HD23	(1,2600)	1:A:129:VAL:HG12	1:A:130:PRO:HA	20	0.03
(1,2554) 1:A:102:LEU:HD21 1:A:105:LYS:HE3 8 0.03 (1,2554) 1:A:102:LEU:HD22 1:A:105:LYS:HE2 8 0.03 (1,2554) 1:A:102:LEU:HD22 1:A:105:LYS:HE3 8 0.03 (1,2554) 1:A:102:LEU:HD23 1:A:105:LYS:HE2 8 0.03 (1,2554) 1:A:102:LEU:HD23 1:A:105:LYS:HE3 8 0.03 (1,2554) 1:A:158:SER:HB2 1:A:159:ASN:H 20 0.03 (1,2505) 1:A:94:ALA:HB1 1:A:137:LEU:HB3 14 0.03 (1,2505) 1:A:94:ALA:HB3 1:A:137:LEU:HB3 14 0.03 (1,2444) 1:A:76:LEU:HD21 1:A:164:LYS:HA 20 0.03 (1,2444) 1:A:76:LEU:HD23 1:A:164:LYS:HA 20 0.03 (1,2444) 1:A:76:LEU:HD2	(1,2600)	1:A:129:VAL:HG13	1:A:130:PRO:HA	20	0.03
(1,2554) 1:A:102:LEU:HD22 1:A:105:LYS:HE2 8 0.03 (1,2554) 1:A:102:LEU:HD22 1:A:105:LYS:HE3 8 0.03 (1,2554) 1:A:102:LEU:HD23 1:A:105:LYS:HE2 8 0.03 (1,2554) 1:A:102:LEU:HD23 1:A:105:LYS:HE3 8 0.03 (1,2554) 1:A:58:SER:HB2 1:A:59:ASN:H 20 0.03 (1,252) 1:A:58:SER:HB2 1:A:59:ASN:H 20 0.03 (1,2505) 1:A:94:ALA:HB1 1:A:137:LEU:HB3 14 0.03 (1,2505) 1:A:94:ALA:HB2 1:A:137:LEU:HB3 14 0.03 (1,2505) 1:A:94:ALA:HB3 1:A:164:LYS:HA 20 0.03 (1,2444) 1:A:76:LEU:HD21 1:A:164:LYS:HA 20 0.03 (1,2444) 1:A:76:LEU:HD23 1:A:164:LYS:HA 20 0.03 (1,2444) 1:A:76:LEU:HD23 1:A:164:LYS:HA 20 0.03	(1,2554)	1:A:102:LEU:HD21	1:A:105:LYS:HE2	8	0.03
(1,2554) 1:A:102:LEU:HD22 1:A:105:LYS:HE3 8 0.03 (1,2554) 1:A:102:LEU:HD23 1:A:105:LYS:HE2 8 0.03 (1,2554) 1:A:102:LEU:HD23 1:A:105:LYS:HE3 8 0.03 (1,2554) 1:A:58:SER:HB2 1:A:59:ASN:H 20 0.03 (1,252) 1:A:94:ALA:HB2 1:A:137:LEU:HB3 14 0.03 (1,2505) 1:A:94:ALA:HB1 1:A:137:LEU:HB3 14 0.03 (1,2505) 1:A:94:ALA:HB2 1:A:137:LEU:HB3 14 0.03 (1,2505) 1:A:94:ALA:HB3 1:A:137:LEU:HB3 14 0.03 (1,2444) 1:A:76:LEU:HD21 1:A:164:LYS:HA 20 0.03 (1,2444) 1:A:76:LEU:HD22 1:A:164:LYS:HA 20 0.03 (1,2444) 1:A:76:LEU:HD23 1:A:164:LYS:HA 20 0.03	(1,2554)	1:A:102:LEU:HD21	1:A:105:LYS:HE3	8	0.03
(1,2554) 1:A:102:LEU:HD23 1:A:105:LYS:HE2 8 0.03 (1,2554) 1:A:102:LEU:HD23 1:A:105:LYS:HE3 8 0.03 (1,252) 1:A:58:SER:HB2 1:A:59:ASN:H 20 0.03 (1,2505) 1:A:94:ALA:HB1 1:A:137:LEU:HB3 14 0.03 (1,2505) 1:A:94:ALA:HB2 1:A:137:LEU:HB3 14 0.03 (1,2505) 1:A:94:ALA:HB3 1:A:137:LEU:HB3 14 0.03 (1,2505) 1:A:94:ALA:HB3 1:A:137:LEU:HB3 14 0.03 (1,2444) 1:A:76:LEU:HD21 1:A:164:LYS:HA 20 0.03 (1,2444) 1:A:76:LEU:HD22 1:A:164:LYS:HA 20 0.03 (1,2444) 1:A:76:LEU:HD23 1:A:164:LYS:HA 20 0.03	(1,2554)	1:A:102:LEU:HD22	1:A:105:LYS:HE2	8	0.03
(1,2554) 1:A:102:LEU:HD23 1:A:105:LYS:HE3 8 0.03 (1,252) 1:A:58:SER:HB2 1:A:59:ASN:H 20 0.03 (1,2505) 1:A:94:ALA:HB1 1:A:137:LEU:HB3 14 0.03 (1,2505) 1:A:94:ALA:HB2 1:A:137:LEU:HB3 14 0.03 (1,2505) 1:A:94:ALA:HB3 1:A:137:LEU:HB3 14 0.03 (1,2505) 1:A:76:LEU:HD21 1:A:164:LYS:HA 20 0.03 (1,2444) 1:A:76:LEU:HD21 1:A:164:LYS:HA 20 0.03 (1,2444) 1:A:76:LEU:HD23 1:A:164:LYS:HA 20 0.03 (1,2444) 1:A:76:LEU:HD23 1:A:164:LYS:HA 20 0.03	(1,2554)	1:A:102:LEU:HD22	1:A:105:LYS:HE3	8	0.03
(1,252) 1:A:58:SER:HB2 1:A:59:ASN:H 20 0.03 (1,2505) 1:A:94:ALA:HB1 1:A:137:LEU:HB3 14 0.03 (1,2505) 1:A:94:ALA:HB2 1:A:137:LEU:HB3 14 0.03 (1,2505) 1:A:94:ALA:HB3 1:A:137:LEU:HB3 14 0.03 (1,2444) 1:A:76:LEU:HD21 1:A:164:LYS:HA 20 0.03 (1,2444) 1:A:76:LEU:HD22 1:A:164:LYS:HA 20 0.03 (1,2444) 1:A:76:LEU:HD23 1:A:164:LYS:HA 20 0.03 (1,2444) 1:A:76:LEU:HD23 1:A:164:LYS:HA 20 0.03	(1,2554)	1:A:102:LEU:HD23	1:A:105:LYS:HE2	8	0.03
(1,2505) 1:A:94:ALA:HB1 1:A:137:LEU:HB3 14 0.03 (1,2505) 1:A:94:ALA:HB2 1:A:137:LEU:HB3 14 0.03 (1,2505) 1:A:94:ALA:HB3 1:A:137:LEU:HB3 14 0.03 (1,2444) 1:A:76:LEU:HD21 1:A:164:LYS:HA 20 0.03 (1,2444) 1:A:76:LEU:HD22 1:A:164:LYS:HA 20 0.03 (1,2444) 1:A:76:LEU:HD23 1:A:164:LYS:HA 20 0.03	(1,2554)	1:A:102:LEU:HD23	1:A:105:LYS:HE3	8	0.03
(1,2505) 1:A:94:ALA:HB2 1:A:137:LEU:HB3 14 0.03 (1,2505) 1:A:94:ALA:HB3 1:A:137:LEU:HB3 14 0.03 (1,2444) 1:A:76:LEU:HD21 1:A:164:LYS:HA 20 0.03 (1,2444) 1:A:76:LEU:HD22 1:A:164:LYS:HA 20 0.03 (1,2444) 1:A:76:LEU:HD23 1:A:164:LYS:HA 20 0.03 (1,2444) 1:A:76:LEU:HD23 1:A:164:LYS:HA 20 0.03	(1,252)	1:A:58:SER:HB2	1:A:59:ASN:H	20	0.03
(1,2505) 1:A:94:ALA:HB3 1:A:137:LEU:HB3 14 0.03 (1,2444) 1:A:76:LEU:HD21 1:A:164:LYS:HA 20 0.03 (1,2444) 1:A:76:LEU:HD22 1:A:164:LYS:HA 20 0.03 (1,2444) 1:A:76:LEU:HD23 1:A:164:LYS:HA 20 0.03 (1,2444) 1:A:76:LEU:HD23 1:A:164:LYS:HA 20 0.03	(1,2505)	1:A:94:ALA:HB1	1:A:137:LEU:HB3	14	0.03
(1,2444) 1:A:76:LEU:HD21 1:A:164:LYS:HA 20 0.03 (1,2444) 1:A:76:LEU:HD22 1:A:164:LYS:HA 20 0.03 (1,2444) 1:A:76:LEU:HD23 1:A:164:LYS:HA 20 0.03	(1,2505)	1:A:94:ALA:HB2	1:A:137:LEU:HB3	14	0.03
(1,2444) 1:A:76:LEU:HD22 1:A:164:LYS:HA 20 0.03 (1,2444) 1:A:76:LEU:HD23 1:A:164:LYS:HA 20 0.03	(1,2505)	1:A:94:ALA:HB3	1:A:137:LEU:HB3	14	0.03
(1,2444) 1:A:76:LEU:HD23 1:A:164:LYS:HA 20 0.03	(1,2444)	1:A:76:LEU:HD21	1:A:164:LYS:HA	20	0.03
	(1,2444)	1:A:76:LEU:HD22	1:A:164:LYS:HA	20	0.03
(1 0 4 0 0) 1 A 70 EDD HD1 1 4 A 70 HD HD44 14 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1	(1,2444)	1:A:76:LEU:HD23	1:A:164:LYS:HA	20	0.03
(1,2429) 1:A:70:TRP:HD1 1:A:72:ILE:HD11 14 0.03	(1,2429)	1:A:70:TRP:HD1	1:A:72:ILE:HD11	14	0.03
(1,2429) 1:A:70:TRP:HD1 1:A:72:ILE:HD12 14 0.03	(1,2429)	1:A:70:TRP:HD1	1:A:72:ILE:HD12	14	0.03
(1,2429) 1:A:70:TRP:HD1 1:A:72:ILE:HD13 14 0.03	(1,2429)	1:A:70:TRP:HD1	1:A:72:ILE:HD13	14	0.03
(1,2409) 1:A:32:LEU:HD11 1:A:61:GLU:HA 9 0.03	(1,2409)	1:A:32:LEU:HD11	1:A:61:GLU:HA	9	0.03



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,2409)	1:A:32:LEU:HD12	1:A:61:GLU:HA	9	0.03
(1,2409)	1:A:32:LEU:HD13	1:A:61:GLU:HA	9	0.03
(1,2387)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:47:LYS:HE2	5	0.03
(1,2387)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:47:LYS:HE3	5	0.03
(1,2387)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:47:LYS:HE2	5	0.03
(1,2387)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:47:LYS:HE3	5	0.03
(1,2387)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:47:LYS:HE2	5	0.03
(1,2387)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:47:LYS:HE3	5	0.03
(1,2386)	1:A:40:ILE:HG21	1:A:44:GLU:HG2	9	0.03
(1,2386)	1:A:40:ILE:HG22	1:A:44:GLU:HG2	9	0.03
(1,2386)	1:A:40:ILE:HG23	1:A:44:GLU:HG2	9	0.03
(1,2386)	1:A:40:ILE:HG21	1:A:44:GLU:HG2	17	0.03
(1,2386)	1:A:40:ILE:HG22	1:A:44:GLU:HG2	17	0.03
(1,2386)	1:A:40:ILE:HG23	1:A:44:GLU:HG2	17	0.03
(1,2321)	1:A:23:ARG:HD2	1:A:88:ILE:HG21	6	0.03
(1,2321)	1:A:23:ARG:HD2	1:A:88:ILE:HG22	6	0.03
(1,2321)	1:A:23:ARG:HD2	1:A:88:ILE:HG23	6	0.03
(1,2321)	1:A:23:ARG:HD3	1:A:88:ILE:HG21	6	0.03
(1,2321)	1:A:23:ARG:HD3	1:A:88:ILE:HG22	6	0.03
(1,2321)	1:A:23:ARG:HD3	1:A:88:ILE:HG23	6	0.03
(1,2297)	1:A:16:LEU:HD21	1:A:35:GLU:HA	17	0.03
(1,2297)	1:A:16:LEU:HD22	1:A:35:GLU:HA	17	0.03
(1,2297)	1:A:16:LEU:HD23	1:A:35:GLU:HA	17	0.03
(1,2058)	1:A:64:ARG:HD3	1:A:66:PHE:HE1	7	0.03
(1,2040)	1:A:53:TRP:HH2	1:A:138:MET:HA	10	0.03
(1,2040)	1:A:53:TRP:HH2	1:A:138:MET:HA	11	0.03
(1,2040)	1:A:53:TRP:HH2	1:A:138:MET:HA	20	0.03
(1,2019)	1:A:22:PRO:HB2	1:A:28:TRP:HZ2	3	0.03
(1,1991)	1:A:84:PHE:HB3	1:A:97:ILE:HA	2	0.03
(1,1991)	1:A:84:PHE:HB3	1:A:97:ILE:HA	5	0.03
(1,1991)	1:A:84:PHE:HB3	1:A:97:ILE:HA	8	0.03
(1,1991)	1:A:84:PHE:HB3	1:A:97:ILE:HA	14	0.03
(1,1991)	1:A:84:PHE:HB3	1:A:97:ILE:HA	18	0.03
(1,197)	1:A:45:ASN:H	1:A:45:ASN:HB3	4	0.03
(1,197)	1:A:45:ASN:H	1:A:45:ASN:HB3	5	0.03
(1,197)	1:A:45:ASN:H	1:A:45:ASN:HB3	6	0.03
(1,197)	1:A:45:ASN:H	1:A:45:ASN:HB3	16	0.03
(1,1953)	1:A:124:LEU:HA	1:A:127:ARG:HG3	14	0.03
(1,1953)	1:A:124:LEU:HA	1:A:127:ARG:HG3	19	0.03
(1,1949)	1:A:125:TRP:HH2	1:A:137:LEU:HA	11	0.03
(1,1949)	1:A:125:TRP:HH2	1:A:137:LEU:HA	16	0.03
(1,1939)	1:A:10:VAL:HA	1:A:13:ILE:HG13	7	0.03



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1938)	1:A:154:ILE:HA	1:A:159:ILE:HB	10	0.03
(1,1935)	1:A:150:ILE:HB	1:A:151:PRO:HD2	3	0.03
(1,1935)	1:A:150:ILE:HB	1:A:151:PRO:HD3	3	0.03
(1,1935)	1:A:150:ILE:HB	1:A:151:PRO:HD2	5	0.03
(1,1935)	1:A:150:ILE:HB	1:A:151:PRO:HD3	5	0.03
(1,1906)	1:A:122:LYS:HB2	1:A:123:PRO:HD3	7	0.03
(1,1905)	1:A:122:LYS:HB3	1:A:123:PRO:HD2	8	0.03
(1,1905)	1:A:122:LYS:HB3	1:A:123:PRO:HD2	17	0.03
(1,190)	1:A:41:ARG:HA	1:A:45:ASN:H	15	0.03
(1,1894)	1:A:80:PHE:HD1	1:A:101:GLU:HG2	1	0.03
(1,1894)	1:A:80:PHE:HD1	1:A:101:GLU:HG3	1	0.03
(1,1894)	1:A:80:PHE:HD2	1:A:101:GLU:HG2	1	0.03
(1,1894)	1:A:80:PHE:HD2	1:A:101:GLU:HG3	1	0.03
(1,1894)	1:A:80:PHE:HD1	1:A:101:GLU:HG2	5	0.03
(1,1894)	1:A:80:PHE:HD1	1:A:101:GLU:HG3	5	0.03
(1,1894)	1:A:80:PHE:HD2	1:A:101:GLU:HG2	5	0.03
(1,1894)	1:A:80:PHE:HD2	1:A:101:GLU:HG3	5	0.03
(1,1874)	1:A:81:ASP:HB2	1:A:83:GLU:HG2	19	0.03
(1,1874)	1:A:81:ASP:HB2	1:A:83:GLU:HG3	19	0.03
(1,1840)	1:A:66:PHE:HB2	1:A:83:GLU:HB2	6	0.03
(1,1808)	1:A:41:ARG:HD3	1:A:45:ASN:HD22	12	0.03
(1,1795)	1:A:28:TRP:HD1	1:A:32:LEU:HG	13	0.03
(1,1767)	1:A:13:ILE:HA	1:A:41:ARG:HB2	5	0.03
(1,1755)	1:A:3:ASP:HB2	1:A:6:THR:HB	6	0.03
(1,1755)	1:A:3:ASP:HB3	1:A:6:THR:HB	6	0.03
(1,1694)	1:A:122:LYS:HB2	1:A:122:LYS:HD3	6	0.03
(1,1694)	1:A:122:LYS:HB2	1:A:122:LYS:HD3	12	0.03
(1,1614)	1:A:47:LYS:HA	1:A:47:LYS:HG3	16	0.03
(1,1600)	1:A:37:GLN:HA	1:A:37:GLN:HG3	13	0.03
(1,1599)	1:A:37:GLN:H	1:A:37:GLN:HG3	20	0.03
(1,1591)	1:A:33:LYS:HB2	1:A:33:LYS:HE2	18	0.03
(1,1591)	1:A:33:LYS:HB2	1:A:33:LYS:HE3	18	0.03
(1,1591)	1:A:33:LYS:HB3	1:A:33:LYS:HE2	18	0.03
(1,1591)	1:A:33:LYS:HB3	1:A:33:LYS:HE3	18	0.03
(1,1582)	1:A:30:GLN:HB2	1:A:30:GLN:HE21	16	0.03
(1,1582)	1:A:30:GLN:HB3	1:A:30:GLN:HE21	16	0.03
(1,1550)	1:A:12:GLU:H	1:A:12:GLU:HG2	3	0.03
(1,1550)	1:A:12:GLU:H	1:A:12:GLU:HG2	17	0.03
(1,1550)	1:A:12:GLU:H	1:A:12:GLU:HG2	18	0.03
(1,155)	1:A:37:GLN:HB3	1:A:38:SER:H	2	0.03
(1,155)	1:A:37:GLN:HB3	1:A:38:SER:H	4	0.03
(1,155)	1:A:37:GLN:HB3	1:A:38:SER:H	5	0.03



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,155)	1:A:37:GLN:HB3	1:A:38:SER:H	18	0.03
(1,1531)	1:A:124:LEU:HA	1:A:127:ARG:HB3	1	0.03
(1,1482)	1:A:74:ASP:HB2	1:A:76:LEU:H	10	0.03
(1,147)	1:A:36:TYR:HB2	1:A:37:GLN:H	18	0.03
(1,143)	1:A:36:TYR:H	1:A:36:TYR:HB3	5	0.03
(1,1422)	1:A:127:ARG:H	1:A:127:ARG:HB3	1	0.03
(1,1414)	1:A:121:PHE:HA	1:A:124:LEU:H	14	0.03
(1,1414)	1:A:121:PHE:HA	1:A:124:LEU:H	15	0.03
(1,1414)	1:A:121:PHE:HA	1:A:124:LEU:H	19	0.03
(1,1412)	1:A:119:ASP:HA	1:A:122:LYS:HB3	11	0.03
(1,1408)	1:A:117:LEU:HB2	1:A:118:THR:H	17	0.03
(1,1386)	1:A:74:ASP:HB3	1:A:75:LEU:H	5	0.03
(1,1386)	1:A:74:ASP:HB3	1:A:75:LEU:H	15	0.03
(1,1370)	1:A:45:ASN:HA	1:A:45:ASN:HB3	1	0.03
(1,1369)	1:A:44:GLU:H	1:A:44:GLU:HB3	16	0.03
(1,1369)	1:A:44:GLU:H	1:A:44:GLU:HB3	18	0.03
(1,1350)	1:A:37:GLN:HA	1:A:40:ILE:H	16	0.03
(1,1343)	1:A:34:GLU:HA	1:A:37:GLN:HB3	14	0.03
(1,1343)	1:A:34:GLU:HA	1:A:37:GLN:HB3	18	0.03
(1,1343)	1:A:34:GLU:HA	1:A:37:GLN:HB3	20	0.03
(1,1328)	1:A:25:ARG:HB3	1:A:26:GLU:H	20	0.03
(1,1317)	1:A:12:GLU:H	1:A:12:GLU:HB3	5	0.03
(1,1317)	1:A:12:GLU:H	1:A:12:GLU:HB3	15	0.03
(1,1300)	1:A:107:ALA:HB1	1:A:108:LYS:H	8	0.03
(1,1300)	1:A:107:ALA:HB2	1:A:108:LYS:H	8	0.03
(1,1300)	1:A:107:ALA:HB3	1:A:108:LYS:H	8	0.03
(1,129)	1:A:32:LEU:HA	1:A:35:GLU:H	14	0.03
(1,129)	1:A:32:LEU:HA	1:A:35:GLU:H	17	0.03
(1,1213)	1:A:18:THR:HG21	1:A:20:ALA:H	5	0.03
(1,1213)	1:A:18:THR:HG22	1:A:20:ALA:H	5	0.03
(1,1213)	1:A:18:THR:HG23	1:A:20:ALA:H	5	0.03
(1,1156)	1:A:88:ILE:H	1:A:88:ILE:HD11	17	0.03
(1,1156)	1:A:88:ILE:H	1:A:88:ILE:HD12	17	0.03
(1,1156)	1:A:88:ILE:H	1:A:88:ILE:HD13	17	0.03
(1,113)	1:A:29:VAL:HA	1:A:33:LYS:H	20	0.03
(1,1093)	1:A:116:CYS:H	1:A:145:TRP:HE1	10	0.03
(1,1086)	1:A:46:ASN:HD22	1:A:53:TRP:HE1	20	0.03
(1,1079)	1:A:53:TRP:HH2	1:A:143:GLY:H	5	0.03
(1,1072)	1:A:133:GLY:H	1:A:136:HIS:HE1	13	0.03
(1,1072)	1:A:133:GLY:H	1:A:136:HIS:HE1	14	0.03
(1,1072)	1:A:133:GLY:H	1:A:136:HIS:HE1	15	0.03
(1,1069)	1:A:127:ARG:HB2	1:A:128:ASN:HD21	4	0.03



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1054)	1:A:94:ALA:H	1:A:125:TRP:HZ2	8	0.03
(1,1035)	1:A:53:TRP:HE3	1:A:70:TRP:H	20	0.03
(1,1011)	1:A:59:ASN:HD22	1:A:64:ARG:HB2	8	0.03
(1,1009)	1:A:59:ASN:HD21	1:A:64:ARG:HB2	11	0.03
(1,1003)	1:A:56:LEU:H	1:A:65:TRP:HZ3	3	0.03
(1,1003)	1:A:56:LEU:H	1:A:65:TRP:HZ3	20	0.03
(1,996)	1:A:45:ASN:HA	1:A:48:ASN:HD21	7	0.02
(1,989)	1:A:12:GLU:HB3	1:A:45:ASN:HD22	15	0.02
(1,973)	1:A:22:PRO:HA	1:A:28:TRP:HE1	17	0.02
(1,967)	1:A:20:ALA:H	1:A:91:PRO:HD2	9	0.02
(1,967)	1:A:20:ALA:H	1:A:91:PRO:HD2	19	0.02
(1,86)	1:A:27:LEU:HB3	1:A:28:TRP:H	18	0.02
(1,846)	1:A:61:GLU:H	1:A:61:GLU:HG3	5	0.02
(1,846)	1:A:61:GLU:H	1:A:61:GLU:HG3	14	0.02
(1,846)	1:A:61:GLU:H	1:A:61:GLU:HG3	16	0.02
(1,845)	1:A:61:GLU:H	1:A:61:GLU:HG2	13	0.02
(1,828)	1:A:51:ASN:HB2	1:A:51:ASN:HD22	7	0.02
(1,828)	1:A:51:ASN:HB2	1:A:51:ASN:HD22	11	0.02
(1,828)	1:A:51:ASN:HB2	1:A:51:ASN:HD22	14	0.02
(1,828)	1:A:51:ASN:HB2	1:A:51:ASN:HD22	19	0.02
(1,815)	1:A:45:ASN:HB2	1:A:45:ASN:HD22	1	0.02
(1,815)	1:A:45:ASN:HB2	1:A:45:ASN:HD22	5	0.02
(1,815)	1:A:45:ASN:HB2	1:A:45:ASN:HD22	15	0.02
(1,780)	1:A:32:LEU:H	1:A:32:LEU:HG	7	0.02
(1,780)	1:A:32:LEU:H	1:A:32:LEU:HG	10	0.02
(1,780)	1:A:32:LEU:H	1:A:32:LEU:HG	15	0.02
(1,767)	1:A:25:ARG:H	1:A:25:ARG:HG2	4	0.02
(1,767)	1:A:25:ARG:H	1:A:25:ARG:HG2	17	0.02
(1,767)	1:A:25:ARG:H	1:A:25:ARG:HG2	19	0.02
(1,760)	1:A:19:ASN:HB2	1:A:19:ASN:HD22	17	0.02
(1,752)	1:A:13:ILE:H	1:A:13:ILE:HG12	9	0.02
(1,725)	1:A:67:GLY:H	1:A:83:GLU:HA	16	0.02
(1,714)	1:A:154:ILE:HA	1:A:158:VAL:H	13	0.02
(1,673)	1:A:64:ARG:HA	1:A:86:ILE:H	18	0.02
(1,663)	1:A:83:GLU:H	1:A:98:ALA:H	17	0.02
(1,663)	1:A:83:GLU:H	1:A:98:ALA:H	19	0.02
(1,652)	1:A:56:LEU:HA	1:A:66:PHE:H	9	0.02
(1,651)	1:A:65:TRP:H	1:A:85:ASP:HA	3	0.02
(1,633)	1:A:47:LYS:HA	1:A:51:ASN:H	4	0.02
(1,627)	1:A:46:ASN:HA	1:A:49:ALA:H	9	0.02
(1,627)	1:A:46:ASN:HA	1:A:49:ALA:H	15	0.02
(1,613)	1:A:23:ARG:HA	1:A:25:ARG:H	5	0.02



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,613)	1:A:23:ARG:HA	1:A:25:ARG:H	20	0.02
(1,60)	1:A:23:ARG:H	1:A:23:ARG:HB3	16	0.02
(1,579)	1:A:164:LYS:HB3	1:A:165:CYS:H	4	0.02
(1,579)	1:A:164:LYS:HB3	1:A:165:CYS:H	8	0.02
(1,579)	1:A:164:LYS:HB3	1:A:165:CYS:H	9	0.02
(1,579)	1:A:164:LYS:HB3	1:A:165:CYS:H	12	0.02
(1,579)	1:A:164:LYS:HB3	1:A:165:CYS:H	20	0.02
(1,572)	1:A:162:LYS:H	1:A:163:GLU:H	16	0.02
(1,559)	1:A:158:VAL:HB	1:A:159:ILE:H	2	0.02
(1,559)	1:A:158:VAL:HB	1:A:159:ILE:H	7	0.02
(1,559)	1:A:158:VAL:HB	1:A:159:ILE:H	15	0.02
(1,554)	1:A:156:LYS:H	1:A:156:LYS:HB3	2	0.02
(1,554)	1:A:156:LYS:H	1:A:156:LYS:HB3	5	0.02
(1,554)	1:A:156:LYS:H	1:A:156:LYS:HB3	12	0.02
(1,554)	1:A:156:LYS:H	1:A:156:LYS:HB3	15	0.02
(1,474)	1:A:136:HIS:H	1:A:136:HIS:HB3	1	0.02
(1,474)	1:A:136:HIS:H	1:A:136:HIS:HB3	2	0.02
(1,457)	1:A:131:LYS:H	1:A:131:LYS:HB3	2	0.02
(1,457)	1:A:131:LYS:H	1:A:131:LYS:HB3	9	0.02
(1,457)	1:A:131:LYS:H	1:A:131:LYS:HB3	12	0.02
(1,457)	1:A:131:LYS:H	1:A:131:LYS:HB3	15	0.02
(1,457)	1:A:131:LYS:H	1:A:131:LYS:HB3	18	0.02
(1,457)	1:A:131:LYS:H	1:A:131:LYS:HB3	19	0.02
(1,457)	1:A:131:LYS:H	1:A:131:LYS:HB3	20	0.02
(1,435)	1:A:123:PRO:HA	1:A:125:TRP:H	17	0.02
(1,418)	1:A:119:ASP:H	1:A:119:ASP:HB2	6	0.02
(1,396)	1:A:106:THR:HA	1:A:107:ALA:H	4	0.02
(1,395)	1:A:106:THR:H	1:A:107:ALA:H	13	0.02
(1,384)	1:A:103:ASP:H	1:A:103:ASP:HB2	17	0.02
(1,3632)	1:A:149:GLU:O	1:A:153:LEU:N	2	0.02
(1,3631)	1:A:149:GLU:O	1:A:153:LEU:H	3	0.02
(1,3629)	1:A:146:LEU:O	1:A:150:ILE:H	12	0.02
(1,3629)	1:A:146:LEU:O	1:A:150:ILE:H	15	0.02
(1,3625)	1:A:141:GLY:O	1:A:145:TRP:H	2	0.02
(1,3622)	1:A:135:ALA:O	1:A:139:ALA:N	2	0.02
(1,3622)	1:A:135:ALA:O	1:A:139:ALA:N	6	0.02
(1,3622)	1:A:135:ALA:O	1:A:139:ALA:N	16	0.02
(1,3621)	1:A:135:ALA:O	1:A:139:ALA:H	5	0.02
(1,3619)	1:A:121:PHE:O	1:A:125:TRP:H	2	0.02
(1,3618)	1:A:120:HIS:O	1:A:124:LEU:N	20	0.02
(1,3611)	1:A:69:CYS:O	1:A:80:PHE:H	5	0.02
(1,3610)	1:A:73:HIS:N	1:A:76:LEU:O	13	0.02
		I.	1	d on nort nago



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,3609)	1:A:73:HIS:H	1:A:76:LEU:O	3	0.02
(1,3607)	1:A:53:TRP:O	1:A:70:TRP:H	7	0.02
(1,3605)	1:A:69:CYS:H	1:A:80:PHE:O	14	0.02
(1,3603)	1:A:55:ARG:O	1:A:68:LYS:H	11	0.02
(1,3601)	1:A:67:GLY:H	1:A:82:ILE:O	6	0.02
(1,3601)	1:A:67:GLY:H	1:A:82:ILE:O	11	0.02
(1,3599)	1:A:57:GLU:O	1:A:66:PHE:H	7	0.02
(1,3597)	1:A:44:GLU:O	1:A:48:ASN:H	20	0.02
(1,3595)	1:A:43:VAL:O	1:A:47:LYS:H	9	0.02
(1,3591)	1:A:40:ILE:O	1:A:44:GLU:H	14	0.02
(1,3584)	1:A:35:GLU:O	1:A:39:LEU:N	18	0.02
(1,3584)	1:A:35:GLU:O	1:A:39:LEU:N	20	0.02
(1,3583)	1:A:35:GLU:O	1:A:39:LEU:H	14	0.02
(1,3583)	1:A:35:GLU:O	1:A:39:LEU:H	17	0.02
(1,3581)	1:A:34:GLU:O	1:A:38:SER:H	2	0.02
(1,3581)	1:A:34:GLU:O	1:A:38:SER:H	5	0.02
(1,3581)	1:A:34:GLU:O	1:A:38:SER:H	13	0.02
(1,3575)	1:A:30:GLN:O	1:A:34:GLU:H	4	0.02
(1,3575)	1:A:30:GLN:O	1:A:34:GLU:H	9	0.02
(1,3574)	1:A:28:TRP:O	1:A:32:LEU:N	4	0.02
(1,3574)	1:A:28:TRP:O	1:A:32:LEU:N	5	0.02
(1,3574)	1:A:28:TRP:O	1:A:32:LEU:N	7	0.02
(1,3574)	1:A:28:TRP:O	1:A:32:LEU:N	10	0.02
(1,3569)	1:A:25:ARG:O	1:A:29:VAL:H	18	0.02
(1,3568)	1:A:24:ASP:O	1:A:28:TRP:N	10	0.02
(1,3568)	1:A:24:ASP:O	1:A:28:TRP:N	13	0.02
(1,3568)	1:A:24:ASP:O	1:A:28:TRP:N	14	0.02
(1,3567)	1:A:24:ASP:O	1:A:28:TRP:H	10	0.02
(1,3565)	1:A:7:ARG:O	1:A:11:SER:H	11	0.02
(1,3565)	1:A:7:ARG:O	1:A:11:SER:H	20	0.02
(1,3561)	1:A:5:ALA:O	1:A:9:VAL:H	9	0.02
(1,3540)	1:A:160:GLN:HB2	1:A:161:HIS:H	7	0.02
(1,3537)	1:A:160:GLN:H	1:A:160:GLN:HB2	15	0.02
(1,3488)	1:A:127:ARG:HB2	1:A:128:ASN:HD22	20	0.02
(1,3476)	1:A:122:LYS:HB3	1:A:123:PRO:HD2	12	0.02
(1,3473)	1:A:122:LYS:HA	1:A:122:LYS:HG2	13	0.02
(1,3463)	1:A:118:THR:HG21	1:A:121:PHE:HB2	20	0.02
(1,3463)	1:A:118:THR:HG22	1:A:121:PHE:HB2	20	0.02
(1,3463)	1:A:118:THR:HG23	1:A:121:PHE:HB2	20	0.02
(1,3452)	1:A:111:ARG:HG2	1:A:112:GLY:H	12	0.02
(1,344)	1:A:83:GLU:HB3	1:A:84:PHE:H	2	0.02
(1,344)	1:A:83:GLU:HB3	1:A:84:PHE:H	16	0.02



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,344)	1:A:83:GLU:HB3	1:A:84:PHE:H	18	0.02
(1,3398)	1:A:96:GLU:H	1:A:96:GLU:HG2	9	0.02
(1,339)	1:A:82:ILE:HB	1:A:83:GLU:H	7	0.02
(1,3280)	1:A:64:ARG:HB3	1:A:64:ARG:HD2	12	0.02
(1,3266)	1:A:60:LYS:HB2	1:A:60:LYS:HE2	5	0.02
(1,3266)	1:A:60:LYS:HB2	1:A:60:LYS:HE3	5	0.02
(1,3249)	1:A:57:GLU:HG2	1:A:58:SER:H	17	0.02
(1,322)	1:A:78:TYR:H	1:A:78:TYR:HB2	19	0.02
(1,3215)	1:A:56:LEU:HB2	1:A:57:GLU:H	6	0.02
(1,3183)	1:A:44:GLU:H	1:A:44:GLU:HG2	7	0.02
(1,3176)	1:A:41:ARG:HG2	1:A:45:ASN:HD22	8	0.02
(1,3168)	1:A:40:ILE:H	1:A:40:ILE:HG12	1	0.02
(1,3168)	1:A:40:ILE:H	1:A:40:ILE:HG12	6	0.02
(1,3168)	1:A:40:ILE:H	1:A:40:ILE:HG12	14	0.02
(1,3168)	1:A:40:ILE:H	1:A:40:ILE:HG12	15	0.02
(1,3147)	1:A:32:LEU:HD11	1:A:65:TRP:HZ2	16	0.02
(1,3147)	1:A:32:LEU:HD12	1:A:65:TRP:HZ2	16	0.02
(1,3147)	1:A:32:LEU:HD13	1:A:65:TRP:HZ2	16	0.02
(1,3134)	1:A:31:ARG:H	1:A:33:LYS:HG2	5	0.02
(1,3131)	1:A:30:GLN:HE21	1:A:34:GLU:HG2	19	0.02
(1,3088)	1:A:22:PRO:HB2	1:A:28:TRP:HZ2	7	0.02
(1,2996)	1:A:68:LYS:HD3	1:A:70:TRP:HZ2	1	0.02
(1,2996)	1:A:68:LYS:HD3	1:A:70:TRP:HZ2	5	0.02
(1,2996)	1:A:68:LYS:HD3	1:A:70:TRP:HZ2	12	0.02
(1,2995)	1:A:68:LYS:HD2	1:A:70:TRP:HZ2	3	0.02
(1,296)	1:A:70:TRP:HB2	1:A:71:TYR:H	17	0.02
(1,293)	1:A:69:CYS:HB2	1:A:70:TRP:H	2	0.02
(1,2923)	1:A:18:THR:HG21	1:A:27:LEU:HD11	17	0.02
(1,2923)	1:A:18:THR:HG21	1:A:27:LEU:HD12	17	0.02
(1,2923)	1:A:18:THR:HG21	1:A:27:LEU:HD13	17	0.02
(1,2923)	1:A:18:THR:HG22	1:A:27:LEU:HD11	17	0.02
(1,2923)	1:A:18:THR:HG22	1:A:27:LEU:HD12	17	0.02
(1,2923)	1:A:18:THR:HG22	1:A:27:LEU:HD13	17	0.02
(1,2923)	1:A:18:THR:HG23	1:A:27:LEU:HD11	17	0.02
(1,2923)	1:A:18:THR:HG23	1:A:27:LEU:HD12	17	0.02
(1,2923)	1:A:18:THR:HG23	1:A:27:LEU:HD13	17	0.02
(1,2921)	1:A:105:LYS:HD2	1:A:158:VAL:HG21	10	0.02
(1,2921)	1:A:105:LYS:HD2	1:A:158:VAL:HG22	10	0.02
(1,2921)	1:A:105:LYS:HD2	1:A:158:VAL:HG23	10	0.02
(1,2921)	1:A:105:LYS:HD3	1:A:158:VAL:HG21	10	0.02
(1,2921)	1:A:105:LYS:HD3	1:A:158:VAL:HG22	10	0.02
1 \ / /				



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,29)	1:A:10:VAL:HA	1:A:11:SER:H	8	0.02
(1,29)	1:A:10:VAL:HA	1:A:11:SER:H	12	0.02
(1,2870)	1:A:15:VAL:HG11	1:A:131:LYS:HD2	10	0.02
(1,2870)	1:A:15:VAL:HG12	1:A:131:LYS:HD2	10	0.02
(1,2870)	1:A:15:VAL:HG13	1:A:131:LYS:HD2	10	0.02
(1,2834)	1:A:87:PRO:HB3	1:A:93:THR:HG21	1	0.02
(1,2834)	1:A:87:PRO:HB3	1:A:93:THR:HG22	1	0.02
(1,2834)	1:A:87:PRO:HB3	1:A:93:THR:HG23	1	0.02
(1,2834)	1:A:87:PRO:HB3	1:A:93:THR:HG21	7	0.02
(1,2834)	1:A:87:PRO:HB3	1:A:93:THR:HG22	7	0.02
(1,2834)	1:A:87:PRO:HB3	1:A:93:THR:HG23	7	0.02
(1,2820)	1:A:118:THR:HG21	1:A:121:PHE:HB2	20	0.02
(1,2820)	1:A:118:THR:HG22	1:A:121:PHE:HB2	20	0.02
(1,2820)	1:A:118:THR:HG23	1:A:121:PHE:HB2	20	0.02
(1,2816)	1:A:84:PHE:HZ	1:A:134:LEU:HD21	3	0.02
(1,2816)	1:A:84:PHE:HZ	1:A:134:LEU:HD22	3	0.02
(1,2816)	1:A:84:PHE:HZ	1:A:134:LEU:HD23	3	0.02
(1,2816)	1:A:84:PHE:HZ	1:A:134:LEU:HD21	15	0.02
(1,2816)	1:A:84:PHE:HZ	1:A:134:LEU:HD22	15	0.02
(1,2816)	1:A:84:PHE:HZ	1:A:134:LEU:HD23	15	0.02
(1,2806)	1:A:109:MET:HE1	1:A:145:TRP:HZ2	18	0.02
(1,2806)	1:A:109:MET:HE2	1:A:145:TRP:HZ2	18	0.02
(1,2806)	1:A:109:MET:HE3	1:A:145:TRP:HZ2	18	0.02
(1,2798)	1:A:109:MET:HE1	1:A:115:ILE:HG21	13	0.02
(1,2798)	1:A:109:MET:HE1	1:A:115:ILE:HG22	13	0.02
(1,2798)	1:A:109:MET:HE1	1:A:115:ILE:HG23	13	0.02
(1,2798)	1:A:109:MET:HE2	1:A:115:ILE:HG21	13	0.02
(1,2798)	1:A:109:MET:HE2	1:A:115:ILE:HG22	13	0.02
(1,2798)	1:A:109:MET:HE2	1:A:115:ILE:HG23	13	0.02
(1,2798)	1:A:109:MET:HE3	1:A:115:ILE:HG21	13	0.02
(1,2798)	1:A:109:MET:HE3	1:A:115:ILE:HG22	13	0.02
(1,2798)	1:A:109:MET:HE3	1:A:115:ILE:HG23	13	0.02
(1,279)	1:A:65:TRP:HB2	1:A:66:PHE:H	11	0.02
(1,2763)	1:A:76:LEU:HD21	1:A:163:GLU:HA	13	0.02
(1,2763)	1:A:76:LEU:HD22	1:A:163:GLU:HA	13	0.02
(1,2763)	1:A:76:LEU:HD23	1:A:163:GLU:HA	13	0.02
(1,2735)	1:A:78:TYR:HB2	1:A:154:ILE:HG21	20	0.02
(1,2735)	1:A:78:TYR:HB2	1:A:154:ILE:HG22	20	0.02
(1,2735)	1:A:78:TYR:HB2	1:A:154:ILE:HG23	20	0.02
(1,2714)	1:A:106:THR:HB	1:A:153:LEU:HD21	6	0.02
(1,2714)	1:A:106:THR:HB	1:A:153:LEU:HD22	6	0.02
(1,2714)	1:A:106:THR:HB	1:A:153:LEU:HD23	6	0.02



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,2712)	1:A:106:THR:HB	1:A:153:LEU:HD11	5	0.02
(1,2712)	1:A:106:THR:HB	1:A:153:LEU:HD12	5	0.02
(1,2712)	1:A:106:THR:HB	1:A:153:LEU:HD13	5	0.02
(1,2712)	1:A:106:THR:HB	1:A:153:LEU:HD11	7	0.02
(1,2712)	1:A:106:THR:HB	1:A:153:LEU:HD12	7	0.02
(1,2712)	1:A:106:THR:HB	1:A:153:LEU:HD13	7	0.02
(1,2707)	1:A:146:LEU:HA	1:A:150:ILE:HD11	20	0.02
(1,2707)	1:A:146:LEU:HA	1:A:150:ILE:HD12	20	0.02
(1,2707)	1:A:146:LEU:HA	1:A:150:ILE:HD13	20	0.02
(1,2683)	1:A:80:PHE:HE1	1:A:146:LEU:HD21	18	0.02
(1,2683)	1:A:80:PHE:HE1	1:A:146:LEU:HD22	18	0.02
(1,2683)	1:A:80:PHE:HE1	1:A:146:LEU:HD23	18	0.02
(1,2640)	1:A:125:TRP:HZ3	1:A:137:LEU:HD11	8	0.02
(1,2640)	1:A:125:TRP:HZ3	1:A:137:LEU:HD12	8	0.02
(1,2640)	1:A:125:TRP:HZ3	1:A:137:LEU:HD13	8	0.02
(1,262)	1:A:61:GLU:H	1:A:61:GLU:HB3	1	0.02
(1,262)	1:A:61:GLU:H	1:A:61:GLU:HB3	12	0.02
(1,2615)	1:A:84:PHE:HE1	1:A:134:LEU:HD21	4	0.02
(1,2615)	1:A:84:PHE:HE1	1:A:134:LEU:HD22	4	0.02
(1,2615)	1:A:84:PHE:HE1	1:A:134:LEU:HD23	4	0.02
(1,2600)	1:A:129:VAL:HG11	1:A:130:PRO:HA	13	0.02
(1,2600)	1:A:129:VAL:HG12	1:A:130:PRO:HA	13	0.02
(1,2600)	1:A:129:VAL:HG13	1:A:130:PRO:HA	13	0.02
(1,2600)	1:A:129:VAL:HG11	1:A:130:PRO:HA	14	0.02
(1,2600)	1:A:129:VAL:HG12	1:A:130:PRO:HA	14	0.02
(1,2600)	1:A:129:VAL:HG13	1:A:130:PRO:HA	14	0.02
(1,260)	1:A:60:LYS:HB3	1:A:61:GLU:H	15	0.02
(1,2585)	1:A:115:ILE:HD11	1:A:117:LEU:HD21	20	0.02
(1,2585)	1:A:115:ILE:HD11	1:A:117:LEU:HD22	20	0.02
(1,2585)	1:A:115:ILE:HD11	1:A:117:LEU:HD23	20	0.02
(1,2585)	1:A:115:ILE:HD12	1:A:117:LEU:HD21	20	0.02
(1,2585)	1:A:115:ILE:HD12	1:A:117:LEU:HD22	20	0.02
(1,2585)	1:A:115:ILE:HD12	1:A:117:LEU:HD23	20	0.02
(1,2585)	1:A:115:ILE:HD13	1:A:117:LEU:HD21	20	0.02
(1,2585)	1:A:115:ILE:HD13	1:A:117:LEU:HD22	20	0.02
(1,2585)	1:A:115:ILE:HD13	1:A:117:LEU:HD23	20	0.02
(1,2582)	1:A:117:LEU:HD11	1:A:141:GLY:HA3	17	0.02
(1,2582)	1:A:117:LEU:HD12	1:A:141:GLY:HA3	17	0.02
(1,2582)	1:A:117:LEU:HD13	1:A:141:GLY:HA3	17	0.02
(1,252)	1:A:58:SER:HB2	1:A:59:ASN:H	1	0.02
(1,2513)	1:A:97:ILE:HD11	1:A:142:LEU:HB3	9	0.02
(1,2513)	1:A:97:ILE:HD12	1:A:142:LEU:HB3	9	0.02



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,2513)	1:A:97:ILE:HD13	1:A:142:LEU:HB3	9	0.02
(1,25)	1:A:8:ARG:HA	1:A:11:SER:H	12	0.02
(1,2471)	1:A:28:TRP:HH2	1:A:86:ILE:HG21	1	0.02
(1,2471)	1:A:28:TRP:HH2	1:A:86:ILE:HG22	1	0.02
(1,2471)	1:A:28:TRP:HH2	1:A:86:ILE:HG23	1	0.02
(1,2444)	1:A:76:LEU:HD21	1:A:164:LYS:HA	14	0.02
(1,2444)	1:A:76:LEU:HD22	1:A:164:LYS:HA	14	0.02
(1,2444)	1:A:76:LEU:HD23	1:A:164:LYS:HA	14	0.02
(1,2426)	1:A:72:ILE:HG21	1:A:75:LEU:H	14	0.02
(1,2426)	1:A:72:ILE:HG22	1:A:75:LEU:H	14	0.02
(1,2426)	1:A:72:ILE:HG23	1:A:75:LEU:H	14	0.02
(1,2409)	1:A:32:LEU:HD11	1:A:61:GLU:HA	12	0.02
(1,2409)	1:A:32:LEU:HD12	1:A:61:GLU:HA	12	0.02
(1,2409)	1:A:32:LEU:HD13	1:A:61:GLU:HA	12	0.02
(1,2402)	1:A:56:LEU:HD21	1:A:65:TRP:HE3	10	0.02
(1,2402)	1:A:56:LEU:HD22	1:A:65:TRP:HE3	10	0.02
(1,2402)	1:A:56:LEU:HD23	1:A:65:TRP:HE3	10	0.02
(1,2387)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:47:LYS:HE2	14	0.02
(1,2387)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:47:LYS:HE3	14	0.02
(1,2387)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:47:LYS:HE2	14	0.02
(1,2387)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:47:LYS:HE3	14	0.02
(1,2387)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:47:LYS:HE2	14	0.02
(1,2387)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:47:LYS:HE3	14	0.02
(1,2358)	1:A:39:LEU:HD21	1:A:65:TRP:HZ3	9	0.02
(1,2358)	1:A:39:LEU:HD22	1:A:65:TRP:HZ3	9	0.02
(1,2358)	1:A:39:LEU:HD23	1:A:65:TRP:HZ3	9	0.02
(1,2358)	1:A:39:LEU:HD21	1:A:65:TRP:HZ3	16	0.02
(1,2358)	1:A:39:LEU:HD22	1:A:65:TRP:HZ3	16	0.02
(1,2358)	1:A:39:LEU:HD23	1:A:65:TRP:HZ3	16	0.02
(1,2358)	1:A:39:LEU:HD21	1:A:65:TRP:HZ3	20	0.02
(1,2358)	1:A:39:LEU:HD22	1:A:65:TRP:HZ3	20	0.02
(1,2358)	1:A:39:LEU:HD23	1:A:65:TRP:HZ3	20	0.02
(1,2331)	1:A:26:GLU:HG2	1:A:27:LEU:HD21	12	0.02
(1,2331)	1:A:26:GLU:HG2	1:A:27:LEU:HD22	12	0.02
(1,2331)	1:A:26:GLU:HG2	1:A:27:LEU:HD23	12	0.02
(1,2331)	1:A:26:GLU:HG3	1:A:27:LEU:HD21	12	0.02
(1,2331)	1:A:26:GLU:HG3	1:A:27:LEU:HD22	12	0.02
(1,2331)	1:A:26:GLU:HG3	1:A:27:LEU:HD23	12	0.02
(1,2321)	1:A:23:ARG:HD2	1:A:88:ILE:HG21	3	0.02
(1,2321)	1:A:23:ARG:HD2	1:A:88:ILE:HG22	3	0.02
(1,2321)	1:A:23:ARG:HD2	1:A:88:ILE:HG23	3	0.02
(1,2321)	1:A:23:ARG:HD3	1:A:88:ILE:HG21	3	0.02



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,2321)	1:A:23:ARG:HD3	1:A:88:ILE:HG22	3	0.02
(1,2321)	1:A:23:ARG:HD3	1:A:88:ILE:HG23	3	0.02
(1,2297)	1:A:16:LEU:HD21	1:A:35:GLU:HA	5	0.02
(1,2297)	1:A:16:LEU:HD22	1:A:35:GLU:HA	5	0.02
(1,2297)	1:A:16:LEU:HD23	1:A:35:GLU:HA	5	0.02
(1,2297)	1:A:16:LEU:HD21	1:A:35:GLU:HA	13	0.02
(1,2297)	1:A:16:LEU:HD22	1:A:35:GLU:HA	13	0.02
(1,2297)	1:A:16:LEU:HD23	1:A:35:GLU:HA	13	0.02
(1,2091)	1:A:110:TYR:HE1	1:A:115:ILE:H	10	0.02
(1,2086)	1:A:70:TRP:HD1	1:A:72:ILE:HG12	18	0.02
(1,206)	1:A:43:VAL:HA	1:A:47:LYS:H	19	0.02
(1,2040)	1:A:53:TRP:HH2	1:A:138:MET:HA	2	0.02
(1,2039)	1:A:53:TRP:HZ2	1:A:139:ALA:HA	19	0.02
(1,1991)	1:A:84:PHE:HB3	1:A:97:ILE:HA	9	0.02
(1,1991)	1:A:84:PHE:HB3	1:A:97:ILE:HA	19	0.02
(1,1981)	1:A:131:LYS:H	1:A:131:LYS:HG3	18	0.02
(1,1977)	1:A:111:ARG:H	1:A:111:ARG:HG3	7	0.02
(1,197)	1:A:45:ASN:H	1:A:45:ASN:HB3	7	0.02
(1,197)	1:A:45:ASN:H	1:A:45:ASN:HB3	15	0.02
(1,197)	1:A:45:ASN:H	1:A:45:ASN:HB3	19	0.02
(1,1969)	1:A:66:PHE:HB3	1:A:83:GLU:HA	12	0.02
(1,1967)	1:A:70:TRP:HD1	1:A:77:LYS:HE3	13	0.02
(1,1967)	1:A:70:TRP:HD1	1:A:77:LYS:HE3	14	0.02
(1,1949)	1:A:125:TRP:HH2	1:A:137:LEU:HA	5	0.02
(1,1949)	1:A:125:TRP:HH2	1:A:137:LEU:HA	15	0.02
(1,1949)	1:A:125:TRP:HH2	1:A:137:LEU:HA	18	0.02
(1,1943)	1:A:24:ASP:HB3	1:A:27:LEU:HB2	18	0.02
(1,1935)	1:A:150:ILE:HB	1:A:151:PRO:HD2	9	0.02
(1,1935)	1:A:150:ILE:HB	1:A:151:PRO:HD3	9	0.02
(1,1935)	1:A:150:ILE:HB	1:A:151:PRO:HD2	13	0.02
(1,1935)	1:A:150:ILE:HB	1:A:151:PRO:HD3	13	0.02
(1,1935)	1:A:150:ILE:HB	1:A:151:PRO:HD2	15	0.02
(1,1935)	1:A:150:ILE:HB	1:A:151:PRO:HD3	15	0.02
(1,1924)	1:A:42:TYR:HD1	1:A:135:ALA:HA	6	0.02
(1,1904)	1:A:122:LYS:HB3	1:A:123:PRO:HD3	4	0.02
(1,1904)	1:A:122:LYS:HB3	1:A:123:PRO:HD3	13	0.02
(1,190)	1:A:41:ARG:HA	1:A:45:ASN:H	17	0.02
(1,1890)	1:A:87:PRO:HG3	1:A:93:THR:HB	1	0.02
(1,1874)	1:A:81:ASP:HB2	1:A:83:GLU:HG2	1	0.02
(1,1874)	1:A:81:ASP:HB2	1:A:83:GLU:HG3	1	0.02
(1,1867)	1:A:70:TRP:HD1	1:A:79:GLU:HG2	17	0.02
(1,1867)	1:A:70:TRP:HD1	1:A:79:GLU:HG3	17	0.02



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1859)	1:A:73:HIS:HB3	1:A:78:TYR:HE1	1	0.02
(1,1825)	1:A:56:LEU:HG	1:A:65:TRP:HZ3	19	0.02
(1,1823)	1:A:56:LEU:HG	1:A:65:TRP:HE3	4	0.02
(1,1823)	1:A:56:LEU:HG	1:A:65:TRP:HE3	14	0.02
(1,1807)	1:A:41:ARG:HD2	1:A:45:ASN:HD22	6	0.02
(1,1803)	1:A:36:TYR:H	1:A:37:GLN:HG2	15	0.02
(1,1786)	1:A:23:ARG:HB2	1:A:88:ILE:HA	16	0.02
(1,1786)	1:A:23:ARG:HB2	1:A:88:ILE:HA	20	0.02
(1,1779)	1:A:22:PRO:HA	1:A:28:TRP:HD1	13	0.02
(1,1779)	1:A:22:PRO:HA	1:A:28:TRP:HD1	15	0.02
(1,1779)	1:A:22:PRO:HA	1:A:28:TRP:HD1	17	0.02
(1,1779)	1:A:22:PRO:HA	1:A:28:TRP:HD1	20	0.02
(1,1768)	1:A:15:VAL:HA	1:A:136:HIS:HE1	3	0.02
(1,1728)	1:A:156:LYS:HA	1:A:156:LYS:HE2	5	0.02
(1,1728)	1:A:156:LYS:HA	1:A:156:LYS:HE3	5	0.02
(1,1725)	1:A:156:LYS:HA	1:A:156:LYS:HG3	5	0.02
(1,1708)	1:A:128:ASN:HA	1:A:128:ASN:HD21	13	0.02
(1,1708)	1:A:128:ASN:HA	1:A:128:ASN:HD21	18	0.02
(1,1633)	1:A:61:GLU:HA	1:A:61:GLU:HG3	14	0.02
(1,1633)	1:A:61:GLU:HA	1:A:61:GLU:HG3	16	0.02
(1,1633)	1:A:61:GLU:HA	1:A:61:GLU:HG3	19	0.02
(1,1614)	1:A:47:LYS:HA	1:A:47:LYS:HG3	12	0.02
(1,1611)	1:A:44:GLU:HA	1:A:44:GLU:HG3	18	0.02
(1,1600)	1:A:37:GLN:HA	1:A:37:GLN:HG3	18	0.02
(1,1598)	1:A:37:GLN:HG2	1:A:38:SER:H	15	0.02
(1,1582)	1:A:30:GLN:HB2	1:A:30:GLN:HE21	9	0.02
(1,1582)	1:A:30:GLN:HB3	1:A:30:GLN:HE21	9	0.02
(1,1573)	1:A:26:GLU:H	1:A:26:GLU:HG2	12	0.02
(1,1573)	1:A:26:GLU:H	1:A:26:GLU:HG3	12	0.02
(1,1559)	1:A:17:LYS:H	1:A:17:LYS:HD2	5	0.02
(1,1559)	1:A:17:LYS:H	1:A:17:LYS:HD3	5	0.02
(1,1550)	1:A:12:GLU:H	1:A:12:GLU:HG2	4	0.02
(1,1550)	1:A:12:GLU:H	1:A:12:GLU:HG2	8	0.02
(1,155)	1:A:37:GLN:HB3	1:A:38:SER:H	6	0.02
(1,1539)	1:A:122:LYS:HA	1:A:126:ALA:H	18	0.02
(1,143)	1:A:36:TYR:H	1:A:36:TYR:HB3	19	0.02
(1,1428)	1:A:135:ALA:HA	1:A:138:MET:HB3	4	0.02
(1,1427)	1:A:135:ALA:HA	1:A:138:MET:HB2	11	0.02
(1,1414)	1:A:121:PHE:HA	1:A:124:LEU:H	4	0.02
(1,1414)	1:A:121:PHE:HA	1:A:124:LEU:H	16	0.02
(1,1386)	1:A:74:ASP:HB3	1:A:75:LEU:H	16	0.02
(1,1382)	1:A:57:GLU:HB2	1:A:58:SER:H	3	0.02



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1382)	1:A:57:GLU:HB2	1:A:58:SER:H	18	0.02
(1,137)	1:A:32:LEU:HA	1:A:36:TYR:H	3	0.02
(1,1369)	1:A:44:GLU:H	1:A:44:GLU:HB3	3	0.02
(1,1360)	1:A:41:ARG:HA	1:A:44:GLU:H	11	0.02
(1,1343)	1:A:34:GLU:HA	1:A:37:GLN:HB3	5	0.02
(1,1336)	1:A:29:VAL:HA	1:A:32:LEU:HB3	16	0.02
(1,1317)	1:A:12:GLU:H	1:A:12:GLU:HB3	3	0.02
(1,1304)	1:A:4:GLU:HA	1:A:7:ARG:H	8	0.02
(1,1300)	1:A:107:ALA:HB1	1:A:108:LYS:H	20	0.02
(1,1300)	1:A:107:ALA:HB2	1:A:108:LYS:H	20	0.02
(1,1300)	1:A:107:ALA:HB3	1:A:108:LYS:H	20	0.02
(1,126)	1:A:34:GLU:H	1:A:34:GLU:HB3	1	0.02
(1,126)	1:A:34:GLU:H	1:A:34:GLU:HB3	13	0.02
(1,126)	1:A:34:GLU:H	1:A:34:GLU:HB3	15	0.02
(1,126)	1:A:34:GLU:H	1:A:34:GLU:HB3	18	0.02
(1,1257)	1:A:70:TRP:H	1:A:146:LEU:HD11	15	0.02
(1,1257)	1:A:70:TRP:H	1:A:146:LEU:HD12	15	0.02
(1,1257)	1:A:70:TRP:H	1:A:146:LEU:HD13	15	0.02
(1,1229)	1:A:18:THR:HG21	1:A:31:ARG:H	12	0.02
(1,1229)	1:A:18:THR:HG22	1:A:31:ARG:H	12	0.02
(1,1229)	1:A:18:THR:HG23	1:A:31:ARG:H	12	0.02
(1,1218)	1:A:28:TRP:HE1	1:A:63:THR:HG21	5	0.02
(1,1218)	1:A:28:TRP:HE1	1:A:63:THR:HG22	5	0.02
(1,1218)	1:A:28:TRP:HE1	1:A:63:THR:HG23	5	0.02
(1,1218)	1:A:28:TRP:HE1	1:A:63:THR:HG21	8	0.02
(1,1218)	1:A:28:TRP:HE1	1:A:63:THR:HG22	8	0.02
(1,1218)	1:A:28:TRP:HE1	1:A:63:THR:HG23	8	0.02
(1,118)	1:A:32:LEU:HB3	1:A:33:LYS:H	16	0.02
(1,1159)	1:A:89:THR:H	1:A:89:THR:HG21	14	0.02
(1,1159)	1:A:89:THR:H	1:A:89:THR:HG22	14	0.02
(1,1159)	1:A:89:THR:H	1:A:89:THR:HG23	14	0.02
(1,1112)	1:A:127:ARG:H	1:A:128:ASN:HD22	4	0.02
(1,1112)	1:A:127:ARG:H	1:A:128:ASN:HD22	20	0.02
(1,1098)	1:A:53:TRP:HE1	1:A:139:ALA:HA	9	0.02
(1,1085)	1:A:51:ASN:HD21	1:A:53:TRP:HE1	6	0.02
(1,1082)	1:A:46:ASN:HD21	1:A:53:TRP:HE1	1	0.02
(1,1079)	1:A:53:TRP:HH2	1:A:143:GLY:H	8	0.02
(1,1072)	1:A:133:GLY:H	1:A:136:HIS:HE1	9	0.02
(1,1072)	1:A:133:GLY:H	1:A:136:HIS:HE1	17	0.02
(1,1054)	1:A:94:ALA:H	1:A:125:TRP:HZ2	3	0.02
(1,1042)	1:A:72:ILE:HG13	1:A:78:TYR:H	11	0.02
(1,1041)	1:A:76:LEU:H	1:A:78:TYR:HE1	11	0.02



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1024)	1:A:63:THR:HA	1:A:65:TRP:HE1	1	0.02
(1,1024)	1:A:63:THR:HA	1:A:65:TRP:HE1	6	0.02
(1,1005)	1:A:57:GLU:H	1:A:65:TRP:HE3	3	0.02
(1,1005)	1:A:57:GLU:H	1:A:65:TRP:HE3	11	0.02
(1,1003)	1:A:56:LEU:H	1:A:65:TRP:HZ3	5	0.02
(1,1001)	1:A:46:ASN:HD22	1:A:53:TRP:H	19	0.02
(1,990)	1:A:12:GLU:HB2	1:A:45:ASN:HD22	3	0.01
(1,990)	1:A:12:GLU:HB2	1:A:45:ASN:HD22	9	0.01
(1,973)	1:A:22:PRO:HA	1:A:28:TRP:HE1	5	0.01
(1,967)	1:A:20:ALA:H	1:A:91:PRO:HD2	6	0.01
(1,965)	1:A:20:ALA:H	1:A:28:TRP:HE3	13	0.01
(1,846)	1:A:61:GLU:H	1:A:61:GLU:HG3	9	0.01
(1,840)	1:A:57:GLU:HG3	1:A:58:SER:H	2	0.01
(1,830)	1:A:51:ASN:HA	1:A:51:ASN:HD21	2	0.01
(1,828)	1:A:51:ASN:HB2	1:A:51:ASN:HD22	16	0.01
(1,780)	1:A:32:LEU:H	1:A:32:LEU:HG	17	0.01
(1,780)	1:A:32:LEU:H	1:A:32:LEU:HG	19	0.01
(1,771)	1:A:25:ARG:HG3	1:A:26:GLU:H	4	0.01
(1,767)	1:A:25:ARG:H	1:A:25:ARG:HG2	2	0.01
(1,767)	1:A:25:ARG:H	1:A:25:ARG:HG2	5	0.01
(1,767)	1:A:25:ARG:H	1:A:25:ARG:HG2	20	0.01
(1,764)	1:A:23:ARG:H	1:A:23:ARG:HG3	3	0.01
(1,760)	1:A:19:ASN:HB2	1:A:19:ASN:HD22	1	0.01
(1,760)	1:A:19:ASN:HB2	1:A:19:ASN:HD22	2	0.01
(1,760)	1:A:19:ASN:HB2	1:A:19:ASN:HD22	10	0.01
(1,760)	1:A:19:ASN:HB2	1:A:19:ASN:HD22	19	0.01
(1,759)	1:A:19:ASN:HB3	1:A:19:ASN:HD22	8	0.01
(1,752)	1:A:13:ILE:H	1:A:13:ILE:HG12	3	0.01
(1,746)	1:A:7:ARG:H	1:A:7:ARG:HG3	8	0.01
(1,744)	1:A:4:GLU:H	1:A:4:GLU:HG2	12	0.01
(1,744)	1:A:4:GLU:H	1:A:4:GLU:HG3	12	0.01
(1,666)	1:A:69:CYS:H	1:A:82:ILE:H	17	0.01
(1,663)	1:A:83:GLU:H	1:A:98:ALA:H	9	0.01
(1,663)	1:A:83:GLU:H	1:A:98:ALA:H	12	0.01
(1,660)	1:A:73:HIS:H	1:A:77:LYS:HA	13	0.01
(1,66)	1:A:24:ASP:H	1:A:25:ARG:H	5	0.01
(1,66)	1:A:24:ASP:H	1:A:25:ARG:H	16	0.01
(1,655)	1:A:70:TRP:H	1:A:79:GLU:HA	4	0.01
(1,652)	1:A:56:LEU:HA	1:A:66:PHE:H	10	0.01
(1,651)	1:A:65:TRP:H	1:A:85:ASP:HA	14	0.01
(1,646)	1:A:59:ASN:H	1:A:64:ARG:H	8	0.01
(1,646)	1:A:59:ASN:H	1:A:64:ARG:H	19	0.01



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,640)	1:A:59:ASN:H	1:A:62:GLY:HA3	12	0.01
(1,640)	1:A:59:ASN:H	1:A:62:GLY:HA3	18	0.01
(1,632)	1:A:49:ALA:HA	1:A:51:ASN:H	11	0.01
(1,632)	1:A:49:ALA:HA	1:A:51:ASN:H	14	0.01
(1,627)	1:A:46:ASN:HA	1:A:49:ALA:H	8	0.01
(1,608)	1:A:21:GLY:H	1:A:24:ASP:HB2	6	0.01
(1,608)	1:A:21:GLY:H	1:A:24:ASP:HB2	11	0.01
(1,60)	1:A:23:ARG:H	1:A:23:ARG:HB3	1	0.01
(1,60)	1:A:23:ARG:H	1:A:23:ARG:HB3	3	0.01
(1,60)	1:A:23:ARG:H	1:A:23:ARG:HB3	7	0.01
(1,60)	1:A:23:ARG:H	1:A:23:ARG:HB3	9	0.01
(1,60)	1:A:23:ARG:H	1:A:23:ARG:HB3	15	0.01
(1,60)	1:A:23:ARG:H	1:A:23:ARG:HB3	20	0.01
(1,580)	1:A:165:CYS:H	1:A:166:ASN:H	2	0.01
(1,577)	1:A:164:LYS:H	1:A:165:CYS:H	1	0.01
(1,574)	1:A:163:GLU:H	1:A:163:GLU:HB3	8	0.01
(1,569)	1:A:161:HIS:HA	1:A:162:LYS:H	19	0.01
(1,554)	1:A:156:LYS:H	1:A:156:LYS:HB3	8	0.01
(1,554)	1:A:156:LYS:H	1:A:156:LYS:HB3	11	0.01
(1,554)	1:A:156:LYS:H	1:A:156:LYS:HB3	16	0.01
(1,51)	1:A:18:THR:HB	1:A:19:ASN:H	16	0.01
(1,474)	1:A:136:HIS:H	1:A:136:HIS:HB3	3	0.01
(1,474)	1:A:136:HIS:H	1:A:136:HIS:HB3	4	0.01
(1,474)	1:A:136:HIS:H	1:A:136:HIS:HB3	5	0.01
(1,474)	1:A:136:HIS:H	1:A:136:HIS:HB3	6	0.01
(1,474)	1:A:136:HIS:H	1:A:136:HIS:HB3	7	0.01
(1,474)	1:A:136:HIS:H	1:A:136:HIS:HB3	8	0.01
(1,474)	1:A:136:HIS:H	1:A:136:HIS:HB3	11	0.01
(1,474)	1:A:136:HIS:H	1:A:136:HIS:HB3	12	0.01
(1,474)	1:A:136:HIS:H	1:A:136:HIS:HB3	13	0.01
(1,474)	1:A:136:HIS:H	1:A:136:HIS:HB3	14	0.01
(1,474)	1:A:136:HIS:H	1:A:136:HIS:HB3	15	0.01
(1,474)	1:A:136:HIS:H	1:A:136:HIS:HB3	17	0.01
(1,474)	1:A:136:HIS:H	1:A:136:HIS:HB3	18	0.01
(1,474)	1:A:136:HIS:H	1:A:136:HIS:HB3	19	0.01
(1,457)	1:A:131:LYS:H	1:A:131:LYS:HB3	3	0.01
(1,457)	1:A:131:LYS:H	1:A:131:LYS:HB3	5	0.01
(1,457)	1:A:131:LYS:H	1:A:131:LYS:HB3	8	0.01
(1,457)	1:A:131:LYS:H	1:A:131:LYS:HB3	14	0.01
(1,457)	1:A:131:LYS:H	1:A:131:LYS:HB3	17	0.01
(1,445)	1:A:125:TRP:HB2	1:A:126:ALA:H	7	0.01
(1,435)	1:A:123:PRO:HA	1:A:125:TRP:H	5	0.01



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,418)	1:A:119:ASP:H	1:A:119:ASP:HB2	5	0.01
(1,374)	1:A:97:ILE:H	1:A:97:ILE:HB	2	0.01
(1,3633)	1:A:150:ILE:O	1:A:154:ILE:H	8	0.01
(1,3629)	1:A:146:LEU:O	1:A:150:ILE:H	9	0.01
(1,3629)	1:A:146:LEU:O	1:A:150:ILE:H	20	0.01
(1,3625)	1:A:141:GLY:O	1:A:145:TRP:H	6	0.01
(1,3625)	1:A:141:GLY:O	1:A:145:TRP:H	8	0.01
(1,3625)	1:A:141:GLY:O	1:A:145:TRP:H	9	0.01
(1,3625)	1:A:141:GLY:O	1:A:145:TRP:H	13	0.01
(1,3622)	1:A:135:ALA:O	1:A:139:ALA:N	19	0.01
(1,3621)	1:A:135:ALA:O	1:A:139:ALA:H	1	0.01
(1,3621)	1:A:135:ALA:O	1:A:139:ALA:H	7	0.01
(1,3621)	1:A:135:ALA:O	1:A:139:ALA:H	15	0.01
(1,3621)	1:A:135:ALA:O	1:A:139:ALA:H	17	0.01
(1,3613)	1:A:65:TRP:O	1:A:84:PHE:H	3	0.01
(1,3613)	1:A:65:TRP:O	1:A:84:PHE:H	12	0.01
(1,3611)	1:A:69:CYS:O	1:A:80:PHE:H	1	0.01
(1,3611)	1:A:69:CYS:O	1:A:80:PHE:H	6	0.01
(1,3609)	1:A:73:HIS:H	1:A:76:LEU:O	4	0.01
(1,3609)	1:A:73:HIS:H	1:A:76:LEU:O	12	0.01
(1,3608)	1:A:53:TRP:O	1:A:70:TRP:N	15	0.01
(1,3608)	1:A:53:TRP:O	1:A:70:TRP:N	18	0.01
(1,3607)	1:A:53:TRP:O	1:A:70:TRP:H	6	0.01
(1,3605)	1:A:69:CYS:H	1:A:80:PHE:O	9	0.01
(1,3603)	1:A:55:ARG:O	1:A:68:LYS:H	4	0.01
(1,3603)	1:A:55:ARG:O	1:A:68:LYS:H	6	0.01
(1,3601)	1:A:67:GLY:H	1:A:82:ILE:O	9	0.01
(1,3597)	1:A:44:GLU:O	1:A:48:ASN:H	4	0.01
(1,3597)	1:A:44:GLU:O	1:A:48:ASN:H	11	0.01
(1,3596)	1:A:43:VAL:O	1:A:47:LYS:N	17	0.01
(1,3595)	1:A:43:VAL:O	1:A:47:LYS:H	4	0.01
(1,3592)	1:A:40:ILE:O	1:A:44:GLU:N	10	0.01
(1,3589)	1:A:39:LEU:O	1:A:43:VAL:H	14	0.01
(1,3589)	1:A:39:LEU:O	1:A:43:VAL:H	16	0.01
(1,3585)	1:A:36:TYR:O	1:A:40:ILE:H	11	0.01
(1,3585)	1:A:36:TYR:O	1:A:40:ILE:H	14	0.01
(1,3585)	1:A:36:TYR:O	1:A:40:ILE:H	15	0.01
(1,3584)	1:A:35:GLU:O	1:A:39:LEU:N	2	0.01
(1,3583)	1:A:35:GLU:O	1:A:39:LEU:H	9	0.01
(1,3581)	1:A:34:GLU:O	1:A:38:SER:H	6	0.01
(1,3581)	1:A:34:GLU:O	1:A:38:SER:H	14	0.01
(1,3581)	1:A:34:GLU:O	1:A:38:SER:H	16	0.01



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,3581)	1:A:34:GLU:O	1:A:38:SER:H	19	0.01
(1,3579)	1:A:32:LEU:O	1:A:36:TYR:H	14	0.01
(1,3579)	1:A:32:LEU:O	1:A:36:TYR:H	20	0.01
(1,3577)	1:A:31:ARG:O	1:A:35:GLU:H	5	0.01
(1,3577)	1:A:31:ARG:O	1:A:35:GLU:H	10	0.01
(1,3577)	1:A:31:ARG:O	1:A:35:GLU:H	17	0.01
(1,3575)	1:A:30:GLN:O	1:A:34:GLU:H	7	0.01
(1,3571)	1:A:27:LEU:O	1:A:31:ARG:H	17	0.01
(1,3569)	1:A:25:ARG:O	1:A:29:VAL:H	9	0.01
(1,3568)	1:A:24:ASP:O	1:A:28:TRP:N	2	0.01
(1,3568)	1:A:24:ASP:O	1:A:28:TRP:N	18	0.01
(1,3565)	1:A:7:ARG:O	1:A:11:SER:H	6	0.01
(1,3565)	1:A:7:ARG:O	1:A:11:SER:H	16	0.01
(1,3563)	1:A:6:THR:O	1:A:10:VAL:H	2	0.01
(1,3561)	1:A:5:ALA:O	1:A:9:VAL:H	3	0.01
(1,3561)	1:A:5:ALA:O	1:A:9:VAL:H	10	0.01
(1,3559)	1:A:4:GLU:O	1:A:8:ARG:H	9	0.01
(1,3548)	1:A:164:LYS:HA	1:A:164:LYS:HG2	6	0.01
(1,3546)	1:A:164:LYS:H	1:A:164:LYS:HB2	8	0.01
(1,3487)	1:A:127:ARG:HB2	1:A:128:ASN:H	5	0.01
(1,3463)	1:A:118:THR:HG21	1:A:121:PHE:HB2	12	0.01
(1,3463)	1:A:118:THR:HG22	1:A:121:PHE:HB2	12	0.01
(1,3463)	1:A:118:THR:HG23	1:A:121:PHE:HB2	12	0.01
(1,344)	1:A:83:GLU:HB3	1:A:84:PHE:H	5	0.01
(1,344)	1:A:83:GLU:HB3	1:A:84:PHE:H	10	0.01
(1,344)	1:A:83:GLU:HB3	1:A:84:PHE:H	20	0.01
(1,3398)	1:A:96:GLU:H	1:A:96:GLU:HG2	4	0.01
(1,3392)	1:A:95:PRO:HG2	1:A:134:LEU:HD11	2	0.01
(1,3392)	1:A:95:PRO:HG2	1:A:134:LEU:HD12	2	0.01
(1,3392)	1:A:95:PRO:HG2	1:A:134:LEU:HD13	2	0.01
(1,3352)	1:A:83:GLU:H	1:A:100:PRO:HD2	19	0.01
(1,3330)	1:A:77:LYS:H	1:A:77:LYS:HD2	1	0.01
(1,3266)	1:A:60:LYS:HB2	1:A:60:LYS:HE2	3	0.01
(1,3266)	1:A:60:LYS:HB2	1:A:60:LYS:HE3	3	0.01
(1,3251)	1:A:58:SER:H	1:A:58:SER:HB2	19	0.01
(1,325)	1:A:78:TYR:HB3	1:A:79:GLU:H	19	0.01
(1,3248)	1:A:57:GLU:HA	1:A:57:GLU:HG2	18	0.01
(1,3197)	1:A:51:ASN:H	1:A:52:ASP:HB2	14	0.01
(1,3178)	1:A:41:ARG:HD2	1:A:45:ASN:H	11	0.01
(1,3168)	1:A:40:ILE:H	1:A:40:ILE:HG12	18	0.01
(1,3168)	1:A:40:ILE:H	1:A:40:ILE:HG12	20	0.01
(1,3075)	1:A:20:ALA:HB1	1:A:24:ASP:HB2	9	0.01



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,3075)	1:A:20:ALA:HB2	1:A:24:ASP:HB2	9	0.01
(1,3075)	1:A:20:ALA:HB3	1:A:24:ASP:HB2	9	0.01
(1,3060)	1:A:19:ASN:HA	1:A:91:PRO:HB2	10	0.01
(1,3011)	1:A:145:TRP:HE3	1:A:148:VAL:HB	10	0.01
(1,2985)	1:A:28:TRP:HZ2	1:A:63:THR:HB	16	0.01
(1,2985)	1:A:28:TRP:HZ2	1:A:63:THR:HB	20	0.01
(1,296)	1:A:70:TRP:HB2	1:A:71:TYR:H	14	0.01
(1,2923)	1:A:18:THR:HG21	1:A:27:LEU:HD11	6	0.01
(1,2923)	1:A:18:THR:HG21	1:A:27:LEU:HD12	6	0.01
(1,2923)	1:A:18:THR:HG21	1:A:27:LEU:HD13	6	0.01
(1,2923)	1:A:18:THR:HG22	1:A:27:LEU:HD11	6	0.01
(1,2923)	1:A:18:THR:HG22	1:A:27:LEU:HD12	6	0.01
(1,2923)	1:A:18:THR:HG22	1:A:27:LEU:HD13	6	0.01
(1,2923)	1:A:18:THR:HG23	1:A:27:LEU:HD11	6	0.01
(1,2923)	1:A:18:THR:HG23	1:A:27:LEU:HD12	6	0.01
(1,2923)	1:A:18:THR:HG23	1:A:27:LEU:HD13	6	0.01
(1,292)	1:A:69:CYS:HB3	1:A:70:TRP:H	11	0.01
(1,29)	1:A:10:VAL:HA	1:A:11:SER:H	17	0.01
(1,2842)	1:A:94:ALA:HB1	1:A:125:TRP:HH2	20	0.01
(1,2842)	1:A:94:ALA:HB2	1:A:125:TRP:HH2	20	0.01
(1,2842)	1:A:94:ALA:HB3	1:A:125:TRP:HH2	20	0.01
(1,2825)	1:A:72:ILE:HD11	1:A:77:LYS:HE3	20	0.01
(1,2825)	1:A:72:ILE:HD12	1:A:77:LYS:HE3	20	0.01
(1,2825)	1:A:72:ILE:HD13	1:A:77:LYS:HE3	20	0.01
(1,2824)	1:A:72:ILE:HD11	1:A:77:LYS:HD3	4	0.01
(1,2824)	1:A:72:ILE:HD12	1:A:77:LYS:HD3	4	0.01
(1,2824)	1:A:72:ILE:HD13	1:A:77:LYS:HD3	4	0.01
(1,2820)	1:A:118:THR:HG21	1:A:121:PHE:HB2	12	0.01
(1,2820)	1:A:118:THR:HG22	1:A:121:PHE:HB2	12	0.01
(1,2820)	1:A:118:THR:HG23	1:A:121:PHE:HB2	12	0.01
(1,2806)	1:A:109:MET:HE1	1:A:145:TRP:HZ2	10	0.01
(1,2806)	1:A:109:MET:HE2	1:A:145:TRP:HZ2	10	0.01
(1,2806)	1:A:109:MET:HE3	1:A:145:TRP:HZ2	10	0.01
(1,2805)	1:A:109:MET:HE1	1:A:145:TRP:HH2	17	0.01
(1,2805)	1:A:109:MET:HE2	1:A:145:TRP:HH2	17	0.01
(1,2805)	1:A:109:MET:HE3	1:A:145:TRP:HH2	17	0.01
(1,2798)	1:A:109:MET:HE1	1:A:115:ILE:HG21	11	0.01
(1,2798)	1:A:109:MET:HE1	1:A:115:ILE:HG22	11	0.01
(1,2798)	1:A:109:MET:HE1	1:A:115:ILE:HG23	11	0.01
(1,2798)	1:A:109:MET:HE2	1:A:115:ILE:HG21	11	0.01
(1,2798)	1:A:109:MET:HE2	1:A:115:ILE:HG22	11	0.01
(1,2798)	1:A:109:MET:HE2	1:A:115:ILE:HG23	11	0.01



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,2798)	1:A:109:MET:HE3	1:A:115:ILE:HG21	11	0.01
(1,2798)	1:A:109:MET:HE3	1:A:115:ILE:HG22	11	0.01
(1,2798)	1:A:109:MET:HE3	1:A:115:ILE:HG23	11	0.01
(1,2798)	1:A:109:MET:HE1	1:A:115:ILE:HG21	14	0.01
(1,2798)	1:A:109:MET:HE1	1:A:115:ILE:HG22	14	0.01
(1,2798)	1:A:109:MET:HE1	1:A:115:ILE:HG23	14	0.01
(1,2798)	1:A:109:MET:HE2	1:A:115:ILE:HG21	14	0.01
(1,2798)	1:A:109:MET:HE2	1:A:115:ILE:HG22	14	0.01
(1,2798)	1:A:109:MET:HE2	1:A:115:ILE:HG23	14	0.01
(1,2798)	1:A:109:MET:HE3	1:A:115:ILE:HG21	14	0.01
(1,2798)	1:A:109:MET:HE3	1:A:115:ILE:HG22	14	0.01
(1,2798)	1:A:109:MET:HE3	1:A:115:ILE:HG23	14	0.01
(1,279)	1:A:65:TRP:HB2	1:A:66:PHE:H	5	0.01
(1,279)	1:A:65:TRP:HB2	1:A:66:PHE:H	17	0.01
(1,279)	1:A:65:TRP:HB2	1:A:66:PHE:H	18	0.01
(1,2763)	1:A:76:LEU:HD21	1:A:163:GLU:HA	6	0.01
(1,2763)	1:A:76:LEU:HD22	1:A:163:GLU:HA	6	0.01
(1,2763)	1:A:76:LEU:HD23	1:A:163:GLU:HA	6	0.01
(1,2746)	1:A:80:PHE:HZ	1:A:159:ILE:HG21	20	0.01
(1,2746)	1:A:80:PHE:HZ	1:A:159:ILE:HG22	20	0.01
(1,2746)	1:A:80:PHE:HZ	1:A:159:ILE:HG23	20	0.01
(1,2732)	1:A:78:TYR:HB3	1:A:154:ILE:HD11	15	0.01
(1,2732)	1:A:78:TYR:HB3	1:A:154:ILE:HD12	15	0.01
(1,2732)	1:A:78:TYR:HB3	1:A:154:ILE:HD13	15	0.01
(1,2732)	1:A:78:TYR:HB3	1:A:154:ILE:HD11	19	0.01
(1,2732)	1:A:78:TYR:HB3	1:A:154:ILE:HD12	19	0.01
(1,2732)	1:A:78:TYR:HB3	1:A:154:ILE:HD13	19	0.01
(1,2731)	1:A:151:PRO:HA	1:A:154:ILE:HD11	5	0.01
(1,2731)	1:A:151:PRO:HA	1:A:154:ILE:HD12	5	0.01
(1,2731)	1:A:151:PRO:HA	1:A:154:ILE:HD13	5	0.01
(1,2718)	1:A:153:LEU:HD11	1:A:156:LYS:HE2	15	0.01
(1,2718)	1:A:153:LEU:HD11	1:A:156:LYS:HE3	15	0.01
(1,2718)	1:A:153:LEU:HD12	1:A:156:LYS:HE2	15	0.01
(1,2718)	1:A:153:LEU:HD12	1:A:156:LYS:HE3	15	0.01
(1,2718)	1:A:153:LEU:HD13	1:A:156:LYS:HE2	15	0.01
(1,2718)	1:A:153:LEU:HD13	1:A:156:LYS:HE3	15	0.01
(1,270)	1:A:64:ARG:H	1:A:64:ARG:HB3	20	0.01
(1,2680)	1:A:53:TRP:HE3	1:A:146:LEU:HD21	20	0.01
(1,2680)	1:A:53:TRP:HE3	1:A:146:LEU:HD22	20	0.01
(1,2680)	1:A:53:TRP:HE3	1:A:146:LEU:HD23	20	0.01
(1,2626)	1:A:95:PRO:HG3	1:A:134:LEU:HD11	1	0.01
(1,2626)	1:A:95:PRO:HG3	1:A:134:LEU:HD12	1	0.01



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

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,2626)	1:A:95:PRO:HG3	1:A:134:LEU:HD13	1	0.01
(1,2626)	1:A:95:PRO:HG3	1:A:134:LEU:HD11	14	0.01
(1,2626)	1:A:95:PRO:HG3	1:A:134:LEU:HD12	14	0.01
(1,2626)	1:A:95:PRO:HG3	1:A:134:LEU:HD13	14	0.01
(1,2625)	1:A:95:PRO:HG2	1:A:134:LEU:HD11	2	0.01
(1,2625)	1:A:95:PRO:HG2	1:A:134:LEU:HD12	2	0.01
(1,2625)	1:A:95:PRO:HG2	1:A:134:LEU:HD13	2	0.01
(1,262)	1:A:61:GLU:H	1:A:61:GLU:HB3	2	0.01
(1,262)	1:A:61:GLU:H	1:A:61:GLU:HB3	10	0.01
(1,262)	1:A:61:GLU:H	1:A:61:GLU:HB3	14	0.01
(1,262)	1:A:61:GLU:H	1:A:61:GLU:HB3	16	0.01
(1,2606)	1:A:92:THR:HA	1:A:129:VAL:HG21	3	0.01
(1,2606)	1:A:92:THR:HA	1:A:129:VAL:HG22	3	0.01
(1,2606)	1:A:92:THR:HA	1:A:129:VAL:HG23	3	0.01
(1,2600)	1:A:129:VAL:HG11	1:A:130:PRO:HA	4	0.01
(1,2600)	1:A:129:VAL:HG12	1:A:130:PRO:HA	4	0.01
(1,2600)	1:A:129:VAL:HG13	1:A:130:PRO:HA	4	0.01
(1,2600)	1:A:129:VAL:HG11	1:A:130:PRO:HA	19	0.01
(1,2600)	1:A:129:VAL:HG12	1:A:130:PRO:HA	19	0.01
(1,2600)	1:A:129:VAL:HG13	1:A:130:PRO:HA	19	0.01
(1,260)	1:A:60:LYS:HB3	1:A:61:GLU:H	6	0.01
(1,259)	1:A:60:LYS:HB2	1:A:61:GLU:H	12	0.01
(1,253)	1:A:58:SER:HB3	1:A:59:ASN:H	7	0.01
(1,253)	1:A:58:SER:HB3	1:A:59:ASN:H	18	0.01
(1,2529)	1:A:97:ILE:HD11	1:A:115:ILE:HD11	3	0.01
(1,2529)	1:A:97:ILE:HD11	1:A:115:ILE:HD12	3	0.01
(1,2529)	1:A:97:ILE:HD11	1:A:115:ILE:HD13	3	0.01
(1,2529)	1:A:97:ILE:HD12	1:A:115:ILE:HD11	3	0.01
(1,2529)	1:A:97:ILE:HD12	1:A:115:ILE:HD12	3	0.01
(1,2529)	1:A:97:ILE:HD12	1:A:115:ILE:HD13	3	0.01
(1,2529)	1:A:97:ILE:HD13	1:A:115:ILE:HD11	3	0.01
(1,2529)	1:A:97:ILE:HD13	1:A:115:ILE:HD12	3	0.01
(1,2529)	1:A:97:ILE:HD13	1:A:115:ILE:HD13	3	0.01
(1,252)	1:A:58:SER:HB2	1:A:59:ASN:H	3	0.01
(1,252)	1:A:58:SER:HB2	1:A:59:ASN:H	11	0.01
(1,2513)	1:A:97:ILE:HD11	1:A:142:LEU:HB3	1	0.01
(1,2513)	1:A:97:ILE:HD12	1:A:142:LEU:HB3	1	0.01
(1,2513)	1:A:97:ILE:HD13	1:A:142:LEU:HB3	1	0.01
(1,2513)	1:A:97:ILE:HD11	1:A:142:LEU:HB3	13	0.01
(1,2513)	1:A:97:ILE:HD12	1:A:142:LEU:HB3	13	0.01
(1,2513)	1:A:97:ILE:HD13	1:A:142:LEU:HB3	13	0.01
(1,2513)	1:A:97:ILE:HD11	1:A:142:LEU:HB3	16	0.01



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,2513)	1:A:97:ILE:HD12	1:A:142:LEU:HB3	16	0.01
(1,2513)	1:A:97:ILE:HD13	1:A:142:LEU:HB3	16	0.01
(1,2505)	1:A:94:ALA:HB1	1:A:137:LEU:HB3	5	0.01
(1,2505)	1:A:94:ALA:HB2	1:A:137:LEU:HB3	5	0.01
(1,2505)	1:A:94:ALA:HB3	1:A:137:LEU:HB3	5	0.01
(1,2505)	1:A:94:ALA:HB1	1:A:137:LEU:HB3	6	0.01
(1,2505)	1:A:94:ALA:HB2	1:A:137:LEU:HB3	6	0.01
(1,2505)	1:A:94:ALA:HB3	1:A:137:LEU:HB3	6	0.01
(1,248)	1:A:57:GLU:HA	1:A:58:SER:H	8	0.01
(1,248)	1:A:57:GLU:HA	1:A:58:SER:H	19	0.01
(1,2442)	1:A:74:ASP:HB3	1:A:154:ILE:HG21	4	0.01
(1,2442)	1:A:74:ASP:HB3	1:A:154:ILE:HG22	4	0.01
(1,2442)	1:A:74:ASP:HB3	1:A:154:ILE:HG23	4	0.01
(1,2436)	1:A:72:ILE:HD11	1:A:77:LYS:HE2	17	0.01
(1,2436)	1:A:72:ILE:HD12	1:A:77:LYS:HE2	17	0.01
(1,2436)	1:A:72:ILE:HD13	1:A:77:LYS:HE2	17	0.01
(1,2414)	1:A:22:PRO:HA	1:A:63:THR:HG21	5	0.01
(1,2414)	1:A:22:PRO:HA	1:A:63:THR:HG22	5	0.01
(1,2414)	1:A:22:PRO:HA	1:A:63:THR:HG23	5	0.01
(1,2409)	1:A:32:LEU:HD11	1:A:61:GLU:HA	17	0.01
(1,2409)	1:A:32:LEU:HD12	1:A:61:GLU:HA	17	0.01
(1,2409)	1:A:32:LEU:HD13	1:A:61:GLU:HA	17	0.01
(1,2404)	1:A:56:LEU:HD11	1:A:67:GLY:HA3	9	0.01
(1,2404)	1:A:56:LEU:HD12	1:A:67:GLY:HA3	9	0.01
(1,2404)	1:A:56:LEU:HD13	1:A:67:GLY:HA3	9	0.01
(1,2387)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:47:LYS:HE2	15	0.01
(1,2387)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:47:LYS:HE3	15	0.01
(1,2387)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:47:LYS:HE2	15	0.01
(1,2387)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:47:LYS:HE3	15	0.01
(1,2387)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:47:LYS:HE2	15	0.01
(1,2387)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:47:LYS:HE3	15	0.01
(1,2387)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:47:LYS:HE2	18	0.01
(1,2387)	1:A:43:VAL:HG11	1:A:47:LYS:HE3	18	0.01
(1,2387)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:47:LYS:HE2	18	0.01
(1,2387)	1:A:43:VAL:HG12	1:A:47:LYS:HE3	18	0.01
(1,2387)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:47:LYS:HE2	18	0.01
(1,2387)	1:A:43:VAL:HG13	1:A:47:LYS:HE3	18	0.01
(1,237)	1:A:54:PHE:HB3	1:A:55:ARG:H	17	0.01
(1,2358)	1:A:39:LEU:HD21	1:A:65:TRP:HZ3	1	0.01
(1,2358)	1:A:39:LEU:HD22	1:A:65:TRP:HZ3	1	0.01
(1,2358)	1:A:39:LEU:HD23	1:A:65:TRP:HZ3	1	0.01
(1,2358)	1:A:39:LEU:HD21	1:A:65:TRP:HZ3	10	0.01



Continued from previous page...

Key Atom-1		Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,2358)	1:A:39:LEU:HD22	1:A:65:TRP:HZ3	10	0.01
(1,2358)	1:A:39:LEU:HD23	1:A:65:TRP:HZ3	10	0.01
(1,2338)	1:A:18:THR:HG21	1:A:30:GLN:HB2	10	0.01
(1,2338)	1:A:18:THR:HG21	1:A:30:GLN:HB3	10	0.01
(1,2338)	1:A:18:THR:HG22	1:A:30:GLN:HB2	10	0.01
(1,2338)	1:A:18:THR:HG22	1:A:30:GLN:HB3	10	0.01
(1,2338)	1:A:18:THR:HG23	1:A:30:GLN:HB2	10	0.01
(1,2338)	1:A:18:THR:HG23	1:A:30:GLN:HB3	10	0.01
(1,2338)	1:A:18:THR:HG21	1:A:30:GLN:HB2	20	0.01
(1,2338)	1:A:18:THR:HG21	1:A:30:GLN:HB3	20	0.01
(1,2338)	1:A:18:THR:HG22	1:A:30:GLN:HB2	20	0.01
(1,2338)	1:A:18:THR:HG22	1:A:30:GLN:HB3	20	0.01
(1,2338)	1:A:18:THR:HG23	1:A:30:GLN:HB2	20	0.01
(1,2338)	1:A:18:THR:HG23	1:A:30:GLN:HB3	20	0.01
(1,2267)	1:A:10:VAL:HA	1:A:13:ILE:HD11	15	0.01
(1,2267)	1:A:10:VAL:HA	1:A:13:ILE:HD12	15	0.01
(1,2267)	1:A:10:VAL:HA	1:A:13:ILE:HD13	15	0.01
(1,2148)	1:A:75:LEU:HA	1:A:75:LEU:HD11	18	0.01
(1,2148)	1:A:75:LEU:HA	1:A:75:LEU:HD12	18	0.01
(1,2148)	1:A:75:LEU:HA	1:A:75:LEU:HD13	18	0.01
(1,2141)	1:A:56:LEU:HD11	1:A:57:GLU:H	12	0.01
(1,2141)	1:A:56:LEU:HD12	1:A:57:GLU:H	12	0.01
(1,2141)	1:A:56:LEU:HD13	1:A:57:GLU:H	12	0.01
(1,2089)	1:A:73:HIS:H	1:A:78:TYR:HE1	10	0.01
(1,2086)	1:A:70:TRP:HD1	1:A:72:ILE:HG12	6	0.01
(1,2059)	1:A:128:ASN:HB3	1:A:132:PHE:HE1	20	0.01
(1,2048)	1:A:121:PHE:HZ	1:A:125:TRP:HB3	4	0.01
(1,2040)	1:A:53:TRP:HH2	1:A:138:MET:HA	3	0.01
(1,202)	1:A:45:ASN:HB3	1:A:46:ASN:H	14	0.01
(1,2019)	1:A:22:PRO:HB2	1:A:28:TRP:HZ2	8	0.01
(1,1991)	1:A:84:PHE:HB3	1:A:97:ILE:HA	13	0.01
(1,1983)	1:A:131:LYS:HA	1:A:131:LYS:HD3	14	0.01
(1,197)	1:A:45:ASN:H	1:A:45:ASN:HB3	12	0.01
(1,195)	1:A:44:GLU:HB2	1:A:45:ASN:H	19	0.01
(1,1949)	1:A:125:TRP:HH2	1:A:137:LEU:HA	10	0.01
(1,1949)	1:A:125:TRP:HH2	1:A:137:LEU:HA	12	0.01
(1,1948)	1:A:46:ASN:HB2	1:A:52:ASP:HA	7	0.01
(1,1948)	1:A:46:ASN:HB3	1:A:52:ASP:HA	7	0.01
(1,1939)	1:A:10:VAL:HA	1:A:13:ILE:HG13	6	0.01
(1,1935)	1:A:150:ILE:HB	1:A:151:PRO:HD2	12	0.01
(1,1935)	1:A:150:ILE:HB	1:A:151:PRO:HD3	12	0.01
(1,1935)	1:A:150:ILE:HB	1:A:151:PRO:HD2	14	0.01



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1935)	1:A:150:ILE:HB	1:A:151:PRO:HD3	14	0.01
(1,193)	1:A:43:VAL:HA	1:A:45:ASN:H	9	0.01
(1,1921)	1:A:127:ARG:HB2	1:A:128:ASN:HD22	6	0.01
(1,190)	1:A:41:ARG:HA	1:A:45:ASN:H	14	0.01
(1,1897)	1:A:117:LEU:HA	1:A:145:TRP:HD1	1	0.01
(1,1888)	1:A:89:THR:HB	1:A:93:THR:HB	13	0.01
(1,1888)	1:A:89:THR:HB	1:A:93:THR:HB	17	0.01
(1,1885)	1:A:90:TYR:HE1	1:A:95:PRO:HD3	2	0.01
(1,1874)	1:A:81:ASP:HB2	1:A:83:GLU:HG2	18	0.01
(1,1874)	1:A:81:ASP:HB2	1:A:83:GLU:HG3	18	0.01
(1,1823)	1:A:56:LEU:HG	1:A:65:TRP:HE3	16	0.01
(1,1819)	1:A:47:LYS:HA	1:A:52:ASP:HB2	17	0.01
(1,1819)	1:A:47:LYS:HA	1:A:52:ASP:HB2	20	0.01
(1,1818)	1:A:46:ASN:HA	1:A:51:ASN:HB2	20	0.01
(1,1807)	1:A:41:ARG:HD2	1:A:45:ASN:HD22	11	0.01
(1,1804)	1:A:36:TYR:H	1:A:37:GLN:HG3	20	0.01
(1,1786)	1:A:23:ARG:HB2	1:A:88:ILE:HA	9	0.01
(1,1779)	1:A:22:PRO:HA	1:A:28:TRP:HD1	4	0.01
(1,1779)	1:A:22:PRO:HA	1:A:28:TRP:HD1	7	0.01
(1,1774)	1:A:16:LEU:HG	1:A:34:GLU:HB3	12	0.01
(1,1740)	1:A:162:LYS:HA	1:A:162:LYS:HE2	3	0.01
(1,1740)	1:A:162:LYS:HA	1:A:162:LYS:HE3	3	0.01
(1,1644)	1:A:64:ARG:HD3	1:A:65:TRP:H	8	0.01
(1,162)	1:A:38:SER:H	1:A:40:ILE:H	13	0.01
(1,1614)	1:A:47:LYS:HA	1:A:47:LYS:HG3	4	0.01
(1,1611)	1:A:44:GLU:HA	1:A:44:GLU:HG3	16	0.01
(1,1600)	1:A:37:GLN:HA	1:A:37:GLN:HG3	3	0.01
(1,1600)	1:A:37:GLN:HA	1:A:37:GLN:HG3	8	0.01
(1,1600)	1:A:37:GLN:HA	1:A:37:GLN:HG3	17	0.01
(1,1591)	1:A:33:LYS:HB2	1:A:33:LYS:HE2	4	0.01
(1,1591)	1:A:33:LYS:HB2	1:A:33:LYS:HE3	4	0.01
(1,1591)	1:A:33:LYS:HB3	1:A:33:LYS:HE2	4	0.01
(1,1591)	1:A:33:LYS:HB3	1:A:33:LYS:HE3	4	0.01
(1,1582)	1:A:30:GLN:HB2	1:A:30:GLN:HE21	11	0.01
(1,1582)	1:A:30:GLN:HB3	1:A:30:GLN:HE21	11	0.01
(1,1572)	1:A:25:ARG:HB3	1:A:25:ARG:HG2	15	0.01
(1,1565)	1:A:23:ARG:HA	1:A:23:ARG:HG3	17	0.01
(1,1554)	1:A:13:ILE:HA	1:A:14:PRO:HD2	18	0.01
(1,1550)	1:A:12:GLU:H	1:A:12:GLU:HG2	15	0.01
(1,155)	1:A:37:GLN:HB3	1:A:38:SER:H	3	0.01
(1,155)	1:A:37:GLN:HB3	1:A:38:SER:H	11	0.01
(1,155)	1:A:37:GLN:HB3	1:A:38:SER:H	13	0.01



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1494)	1:A:87:PRO:HA	1:A:89:THR:H	2	0.01
(1,1494)	1:A:87:PRO:HA	1:A:89:THR:H	5	0.01
(1,1445)	1:A:4:GLU:HA	1:A:6:THR:H	12	0.01
(1,143)	1:A:36:TYR:H	1:A:36:TYR:HB3	12	0.01
(1,1428)	1:A:135:ALA:HA	1:A:138:MET:HB3	5	0.01
(1,1414)	1:A:121:PHE:HA	1:A:124:LEU:H	5	0.01
(1,1389)	1:A:85:ASP:H	1:A:85:ASP:HB2	6	0.01
(1,1386)	1:A:74:ASP:HB3	1:A:75:LEU:H	10	0.01
(1,1382)	1:A:57:GLU:HB2	1:A:58:SER:H	2	0.01
(1,1382)	1:A:57:GLU:HB2	1:A:58:SER:H	6	0.01
(1,1382)	1:A:57:GLU:HB2	1:A:58:SER:H	12	0.01
(1,1368)	1:A:41:ARG:HA	1:A:44:GLU:HB3	3	0.01
(1,1360)	1:A:41:ARG:HA	1:A:44:GLU:H	1	0.01
(1,1360)	1:A:41:ARG:HA	1:A:44:GLU:H	2	0.01
(1,1360)	1:A:41:ARG:HA	1:A:44:GLU:H	6	0.01
(1,1343)	1:A:34:GLU:HA	1:A:37:GLN:HB3	11	0.01
(1,1337)	1:A:32:LEU:H	1:A:32:LEU:HB3	11	0.01
(1,1336)	1:A:29:VAL:HA	1:A:32:LEU:HB3	11	0.01
(1,1336)	1:A:29:VAL:HA	1:A:32:LEU:HB3	13	0.01
(1,1328)	1:A:25:ARG:HB3	1:A:26:GLU:H	19	0.01
(1,1317)	1:A:12:GLU:H	1:A:12:GLU:HB3	1	0.01
(1,1317)	1:A:12:GLU:H	1:A:12:GLU:HB3	10	0.01
(1,1317)	1:A:12:GLU:H	1:A:12:GLU:HB3	12	0.01
(1,1317)	1:A:12:GLU:H	1:A:12:GLU:HB3	17	0.01
(1,1317)	1:A:12:GLU:H	1:A:12:GLU:HB3	19	0.01
(1,1316)	1:A:12:GLU:HA	1:A:13:ILE:H	13	0.01
(1,1307)	1:A:6:THR:HA	1:A:9:VAL:HB	17	0.01
(1,129)	1:A:32:LEU:HA	1:A:35:GLU:H	9	0.01
(1,126)	1:A:34:GLU:H	1:A:34:GLU:HB3	5	0.01
(1,126)	1:A:34:GLU:H	1:A:34:GLU:HB3	7	0.01
(1,126)	1:A:34:GLU:H	1:A:34:GLU:HB3	12	0.01
(1,1211)	1:A:19:ASN:HD21	1:A:129:VAL:HG11	20	0.01
(1,1211)	1:A:19:ASN:HD21	1:A:129:VAL:HG12	20	0.01
(1,1211)	1:A:19:ASN:HD21	1:A:129:VAL:HG13	20	0.01
(1,1163)	1:A:97:ILE:H	1:A:97:ILE:HD11	13	0.01
(1,1163)	1:A:97:ILE:H	1:A:97:ILE:HD12	13	0.01
(1,1163)	1:A:97:ILE:H	1:A:97:ILE:HD13	13	0.01
(1,1116)	1:A:127:ARG:H	1:A:127:ARG:HG3	18	0.01
(1,1109)	1:A:46:ASN:HD22	1:A:51:ASN:HD22	1	0.01
(1,1098)	1:A:53:TRP:HE1	1:A:139:ALA:HA	8	0.01
(1,1082)	1:A:46:ASN:HD21	1:A:53:TRP:HE1	13	0.01
(1,1079)	1:A:53:TRP:HH2	1:A:143:GLY:H	9	0.01



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,1079)	1:A:53:TRP:HH2	1:A:143:GLY:H	15	0.01
(1,1073)	1:A:39:LEU:HG	1:A:135:ALA:H	2	0.01
(1,1072)	1:A:133:GLY:H	1:A:136:HIS:HE1	3	0.01
(1,1072)	1:A:133:GLY:H	1:A:136:HIS:HE1	10	0.01
(1,1069)	1:A:127:ARG:HB2	1:A:128:ASN:HD21	20	0.01
(1,1066)	1:A:124:LEU:HA	1:A:128:ASN:HD21	11	0.01
(1,1054)	1:A:94:ALA:H	1:A:125:TRP:HZ2	2	0.01
(1,1054)	1:A:94:ALA:H	1:A:125:TRP:HZ2	5	0.01
(1,1054)	1:A:94:ALA:H	1:A:125:TRP:HZ2	18	0.01
(1,1054)	1:A:94:ALA:H	1:A:125:TRP:HZ2	20	0.01
(1,1035)	1:A:53:TRP:HE3	1:A:70:TRP:H	9	0.01
(1,1028)	1:A:65:TRP:HE1	1:A:86:ILE:HG12	12	0.01
(1,1024)	1:A:63:THR:HA	1:A:65:TRP:HE1	12	0.01
(1,1024)	1:A:63:THR:HA	1:A:65:TRP:HE1	14	0.01
(1,1014)	1:A:59:ASN:HD22	1:A:63:THR:H	6	0.01
(1,1006)	1:A:57:GLU:H	1:A:65:TRP:HB3	17	0.01
(1,1005)	1:A:57:GLU:H	1:A:65:TRP:HE3	13	0.01
(1,1003)	1:A:56:LEU:H	1:A:65:TRP:HZ3	8	0.01
(1,1003)	1:A:56:LEU:H	1:A:65:TRP:HZ3	17	0.01
(1,1003)	1:A:56:LEU:H	1:A:65:TRP:HZ3	18	0.01



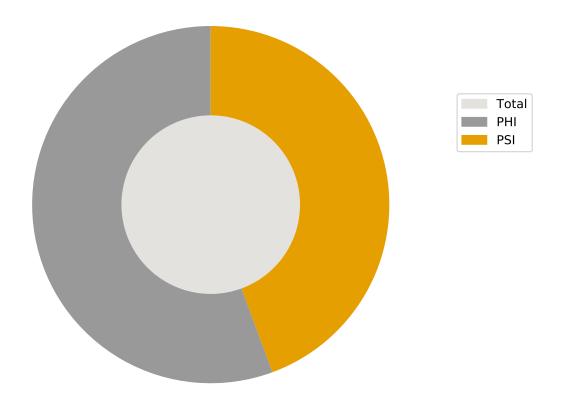
9 Dihedral angle restraints analysis

9.1 Dihedral angle restraints summary

Angle name	Count	%
PHI	203	55.6
PSI	162	44.4
Total	365	100.0

9.1.1 Pie chart : Dihedral angle restraints

There are 0 unmapped restraints



9.2 Dihedral angle violations

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

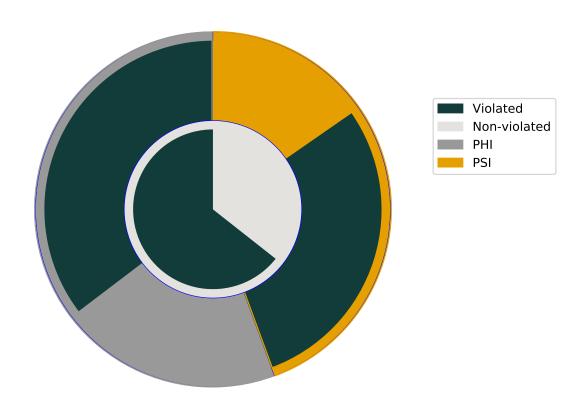
Angle name	Count	$\%^1$	$\%^2$
PHI	129	63.5	54.9
PSI	106	65.4	45.1



Angle name	Count	$\%^1$	$\%^2$
Total	235	64.4	100.0

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

9.2.1 Pie chart: Dihedral angle violations



9.3 Consistent dihedral angle violations

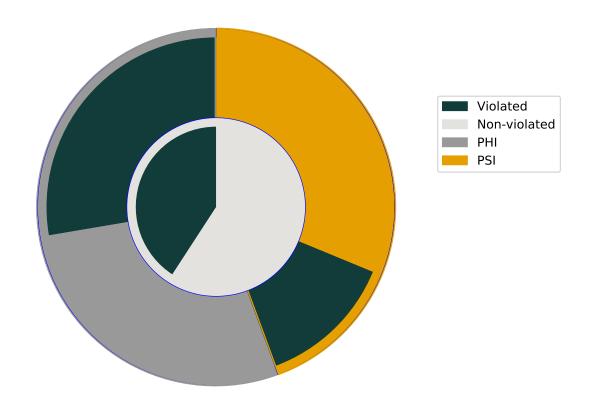
The following table provides the summary of consistently violated restraints. Restraints that are violated all models are counted as violated.

Angle name	Count	$\%^1$	$\%^2$
PHI	101	49.8	67.8
PSI	48	29.6	32.2
Total	149	40.8	100.0

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



9.3.1 Pie chart: Consistent dihedral angle violations



9.4 Residual dihedral angle violations

Violation are counted in different bin sizes and listed below

Range (\circ)	No. of violated restraints per model	$ \text{Max violation } (\circ) $
0.0-5.0	18.8	4.98
5.0-10.0	3.9	9.99
10.0-20.0	13.1	20.0
20.0-40.0	38.6	40.0
40.0-80.0	53.2	80.0
80.0<	47.8	143.49

9.5 Dihedral angle violations in the ensemble

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

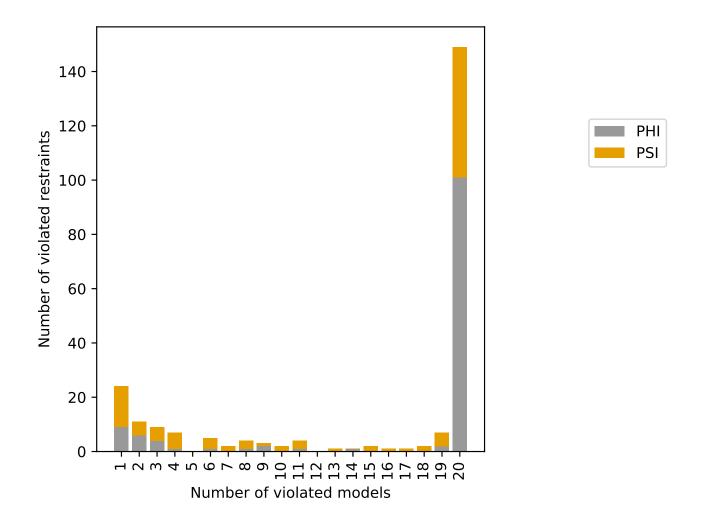
No.	of vic	lated restraints	No. of violated models
PHI	PSI	Total	No. of violated models
9	15	24	1



		$\overline{ m plated\ restraints}$	
PHI	PSI	Total	No. of violated models
6	5	11	2
4	5	9	3
1	6	7	4
0	0	0	5
1	4	5	6
0	2	2	7
1	3	4	8
2	1	3	9
0	2	2	10
1	3	4	11
0	0	0	12
0	1	1	13
1	0	1	14
0	2	2	15
0	1	1	16
0	1	1	17
0	2	2	18
2	5	7	19
101	48	149	20



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



9.6 Violations in each model

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

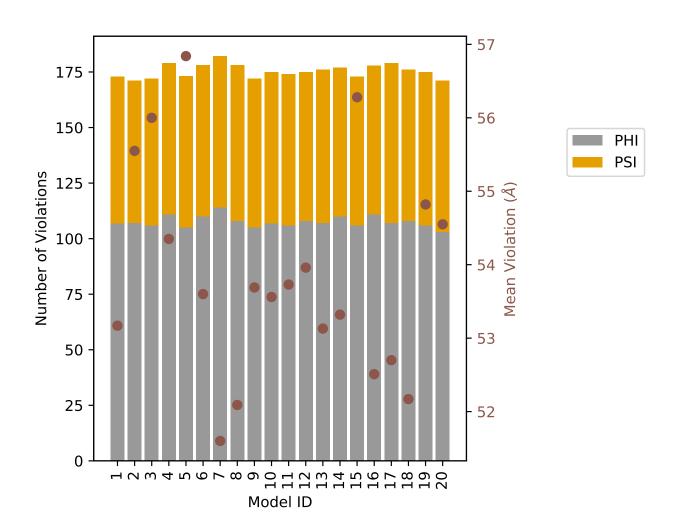
Model ID	No.	of vic	olations	Mean (Å) Max (Å		
Model 1D	PHI	PSI	Total	Mean (A)	Wax (A)	
1	107	66	173	53.17	133.31	
2	107	64	171	55.55	143.4	
3	106	66	172	56.0	132.28	
4	111	68	179	54.35	142.69	
5	105	68	173	56.84	130.21	
6	110	68	178	53.6	129.27	
7	114	68	182	51.6	135.74	
8	108	70	178	52.09	140.55	
9	105	67	172	53.69	132.72	



Continued from previous page...

Model ID	No.	of vic	olations	Mean (Å)	Max (Å)
Wiodei 1D	PHI	PSI	Total	Mean (A)	Max (A)
10	107	68	175	53.56	140.25
11	106	68	174	53.73	139.01
12	108	67	175	53.96	132.8
13	107	69	176	53.13	134.86
14	110	67	177	53.32	136.34
15	106	67	173	56.28	135.5
16	111	67	178	52.51	142.07
17	107	72	179	52.7	137.21
18	108	68	176	52.17	126.45
19	106	69	175	54.82	143.49
20	103	68	171	54.55	127.17

9.6.1 Bar graph: Violations in each model

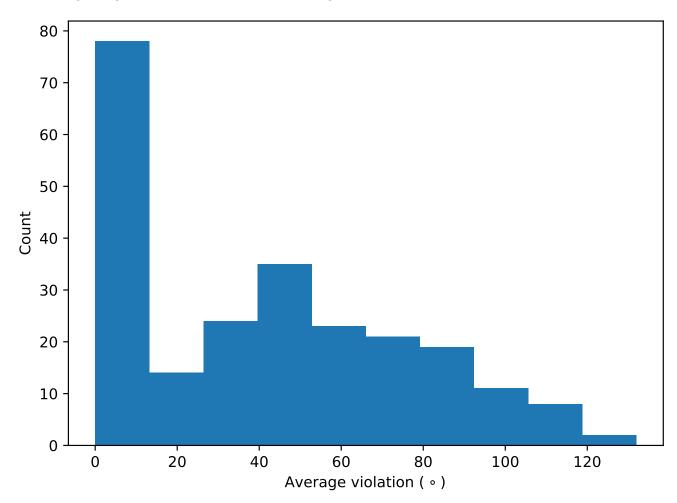




9.7 Most violated dihedral angle restraints

9.7.1 Histogram: Distribution of mean dihedral angle violations

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



9.7.2 Table: Most violated dihedral angle restraints

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

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models	Mean (o)	Max (o)
(1,224)	1:A:74:ASP:N	1:A:74:ASP:CA	1:A:74:ASP:C	1:A:75:LEU:N	16	131.94	143.49
(1,354)	1:A:163:GLU:N	1:A:163:GLU:CA	1:A:163:GLU:C	1:A:164:LYS:N	19	75.07	139.01
(1,289)	1:A:110:TYR:N	1:A:110:TYR:CA	1:A:110:TYR:C	1:A:111:ARG:N	20	48.28	136.34
(1,359)	1:A:165:CYS:N	1:A:165:CYS:CA	1:A:165:CYS:C	1:A:166:ASN:N	20	76.03	135.74
(1,283)	1:A:108:LYS:N	1:A:108:LYS:CA	1:A:108:LYS:C	1:A:109:MET:N	20	90.85	135.5
(1,280)	1:A:107:ALA:N	1:A:107:ALA:CA	1:A:107:ALA:C	1:A:108:LYS:N	18	62.8	132.72
(1,345)	1:A:160:GLN:N	1:A:160:GLN:CA	1:A:160:GLN:C	1:A:161:HIS:N	20	80.54	128.84
(1,348)	1:A:161:HIS:N	1:A:161:HIS:CA	1:A:161:HIS:C	1:A:162:LYS:N	20	73.02	126.41
(1,292)	1:A:111:ARG:N	1:A:111:ARG:CA	1:A:111:ARG:C	1:A:112:GLY:N	20	84.47	122.82
(1,362)	1:A:166:ASN:N	1:A:166:ASN:CA	1:A:166:ASN:C	1:A:167:GLN:N	20	68.66	122.37



	ed from previous pe	•			3.5 1.1	7.4	7.5
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models	Mean (o)	Max (∘)
(1,365)	1:A:167:GLN:N	1:A:167:GLN:CA	1:A:167:GLN:C	1:A:168:LEU:N	20	70.2	119.2
(1,187)	1:A:21:GLY:N	1:A:21:GLY:CA	1:A:21:GLY:C	1:A:22:PRO:N	20	111.96	118.22
(1,351)	1:A:162:LYS:N	1:A:162:LYS:CA	1:A:162:LYS:C	1:A:163:GLU:N	20	40.93	116.49
(1,203)	1:A:52:ASP:N	1:A:52:ASP:CA	1:A:52:ASP:C	1:A:53:TRP:N	20	93.29	113.99
(1,298)	1:A:114:LYS:N	1:A:114:LYS:CA	1:A:114:LYS:C	1:A:115:ILE:N	20	63.07	113.1
(1,200)	1:A:51:ASN:N	1:A:51:ASN:CA	1:A:51:ASN:C	1:A:52:ASP:N	20	84.92	112.55
(1,195)	1:A:24:ASP:N	1:A:24:ASP:CA	1:A:24:ASP:C	1:A:25:ARG:N	20	101.88	112.41
(1,286)	1:A:109:MET:N	1:A:109:MET:CA	1:A:109:MET:C	1:A:110:TYR:N	20	55.12	112.17
(1,178)	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	1:A:19:ASN:N	20	70.91	111.65
(1,181)	1:A:19:ASN:N	1:A:19:ASN:CA	1:A:19:ASN:C	1:A:20:ALA:N	20	86.97	108.23
(1,269)	1:A:103:ASP:N	1:A:103:ASP:CA	1:A:103:ASP:C	1:A:104:GLY:N	15	85.35	107.62
(1,249)	1:A:96:GLU:N	1:A:96:GLU:CA	1:A:96:GLU:C	1:A:97:ILE:N	20	77.68	104.26
(1,304)	1:A:116:CYS:N	1:A:116:CYS:CA	1:A:116:CYS:C	1:A:117:LEU:N	20	74.2	101.3
(1,184)	1:A:20:ALA:N	1:A:20:ALA:CA	1:A:20:ALA:C	1:A:21:GLY:N	20	65.73	99.49
(1,310)	1:A:118:THR:N	1:A:118:THR:CA	1:A:118:THR:C	1:A:119:ASP:N	20	85.55	94.74
(1,163)	1:A:3:ASP:N	1:A:3:ASP:CA	1:A:3:ASP:C	1:A:4:GLU:N	18	56.42	94.46
(1,255)	1:A:98:ALA:N	1:A:98:ALA:CA	1:A:98:ALA:C	1:A:99:VAL:N	20	65.39	92.62
(1,299)	1:A:114:LYS:N	1:A:114:LYS:CA	1:A:114:LYS:C	1:A:115:ILE:N	20	54.43	83.23
(1,317)	1:A:120:HIS:N	1:A:120:HIS:CA	1:A:120:HIS:C	1:A:121:PHE:N	20	68.93	82.27
(1,210)	1:A:60:LYS:N	1:A:60:LYS:CA	1:A:60:LYS:C	1:A:61:GLU:N	20	63.58	80.2
(1,277)	1:A:106:THR:N	1:A:106:THR:CA	1:A:106:THR:C	1:A:107:ALA:N	19	41.97	75.06
(1,314)	1:A:119:ASP:N	1:A:119:ASP:CA	1:A:119:ASP:C	1:A:120:HIS:N	20	51.17	72.12
(1,220)	1:A:66:PHE:N	1:A:66:PHE:CA	1:A:66:PHE:C	1:A:67:GLY:N	20	49.55	71.06
(1,230)	1:A:76:LEU:N	1:A:76:LEU:CA	1:A:76:LEU:C	1:A:77:LYS:N	20	51.7	64.61
(1,311)	1:A:118:THR:N	1:A:118:THR:CA	1:A:118:THR:C	1:A:119:ASP:N	20	44.45	63.07
(1,307)	1:A:117:LEU:N	1:A:117:LEU:CA	1:A:117:LEU:C	1:A:118:THR:N	20	31.47	62.44
(1,326)	1:A:132:PHE:N	1:A:132:PHE:CA	1:A:132:PHE:C	1:A:133:GLY:N	20	34.09	60.34
(1,301)	1:A:115:ILE:N	1:A:115:ILE:CA	1:A:115:ILE:C	1:A:116:CYS:N	20	40.68	59.76
(1,185)	1:A:20:ALA:N	1:A:20:ALA:CA	1:A:20:ALA:C	1:A:21:GLY:N	20	34.27	59.37
(1,246)	1:A:95:PRO:N	1:A:95:PRO:CA	1:A:95:PRO:C	1:A:96:GLU:N	19	39.23	59.0
(1,342)	1:A:159:ILE:N	1:A:159:ILE:CA	1:A:159:ILE:C	1:A:160:GLN:N	20	42.28	56.48
(1,168)	1:A:14:PRO:N	1:A:14:PRO:CA	1:A:14:PRO:C	1:A:15:VAL:N	20	43.68	55.48
(1,242)	1:A:93:THR:N	1:A:93:THR:CA	1:A:93:THR:C	1:A:94:ALA:N	20	36.91	49.36
(1,252)	1:A:97:ILE:N	1:A:97:ILE:CA	1:A:97:ILE:C	1:A:98:ALA:N	20	33.31	48.47
(1,233)	1:A:87:PRO:N	1:A:87:PRO:CA	1:A:87:PRO:C	1:A:88:ILE:N	20	35.11	46.78
(1,209)	1:A:60:LYS:N	1:A:60:LYS:CA	1:A:60:LYS:C	1:A:61:GLU:N	19	17.29	44.33
(1,112)	1:A:85:ASP:N	1:A:85:ASP:CA	1:A:85:ASP:C	1:A:86:ILE:N	20	28.51	43.71
(1,189)	1:A:21:GLY:N	1:A:21:GLY:CA	1:A:21:GLY:C	1:A:22:PRO:N	20	30.7	43.69
(1,188)	1:A:21:GLY:N	1:A:21:GLY:CA	1:A:21:GLY:C	1:A:22:PRO:N	20	19.3	40.45
(1,170)	1:A:15:VAL:N	1:A:15:VAL:CA	1:A:15:VAL:C	1:A:16:LEU:N	20	31.28	37.88
(1,106)	1:A:82:ILE:N	1:A:82:ILE:CA	1:A:82:ILE:C	1:A:83:GLU:N	20	26.13	34.68
(1,172)	1:A:16:LEU:N	1:A:16:LEU:CA	1:A:16:LEU:C	1:A:17:LYS:N	11	18.52	34.53
(1,108)	1:A:83:GLU:N	1:A:83:GLU:CA	1:A:83:GLU:C	1:A:84:PHE:N	20	25.99	30.6
(1,82)	1:A:65:TRP:N	1:A:65:TRP:CA	1:A:65:TRP:C	1:A:66:PHE:N	20	13.68	27.33
(1,78)	1:A:59:ASN:N	1:A:59:ASN:CA	1:A:59:ASN:C	1:A:60:LYS:N	20	12.26	23.29
(1,84)	1:A:68:LYS:N	1:A:68:LYS:CA	1:A:68:LYS:C	1:A:69:CYS:N	17	11.54	23.28
(1,34) $(1,259)$	1:A:99:VAL:N	1:A:99:VAL:CA	1:A:99:VAL:C	1:A:100:PRO:N	4	5.35	9.21
(1,233) $(1,232)$	1:A:86:ILE:N	1:A:86:ILE:CA	1:A:86:ILE:C	1:A:87:PRO:N	20	5.36	6.98
(1,232) $(1,167)$	1:A:13:ILE:N	1:A:13:ILE:CA	1:A:13:ILE:C	1:A:14:PRO:N	19	3.46	5.21
(1,107) $(1,38)$	1:A:35:GLU:N	1:A:35:GLU:CA	1:A:35:GLU:C	1:A:36:TYR:N	6	2.74	4.98
(1,38) $(1,94)$	1:A:73:HIS:N	1:A:73:HIS:CA	1:A:73:HIS:C	1:A:74:ASP:N	6	1.63	3.77
(1,94)	1.A.(3.1113:N	1.A.13.1113.UA	1.A.(3.1113.U	1.A.14.ASF.IN	U	Continued on	



	ed from previous po						
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models	$\mathbf{Mean} \; (\; \circ \;)$	Max (∘)
(1,70)	1:A:55:ARG:N	1:A:55:ARG:CA	1:A:55:ARG:C	1:A:56:LEU:N	13	1.31	3.22
(1,90)	1:A:71:TYR:N	1:A:71:TYR:CA	1:A:71:TYR:C	1:A:72:ILE:N	9	1.07	2.34
(1,72)	1:A:56:LEU:N	1:A:56:LEU:CA	1:A:56:LEU:C	1:A:57:GLU:N	8	0.88	2.32
(1,142)	1:A:143:GLY:N	1:A:143:GLY:CA	1:A:143:GLY:C	1:A:144:PRO:N	20	0.88	2.15
(1,100)	1:A:79:GLU:N	1:A:79:GLU:CA	1:A:79:GLU:C	1:A:80:PHE:N	10	0.97	2.08
(1,114)	1:A:121:PHE:N	1:A:121:PHE:CA	1:A:121:PHE:C	1:A:122:LYS:N	11	0.97	1.96
(1,18)	1:A:25:ARG:N	1:A:25:ARG:CA	1:A:25:ARG:C	1:A:26:GLU:N	8	0.86	1.84
(1,130)	1:A:136:HIS:N	1:A:136:HIS:CA	1:A:136:HIS:C	1:A:137:LEU:N	10	0.88	1.77
(1,245)	1:A:94:ALA:N	1:A:94:ALA:CA	1:A:94:ALA:C	1:A:95:PRO:N	15	0.68	1.71
(1,110)	1:A:84:PHE:N	1:A:84:PHE:CA	1:A:84:PHE:C	1:A:85:ASP:N	1	1.68	1.68
(1,150)	1:A:148:VAL:N	1:A:148:VAL:CA	1:A:148:VAL:C	1:A:149:GLU:N	11	0.76	1.68
(1,88)	1:A:70:TRP:N	1:A:70:TRP:CA	1:A:70:TRP:C	1:A:71:TYR:N	8	0.91	1.53
(1,34)	1:A:33:LYS:N	1:A:33:LYS:CA	1:A:33:LYS:C	1:A:34:GLU:N	2	0.78	1.47
(1,356)	1:A:164:LYS:N	1:A:164:LYS:CA	1:A:164:LYS:C	1:A:165:CYS:N	3	0.96	1.46
(1,30)	1:A:31:ARG:N	1:A:31:ARG:CA	1:A:31:ARG:C	1:A:32:LEU:N	3	0.71	1.42
(1,68)	1:A:54:PHE:N	1:A:54:PHE:CA	1:A:54:PHE:C	1:A:55:ARG:N	3	0.73	1.34
(1,58)	1:A:45:ASN:N	1:A:45:ASN:CA	1:A:45:ASN:C	1:A:46:ASN:N	2	0.78	1.26
(1,92)	1:A:72:ILE:N	1:A:72:ILE:CA	1:A:72:ILE:C	1:A:73:HIS:N	6	0.71	1.21
(1,260)	1:A:100:PRO:N	1:A:100:PRO:CA	1:A:100:PRO:C	1:A:101:GLU:N	1	1.2	1.2
(1,76)	1:A:58:SER:N	1:A:58:SER:CA	1:A:58:SER:C	1:A:59:ASN:N	2	1.05	1.2
(1,28)	1:A:30:GLN:N	1:A:30:GLN:CA	1:A:30:GLN:C	1:A:31:ARG:N	4	0.68	1.18
(1,197)	1:A:50:ASP:N	1:A:50:ASP:CA	1:A:50:ASP:C	1:A:51:ASN:N	1	1.13	1.13
(1,160)	1:A:155:GLN:N	1:A:155:GLN:CA	1:A:155:GLN:C	1:A:156:LYS:N	3	0.66	1.07
(1,128)	1:A:135:ALA:N	1:A:135:ALA:CA	1:A:135:ALA:C	1:A:136:HIS:N	4	0.51	0.98
(1,46)	1:A:39:LEU:N	1:A:39:LEU:CA	1:A:39:LEU:C	1:A:40:ILE:N	6	0.52	0.92
(1,56)	1:A:44:GLU:N	1:A:44:GLU:CA	1:A:44:GLU:C	1:A:45:ASN:N	2	0.54	0.87
(1,158)	1:A:154:ILE:N	1:A:154:ILE:CA	1:A:154:ILE:C	1:A:155:GLN:N	4	0.52	0.82
(1,190)	1:A:22:PRO:N	1:A:22:PRO:CA	1:A:22:PRO:C	1:A:23:ARG:N	4	0.56	0.76
(1,64)	1:A:48:ASN:N	1:A:48:ASN:CA	1:A:48:ASN:C	1:A:49:ALA:N	7	0.34	0.72
(1,146)	1:A:146:LEU:N	1:A:146:LEU:CA	1:A:146:LEU:C	1:A:147:ALA:N	3	0.34	0.69
(1,14)	1:A:10:VAL:N	1:A:10:VAL:CA	1:A:10:VAL:C	1:A:11:SER:N	1	0.64	0.64
(1,120)	1:A:125:TRP:N	1:A:125:TRP:CA	1:A:125:TRP:C	1:A:126:ALA:N	7	0.35	0.6
(1,124)	1:A:127:ARG:N	1:A:127:ARG:CA	1:A:127:ARG:C	1:A:128:ASN:N	2	0.54	0.6
(1,121) $(1,26)$	1:A:29:VAL:N	1:A:29:VAL:CA	1:A:29:VAL:C	1:A:30:GLN:N	1	0.5	0.5
		1:A:139:ALA:CA		1:A:140:LEU:N	1	0.47	0.47
(1,150) $(1,152)$	1:A:150:ILE:N	1:A:150:ILE:CA	1:A:150:ILE:C	1:A:151:PRO:N	4	0.4	0.46
(1,162) $(1,6)$	1:A:6:THR:N	1:A:6:THR:CA	1:A:6:THR:C	1:A:7:ARG:N	1	0.44	0.44
(1,102)	1:A:80:PHE:N	1:A:80:PHE:CA	1:A:80:PHE:C	1:A:81:ASP:N	1	0.43	0.43
(1,102) $(1,54)$	1:A:43:VAL:N	1:A:43:VAL:CA	1:A:43:VAL:C	1:A:44:GLU:N	1	0.49	0.49
(1,34) $(1,20)$	1:A:26:GLU:N	1:A:26:GLU:CA	1:A:26:GLU:C	1:A:27:LEU:N	1	0.36	0.36
(1,20) $(1,86)$	1:A:69:CYS:N	1:A:69:CYS:CA	1:A:69:CYS:C	1:A:70:TRP:N	1	0.34	0.34
(1,140)	1:A:142:LEU:N	1:A:142:LEU:CA	1:A:142:LEU:C	1:A:143:GLY:N	1	0.14	0.14
(1,140) $(1,98)$	1:A:78:TYR:N	1:A:78:TYR:CA	1:A:78:TYR:C	1:A:79:GLU:N	1	0.14	0.14
(1,98) $(1,104)$	1:A:81:ASP:N	1:A:81:ASP:CA	1:A:81:ASP:C	1:A:79:GLU:N 1:A:82:ILE:N	1	0.12	0.12
(1,104) $(1,74)$	1:A:57:GLU:N	1:A:57:GLU:CA	1:A:57:GLU:C	1:A:58:SER:N	1	0.09	0.09
(1,74) $(1,327)$	1:A:37:GLU:N 1:A:132:PHE:C	1:A:133:GLV:N	1:A:37:GLU:C 1:A:133:GLY:CA	1:A:33:GLY:C	20	110.28	134.86
(1,327) $(1,349)$	1:A:161:HIS:C	1:A:162:LYS:N	1:A:162:LYS:CA	1:A:162:LYS:C	20	54.16	134.47
(1,349) (1,221)	1:A:66:PHE:C	1:A:67:GLY:N	1:A:102:LYS:CA 1:A:67:GLY:CA	1:A:102:L15:C 1:A:67:GLY:C	20	118.21	134.41
(1,363)	1:A:166:ASN:C	1:A:07:GLY:N 1:A:167:GLN:N	1:A:07:GLY:CA 1:A:167:GLN:CA	1:A:167:GLY:C	20	51.48	133.9
· · /	1:A:100:A5N:C 1:A:112:GLY:C	1:A:107:GLN:N 1:A:113:GLY:N	1:A:107:GLN:CA 1:A:113:GLY:CA	1:A:107:GLN:C 1:A:113:GLY:C	20	58.67	133.23
(1,294)							
(1,293)	1:A:111:ARG:C	1:A:112:GLY:N	1:A:112:GLY:CA	1:A:112:GLY:C	20	62.1	132.28



	ed from previous pa	•	A	A	N.f. 1.1.	TN / ()	N (()
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models	Mean (o)	Max (∘)
(1,282)	1:A:107:ALA:C	1:A:108:LYS:N	1:A:108:LYS:CA	1:A:108:LYS:C	19	85.19	129.99
(1,361)	1:A:165:CYS:C	1:A:166:ASN:N	1:A:166:ASN:CA	1:A:166:ASN:C	20	87.94	129.85
(1,316)	1:A:119:ASP:C	1:A:120:HIS:N	1:A:120:HIS:CA	1:A:120:HIS:C	20	110.0	129.77
(1,279)	1:A:106:THR:C	1:A:107:ALA:N	1:A:107:ALA:CA	1:A:107:ALA:C	20	78.67	129.57
(1,313)	1:A:118:THR:C	1:A:119:ASP:N	1:A:119:ASP:CA	1:A:119:ASP:C	20	121.33	128.09
(1,208)	1:A:59:ASN:C	1:A:60:LYS:N	1:A:60:LYS:CA	1:A:60:LYS:C	20	118.02	127.9
(1,344)	1:A:159:ILE:C	1:A:160:GLN:N	1:A:160:GLN:CA	1:A:160:GLN:C	19	102.53	127.71
(1,347)	1:A:160:GLN:C	1:A:161:HIS:N	1:A:161:HIS:CA	1:A:161:HIS:C	20	79.44	127.69
(1,288)	1:A:109:MET:C	1:A:110:TYR:N	1:A:110:TYR:CA	1:A:110:TYR:C	20	91.38	127.38
(1,202)	1:A:51:ASN:C	1:A:52:ASP:N	1:A:52:ASP:CA	1:A:52:ASP:C	20	102.47	127.25
(1,350)	1:A:161:HIS:C	1:A:162:LYS:N	1:A:162:LYS:CA	1:A:162:LYS:C	20	80.29	126.95
(1,291)	1:A:110:TYR:C	1:A:111:ARG:N	1:A:111:ARG:CA	1:A:111:ARG:C	20	79.51	126.85
(1,346)	1:A:160:GLN:C	1:A:161:HIS:N	1:A:161:HIS:CA	1:A:161:HIS:C	20	60.56	126.8
(1,270)	1:A:103:ASP:C	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	20	50.0	126.74
(1,278)	1:A:106:THR:C	1:A:107:ALA:N	1:A:107:ALA:CA	1:A:107:ALA:C	20	49.53	125.7
(1,364)	1:A:166:ASN:C	1:A:167:GLN:N	1:A:167:GLN:CA	1:A:167:GLN:C	20	77.52	125.6
(1,353)	1:A:162:LYS:C	1:A:163:GLU:N	1:A:163:GLU:CA	1:A:163:GLU:C	20	64.44	125.5
(1,268)	1:A:102:LEU:C	1:A:103:ASP:N	1:A:103:ASP:CA	1:A:103:ASP:C	20	114.78	125.0
(1,309)	1:A:117:LEU:C	1:A:118:THR:N	1:A:118:THR:CA	1:A:118:THR:C	20	105.45	124.86
(1,174)	1:A:16:LEU:C	1:A:17:LYS:N	1:A:17:LYS:CA	1:A:17:LYS:C	20	92.0	124.75
(1,262)	1:A:100:PRO:C	1:A:101:GLU:N	1:A:101:GLU:CA	1:A:101:GLU:C	20	111.37	123.08
(1,244)	1:A:93:THR:C	1:A:94:ALA:N	1:A:94:ALA:CA	1:A:94:ALA:C	20	114.53	122.39
(1,186)	1:A:20:ALA:C	1:A:21:GLY:N	1:A:21:GLY:CA	1:A:21:GLY:C	20	65.4	122.12
(1,205)	1:A:52:ASP:C	1:A:53:TRP:N	1:A:53:TRP:CA	1:A:53:TRP:C	20	78.79	121.44
(1,281)	1:A:107:ALA:C	1:A:108:LYS:N	1:A:108:LYS:CA	1:A:108:LYS:C	20	42.58	121.15
(1,265)	1:A:101:GLU:C	1:A:102:LEU:N	1:A:102:LEU:CA	1:A:102:LEU:C	20	93.6	121.12
(1,162)	1:A:2:ALA:C	1:A:3:ASP:N	1:A:3:ASP:CA	1:A:3:ASP:C	20	69.31	120.94
(1,182)	1:A:19:ASN:C	1:A:20:ALA:N	1:A:20:ALA:CA	1:A:20:ALA:C	20	93.8	120.63
(1,325)	1:A:131:LYS:C	1:A:132:PHE:N	1:A:132:PHE:CA	1:A:132:PHE:C	20	94.47	120.03
(1,296)	1:A:113:GLY:C	1:A:114:LYS:N	1:A:114:LYS:CA	1:A:114:LYS:C	20	60.33	119.61
(1,177)	1:A:17:LYS:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	20	87.89	118.87
(1,285)	1:A:108:LYS:C	1:A:109:MET:N	1:A:109:MET:CA	1:A:109:MET:C	20	67.04	118.68
(1,308)	1:A:117:LEU:C	1:A:118:THR:N	1:A:118:THR:CA	1:A:118:THR:C	20	33.83	118.39
(1,290)	1:A:110:TYR:C	1:A:111:ARG:N	1:A:111:ARG:CA	1:A:111:ARG:C	20	43.68	118.3
(1,276)	1:A:105:LYS:C	1:A:106:THR:N	1:A:106:THR:CA	1:A:106:THR:C	20	79.55	118.06
(1,331)	1:A:148:VAL:C	1:A:149:GLU:N	1:A:149:GLU:CA	1:A:149:GLU:C	20	87.77	117.47
(1,337) $(1,237)$	1:A:88:ILE:C	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:C	20	102.89	116.64
(1,358)	1:A:164:LYS:C	1:A:165:CYS:N	1:A:165:CYS:CA	1:A:165:CYS:C	20	64.32	116.53
(1,360) $(1,360)$	1:A:165:CYS:C	1:A:166:ASN:N	1:A:166:ASN:CA	1:A:166:ASN:C	20	46.54	115.41
(1,380) $(1,183)$	1:A:19:ASN:C	1:A:20:ALA:N	1:A:20:ALA:CA	1:A:20:ALA:C	20	46.2	115.37
(1,103) $(1,297)$	1:A:113:GLY:C	1:A:114:LYS:N	1:A:114:LYS:CA	1:A:114:LYS:C	20	74.17	114.97
(1,201) $(1,201)$	1:A:51:ASN:C	1:A:52:ASP:N	1:A:52:ASP:CA	1:A:52:ASP:C	20	37.17	113.09
(1,201) $(1,218)$	1:A:65:TRP:C	1:A:66:PHE:N	1:A:66:PHE:CA	1:A:66:PHE:C	20	99.22	111.11
(1,352)	1:A:162:LYS:C	1:A:163:GLU:N	1:A:163:GLU:CA	1:A:163:GLU:C	20	36.61	110.95
(1,332) $(1,176)$	1:A:17:LYS:C	1:A:103.GLU:N 1:A:18:THR:N	1:A:103:GLU:CA 1:A:18:THR:CA	1:A:103:GLU:C 1:A:18:THR:C	20	52.11	10.93
(1,170) $(1,194)$	1:A:17:L15:C 1:A:23:ARG:C	1:A:16:11IR:N 1:A:24:ASP:N	1:A:16:11R:CA 1:A:24:ASP:CA	1:A:16:111R:C 1:A:24:ASP:C	20	87.45	109.21
(1,194) $(1,275)$	1:A:25:ARG:C 1:A:105:LYS:C	1:A:24:ASP:N 1:A:106:THR:N	1:A:24:A5P:CA 1:A:106:THR:CA	1:A:106:THR:C	20	60.45	108.4
(1,273) $(1,179)$	1:A:103:L13:C 1:A:18:THR:C	1:A:100:111R:N 1:A:19:ASN:N	1:A:100:11R:CA 1:A:19:ASN:CA	1:A:100:111K:C 1:A:19:ASN:C	20	72.85	108.02
(1,179) (1,216)	1:A:62:GLY:C	1:A:19:ASN:N 1:A:63:THR:N	1:A:19:ASN:CA 1:A:63:THR:CA	1:A:19:A5N:C 1:A:63:THR:C	20	96.28	107.63
	1:A:02:GLY:C 1:A:108:LYS:C	1:A:03:1HK:N 1:A:109:MET:N	1:A:03:1HR:CA 1:A:109:MET:CA	1:A:03:1HR:C 1:A:109:MET:C	20	96.28 61.96	107.03
(1,284)							
(1,343)	1:A:159:ILE:C	1:A:160:GLN:N	1:A:160:GLN:CA	1:A:160:GLN:C	20	Gentinued on	101.15



(1,294		ed from previous pa		A	A	N. T. 1. 1.	N ()	N ()
(1,225)	Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models	Mean (°)	Max (∘)
(1.330)	· · /							
(1,198) 1A-590-ASP-C 1-A-51-ASN-N 1-A-51-ASN-C 1-A-51-ASN-C 20 77.06 96.52 (1,303) 1-A-115-ILEC 1-A-116-CYS-CN 1-A-116-CYS-CA 1-A-116-CYS-C 20 77.8 96.29 (1,204) 1-A-97-ILEC 1-A-98-ALA-N 1-A-19-ASN-CA 1-A-98-ALA-C 20 56.15 95.78 (1,204) 1-A-97-ILEC 1-A-98-ALA-N 1-A-19-ASN-CA 1-A-98-ALA-C 20 56.15 95.78 (1,204) 1-A-97-ILEC 1-A-98-ALA-N 1-A-19-ASN-CA 1-A-98-ALA-C 20 56.15 95.78 (1,204) 1-A-97-ILEC 1-A-98-ALA-N 1-A-98-ALA-C 20 60.48 95.46 (1,302) 1-A-116-IS-CYS-C 1-A-116-CYS-C 1-A-116-ASN-C 20 62.2 93.47 (1,199) 1-A-50-ASP-C 1-A-51-ASN-N 1-A-116-ASN-C 1-A-51-ASN-C 20 67.94 93.04 (1,371) 1-A-16-IEU-C 1-A-17-IY-S-N 1-A-15-CYS-CA 1-A-16-IS-CYS-C 20 42.68 92.82 (1,473) 1-A-16-IEU-C 1-A-17-IY-S-N 1-A-17-IY-S-C 1-A-17-IY-S-C 20 48.0 92.04 (1,272) 1-A-10-IG-U-C 1-A-10-IS-U-N 1-A-99-VAL-C 1-A-17-IY-S-C 20 48.0 92.04 (1,272) 1-A-10-IG-U-C 1-A-10-IT-U-C 1-A-10-IT-U-C 1-A-19-IT-U-C 1-A-10-IT-U-C 20 66.35 83.20 (1,340) 1-A-15-IT-U-C 1-A-11-IT-U-C 1-A-11	,							
(1,303)	· · /							
(1.180	· · /							
(1.254) 1:A-97:ILEC	· · /							
(1,390								
(1.195)								
(1.357) 1:A:164:LYS-C 1:A:165:CYS:N 1:A:165:CYS-CA 1:A:165:CYS-C 20 42.68 92.82 (1.173) 1:A:164:LYS-C 1:A:175:LYS-N 1:A:175:LYS-CA 1:A:175:LYS-C 20 48.0 92.04 (1.272) 1:A:104:GLY-C 1:A:105:LYS-N 1:A:175:LYS-CA 1:A:105:LYS-C 20 55.28 88.85 (1.256) 1:A:98:ALA:C 1:A:99:VAL:N 1:A:99:VAL:CA 1:A:195:LYS-C 20 55.28 88.85 (1.256) 1:A:98:ALA:C 1:A:99:VAL:N 1:A:99:VAL:CA 1:A:195:LYS-C 20 66.35 85.25 (1.232) 1:A:140:LEU-C 1:A:141:GLY-N 1:A:141:GLY-C 1:A:141:GLY-C 20 66.35 84.29 (1.324) 1:A:133:LYS-C 1:A:132:PHE:N 1:A:132:PHE:CA 1:A:132:PHE:C 20 45.53 83.01 (1.340) 1:A:158:VAL:C 1:A:159:ILEN 1:A:159:ILECA 1:A:159:ILEC 20 45.04 82.2 (1.287) 1:A:109.WET-C 1:A:110:TYR-N 1:A:110:TYR-C 20 45.04 82.2 (1.287) 1:A:109.WET-C 1:A:110:TYR-N 1:A:110:TYR-C 20 45.04 82.2 (1.287) 1:A:106:CYS-C 1:A:110:TYR-N 1:A:110:TYR-C 20 45.04 82.2 (1.247) 1:A:195:PRO-C 1:A:106:CYS-N 1:A:106:CYS-C 1:A:110:TYR-N 1:A:117:LEU-C 1:A:110:TYR-C 20 46.18 79.97 (1.247) 1:A:105:PRO-C 1:A:106:CUS-N 1:A:106:CUS-C 1:A:105:LEU-N 1:A:102:LEU-C 1:A:106:CUS-C 20 46.4 78.89 (1.264) 1:A:101:GUU-C 1:A:102:LEU-N 1:A:102:LEU-C 1:A:102:LEU-C 20 46.4 78.89 (1.164) 1:A:2:ALA-C 1:A:3:ASP-N 1:A:2:ASP-CA 1:A:2:ASP-CC 20 32.19 75.92 (1.231) 1:A:97:ILE-C 1:A:98:ALA-N 1:A:98:ALA-C 1:A:98:ALA-C 20 59.52 74.62 (1.228) 1:A:75:LEU-C 1:A:76:LEU-N 1:A:76:LEU-C 1:A:98:ALA-C 20 59.52 74.62 (1.228) 1:A:75:LEU-C 1:A:76:LEU-N 1:A:76:LEU-C 1:A:76:LEU-C 20 47.88 67.38 (1.257) 1:A:98:ALA-C 1:A:98:ALA-C 20 59.52 74.62 (1.228) 1:A:75:LEU-C 1:A:76:LEU-N 1:A:76:LEU-C 20 47.88 67.38 (1.257) 1:A:16:GU-C 1:A:16:GU-N 1:A:76:LEU-C 20 47.88 67.38 (1.331) 1:A:15:GU-C 1:A:16:LU-N 1:A:76:LEU-C 20 1:A:76:LEU-C 20 47.88 67.38 (1.331) 1:A:15:GU-C 1:A:16:LU-N 1:A:76:LEU-C 20 1:A:76:LEU-C 20 47.88 67.38 (1.331) 1:A:15:GU-C 1:A:16:LU-N 1:A:16:LU-N 1:A:16:LU-N 1:A:16:LU-N 20 20 49.83 65.11 (1.355) 1:A:16:GU-C 1:A:16:LU-N 1:A:16:LU-N 1:A:16:LU-N 20 20 49.83 65.11 (1.355) 1:A:16:GU-C 1:A:16:LU-N 1:A:16:LU-N 1:A:16:LU-N 20 20 49.83 65.11 (1.355) 1:A:16:GU-C 1:A:16:LU-N 1:A:16:LU-N 1:A:16:LU-N 20 20 20 30.71 66.66 (1.								
(1,173) 1:A:16:LEUC 1:A:17:LYS:N 1:A:17:LYS:CA 1:A:17:LYS:C 20 48.0 92.04 (1,272) 1:A:104:CHY:C 1:A:105:LYS:N 1:A:105:LYS:C 20 55.28 88.85 (1,228) 1:A:198:ALC 1:A:199:VAL:N 1:A:199:VAL:C 1:A:199:VAL:C 20 66.13 85.55 (1,328) 1:A:140:LEUC 1:A:141:GLY:N 1:A:141:GLY:C 20 66.35 84.29 (1,324) 1:A:131:LYS:C 1:A:132:PHE:N 1:A:141:GLY:C 1:A:132:PHE:C 20 45.53 83.01 (1,340) 1:A:158:VAL:C 1:A:159:ILE:N 1:A:159:ILE:C 1:A:159:ILE:C 20 45.04 82.2 (1,287) 1:A:109:MET:C 1:A:159:ILE:N 1:A:159:ILE:C 1:A:159:ILE:C 20 45.04 82.2 (1,287) 1:A:16:CYS:C 1:A:115:LEUN 1:A:110:TYR:C 1:A:110:TYR:C 20 37.62 81.54 (1,305) 1:A:16:CYS:C 1:A:115:LEUN 1:A:117:LEU:C 1:A:110:TYR:C 20 37.62 81.54 (1,305) 1:A:116:CYS:C 1:A:117:LEUN 1:A:117:LEU:C 1:A:110:TYR:C 20 46.18 79.97 (1,247) 1:A:16:CYS:C 1:A:117:LEUN 1:A:117:LEU:C 1:A:110:TYR:C 20 46.4 78.89 (1,264) 1:A:10:LGU:C 1:A:136:SP:N 1:A:102:LEU:N 1:A:102:LEU:C 20 46.4 78.89 (1,264) 1:A:101:LGU:C 1:A:36:SP:N 1:A:36:SP:C 1:A:36:SP:C 20 32.19 75.92 (1,164) 1:A:2:ALC:C 1:A:3:ASP:N 1:A:3:ASP:C 1:A:3:ASP:C 20 32.19 75.92 (1,193) 1:A:23:ARG:C 1:A:24:ASP:N 1:A:24:ASP:C 1:A:3:ASP:C 20 32.19 75.92 (1,193) 1:A:23:ARG:C 1:A:24:ASP:N 1:A:24:ASP:C 1:A:3:ASP:C 20 32.19 75.92 (1,228) 1:A:75:LEU:C 1:A:76:LEU:N 1:A:76:LEU:C 1:A:76:LEU:C 20 44.38 67.38 (1,257) 1:A:98:ALA:C 1:A:39:ALA:N 1:A:99:VAL:C 20 59.52 74.62 (1,238) 1:A:75:LEU:C 1:A:76:LEU:N 1:A:76:LEU:C 1:A:76:LEU:C 20 44.38 67.38 (1,257) 1:A:16:3:GLU:C 1:A:16:LYS:N 1:A:16:LYS:C 20 38.67 63.48 (1,355) 1:A:16:3:GLU:C 1:A:16:LYS:N 1:A:16:LYS:C 20 38.67 63.48 (1,250) 1:A:16:GU:C 1:A:16:LYS:N 1:A:16:LYS:C 20 38.67 63.48 (1,251) 1:A:16:LYS:C 1:A:16:LYS:N 1:A:16:LYS:C 20 38.67 63.48 (1,251) 1:A:16:LYS:C 1:A:1	· · /							
(1,272) 1:A:104:GIV-C 1:A:105:IVS:N 1:A:105:IVS:C 1:A:105:IVS:C 20 55:28 88.85 (1,256) 1:A:288:ALA:C 1:A:99:VAL:N 1:A:199:VAL:C 20 66.35 84.29 (1,324) 1:A:140:IEU-C 1:A:141:GIV:N 1:A:141:GIV-CA 1:A:141:GIV:C 20 66.35 84.29 (1,324) 1:A:130:IVS:C 1:A:132:PHE:N 1:A:132:PHE:CA 1:A:132:PHE:C 20 45.38 83.01 (1,340) 1:A:158:VAL:C 1:A:159:ILE:N 1:A:159:ILE:CA 1:A:159:ILE:C 20 45.08 83.01 (1,340) 1:A:158:VAL:C 1:A:110:IVR:N 1:A:1159:ILE:CA 1:A:159:ILE:C 20 45.04 82.2 (1,325) 1:A:109:MET.C 1:A:110:IVR:N 1:A:110:IVR:CA 1:A:110:IVR:C 20 37.62 81.54 (1,305) 1:A:16-CVS:C 1:A:117:IDEU-N 1:A:117:IDEU-CA 1:A:117:IDEU-C 20 46.18 79.97 (1,247) 1:A:95:PRO:C 1:A:160:IUC-N 1:A:161:IDEU-CA 1:A:161:IDEU-C 20 46.18 79.97 (1,247) 1:A:95:PRO:C 1:A:160:IDEU-N 1:A:102:IDEU-CA 1:A:102:IDEU-C 20 46.4 78.39 (1,161) 1:A:2:ALA:C 1:A:3:ASP:N 1:A:3:ASP:CA 1:A:3:ASP:C 20 32.19 75.92 (1,193) 1:A:23:ARG:C 1:A:24:ASP:N 1:A:3:ASP:CA 1:A:3:ASP:C 20 32.19 75.92 (1,193) 1:A:23:ARG:C 1:A:24:ASP:N 1:A:3:ASP:CA 1:A:3:ASP:C 20 52.54 75.38 (1,253) 1:A:97:ILE:C 1:A:98:ALA:N 1:A:99:VAL-CA 1:A:99:VAL-C 20 59.52 74.62 (1,228) 1:A:97:ILE:C 1:A:98:ALA:N 1:A:99:VAL-CA 1:A:99:VAL-C 20 51.87 66.68 (1,318) 1:A:127:ARG:C 1:A:128:ASN:N 1:A:101:GU-CA 1:A:105:U-C 20 44.83 65.11 (1,355) 1:A:163:GU-C 1:A:164:DYS:N 1:A:101:GU-C 20 24.86 58.2 (1,261) 1:A:100:PRO:C 1:A:101:GU-N 1:A:101:GU-C 20 24.86 58.2 (1,261) 1:A:100:PRO:C 1:A:101:GU-N 1:A:101:GU-C 20 24.86 58.2 (1,261) 1:A:100:PRO:C 1:A:101:GU-N 1:A:101:GU-C 20 39.78 67.38 (1,261) 1:A:157:GU-C 1:A:164:DYS:N 1:A:198:VAL-C 20 39.78 67.38 (1,261) 1:A:157:GU-C 1:A:164:DYS:N 1:A:101:GU-C 20 24.28 6.58 (1,337) 1:A:157:GU-C 1:A:164:DYS:N 1:A:164:DYS:C 20 30.71 56.64 (1,333) 1:A:156:GU-C 1:A:164:DYS:N 1:A:164:DYS:C 20 30.71 56.44 (1,261) 1:A:164:DYS:C 20 30.71 56.44 (1,261) 1:A:164:DYS:C								
(1,256) 1:A:98:ALA:C	(' /							
(1,328) 1:A:140.LEU:C 1:A:141:GLY:N 1:A:141:GLY:CA 1:A:141:GLY:C 20 66.35 84.29 (1,324) 1:A:131:LYS:C 1:A:132:PHE:N 1:A:132:PHE:CA 1:A:132:PHE:C 20 45.53 83.01 (1,340) 1:A:158:VAL:C 1:A:159:ILE:N 1:A:132:PHE:CA 1:A:159:ILE:C 20 45.53 88.01 (1,340) 1:A:158:VAL:C 1:A:159:ILE:N 1:A:159:ILE:CA 1:A:159:ILE:C 20 45.54 82.2 (1,287) 1:A:109:MET:C 1:A:110:TYR:N 1:A:150:TYR:CA 1:A:110:TYR:C 20 37.62 81.54 (1,305) 1:A:116:CYS:C 1:A:1417:LEU:N 1:A:117:LEU:CA 1:A:117:LEU:C 20 46.18 79.97 (1,247) 1:A:99:PRO:C 1:A:96:GLU:N 1:A:96:GLU:CA 1:A:96:GLU:C 20 46.4 78.89 (1,264) 1:A:10:IGU:C 1:A:162:LEU:N 1:A:102:LEU:CA 1:A:96:GLU:C 20 46.4 78.39 (1,264) 1:A:10:IGU:C 1:A:3:ASP:N 1:A:3:ASP:CA 1:A:3:ASP:C 20 32.19 75.92 (1,193) 1:A:23:ARG:C 1:A:24:ASP:N 1:A:3:ASP:CA 1:A:3:ASP:C 20 32.19 75.92 (1,193) 1:A:23:ARG:C 1:A:24:ASP:N 1:A:3:ASP:CA 1:A:24:ASP:C 20 52.54 75.38 (1,253) 1:A:97:ILE:C 1:A:98:ALA:N 1:A:98:ALA:CA 1:A:98:ALA:C 20 59.52 74.62 (1,228) 1:A:75:LEU:C 1:A:76:LEU:N 1:A:76:LEU:C 1:A:98:ALA:C 20 59.52 74.62 (1,228) 1:A:75:LEU:C 1:A:99:VAL:N 1:A:99:VAL:C 1:A:99:VAL:C 20 51.87 66.68 (1,318) 1:A:127:ARG:C 1:A:128:ASN:N 1:A:128:ASN:C 20 49.83 67.11 (1,355) 1:A:163:GU:C 1:A:164:LYS:N 1:A:164:LYS:C 20 42.86 58.2 (1,250) 1:A:96:GU:C 1:A:164:LYS:N 1:A:164:LYS:C 20 40.78 55.16 (1,250) 1:A:164:LYS:C 20 40.78 55.16 (1,250) 1:A:164:LYS:C 20 40.78 55.16 (1,250)	· · /							
(1,324)	· · /							
(1,340) 1:A:158:VALC 1:A:159:ILE.N 1:A:159:ILE.CA 1:A:159:ILE.C 20 45.04 82.2 (1,287) 1:A:109:MET:C 1:A:10:TYR:N 1:A:110:TYR:CA 1:A:110:TYR:C 20 37.62 81.54 (1,247) 1:A:16:CYS:C 1:A:171:LEU:N 1:A:171:LEU:CA 1:A:171:LEU:CA 20 46.4 78.89 (1,247) 1:A:96:GU:N 1:A:26:GU:CA 1:A:96:GU:C 20 46.4 78.89 (1,241) 1:A:24:ASP:C 1:A:36:GU:CA 1:A:10:26:UC 20 46.4 78.89 (1,161) 1:A:24:ASP:CC 1:A:33:ASP:N 1:A:33:ASP:CA 1:A:33:ASP:C 20 32.19 75.92 (1,193) 1:A:24:ASP:N 1:A:34:ASP:CA 1:A:34:ASP:C 20 52.54 75.38 (1,253) 1:A:97:LE:C 1:A:98:ALA:N 1:A:36:LE:UC 1:A:75:LE:UC 20 59.52 74.62 (1,257) 1:A:99:VAL:C 1:A:76:LE:UC 20 59.52 74.62 (1,257) 1:A:99:VAL:C 1:A:16:LE:UC 20								
(1,287)								83.01
(1,365)	· · /							
(1,247) 1:A:95:PRO:C 1:A:96:GLU:N 1:A:96:GLU:C 20 46.4 78.89 (1,264) 1:A:101:GLU:C 1:A:102:LEU:N 1:A:102:LEU:CA 1:A:102:LEU:C 20 46.4 78.89 (1,161) 1:A:2:AAA:C 1:A:3:ASP:N 1:A:3:ASP:CA 1:A:3:ASP:C 20 32.19 75.92 (1,193) 1:A:23:ARG:C 1:A:24:ASP:N 1:A:24:ASP:CA 1:A:3:ASP:C 20 52.54 75.38 (1,253) 1:A:97:ILE:C 1:A:98:ALA:N 1:A:98:ALA:CA 1:A:98:ALA:C 20 59.52 74.62 (1,227) 1:A:98:ALA:C 1:A:99:VAL:N 1:A:99:VAL:CA 1:A:199:VAL:C 20 51.87 66.68 (1,318) 1:A:127:ARG:C 1:A:164:LYS:N 1:A:164:LYS:CA 1:A:164:LYS:C 20 38.67 63.48 (1,355) 1:A:163:GLU:C 1:A:164:LYS:N 1:A:164:LYS:CA 1:A:164:LYS:C 20 38.67 63.48 (1,361) 1:A:169:GLU:C 1:A:158:VAL:N 1:A:164:LYS:CA 1:A:164:LYS:C 20 38.71 56.64 </td <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td>81.54</td>								81.54
(1,264) 1:A:101:GLU:C	· · /							79.97
(1,161) 1:A:2:ALA:C 1:A:3:ASP:N 1:A:3:ASP:CA 1:A:3:ASP:C 20 32.19 75.92 (1,193) 1:A:23:ARG:C 1:A:24:ASP:N 1:A:24:ASP:CA 1:A:24:ASP:C 20 52.54 75.38 (1,253) 1:A:23:ARG:C 1:A:24:ASP:N 1:A:24:ASP:CA 1:A:24:ASP:C 20 55.52 74.62 (1,228) 1:A:76:IEU:C 1:A:76:IEU:N 1:A:76:IEU:C 1:A:76:IEU:C 20 44.38 67.38 (1,257) 1:A:98:ALA:C 1:A:99:VAL:N 1:A:99:VAL:CA 1:A:99:VAL:C 20 51.87 66.68 (1,318) 1:A:127:ARG:C 1:A:128:ASN:N 1:A:128:ASN:CA 1:A:128:ASN:C 20 49.83 65.11 (1,355) 1:A:163:GLU:C 1:A:164:LYS:N 1:A:164:LYS:CA 1:A:128:ASN:C 20 49.83 65.11 (1,355) 1:A:163:GLU:C 1:A:164:LYS:N 1:A:164:LYS:CA 1:A:164:LYS:C 20 38.67 63.48 (1,261) 1:A:100:PRO:C 1:A:101:GLU:N 1:A:101:GLU:CA 1:A:101:GLU:C 20 28.42 58.95 (1,337) 1:A:157:GLY:C 1:A:158:VAL:N 1:A:158:VAL:CA 1:A:158:VAL:C 20 42.86 58.2 (1,250) 1:A:96:GLU:C 1:A:97:ILE:N 1:A:66:PHE:N 1:A:66:PHE:C 20 40.78 55.16 (1,219) 1:A:65:TRP:C 1:A:66:PHE:N 1:A:66:PHE:N 1:A:66:PHE:C 20 40.78 55.16 (1,219) 1:A:65:GLY:C 1:A:63:THR:N 1:A:63:THR:C 20 44.72 54.42 (1,236) 1:A:88:ILE:C 1:A:89:THR:N 1:A:63:THR:C 20 44.72 54.42 (1,236) 1:A:88:ILE:C 1:A:89:THR:N 1:A:63:THR:C 20 43.72 54.42 (1,236) 1:A:93:THR:C 1:A:94:ALA:N 1:A:94:ALA:CA 1:A:94:ALA:C 20 25.47 36.41 (1,109) 1:A:83:GLU:C 1:A:84:PHE:N 1:A:66:CLYS:C 1:A:131:LYS:N 1:A:131:LYS:C 20 25.47 36.41 (1,109) 1:A:83:GLU:C 1:A:84:PHE:N 1:A:66:LYS:C 1:A:46:CLYS:C 20 25.47 36.41 (1,109) 1:A:83:GLU:C 1:A:84:PHE:N 1:A:66:LYS:C 1:A:131:LYS:C 20 25.47 36.41 (1,231) 1:A:130:PRO:C 1:A:131:LYS:N 1:A:131:LYS:C 20 25.47 36.41 (1,331) 1:A:130:PRO:C 1:A:131:LYS:N 1:A:131:LYS:C 20 25.47 36.41 (1,331) 1:A:130:PRO:C 1:A:131:LYS:N 1:A:131:LYS:C 20 25.47 36.41 (1,332) 1:A:130:PRO:C 1:A:131:LYS:N 1:A:131:LYS:C 20 25.47 36.41 (1,332) 1:A:130:PRO:C 1:A:131:LYS:N 1:A:131:LYS:C 20 25.47 36.41 (1,332) 1:A:131:LYS:C 20 25.47 36.41 (1,332) 1:A:131:LYS:C 20	(1,247)	1:A:95:PRO:C	1:A:96:GLU:N	1:A:96:GLU:CA	1:A:96:GLU:C		46.4	78.89
(1,193) 1:A:23:ARG:C 1:A:24:ASP:N 1:A:24:ASP:CA 1:A:24:ASP:C 20 52.54 75.38 (1,253) 1:A:97:ILE:C 1:A:98:ALA:N 1:A:98:ALA:CA 1:A:98:ALA:C 20 59.52 74.62 (1,228) 1:A:75:LEU:C 1:A:76:LEU:N 1:A:76:LEU:CA 1:A:76:LEU:C 20 47.38 67.38 (1,257) 1:A:98:ALA:C 1:A:99:VAL:N 1:A:76:LEU:CA 1:A:76:LEU:C 20 47.38 67.38 (1,318) 1:A:127:ARG:C 1:A:128:ASN:N 1:A:128:ASN:CA 1:A:164:LYS:C 20 49.83 65.11 (1,318) 1:A:160:DC:C 1:A:164:LYS:N 1:A:164:LYS:CA 1:A:164:LYS:C 20 49.83 65.11 (1,261) 1:A:100:PRO:C 1:A:164:LYS:N 1:A:161:LYS:CA 1:A:164:LYS:C 20 38.67 63.48 (1,261) 1:A:26:GLY:C 1:A:158:VAL:N 1:A:165:LYS:CA 1:A:167:GLY:C 20 28.42 58.92 (1,250) 1:A:29:GLY:C 1:A:49:TIS:N 1:A:39:TIS:CA 1:A:49:TIS:C 20	(1,264)	1:A:101:GLU:C	1:A:102:LEU:N	1:A:102:LEU:CA			46.4	78.38
(1,253) 1:A:97:ILE:C 1:A:98:ALA:N 1:A:98:ALA:CA 1:A:98:ALA:C 20 59.52 74.62 (1,228) 1:A:75:LEU:C 1:A:76:LEU:N 1:A:76:LEU:CA 1:A:76:LEU:C 20 47.38 67.38 (1,257) 1:A:98:ALA:C 1:A:79:VAL:N 1:A:99:VAL:CA 1:A:99:VAL:C 20 51.87 66.68 (1,318) 1:A:127:ARG:C 1:A:128:ASN:N 1:A:128:ASN:CA 1:A:138:SAN:C 20 49.83 65.11 (1,355) 1:A:163:GLU:C 1:A:164:LYS:N 1:A:164:LYS:CA 1:A:164:LYS:C 20 38.67 63.48 (1,261) 1:A:167:GLY:C 1:A:161:GLU:C 1:A:161:GLU:C 20 28.42 58.95 (1,337) 1:A:157:GLY:C 1:A:158:VAL:N 1:A:158:VAL:C 20 42.86 58.2 (1,250) 1:A:96:GLU:C 1:A:73:HIS:N 1:A:37:HIS:CA 1:A:47:HIE:C 20 30.71 56.64 (1,293) 1:A:72:ILE:C 1:A:466:PHE:N 1:A:66:PHE:CA 1:A:36:PHE:C 20 30.78 54.42	(1,161)	1:A:2:ALA:C	1:A:3:ASP:N	1:A:3:ASP:CA	1:A:3:ASP:C	20	32.19	75.92
(1,228) 1:A:75:LEU:C 1:A:76:LEU:N 1:A:76:LEU:CA 1:A:76:LEU:C 20 47.38 67.38 (1,257) 1:A:98:ALA:C 1:A:99:VAL:N 1:A:99:VAL:CA 1:A:99:VAL:C 20 51.87 66.68 (1,318) 1:A:127:ARG:C 1:A:128:ASN:N 1:A:128:ASN:CA 1:A:1428:ASN:C 20 49.83 65.11 (1,355) 1:A:163:GLU:C 1:A:164:LYS:N 1:A:164:LYS:C 20 38.67 63.48 (1,261) 1:A:160:CU:N 1:A:161:GLU:CA 1:A:161:CU:C 20 28.42 58.95 (1,337) 1:A:157:GLY:C 1:A:158:VAL:N 1:A:158:VAL:CA 1:A:158:VAL:C 20 42.86 58.2 (1,250) 1:A:96:GLU:C 1:A:37:HIS:N 1:A:97:ILE:CA 1:A:97:ILE:C 20 30.71 56.64 (1,219) 1:A:65:TRP:C 1:A:66:PHE:N 1:A:66:PHE:CA 1:A:66:PHE:C 20 40.78 55.16 (1,335) 1:A:15:GLY:C 1:A:157:GLY:C 1:A:157:GLY:C 20 39.78 54.82 (1,215) <	(1,193)	1:A:23:ARG:C	1:A:24:ASP:N	1:A:24:ASP:CA	1:A:24:ASP:C		52.54	75.38
(1,257) 1:A:99:ALA:C 1:A:99:VAL:N 1:A:99:VAL:CA 1:A:99:VAL:C 20 51.87 66.68 (1,318) 1:A:127:ARG:C 1:A:128:ASN:N 1:A:128:ASN:CA 1:A:128:ASN:C 20 49.83 65.11 (1,355) 1:A:163:GLU:C 1:A:164:LYS:CN 1:A:164:LYS:C 20 38.67 63.48 (1,261) 1:A:100:PRO:C 1:A:101:GLU:N 1:A:101:GLU:CA 1:A:101:GLU:C 20 28.42 58.95 (1,337) 1:A:157:GIY:C 1:A:158:VAL:N 1:A:158:VAL:CA 1:A:151:CU:C 20 42.86 58.2 (1,250) 1:A:96:GU:C 1:A:97:ILE:N 1:A:497:ILE:CA 1:A:497:ILE:C 20 30.71 56.64 (1,29) 1:A:66:GU:C 1:A:37:HIS:N 1:A:473:HIS:CA 1:A:473:HIS:C 20 42.18 55.28 (1,219) 1:A:66:FPE:C 1:A:157:GUY:C 1:A:157:GUY:C 20 39.78 54.58 (1,215) 1:A:166:GY:C 1:A:157:GUY:C 1:A:157:GUY:C 20 39.78 54.58 (1,215)	(1,253)	1:A:97:ILE:C	1:A:98:ALA:N	1:A:98:ALA:CA	1:A:98:ALA:C	20	59.52	74.62
(1,318) 1:A:127:ARG:C 1:A:128:ASN:N 1:A:128:ASN:CA 1:A:128:ASN:C 20 49.83 65.11 (1,355) 1:A:163:GLU:C 1:A:164:LYS:N 1:A:164:LYS:CA 1:A:164:LYS:C 20 38.67 63.48 (1,261) 1:A:100:PRO:C 1:A:101:GLU:N 1:A:101:GLU:CA 1:A:101:GLU:C 20 28.42 58.95 (1,337) 1:A:157:GLY:C 1:A:158:VAL:N 1:A:158:VAL:CA 1:A:197:ILE:C 20 42.86 58.2 (1,250) 1:A:96:GUU:C 1:A:97:ILE:N 1:A:73:HIS:CA 1:A:73:HIS:C 20 30.71 56.64 (1,93) 1:A:72:ILE:C 1:A:73:HIS:N 1:A:73:HIS:CA 1:A:73:HIS:C 20 42.18 55.28 (1,219) 1:A:66:TRP:C 1:A:66:PHE:N 1:A:66:PHE:CA 1:A:66:PHE:C 20 40.78 55.16 (1,335) 1:A:156:LYS:C 1:A:157:GLY:N 1:A:157:GLY:CA 1:A:157:GLY:C 20 39.78 54.58 (1,215) 1:A:62:GY:C 1:A:63:THR:N 1:A:63:THR:CA 1:A:63:THR:C 20	(1,228)	1:A:75:LEU:C	1:A:76:LEU:N	1:A:76:LEU:CA	1:A:76:LEU:C	20	47.38	67.38
(1,355) 1:A:163:GLU:C 1:A:164:LYS:N 1:A:164:LYS:CA 1:A:164:LYS:C 20 38.67 63.48 (1,261) 1:A:100:PRO:C 1:A:101:GLU:N 1:A:101:GLU:CA 1:A:101:GLU:C 20 28.42 58.95 (1,337) 1:A:157:GLY:C 1:A:158:VAL:N 1:A:158:VAL:CA 1:A:158:VAL:C 20 42.86 58.2 (1,250) 1:A:96:GLY:C 1:A:73:HIS:N 1:A:73:HIS:CA 1:A:73:HIS:C 20 30.71 56.64 (1,93) 1:A:72:ILE:C 1:A:73:HIS:CA 1:A:73:HIS:C 20 42.18 55.28 (1,219) 1:A:65:TRP:C 1:A:66:PHE:N 1:A:66:PHE:CA 1:A:36:PHE:C 20 40.78 55.16 (1,335) 1:A:156:LYS:C 1:A:69:PHE:N 1:A:66:PHE:CA 1:A:66:PHE:C 20 40.78 55.16 (1,215) 1:A:62:GLY:C 1:A:63:THR:N 1:A:66:PHE:CA 1:A:63:THR:C 20 39.78 54.58 (1,215) 1:A:62:GLY:C 1:A:63:THR:CA 1:A:63:THR:CA 1:A:63:THR:C 20 37.11 48.5	(1,257)	1:A:98:ALA:C	1:A:99:VAL:N	1:A:99:VAL:CA	1:A:99:VAL:C	20	51.87	66.68
(1,261) 1:A:100:PRO:C 1:A:101:GLU:N 1:A:101:GLU:CA 1:A:101:GLU:C 20 28.42 58.95 (1,337) 1:A:157:GLY:C 1:A:158:VAL:N 1:A:158:VAL:CA 1:A:158:VAL:C 20 42.86 58.2 (1,250) 1:A:96:GLU:C 1:A:97:ILE:N 1:A:97:ILE:CA 1:A:473:HIS:CA 1:A:473:HIS:C 20 30.71 56.64 (1,93) 1:A:72:ILE:C 1:A:73:HIS:N 1:A:73:HIS:CA 1:A:73:HIS:C 20 42.18 55.28 (1,219) 1:A:66:TRP:C 1:A:66:PHE:N 1:A:66:PHE:CA 1:A:66:PHE:C 20 40.78 55.16 (1,335) 1:A:156:LYS:C 1:A:63:THR:N 1:A:66:PHE:CA 1:A:66:PHE:C 20 40.78 55.16 (1,215) 1:A:62:GLY:C 1:A:63:THR:N 1:A:63:THR:CA 1:A:163:THR:C 20 39.78 54.82 (1,215) 1:A:62:GLY:C 1:A:489:THR:CA 1:A:463:THR:C 20 37.11 48.52 (1,236) 1:A:319:ASP:C 1:A:130:HIS:N 1:A:120:HIS:CA 1:A:49:HR:C 20	(1,318)	1:A:127:ARG:C	1:A:128:ASN:N	1:A:128:ASN:CA	1:A:128:ASN:C	20	49.83	65.11
(1,337) 1:A:157:GLY:C 1:A:158:VAL:N 1:A:158:VAL:CA 1:A:158:VAL:C 20 42.86 58.2 (1,250) 1:A:96:GLU:C 1:A:97:ILE:N 1:A:97:ILE:CA 1:A:97:ILE:C 20 30.71 56.64 (1,93) 1:A:72:ILE:C 1:A:66:PHE:N 1:A:66:PHE:CA 1:A:66:PHE:C 20 42.18 55.28 (1,219) 1:A:65:TRP:C 1:A:66:PHE:N 1:A:66:PHE:CA 1:A:66:PHE:C 20 40.78 55.16 (1,335) 1:A:156:LYS:C 1:A:157:GLY:N 1:A:157:GLY:CA 1:A:157:GLY:C 20 39.78 54.58 (1,215) 1:A:62:GLY:C 1:A:63:THR:N 1:A:63:THR:CA 1:A:63:THR:C 20 43.72 54.42 (1,236) 1:A:88:IHE:C 1:A:89:THR:N 1:A:89:THR:CA 1:A:89:THR:C 20 37.11 48.52 (1,315) 1:A:119:ASP:C 1:A:120:HIS:CA 1:A:142:HIS:C 20 29.97 48.39 (1,243) 1:A:33:HIS:C 1:A:442:HIS:CA 1:A:448:PHE:CA 1:A:484:PHE:C 20 25.47 36.	(1,355)	1:A:163:GLU:C	1:A:164:LYS:N	1:A:164:LYS:CA	1:A:164:LYS:C	20	38.67	63.48
(1,250) 1:A:96:GLU:C 1:A:97:ILE:N 1:A:97:ILE:CA 1:A:97:ILE:C 20 30.71 56.64 (1,93) 1:A:72:ILE:C 1:A:73:HIS:N 1:A:73:HIS:CA 1:A:73:HIS:C 20 42.18 55.28 (1,219) 1:A:65:TRP:C 1:A:66:PHE:N 1:A:66:PHE:CA 1:A:66:PHE:C 20 40.78 55.16 (1,335) 1:A:156:LYS:C 1:A:66:PHE:N 1:A:66:PHE:CA 1:A:66:PHE:C 20 39.78 54.58 (1,215) 1:A:62:GLY:C 1:A:63:THR:N 1:A:63:THR:CA 1:A:63:THR:C 20 43.72 54.42 (1,236) 1:A:88:ILE:C 1:A:89:THR:N 1:A:89:THR:CA 1:A:63:THR:C 20 37.11 48.52 (1,315) 1:A:119:ASP:C 1:A:120:HIS:N 1:A:120:HIS:CA 1:A:89:THR:C 20 37.11 48.52 (1,343) 1:A:43:9:ALA:N 1:A:49:ALA:CA 1:A:49:ALA:C 20 29.97 48.39 (1,243) 1:A:33:GLU:C 1:A:49:ALA:N 1:A:49:ALA:CA 20 25.47 36.41 <th< td=""><td>(1,261)</td><td>1:A:100:PRO:C</td><td>1:A:101:GLU:N</td><td>1:A:101:GLU:CA</td><td>1:A:101:GLU:C</td><td>20</td><td>28.42</td><td>58.95</td></th<>	(1,261)	1:A:100:PRO:C	1:A:101:GLU:N	1:A:101:GLU:CA	1:A:101:GLU:C	20	28.42	58.95
(1,93) 1:A:72:ILE:C 1:A:73:HIS:N 1:A:73:HIS:CA 1:A:73:HIS:C 20 42.18 55.28 (1,219) 1:A:65:TRP:C 1:A:66:PHE:N 1:A:66:PHE:CA 1:A:66:PHE:C 20 40.78 55.16 (1,335) 1:A:156:LYS:C 1:A:157:GLY:N 1:A:157:GLY:CA 1:A:157:GLY:C 20 39.78 54.58 (1,215) 1:A:62:GLY:C 1:A:63:THR:N 1:A:63:THR:CA 1:A:63:THR:C 20 43.72 54.42 (1,236) 1:A:88:ILE:C 1:A:89:THR:N 1:A:89:THR:CA 1:A:89:THR:C 20 37.11 48.52 (1,315) 1:A:119:ASP:C 1:A:120:HIS:N 1:A:420:HIS:CA 1:A:439:THR:C 20 29.97 48.39 (1,243) 1:A:93:THR:C 1:A:494:ALA:N 1:A:494:ALA:CA 1:A:494:ALA:C 20 25.47 36.41 (1,109) 1:A:83:GLU:C 1:A:462:GLY:N 1:A:62:GLY:CA 1:A:62:GLY:C 20 23.62 34.89 (1,213) 1:A:61:GLU:C 1:A:62:GLY:N 1:A:62:GLY:CA 1:A:62:GLY:C 20 <t< td=""><td>(1,337)</td><td>1:A:157:GLY:C</td><td>1:A:158:VAL:N</td><td>1:A:158:VAL:CA</td><td>1:A:158:VAL:C</td><td>20</td><td>42.86</td><td>58.2</td></t<>	(1,337)	1:A:157:GLY:C	1:A:158:VAL:N	1:A:158:VAL:CA	1:A:158:VAL:C	20	42.86	58.2
(1,219) 1:A:65:TRP:C 1:A:66:PHE:N 1:A:66:PHE:CA 1:A:66:PHE:C 20 40.78 55.16 (1,335) 1:A:156:LYS:C 1:A:157:GLY:N 1:A:157:GLY:CA 1:A:157:GLY:C 20 39.78 54.58 (1,215) 1:A:62:GLY:C 1:A:63:THR:N 1:A:63:THR:CA 1:A:63:THR:C 20 43.72 54.42 (1,236) 1:A:88:ILE:C 1:A:89:THR:N 1:A:89:THR:CA 1:A:89:THR:C 20 37.11 48.52 (1,315) 1:A:119:ASP:C 1:A:120:HIS:N 1:A:120:HIS:CA 1:A:120:HIS:C 20 29.97 48.39 (1,243) 1:A:93:THR:C 1:A:94:ALA:N 1:A:494:ALA:CA 1:A:494:ALA:C 20 25.47 36.41 (1,109) 1:A:83:GLU:C 1:A:462:GLY:N 1:A:62:GLY:CA 1:A:484:PHE:C 20 23.62 34.89 (1,213) 1:A:61:GU:C 1:A:462:GLY:N 1:A:62:GLY:CA 1:A:62:GLY:C 20 27.86 33.99 (1,321) 1:A:131:LYS:CA 1:A:131:LYS:CA 1:A:131:LYS:C 20 28.79	(1,250)	1:A:96:GLU:C	1:A:97:ILE:N	1:A:97:ILE:CA	1:A:97:ILE:C	20	30.71	56.64
(1,335) 1:A:156:LYS:C 1:A:157:GLY:N 1:A:157:GLY:CA 1:A:157:GLY:C 20 39.78 54.58 (1,215) 1:A:62:GLY:C 1:A:63:THR:N 1:A:63:THR:CA 1:A:63:THR:C 20 43.72 54.42 (1,236) 1:A:88:ILE:C 1:A:89:THR:N 1:A:89:THR:CA 1:A:89:THR:C 20 37.11 48.52 (1,315) 1:A:119:ASP:C 1:A:120:HIS:N 1:A:120:HIS:CA 1:A:120:HIS:C 20 29.97 48.39 (1,243) 1:A:93:THR:C 1:A:94:ALA:N 1:A:494:ALA:CA 1:A:494:ALA:C 20 25.47 36.41 (1,109) 1:A:83:GLU:C 1:A:462:GLY:N 1:A:462:GLY:CA 1:A:462:GLY:C 20 23.62 34.89 (1,213) 1:A:61:GLU:C 1:A:62:GLY:N 1:A:62:GLY:CA 1:A:62:GLY:C 20 27.86 33.99 (1,321) 1:A:131:LYS:N 1:A:131:LYS:CA 1:A:131:LYS:C 20 28.79 32.21 (1,207) 1:A:59:ASN:C 1:A:60:LYS:N 1:A:60:LYS:CA 1:A:60:LYS:C 20 21.98	(1,93)	1:A:72:ILE:C	1:A:73:HIS:N	1:A:73:HIS:CA	1:A:73:HIS:C	20	42.18	55.28
(1,215) 1:A:62:GLY:C 1:A:63:THR:N 1:A:63:THR:CA 1:A:63:THR:C 20 43.72 54.42 (1,236) 1:A:88:ILE:C 1:A:89:THR:N 1:A:89:THR:CA 1:A:89:THR:C 20 37.11 48.52 (1,315) 1:A:119:ASP:C 1:A:120:HIS:N 1:A:120:HIS:CA 1:A:120:HIS:C 20 29.97 48.39 (1,243) 1:A:93:THR:C 1:A:94:ALA:N 1:A:94:ALA:CA 1:A:94:ALA:C 20 25.47 36.41 (1,109) 1:A:83:GLU:C 1:A:84:PHE:N 1:A:84:PHE:CA 1:A:84:PHE:C 20 23.62 34.89 (1,213) 1:A:61:GLU:C 1:A:62:GLY:N 1:A:62:GLY:CA 1:A:62:GLY:C 20 27.86 33.99 (1,321) 1:A:130:PRO:C 1:A:131:LYS:N 1:A:131:LYS:CA 1:A:60:LYS:C 20 28.79 32.21 (1,207) 1:A:59:ASN:C 1:A:60:LYS:N 1:A:60:LYS:CA 1:A:60:LYS:C 20 21.98 31.12 (1,312) 1:A:18:THR:C 1:A:119:ASP:N 1:A:419:ASP:CA 1:A:419:ASP:C 20 <td< td=""><td>(1,219)</td><td>1:A:65:TRP:C</td><td>1:A:66:PHE:N</td><td>1:A:66:PHE:CA</td><td>1:A:66:PHE:C</td><td>20</td><td>40.78</td><td>55.16</td></td<>	(1,219)	1:A:65:TRP:C	1:A:66:PHE:N	1:A:66:PHE:CA	1:A:66:PHE:C	20	40.78	55.16
(1,236) 1:A:88:ILE:C 1:A:89:THR:N 1:A:89:THR:CA 1:A:89:THR:C 20 37.11 48.52 (1,315) 1:A:119:ASP:C 1:A:120:HIS:N 1:A:120:HIS:CA 1:A:120:HIS:C 20 29.97 48.39 (1,243) 1:A:93:THR:C 1:A:94:ALA:N 1:A:94:ALA:CA 1:A:94:ALA:C 20 25.47 36.41 (1,109) 1:A:83:GLU:C 1:A:84:PHE:N 1:A:84:PHE:CA 1:A:84:PHE:C 20 23.62 34.89 (1,213) 1:A:61:GLU:C 1:A:62:GLY:N 1:A:62:GLY:CA 1:A:62:GLY:C 20 27.86 33.99 (1,321) 1:A:61:GLU:C 1:A:60:LYS:N 1:A:60:LYS:CA 1:A:60:LYS:C 20 28.79 32.21 (1,207) 1:A:59:ASN:C 1:A:60:LYS:N 1:A:60:LYS:CA 1:A:60:LYS:C 20 21.98 31.12 (1,312) 1:A:118:THR:C 1:A:119:ASP:N 1:A:119:ASP:CA 1:A:119:ASP:C 20 17.86 30.32 (1,233) 1:A:73:HIS:C 1:A:74:ASP:N 1:A:74:ASP:CA 1:A:74:ASP:C 20 1	(1,335)	1:A:156:LYS:C	1:A:157:GLY:N	1:A:157:GLY:CA	1:A:157:GLY:C	20	39.78	54.58
(1,315) 1:A:119:ASP:C 1:A:120:HIS:N 1:A:120:HIS:CA 1:A:120:HIS:C 20 29.97 48.39 (1,243) 1:A:93:THR:C 1:A:94:ALA:N 1:A:94:ALA:CA 1:A:94:ALA:C 20 25.47 36.41 (1,109) 1:A:83:GLU:C 1:A:84:PHE:N 1:A:84:PHE:CA 1:A:84:PHE:C 20 23.62 34.89 (1,213) 1:A:61:GLU:C 1:A:62:GLY:N 1:A:62:GLY:CA 1:A:62:GLY:C 20 27.86 33.99 (1,321) 1:A:61:GU:C 1:A:62:GLY:N 1:A:62:GLY:CA 1:A:62:GLY:C 20 27.86 33.99 (1,321) 1:A:61:GU:C 1:A:60:LYS:N 1:A:62:GLY:C 20 27.86 33.99 (1,321) 1:A:131:LYS:N 1:A:131:LYS:CA 1:A:60:LYS:C 20 28.79 32.21 (1,207) 1:A:59:ASN:C 1:A:60:LYS:N 1:A:60:LYS:CA 1:A:60:LYS:C 20 21.98 31.12 (1,312) 1:A:118:THR:C 1:A:119:ASP:N 1:A:119:ASP:CA 1:A:119:ASP:C 20 17.86 30.32 <	(1,215)	1:A:62:GLY:C	1:A:63:THR:N	1:A:63:THR:CA	1:A:63:THR:C	20	43.72	54.42
(1,315) 1:A:119:ASP:C 1:A:120:HIS:N 1:A:120:HIS:CA 1:A:120:HIS:C 20 29.97 48.39 (1,243) 1:A:93:THR:C 1:A:94:ALA:N 1:A:94:ALA:CA 1:A:94:ALA:C 20 25.47 36.41 (1,109) 1:A:83:GLU:C 1:A:84:PHE:N 1:A:84:PHE:CA 1:A:84:PHE:C 20 23.62 34.89 (1,213) 1:A:61:GLU:C 1:A:62:GLY:N 1:A:62:GLY:CA 1:A:62:GLY:C 20 27.86 33.99 (1,321) 1:A:130:PRO:C 1:A:131:LYS:N 1:A:131:LYS:CA 1:A:131:LYS:C 20 28.79 32.21 (1,207) 1:A:59:ASN:C 1:A:60:LYS:N 1:A:60:LYS:CA 1:A:60:LYS:C 20 21.98 31.12 (1,207) 1:A:59:ASN:C 1:A:60:LYS:N 1:A:60:LYS:CA 1:A:60:LYS:C 20 21.98 31.12 (1,312) 1:A:118:THR:C 1:A:131:LYS:N 1:A:119:ASP:CA 1:A:149:ASP:C 20 17.86 30.32 (1,223) 1:A:131:LYS:C 1:A:103:ASP:CA 1:A:103:ASP:C 20 17.18 2	(1,236)	1:A:88:ILE:C	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:C	20	37.11	48.52
(1,109) 1:A:83:GLU:C 1:A:84:PHE:N 1:A:84:PHE:CA 1:A:84:PHE:C 20 23.62 34.89 (1,213) 1:A:61:GLU:C 1:A:62:GLY:N 1:A:62:GLY:CA 1:A:62:GLY:C 20 27.86 33.99 (1,321) 1:A:130:PRO:C 1:A:131:LYS:N 1:A:131:LYS:CA 1:A:131:LYS:C 20 28.79 32.21 (1,207) 1:A:59:ASN:C 1:A:60:LYS:N 1:A:60:LYS:CA 1:A:60:LYS:C 20 21.98 31.12 (1,312) 1:A:118:THR:C 1:A:119:ASP:N 1:A:119:ASP:CA 1:A:119:ASP:C 20 17.86 30.32 (1,223) 1:A:73:HIS:C 1:A:74:ASP:N 1:A:74:ASP:CA 1:A:74:ASP:C 20 14.66 26.92 (1,267) 1:A:102:LEU:C 1:A:103:ASP:N 1:A:103:ASP:CA 1:A:103:ASP:C 20 17.18 26.17 (1,239) 1:A:91:PRO:C 1:A:92:THR:N 1:A:92:THR:CA 1:A:92:THR:C 20 16.99 24.57 (1,222) 1:A:73:HIS:C 1:A:74:ASP:N 1:A:74:ASP:CA 1:A:74:ASP:C 20 <		1:A:119:ASP:C	1:A:120:HIS:N	1:A:120:HIS:CA	1:A:120:HIS:C	20	29.97	48.39
(1,213) 1:A:61:GLU:C 1:A:62:GLY:N 1:A:62:GLY:CA 1:A:62:GLY:C 20 27.86 33.99 (1,321) 1:A:130:PRO:C 1:A:131:LYS:N 1:A:131:LYS:CA 1:A:131:LYS:C 20 28.79 32.21 (1,207) 1:A:59:ASN:C 1:A:60:LYS:N 1:A:60:LYS:CA 1:A:60:LYS:C 20 21.98 31.12 (1,312) 1:A:118:THR:C 1:A:119:ASP:N 1:A:119:ASP:CA 1:A:119:ASP:C 20 17.86 30.32 (1,223) 1:A:73:HIS:C 1:A:74:ASP:N 1:A:74:ASP:CA 1:A:74:ASP:C 20 14.66 26.92 (1,267) 1:A:102:LEU:C 1:A:103:ASP:N 1:A:103:ASP:CA 1:A:103:ASP:C 20 17.18 26.17 (1,239) 1:A:91:PRO:C 1:A:92:THR:N 1:A:92:THR:CA 1:A:92:THR:C 20 16.99 24.57 (1,222) 1:A:73:HIS:C 1:A:74:ASP:N 1:A:74:ASP:CA 1:A:74:ASP:C 20 15.34 23.3 (1,322) 1:A:130:PRO:C 1:A:131:LYS:N 1:A:131:LYS:CA 1:A:131:LYS:C 9	(1,243)	1:A:93:THR:C	1:A:94:ALA:N	1:A:94:ALA:CA	1:A:94:ALA:C	20	25.47	36.41
(1,213) 1:A:61:GLU:C 1:A:62:GLY:N 1:A:62:GLY:CA 1:A:62:GLY:C 20 27.86 33.99 (1,321) 1:A:130:PRO:C 1:A:131:LYS:N 1:A:131:LYS:CA 1:A:131:LYS:C 20 28.79 32.21 (1,207) 1:A:59:ASN:C 1:A:60:LYS:N 1:A:60:LYS:CA 1:A:60:LYS:C 20 21.98 31.12 (1,312) 1:A:118:THR:C 1:A:119:ASP:N 1:A:119:ASP:CA 1:A:119:ASP:C 20 17.86 30.32 (1,223) 1:A:73:HIS:C 1:A:74:ASP:N 1:A:74:ASP:CA 1:A:74:ASP:C 20 14.66 26.92 (1,267) 1:A:102:LEU:C 1:A:103:ASP:N 1:A:103:ASP:CA 1:A:103:ASP:C 20 17.18 26.17 (1,239) 1:A:91:PRO:C 1:A:92:THR:N 1:A:92:THR:CA 1:A:92:THR:C 20 16.99 24.57 (1,222) 1:A:73:HIS:C 1:A:74:ASP:N 1:A:74:ASP:CA 1:A:74:ASP:C 20 15.34 23.3 (1,322) 1:A:130:PRO:C 1:A:131:LYS:N 1:A:131:LYS:CA 1:A:131:LYS:C 9	· · /	1:A:83:GLU:C	1:A:84:PHE:N	1:A:84:PHE:CA	1:A:84:PHE:C	20	23.62	34.89
(1,321) 1:A:130:PRO:C 1:A:131:LYS:N 1:A:131:LYS:CA 1:A:131:LYS:C 20 28.79 32.21 (1,207) 1:A:59:ASN:C 1:A:60:LYS:N 1:A:60:LYS:CA 1:A:60:LYS:C 20 21.98 31.12 (1,312) 1:A:118:THR:C 1:A:119:ASP:N 1:A:119:ASP:CA 1:A:119:ASP:C 20 17.86 30.32 (1,223) 1:A:73:HIS:C 1:A:74:ASP:N 1:A:74:ASP:CA 1:A:74:ASP:C 20 14.66 26.92 (1,267) 1:A:102:LEU:C 1:A:103:ASP:N 1:A:103:ASP:CA 1:A:103:ASP:C 20 17.18 26.17 (1,239) 1:A:91:PRO:C 1:A:92:THR:N 1:A:92:THR:CA 1:A:92:THR:C 20 16.99 24.57 (1,222) 1:A:73:HIS:C 1:A:74:ASP:N 1:A:74:ASP:CA 1:A:74:ASP:C 20 15.34 23.3 (1,322) 1:A:130:PRO:C 1:A:131:LYS:N 1:A:131:LYS:CA 1:A:131:LYS:C 9 3.6 7.58 (1,67) 1:A:53:TRP:C 1:A:150:ILE:N 1:A:150:ILE:CA 1:A:150:ILE:C 8 <	(' /			1:A:62:GLY:CA		20		33.99
(1,207) 1:A:59:ASN:C 1:A:60:LYS:N 1:A:60:LYS:CA 1:A:60:LYS:C 20 21.98 31.12 (1,312) 1:A:118:THR:C 1:A:119:ASP:N 1:A:119:ASP:CA 1:A:119:ASP:C 20 17.86 30.32 (1,223) 1:A:73:HIS:C 1:A:74:ASP:N 1:A:74:ASP:CA 1:A:74:ASP:C 20 14.66 26.92 (1,267) 1:A:102:LEU:C 1:A:103:ASP:N 1:A:103:ASP:CA 1:A:103:ASP:C 20 17.18 26.17 (1,239) 1:A:91:PRO:C 1:A:92:THR:N 1:A:92:THR:CA 1:A:92:THR:C 20 16.99 24.57 (1,222) 1:A:73:HIS:C 1:A:74:ASP:N 1:A:74:ASP:CA 1:A:74:ASP:C 20 15.34 23.3 (1,322) 1:A:130:PRO:C 1:A:131:LYS:N 1:A:131:LYS:CA 1:A:131:LYS:C 9 3.6 7.58 (1,67) 1:A:54:PHE:N 1:A:54:PHE:CA 1:A:150:ILE:C 8 0.54 1.79	_ ` ' /		1:A:131:LYS:N			20		32.21
(1,312) 1:A:118:THR:C 1:A:119:ASP:N 1:A:119:ASP:CA 1:A:119:ASP:C 20 17.86 30.32 (1,223) 1:A:73:HIS:C 1:A:74:ASP:N 1:A:74:ASP:CA 1:A:74:ASP:C 20 14.66 26.92 (1,267) 1:A:102:LEU:C 1:A:103:ASP:N 1:A:103:ASP:CA 1:A:103:ASP:C 20 17.18 26.17 (1,239) 1:A:91:PRO:C 1:A:92:THR:N 1:A:92:THR:CA 1:A:92:THR:C 20 16.99 24.57 (1,222) 1:A:73:HIS:C 1:A:74:ASP:N 1:A:74:ASP:CA 1:A:74:ASP:C 20 15.34 23.3 (1,322) 1:A:130:PRO:C 1:A:131:LYS:N 1:A:131:LYS:CA 1:A:131:LYS:C 9 3.6 7.58 (1,67) 1:A:53:TRP:C 1:A:54:PHE:N 1:A:54:PHE:CA 1:A:54:PHE:C 6 0.95 1.83 (1,151) 1:A:149:GLU:C 1:A:150:ILE:N 1:A:150:ILE:CA 1:A:150:ILE:C 8 0.54 1.79	_ ` ' /							31.12
(1,223) 1:A:73:HIS:C 1:A:74:ASP:N 1:A:74:ASP:CA 1:A:74:ASP:C 20 14.66 26.92 (1,267) 1:A:102:LEU:C 1:A:103:ASP:N 1:A:103:ASP:CA 1:A:103:ASP:C 20 17.18 26.17 (1,239) 1:A:91:PRO:C 1:A:92:THR:N 1:A:92:THR:CA 1:A:92:THR:C 20 16.99 24.57 (1,222) 1:A:73:HIS:C 1:A:74:ASP:N 1:A:74:ASP:CA 1:A:74:ASP:C 20 15.34 23.3 (1,322) 1:A:130:PRO:C 1:A:131:LYS:N 1:A:131:LYS:CA 1:A:131:LYS:C 9 3.6 7.58 (1,67) 1:A:53:TRP:C 1:A:54:PHE:N 1:A:54:PHE:CA 1:A:54:PHE:C 6 0.95 1.83 (1,151) 1:A:149:GLU:C 1:A:150:ILE:N 1:A:150:ILE:CA 1:A:150:ILE:C 8 0.54 1.79								30.32
(1,267) 1:A:102:LEU:C 1:A:103:ASP:N 1:A:103:ASP:CA 1:A:103:ASP:C 20 17.18 26.17 (1,239) 1:A:91:PRO:C 1:A:92:THR:N 1:A:92:THR:CA 1:A:92:THR:C 20 16.99 24.57 (1,222) 1:A:73:HIS:C 1:A:74:ASP:N 1:A:74:ASP:CA 1:A:74:ASP:C 20 15.34 23.3 (1,322) 1:A:130:PRO:C 1:A:131:LYS:N 1:A:131:LYS:CA 1:A:131:LYS:C 9 3.6 7.58 (1,67) 1:A:53:TRP:C 1:A:54:PHE:N 1:A:54:PHE:CA 1:A:54:PHE:C 6 0.95 1.83 (1,151) 1:A:149:GLU:C 1:A:150:ILE:N 1:A:150:ILE:CA 1:A:150:ILE:C 8 0.54 1.79	(' /							26.92
(1,239) 1:A:91:PRO:C 1:A:92:THR:N 1:A:92:THR:CA 1:A:92:THR:C 20 16.99 24.57 (1,222) 1:A:73:HIS:C 1:A:74:ASP:N 1:A:74:ASP:CA 1:A:74:ASP:C 20 15.34 23.3 (1,322) 1:A:130:PRO:C 1:A:131:LYS:N 1:A:131:LYS:CA 1:A:131:LYS:C 9 3.6 7.58 (1,67) 1:A:53:TRP:C 1:A:54:PHE:N 1:A:54:PHE:CA 1:A:54:PHE:C 6 0.95 1.83 (1,151) 1:A:149:GLU:C 1:A:150:ILE:N 1:A:150:ILE:CA 1:A:150:ILE:C 8 0.54 1.79	(' /							26.17
(1,222) 1:A:73:HIS:C 1:A:74:ASP:N 1:A:74:ASP:CA 1:A:74:ASP:C 20 15.34 23.3 (1,322) 1:A:130:PRO:C 1:A:131:LYS:N 1:A:131:LYS:CA 1:A:131:LYS:C 9 3.6 7.58 (1,67) 1:A:53:TRP:C 1:A:54:PHE:N 1:A:54:PHE:CA 1:A:54:PHE:C 6 0.95 1.83 (1,151) 1:A:149:GLU:C 1:A:150:ILE:N 1:A:150:ILE:CA 1:A:150:ILE:C 8 0.54 1.79	,							24.57
(1,322) 1:A:130:PRO:C 1:A:131:LYS:N 1:A:131:LYS:CA 1:A:131:LYS:C 9 3.6 7.58 (1,67) 1:A:53:TRP:C 1:A:54:PHE:N 1:A:54:PHE:CA 1:A:54:PHE:C 6 0.95 1.83 (1,151) 1:A:149:GLU:C 1:A:150:ILE:N 1:A:150:ILE:CA 1:A:150:ILE:C 8 0.54 1.79	(/ /							23.3
(1,67) 1:A:53:TRP:C 1:A:54:PHE:N 1:A:54:PHE:CA 1:A:54:PHE:C 6 0.95 1.83 (1,151) 1:A:149:GLU:C 1:A:150:ILE:N 1:A:150:ILE:CA 1:A:150:ILE:C 8 0.54 1.79								
(1,151) 1:A:149:GLU:C 1:A:150:ILE:N 1:A:150:ILE:CA 1:A:150:ILE:C 8 0.54 1.79								
	. ,							
(1,105) 1:A:81:ASP:C 1:A:82:ILE:N 1:A:82:ILE:CA 1:A:82:ILE:C 3 0.87 1.69								
	(1,322) (1,67) (1,151)	1:A:130:PRO:C 1:A:53:TRP:C 1:A:149:GLU:C	1:A:131:LYS:N 1:A:54:PHE:N 1:A:150:ILE:N	1:A:131:LYS:CA 1:A:54:PHE:CA 1:A:150:ILE:CA	1:A:131:LYS:C 1:A:54:PHE:C 1:A:150:ILE:C	9 6 8	3.6 0.95 0.54	7 1 1



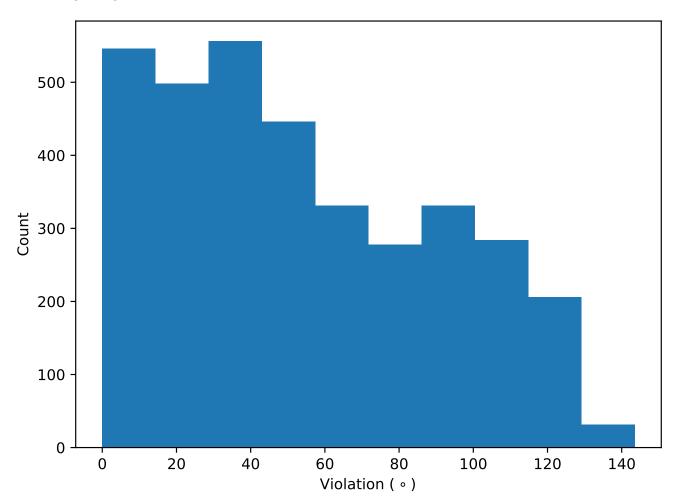
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models	Mean (o)	Max (°)
(1,89)	1:A:70:TRP:C	1:A:71:TYR:N	1:A:71:TYR:CA	1:A:71:TYR:C	11	0.9	1.63
(1,1)	1:A:3:ASP:C	1:A:4:GLU:N	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:C	1	1.34	1.34
(1,17)	1:A:24:ASP:C	1:A:25:ARG:N	1:A:25:ARG:CA	1:A:25:ARG:C	2	0.9	1.02
(1,21)	1:A:26:GLU:C	1:A:27:LEU:N	1:A:27:LEU:CA	1:A:27:LEU:C	2	0.61	0.94
(1,113)	1:A:120:HIS:C	1:A:121:PHE:N	1:A:121:PHE:CA	1:A:121:PHE:C	9	0.47	0.94
(1,83)	1:A:67:GLY:C	1:A:68:LYS:N	1:A:68:LYS:CA	1:A:68:LYS:C	2	0.79	0.82
(1,231)	1:A:85:ASP:C	1:A:86:ILE:N	1:A:86:ILE:CA	1:A:86:ILE:C	3	0.52	0.81
(1,71)	1:A:55:ARG:C	1:A:56:LEU:N	1:A:56:LEU:CA	1:A:56:LEU:C	1	0.76	0.76
(1,81)	1:A:64:ARG:C	1:A:65:TRP:N	1:A:65:TRP:CA	1:A:65:TRP:C	1	0.67	0.67
(1,85)	1:A:68:LYS:C	1:A:69:CYS:N	1:A:69:CYS:CA	1:A:69:CYS:C	4	0.56	0.66
(1,39)	1:A:35:GLU:C	1:A:36:TYR:N	1:A:36:TYR:CA	1:A:36:TYR:C	1	0.58	0.58
(1,37)	1:A:34:GLU:C	1:A:35:GLU:N	1:A:35:GLU:CA	1:A:35:GLU:C	2	0.49	0.57
(1,153)	1:A:151:PRO:C	1:A:152:ASP:N	1:A:152:ASP:CA	1:A:152:ASP:C	3	0.3	0.5
(1,29)	1:A:30:GLN:C	1:A:31:ARG:N	1:A:31:ARG:CA	1:A:31:ARG:C	1	0.48	0.48
(1,226)	1:A:74:ASP:C	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	2	0.38	0.4
(1,53)	1:A:42:TYR:C	1:A:43:VAL:N	1:A:43:VAL:CA	1:A:43:VAL:C	1	0.39	0.39
(1,31)	1:A:31:ARG:C	1:A:32:LEU:N	1:A:32:LEU:CA	1:A:32:LEU:C	2	0.3	0.32
(1,77)	1:A:58:SER:C	1:A:59:ASN:N	1:A:59:ASN:CA	1:A:59:ASN:C	1	0.29	0.29
(1,166)	1:A:12:GLU:C	1:A:13:ILE:N	1:A:13:ILE:CA	1:A:13:ILE:C	3	0.2	0.27
(1,159)	1:A:154:ILE:C	1:A:155:GLN:N	1:A:155:GLN:CA	1:A:155:GLN:C	1	0.16	0.16
(1,35)	1:A:33:LYS:C	1:A:34:GLU:N	1:A:34:GLU:CA	1:A:34:GLU:C	1	0.06	0.06



9.8 All violated dihedral angleeee restraints

9.8.1 Histogram : Distribution of violations

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



9.8.2 Table: All violated dihedral angle restraints

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

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,224)	1:A:74:ASP:N	1:A:74:ASP:CA	1:A:74:ASP:C	1:A:75:LEU:N	19	143.49
(1,224)	1:A:74:ASP:N	1:A:74:ASP:CA	1:A:74:ASP:C	1:A:75:LEU:N	2	143.4
(1,224)	1:A:74:ASP:N	1:A:74:ASP:CA	1:A:74:ASP:C	1:A:75:LEU:N	4	142.69
(1,224)	1:A:74:ASP:N	1:A:74:ASP:CA	1:A:74:ASP:C	1:A:75:LEU:N	16	142.07
(1,224)	1:A:74:ASP:N	1:A:74:ASP:CA	1:A:74:ASP:C	1:A:75:LEU:N	8	140.55
(1,224)	1:A:74:ASP:N	1:A:74:ASP:CA	1:A:74:ASP:C	1:A:75:LEU:N	10	140.25
(1,354)	1:A:163:GLU:N	1:A:163:GLU:CA	1:A:163:GLU:C	1:A:164:LYS:N	11	139.01
(1,224)	1:A:74:ASP:N	1:A:74:ASP:CA	1:A:74:ASP:C	1:A:75:LEU:N	17	137.21
(1,289)	1:A:110:TYR:N	1:A:110:TYR:CA	1:A:110:TYR:C	1:A:111:ARG:N	14	136.34
(1,359)	1:A:165:CYS:N	1:A:165:CYS:CA	1:A:165:CYS:C	1:A:166:ASN:N	7	135.74



	ed from previous pe					774 1 . 4 . ()
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (\circ)
(1,283)	1:A:108:LYS:N	1:A:108:LYS:CA	1:A:108:LYS:C	1:A:109:MET:N	15	135.5
(1,224)	1:A:74:ASP:N	1:A:74:ASP:CA	1:A:74:ASP:C	1:A:75:LEU:N	7	135.13
(1,327)	1:A:132:PHE:C	1:A:133:GLY:N	1:A:133:GLY:CA	1:A:133:GLY:C	13	134.86
(1,349)	1:A:161:HIS:C	1:A:162:LYS:N	1:A:162:LYS:CA	1:A:162:LYS:C	17	134.47
(1,221)	1:A:66:PHE:C	1:A:67:GLY:N	1:A:67:GLY:CA	1:A:67:GLY:C	15	134.41
(1,354)	1:A:163:GLU:N	1:A:163:GLU:CA	1:A:163:GLU:C	1:A:164:LYS:N	8	134.05
(1,363)	1:A:166:ASN:C	1:A:167:GLN:N	1:A:167:GLN:CA	1:A:167:GLN:C	7	133.9
(1,327)	1:A:132:PHE:C	1:A:133:GLY:N	1:A:133:GLY:CA	1:A:133:GLY:C	1	133.31
(1,294)	1:A:112:GLY:C	1:A:113:GLY:N	1:A:113:GLY:CA	1:A:113:GLY:C	10	133.23
(1,221)	1:A:66:PHE:C	1:A:67:GLY:N	1:A:67:GLY:CA	1:A:67:GLY:C	12	132.8
(1,280)	1:A:107:ALA:N	1:A:107:ALA:CA	1:A:107:ALA:C	1:A:108:LYS:N	9	132.72
(1,293)	1:A:111:ARG:C	1:A:112:GLY:N	1:A:112:GLY:CA	1:A:112:GLY:C	3	132.28
(1,224)	1:A:74:ASP:N	1:A:74:ASP:CA	1:A:74:ASP:C	1:A:75:LEU:N	15	130.93
(1,221)	1:A:66:PHE:C	1:A:67:GLY:N	1:A:67:GLY:CA	1:A:67:GLY:C	17	130.68
(1,221)	1:A:66:PHE:C	1:A:67:GLY:N	1:A:67:GLY:CA	1:A:67:GLY:C	19	130.41
(1,224)	1:A:74:ASP:N	1:A:74:ASP:CA	1:A:74:ASP:C	1:A:75:LEU:N	5	130.21
(1,282)	1:A:107:ALA:C	1:A:108:LYS:N	1:A:108:LYS:CA	1:A:108:LYS:C	8	129.99
(1,361)	1:A:165:CYS:C	1:A:166:ASN:N	1:A:166:ASN:CA	1:A:166:ASN:C	11	129.85
(1,316)	1:A:119:ASP:C	1:A:120:HIS:N	1:A:120:HIS:CA	1:A:120:HIS:C	10	129.77
(1,279)	1:A:106:THR:C	1:A:107:ALA:N	1:A:107:ALA:CA	1:A:107:ALA:C	19	129.57
(1,221)	1:A:66:PHE:C	1:A:67:GLY:N	1:A:67:GLY:CA	1:A:67:GLY:C	6	129.27
(1,345)	1:A:160:GLN:N	1:A:160:GLN:CA	1:A:160:GLN:C	1:A:161:HIS:N	1	128.84
(1,359)	1:A:165:CYS:N	1:A:165:CYS:CA	1:A:165:CYS:C	1:A:166:ASN:N	19	128.73
(1,221)	1:A:66:PHE:C	1:A:67:GLY:N	1:A:67:GLY:CA	1:A:67:GLY:C	3	128.71
(1,313)	1:A:118:THR:C	1:A:119:ASP:N	1:A:119:ASP:CA	1:A:119:ASP:C	7	128.09
(1,208)	1:A:59:ASN:C	1:A:60:LYS:N	1:A:60:LYS:CA	1:A:60:LYS:C	7	127.9
(1,313)	1:A:118:THR:C	1:A:119:ASP:N	1:A:119:ASP:CA	1:A:119:ASP:C	3	127.72
(1,344)	1:A:159:ILE:C	1:A:160:GLN:N	1:A:160:GLN:CA	1:A:160:GLN:C	3	127.71
(1,347)	1:A:160:GLN:C	1:A:161:HIS:N	1:A:161:HIS:CA	1:A:161:HIS:C	13	127.69
(1,221)	1:A:66:PHE:C	1:A:67:GLY:N	1:A:67:GLY:CA	1:A:67:GLY:C	11	127.66
(1,208)	1:A:59:ASN:C	1:A:60:LYS:N	1:A:60:LYS:CA	1:A:60:LYS:C	4	127.44
(1,288)	1:A:109:MET:C	1:A:110:TYR:N	1:A:110:TYR:CA	1:A:110:TYR:C	9	127.38
(1,221)	1:A:66:PHE:C	1:A:67:GLY:N	1:A:67:GLY:CA	1:A:67:GLY:C	16	127.34
(1,202)	1:A:51:ASN:C	1:A:52:ASP:N	1:A:52:ASP:CA	1:A:52:ASP:C	10	127.25
(1,221)	1:A:66:PHE:C	1:A:67:GLY:N	1:A:67:GLY:CA	1:A:67:GLY:C	20	127.17
(1,354)	1:A:163:GLU:N	1:A:163:GLU:CA	1:A:163:GLU:C	1:A:164:LYS:N	7	126.96
(1,350)	1:A:161:HIS:C	1:A:162:LYS:N	1:A:162:LYS:CA	1:A:162:LYS:C	12	126.95
(1,224)	1:A:74:ASP:N	1:A:74:ASP:CA	1:A:74:ASP:C	1:A:75:LEU:N	11	126.95
(1,313)	1:A:118:THR:C	1:A:119:ASP:N	1:A:119:ASP:CA	1:A:119:ASP:C	16	126.87
(1,291)	1:A:110:TYR:C	1:A:111:ARG:N	1:A:111:ARG:CA	1:A:111:ARG:C	20	126.85
(1,346)	1:A:160:GLN:C	1:A:161:HIS:N	1:A:161:HIS:CA	1:A:161:HIS:C	12	126.8
(1,270)	1:A:103:ASP:C	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	5	126.74
(1,313)	1:A:118:THR:C	1:A:119:ASP:N	1:A:119:ASP:CA	1:A:119:ASP:C	10	126.59
(1,224)	1:A:74:ASP:N	1:A:74:ASP:CA	1:A:74:ASP:C	1:A:75:LEU:N	6	126.49
(1,293)	1:A:111:ARG:C	1:A:112:GLY:N	1:A:112:GLY:CA	1:A:112:GLY:C	18	126.45
(1,202)	1:A:51:ASN:C	1:A:52:ASP:N	1:A:52:ASP:CA	1:A:52:ASP:C	12	126.44
(1,348)	1:A:161:HIS:N	1:A:161:HIS:CA	1:A:161:HIS:C	1:A:162:LYS:N	1	126.41
(1,313)	1:A:118:THR:C	1:A:119:ASP:N	1:A:119:ASP:CA	1:A:119:ASP:C	4	126.09
(1,344)	1:A:159:ILE:C	1:A:160:GLN:N	1:A:160:GLN:CA	1:A:160:GLN:C	15	125.84
(1,313)	1:A:118:THR:C	1:A:119:ASP:N	1:A:119:ASP:CA	1:A:119:ASP:C	19	125.84
(1,313)	1:A:118:THR:C	1:A:119:ASP:N	1:A:119:ASP:CA	1:A:119:ASP:C	13	125.8
()- =/			1 3-19-1			ed on next page



	ed from previous pe					
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (\circ)
(1,278)	1:A:106:THR:C	1:A:107:ALA:N	1:A:107:ALA:CA	1:A:107:ALA:C	13	125.7
(1,364)	1:A:166:ASN:C	1:A:167:GLN:N	1:A:167:GLN:CA	1:A:167:GLN:C	9	125.6
(1,353)	1:A:162:LYS:C	1:A:163:GLU:N	1:A:163:GLU:CA	1:A:163:GLU:C	10	125.5
(1,344)	1:A:159:ILE:C	1:A:160:GLN:N	1:A:160:GLN:CA	1:A:160:GLN:C	7	125.28
(1,291)	1:A:110:TYR:C	1:A:111:ARG:N	1:A:111:ARG:CA	1:A:111:ARG:C	6	125.13
(1,344)	1:A:159:ILE:C	1:A:160:GLN:N	1:A:160:GLN:CA	1:A:160:GLN:C	8	125.12
(1,291)	1:A:110:TYR:C	1:A:111:ARG:N	1:A:111:ARG:CA	1:A:111:ARG:C	15	125.12
(1,294)	1:A:112:GLY:C	1:A:113:GLY:N	1:A:113:GLY:CA	1:A:113:GLY:C	12	125.03
(1,268)	1:A:102:LEU:C	1:A:103:ASP:N	1:A:103:ASP:CA	1:A:103:ASP:C	1	125.0
(1,327)	1:A:132:PHE:C	1:A:133:GLY:N	1:A:133:GLY:CA	1:A:133:GLY:C	2	124.94
(1,268)	1:A:102:LEU:C	1:A:103:ASP:N	1:A:103:ASP:CA	1:A:103:ASP:C	12	124.89
(1,221)	1:A:66:PHE:C	1:A:67:GLY:N	1:A:67:GLY:CA	1:A:67:GLY:C	18	124.89
(1,353)	1:A:162:LYS:C	1:A:163:GLU:N	1:A:163:GLU:CA	1:A:163:GLU:C	19	124.87
(1,291)	1:A:110:TYR:C	1:A:111:ARG:N	1:A:111:ARG:CA	1:A:111:ARG:C	8	124.87
(1,309)	1:A:117:LEU:C	1:A:118:THR:N	1:A:118:THR:CA	1:A:118:THR:C	2	124.86
(1,174)	1:A:16:LEU:C	1:A:17:LYS:N	1:A:17:LYS:CA	1:A:17:LYS:C	17	124.75
(1,353)	1:A:162:LYS:C	1:A:163:GLU:N	1:A:163:GLU:CA	1:A:163:GLU:C	4	124.68
(1,221)	1:A:66:PHE:C	1:A:67:GLY:N	1:A:67:GLY:CA	1:A:67:GLY:C	1	124.54
(1,353)	1:A:162:LYS:C	1:A:163:GLU:N	1:A:163:GLU:CA	1:A:163:GLU:C	20	124.39
(1,327)	1:A:132:PHE:C	1:A:133:GLY:N	1:A:133:GLY:CA	1:A:133:GLY:C	7	124.35
(1,208)	1:A:59:ASN:C	1:A:60:LYS:N	1:A:60:LYS:CA	1:A:60:LYS:C	1	124.34
(1,309)	1:A:117:LEU:C	1:A:118:THR:N	1:A:118:THR:CA	1:A:118:THR:C	10	123.9
(1,268)	1:A:102:LEU:C	1:A:103:ASP:N	1:A:103:ASP:CA	1:A:103:ASP:C	20	123.89
(1,268)	1:A:102:LEU:C	1:A:103:ASP:N	1:A:103:ASP:CA	1:A:103:ASP:C	16	123.75
(1,283)	1:A:108:LYS:N	1:A:108:LYS:CA	1:A:108:LYS:C	1:A:109:MET:N	1	123.7
(1,313)	1:A:118:THR:C	1:A:119:ASP:N	1:A:119:ASP:CA	1:A:119:ASP:C	18	123.49
(1,288)	1:A:109:MET:C	1:A:110:TYR:N	1:A:110:TYR:CA	1:A:110:TYR:C	1	123.47
(1,291)	1:A:110:TYR:C	1:A:111:ARG:N	1:A:111:ARG:CA	1:A:111:ARG:C	3	123.45
(1,224)	1:A:74:ASP:N	1:A:74:ASP:CA	1:A:74:ASP:C	1:A:75:LEU:N	12	123.36
(1,221)	1:A:66:PHE:C	1:A:67:GLY:N	1:A:67:GLY:CA	1:A:67:GLY:C	2	123.33
(1,268)	1:A:102:LEU:C	1:A:103:ASP:N	1:A:103:ASP:CA	1:A:103:ASP:C	18	123.19
(1,268)	1:A:102:LEU:C	1:A:103:ASP:N	1:A:103:ASP:CA	1:A:103:ASP:C	9	123.16
(1,262)	1:A:100:PRO:C	1:A:101:GLU:N	1:A:101:GLU:CA	1:A:101:GLU:C	9	123.08
(1,208)	1:A:59:ASN:C	1:A:60:LYS:N	1:A:60:LYS:CA	1:A:60:LYS:C	17	123.0
(1,208)	1:A:59:ASN:C	1:A:60:LYS:N	1:A:60:LYS:CA	1:A:60:LYS:C	14	122.94
(1,262)	1:A:100:PRO:C	1:A:101:GLU:N	1:A:101:GLU:CA	1:A:101:GLU:C	19	122.88
(1,292)	1:A:111:ARG:N	1:A:111:ARG:CA	1:A:111:ARG:C	1:A:112:GLY:N	4	122.82
(1,309)	1:A:117:LEU:C	1:A:118:THR:N	1:A:118:THR:CA	1:A:118:THR:C	13	122.81
(1,316)	1:A:119:ASP:C	1:A:120:HIS:N	1:A:120:HIS:CA	1:A:120:HIS:C	8	122.75
(1,318) $(1,268)$	1:A:102:LEU:C	1:A:103:ASP:N	1:A:103:ASP:CA	1:A:103:ASP:C	2	122.74
(1,200) $(1,202)$	1:A:51:ASN:C	1:A:52:ASP:N	1:A:52:ASP:CA	1:A:52:ASP:C	11	122.74
(1,262) $(1,268)$	1:A:102:LEU:C	1:A:103:ASP:N	1:A:103:ASP:CA	1:A:103:ASP:C	10	122.54
(1,200) $(1,313)$	1:A:118:THR:C	1:A:119:ASP:N	1:A:119:ASP:CA	1:A:119:ASP:C	14	122.46
(1,313) $(1,244)$	1:A:93:THR:C	1:A:94:ALA:N	1:A:94:ALA:CA	1:A:94:ALA:C	11	122.39
(1,362)	1:A:166:ASN:N	1:A:166:ASN:CA	1:A:166:ASN:C	1:A:167:GLN:N	4	122.37
(1,362) $(1,364)$	1:A:166:ASN:C	1:A:167:GLN:N	1:A:167:GLN:CA	1:A:167:GLN:N	16	122.14
(1,304) $(1,186)$	1:A:20:ALA:C	1:A:21:GLY:N	1:A:21:GLY:CA	1:A:21:GLY:C	16	122.14
(1,130) $(1,313)$	1:A:118:THR:C	1:A:119:ASP:N	1:A:119:ASP:CA	1:A:119:ASP:C	15	122.07
(1,313) $(1,279)$	1:A:106:THR:C	1:A:107:ALA:N	1:A:107:ALA:CA	1:A:107:ALA:C	10	122.03
(1,273) $(1,268)$	1:A:100:1111c:C	1:A:103:ASP:N	1:A:107:AEA:CA 1:A:103:ASP:CA	1:A:103:ASP:C	5	121.99
(1,203) $(1,327)$	1:A:132:PHE:C	1:A:103:A51 :N 1:A:133:GLY:N	1:A:133:GLY:CA	1:A:133:GLY:C	10	121.96
(1,021)	1.71.102.1 111.0	1.11.100.GH1.1V	1.71.100.011.071	1.11.100.GE1.C		ed on nert nage



	ed from previous pe	-				
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (\circ)
(1,221)	1:A:66:PHE:C	1:A:67:GLY:N	1:A:67:GLY:CA	1:A:67:GLY:C	13	121.83
(1,350)	1:A:161:HIS:C	1:A:162:LYS:N	1:A:162:LYS:CA	1:A:162:LYS:C	3	121.81
(1,283)	1:A:108:LYS:N	1:A:108:LYS:CA	1:A:108:LYS:C	1:A:109:MET:N	11	121.71
(1,244)	1:A:93:THR:C	1:A:94:ALA:N	1:A:94:ALA:CA	1:A:94:ALA:C	13	121.7
(1,208)	1:A:59:ASN:C	1:A:60:LYS:N	1:A:60:LYS:CA	1:A:60:LYS:C	3	121.69
(1,205)	1:A:52:ASP:C	1:A:53:TRP:N	1:A:53:TRP:CA	1:A:53:TRP:C	20	121.44
(1,313)	1:A:118:THR:C	1:A:119:ASP:N	1:A:119:ASP:CA	1:A:119:ASP:C	2	121.43
(1,262)	1:A:100:PRO:C	1:A:101:GLU:N	1:A:101:GLU:CA	1:A:101:GLU:C	5	121.42
(1,262)	1:A:100:PRO:C	1:A:101:GLU:N	1:A:101:GLU:CA	1:A:101:GLU:C	11	121.39
(1,309)	1:A:117:LEU:C	1:A:118:THR:N	1:A:118:THR:CA	1:A:118:THR:C	4	121.35
(1,281)	1:A:107:ALA:C	1:A:108:LYS:N	1:A:108:LYS:CA	1:A:108:LYS:C	9	121.15
(1,265)	1:A:101:GLU:C	1:A:102:LEU:N	1:A:102:LEU:CA	1:A:102:LEU:C	8	121.12
(1,327)	1:A:132:PHE:C	1:A:133:GLY:N	1:A:133:GLY:CA	1:A:133:GLY:C	17	121.01
(1,344)	1:A:159:ILE:C	1:A:160:GLN:N	1:A:160:GLN:CA	1:A:160:GLN:C	20	120.96
(1,162)	1:A:2:ALA:C	1:A:3:ASP:N	1:A:3:ASP:CA	1:A:3:ASP:C	19	120.94
(1,292)	1:A:111:ARG:N	1:A:111:ARG:CA	1:A:111:ARG:C	1:A:112:GLY:N	5	120.86
(1,268)	1:A:102:LEU:C	1:A:103:ASP:N	1:A:103:ASP:CA	1:A:103:ASP:C	15	120.85
(1,283)	1:A:108:LYS:N	1:A:108:LYS:CA	1:A:108:LYS:C	1:A:109:MET:N	2	120.81
(1,349)	1:A:161:HIS:C	1:A:162:LYS:N	1:A:162:LYS:CA	1:A:162:LYS:C	7	120.72
(1,208)	1:A:59:ASN:C	1:A:60:LYS:N	1:A:60:LYS:CA	1:A:60:LYS:C	8	120.69
(1,291)	1:A:110:TYR:C	1:A:111:ARG:N	1:A:111:ARG:CA	1:A:111:ARG:C	2	120.63
(1,182)	1:A:19:ASN:C	1:A:20:ALA:N	1:A:20:ALA:CA	1:A:20:ALA:C	19	120.63
(1,313)	1:A:118:THR:C	1:A:119:ASP:N	1:A:119:ASP:CA	1:A:119:ASP:C	12	120.5
(1,268)	1:A:102:LEU:C	1:A:103:ASP:N	1:A:103:ASP:CA	1:A:103:ASP:C	4	120.4
(1,244)	1:A:93:THR:C	1:A:94:ALA:N	1:A:94:ALA:CA	1:A:94:ALA:C	17	120.32
(1,344)	1:A:159:ILE:C	1:A:160:GLN:N	1:A:160:GLN:CA	1:A:160:GLN:C	11	120.23
(1,202)	1:A:51:ASN:C	1:A:52:ASP:N	1:A:52:ASP:CA	1:A:52:ASP:C	4	120.23
(1,344)	1:A:159:ILE:C	1:A:160:GLN:N	1:A:160:GLN:CA	1:A:160:GLN:C	14	120.21
(1,309)	1:A:117:LEU:C	1:A:118:THR:N	1:A:118:THR:CA	1:A:118:THR:C	5	120.17
(1,309)	1:A:117:LEU:C	1:A:118:THR:N	1:A:118:THR:CA	1:A:118:THR:C	7	120.1
(1,221)	1:A:66:PHE:C	1:A:67:GLY:N	1:A:67:GLY:CA	1:A:67:GLY:C	10	120.1
(1,325)	1:A:131:LYS:C	1:A:132:PHE:N	1:A:132:PHE:CA	1:A:132:PHE:C	18	120.03
(1,309)	1:A:117:LEU:C	1:A:118:THR:N	1:A:118:THR:CA	1:A:118:THR:C	19	120.0
(1,162)	1:A:2:ALA:C	1:A:3:ASP:N	1:A:3:ASP:CA	1:A:3:ASP:C	11	119.99
(1,327)	1:A:132:PHE:C	1:A:133:GLY:N	1:A:133:GLY:CA	1:A:133:GLY:C	8	119.9
(1,282)	1:A:107:ALA:C	1:A:108:LYS:N	1:A:108:LYS:CA	1:A:108:LYS:C	13	119.9
(1,262)	1:A:100:PRO:C	1:A:101:GLU:N	1:A:101:GLU:CA	1:A:101:GLU:C	15	119.89
(1,244)	1:A:93:THR:C	1:A:94:ALA:N	1:A:94:ALA:CA	1:A:94:ALA:C	7	119.88
(1,268)	1:A:102:LEU:C	1:A:103:ASP:N	1:A:103:ASP:CA	1:A:103:ASP:C	14	119.76
(1,344)	1:A:159:ILE:C	1:A:160:GLN:N	1:A:160:GLN:CA	1:A:160:GLN:C	4	119.68
(1,296)	1:A:113:GLY:C	1:A:114:LYS:N	1:A:114:LYS:CA	1:A:114:LYS:C	9	119.61
(1,313)	1:A:118:THR:C	1:A:119:ASP:N	1:A:119:ASP:CA	1:A:119:ASP:C	5	119.58
(1,313) $(1,313)$	1:A:118:THR:C	1:A:119:ASP:N	1:A:119:ASP:CA	1:A:119:ASP:C	20	119.51
(1,344)	1:A:93:THR:C	1:A:94:ALA:N	1:A:94:ALA:CA	1:A:94:ALA:C	3	119.44
(1,208)	1:A:59:ASN:C	1:A:60:LYS:N	1:A:60:LYS:CA	1:A:60:LYS:C	9	119.35
(1,365)	1:A:167:GLN:N	1:A:167:GLN:CA	1:A:167:GLN:C	1:A:168:LEU:N	15	119.2
(1,300) $(1,292)$	1:A:111:ARG:N	1:A:111:ARG:CA	1:A:111:ARG:C	1:A:112:GLY:N	16	119.11
(1,232) $(1,224)$	1:A:74:ASP:N	1:A:74:ASP:CA	1:A:74:ASP:C	1:A:75:LEU:N	3	119.07
(1,177)	1:A:17:LYS:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	16	118.87
(1,208)	1:A:59:ASN:C	1:A:60:LYS:N	1:A:60:LYS:CA	1:A:60:LYS:C	5	118.73
(1,285)	1:A:108:LYS:C	1:A:109:MET:N	1:A:109:MET:CA	1:A:109:MET:C	12	118.68
(1,200)	1.71.100.110.0	1.71.100.1011.10	1.11.103.11L1.OA	1.71.100.1011.0		od on next nage



	ed from previous pe	-	A	A	26 11	T79 1 . 9 /)
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (\circ)
(1,221)	1:A:66:PHE:C	1:A:67:GLY:N	1:A:67:GLY:CA	1:A:67:GLY:C	4	118.68
(1,268)	1:A:102:LEU:C	1:A:103:ASP:N	1:A:103:ASP:CA	1:A:103:ASP:C	6	118.66
(1,313)	1:A:118:THR:C	1:A:119:ASP:N	1:A:119:ASP:CA	1:A:119:ASP:C	8	118.52
(1,350)	1:A:161:HIS:C	1:A:162:LYS:N	1:A:162:LYS:CA	1:A:162:LYS:C	9	118.48
(1,208)	1:A:59:ASN:C	1:A:60:LYS:N	1:A:60:LYS:CA	1:A:60:LYS:C	16	118.47
(1,316)	1:A:119:ASP:C	1:A:120:HIS:N	1:A:120:HIS:CA	1:A:120:HIS:C	19	118.46
(1,291)	1:A:110:TYR:C	1:A:111:ARG:N	1:A:111:ARG:CA	1:A:111:ARG:C	5	118.4
(1,308)	1:A:117:LEU:C	1:A:118:THR:N	1:A:118:THR:CA	1:A:118:THR:C	14	118.39
(1,290)	1:A:110:TYR:C	1:A:111:ARG:N	1:A:111:ARG:CA	1:A:111:ARG:C	1	118.3
(1,262)	1:A:100:PRO:C	1:A:101:GLU:N	1:A:101:GLU:CA	1:A:101:GLU:C	14	118.27
(1,354)	1:A:163:GLU:N	1:A:163:GLU:CA	1:A:163:GLU:C	1:A:164:LYS:N	14	118.22
(1,288)	1:A:109:MET:C	1:A:110:TYR:N	1:A:110:TYR:CA	1:A:110:TYR:C	3	118.22
(1,187)	1:A:21:GLY:N	1:A:21:GLY:CA	1:A:21:GLY:C	1:A:22:PRO:N	6	118.22
(1,327)	1:A:132:PHE:C	1:A:133:GLY:N	1:A:133:GLY:CA	1:A:133:GLY:C	15	118.15
(1,276)	1:A:105:LYS:C	1:A:106:THR:N	1:A:106:THR:CA	1:A:106:THR:C	12	118.06
(1,279)	1:A:106:THR:C	1:A:107:ALA:N	1:A:107:ALA:CA	1:A:107:ALA:C	8	118.01
(1,205)	1:A:52:ASP:C	1:A:53:TRP:N	1:A:53:TRP:CA	1:A:53:TRP:C	4	117.96
(1,316)	1:A:119:ASP:C	1:A:120:HIS:N	1:A:120:HIS:CA	1:A:120:HIS:C	13	117.94
(1,313)	1:A:118:THR:C	1:A:119:ASP:N	1:A:119:ASP:CA	1:A:119:ASP:C	1	117.94
(1,208)	1:A:59:ASN:C	1:A:60:LYS:N	1:A:60:LYS:CA	1:A:60:LYS:C	6	117.81
(1,221)	1:A:66:PHE:C	1:A:67:GLY:N	1:A:67:GLY:CA	1:A:67:GLY:C	14	117.75
(1,347)	1:A:160:GLN:C	1:A:161:HIS:N	1:A:161:HIS:CA	1:A:161:HIS:C	2	117.56
(1,187)	1:A:21:GLY:N	1:A:21:GLY:CA	1:A:21:GLY:C	1:A:22:PRO:N	16	117.54
(1,202)	1:A:51:ASN:C	1:A:52:ASP:N	1:A:52:ASP:CA	1:A:52:ASP:C	7	117.5
(1,331)	1:A:148:VAL:C	1:A:149:GLU:N	1:A:149:GLU:CA	1:A:149:GLU:C	17	117.47
(1,182)	1:A:19:ASN:C	1:A:20:ALA:N	1:A:20:ALA:CA	1:A:20:ALA:C	2	117.42
(1,292)	1:A:111:ARG:N	1:A:111:ARG:CA	1:A:111:ARG:C	1:A:112:GLY:N	12	117.34
(1,244)	1:A:93:THR:C	1:A:94:ALA:N	1:A:94:ALA:CA	1:A:94:ALA:C	14	117.24
(1,262)	1:A:100:PRO:C	1:A:101:GLU:N	1:A:101:GLU:CA	1:A:101:GLU:C	17	117.21
(1,309)	1:A:117:LEU:C	1:A:118:THR:N	1:A:118:THR:CA	1:A:118:THR:C	18	117.12
(1,162)	1:A:2:ALA:C	1:A:3:ASP:N	1:A:3:ASP:CA	1:A:3:ASP:C	14	117.12
(1,187)	1:A:21:GLY:N	1:A:21:GLY:CA	1:A:21:GLY:C	1:A:22:PRO:N	3	117.11
(1,187)	1:A:21:GLY:N	1:A:21:GLY:CA	1:A:21:GLY:C	1:A:22:PRO:N	1	117.03
(1,290)	1:A:110:TYR:C	1:A:111:ARG:N	1:A:111:ARG:CA	1:A:111:ARG:C	19	116.93
(1,224)	1:A:74:ASP:N	1:A:74:ASP:CA	1:A:74:ASP:C	1:A:75:LEU:N	13	116.93
(1,221)	1:A:66:PHE:C	1:A:67:GLY:N	1:A:67:GLY:CA	1:A:67:GLY:C	8	116.93
(1,268)	1:A:102:LEU:C	1:A:103:ASP:N	1:A:103:ASP:CA	1:A:103:ASP:C	19	116.82
(1,177)	1:A:17:LYS:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	15	116.68
(1,237)	1:A:88:ILE:C	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:C	17	116.64
(1,313)	1:A:118:THR:C	1:A:119:ASP:N	1:A:119:ASP:CA	1:A:119:ASP:C	9	116.59
(1,358)	1:A:164:LYS:C	1:A:165:CYS:N	1:A:165:CYS:CA	1:A:165:CYS:C	11	116.53
(1,351)	1:A:162:LYS:N	1:A:162:LYS:CA	1:A:162:LYS:C	1:A:163:GLU:N	11	116.49
(1,361)	1:A:165:CYS:C	1:A:166:ASN:N	1:A:166:ASN:CA	1:A:166:ASN:C	12	116.42
(1,262)	1:A:100:PRO:C	1:A:101:GLU:N	1:A:101:GLU:CA	1:A:101:GLU:C	16	116.42
(1,316)	1:A:119:ASP:C	1:A:120:HIS:N	1:A:120:HIS:CA	1:A:120:HIS:C	16	116.39
(1,313)	1:A:118:THR:C	1:A:119:ASP:N	1:A:119:ASP:CA	1:A:119:ASP:C	17	116.33
(1,268)	1:A:102:LEU:C	1:A:103:ASP:N	1:A:103:ASP:CA	1:A:103:ASP:C	11	116.33
(1,268)	1:A:102:LEU:C	1:A:103:ASP:N	1:A:103:ASP:CA	1:A:103:ASP:C	7	116.32
(1,358)	1:A:164:LYS:C	1:A:165:CYS:N	1:A:165:CYS:CA	1:A:165:CYS:C	20	116.28
(1,182)	1:A:19:ASN:C	1:A:20:ALA:N	1:A:20:ALA:CA	1:A:20:ALA:C	8	116.2
(1,244)	1:A:93:THR:C	1:A:94:ALA:N	1:A:94:ALA:CA	1:A:94:ALA:C	18	116.19



Key	$rac{ed\ from\ previous\ po}{\mathbf{Atom-1}}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,208)	1:A:59:ASN:C	1:A:60:LYS:N	1:A:60:LYS:CA	1:A:60:LYS:C	12	116.17
(1,244)	1:A:93:THR:C	1:A:94:ALA:N	1:A:94:ALA:CA	1:A:94:ALA:C	9	116.0
(1,268)	1:A:102:LEU:C	1:A:103:ASP:N	1:A:103:ASP:CA	1:A:103:ASP:C	3	115.86
(1,208)	1:A:59:ASN:C	1:A:60:LYS:N	1:A:60:LYS:CA	1:A:60:LYS:C	2	115.86
(1,237)	1:A:88:ILE:C	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:C	1	115.84
(1,202)	1:A:51:ASN:C	1:A:52:ASP:N	1:A:52:ASP:CA	1:A:52:ASP:C	14	115.84
(1,202)	1:A:51:ASN:C	1:A:52:ASP:N	1:A:52:ASP:CA	1:A:52:ASP:C	6	115.73
(1,268)	1:A:102:LEU:C	1:A:103:ASP:N	1:A:103:ASP:CA	1:A:103:ASP:C	13	115.71
(1,187)	1:A:21:GLY:N	1:A:21:GLY:CA	1:A:21:GLY:C	1:A:22:PRO:N	19	115.67
(1,282)	1:A:107:ALA:C	1:A:108:LYS:N	1:A:108:LYS:CA	1:A:108:LYS:C	19	115.65
(1,350)	1:A:161:HIS:C	1:A:162:LYS:N	1:A:162:LYS:CA	1:A:162:LYS:C	1	115.55
(1,244)	1:A:93:THR:C	1:A:94:ALA:N	1:A:94:ALA:CA	1:A:94:ALA:C	19	115.48
(1,278)	1:A:106:THR:C	1:A:107:ALA:N	1:A:107:ALA:CA	1:A:107:ALA:C	12	115.47
(1,360)	1:A:165:CYS:C	1:A:166:ASN:N	1:A:166:ASN:CA	1:A:166:ASN:C	20	115.41
(1,183)	1:A:19:ASN:C	1:A:20:ALA:N	1:A:20:ALA:CA	1:A:20:ALA:C	6	115.37
(1,350)	1:A:161:HIS:C	1:A:162:LYS:N	1:A:162:LYS:CA	1:A:162:LYS:C	16	115.24
(1,364)	1:A:166:ASN:C	1:A:167:GLN:N	1:A:167:GLN:CA	1:A:167:GLN:C	11	115.17
(1,387) $(1,187)$	1:A:21:GLY:N	1:A:21:GLY:CA	1:A:21:GLY:C	1:A:22:PRO:N	11	115.16
(1,309)	1:A:117:LEU:C	1:A:118:THR:N	1:A:118:THR:CA	1:A:118:THR:C	16	115.05
(1,397)	1:A:113:GLY:C	1:A:114:LYS:N	1:A:114:LYS:CA	1:A:114:LYS:C	4	114.97
(1,288)	1:A:109:MET:C	1:A:110:TYR:N	1:A:110:TYR:CA	1:A:110:TYR:C	11	114.96
(1,347)	1:A:160:GLN:C	1:A:161:HIS:N	1:A:161:HIS:CA	1:A:161:HIS:C	3	114.95
(1,017) $(1,174)$	1:A:16:LEU:C	1:A:17:LYS:N	1:A:17:LYS:CA	1:A:17:LYS:C	7	114.82
(1,244)	1:A:93:THR:C	1:A:94:ALA:N	1:A:94:ALA:CA	1:A:94:ALA:C	12	114.76
(1,211) $(1,208)$	1:A:59:ASN:C	1:A:60:LYS:N	1:A:60:LYS:CA	1:A:60:LYS:C	18	114.76
(1,345)	1:A:160:GLN:N	1:A:160:GLN:CA	1:A:160:GLN:C	1:A:161:HIS:N	17	114.74
(1,187)	1:A:21:GLY:N	1:A:21:GLY:CA	1:A:21:GLY:C	1:A:22:PRO:N	7	114.69
(1,282)	1:A:107:ALA:C	1:A:108:LYS:N	1:A:108:LYS:CA	1:A:108:LYS:C	20	114.66
(1,327)	1:A:132:PHE:C	1:A:133:GLY:N	1:A:133:GLY:CA	1:A:133:GLY:C	16	114.63
(1,316)	1:A:119:ASP:C	1:A:120:HIS:N	1:A:120:HIS:CA	1:A:120:HIS:C	9	114.57
(1,244)	1:A:93:THR:C	1:A:94:ALA:N	1:A:94:ALA:CA	1:A:94:ALA:C	1	114.56
(1,288)	1:A:109:MET:C	1:A:110:TYR:N	1:A:110:TYR:CA	1:A:110:TYR:C	19	114.5
(1,327)	1:A:132:PHE:C	1:A:133:GLY:N	1:A:133:GLY:CA	1:A:133:GLY:C	6	114.43
(1,208)	1:A:59:ASN:C	1:A:60:LYS:N	1:A:60:LYS:CA	1:A:60:LYS:C	13	114.37
(1,244)	1:A:93:THR:C	1:A:94:ALA:N	1:A:94:ALA:CA	1:A:94:ALA:C	16	114.29
(1,244)	1:A:93:THR:C	1:A:94:ALA:N	1:A:94:ALA:CA	1:A:94:ALA:C	5	114.27
(1,362)	1:A:166:ASN:N	1:A:166:ASN:CA	1:A:166:ASN:C	1:A:167:GLN:N	19	114.25
(1,182)	1:A:19:ASN:C	1:A:20:ALA:N	1:A:20:ALA:CA	1:A:20:ALA:C	18	114.07
(1,358)	1:A:164:LYS:C	1:A:165:CYS:N	1:A:165:CYS:CA	1:A:165:CYS:C	16	114.0
(1,203)	1:A:52:ASP:N	1:A:52:ASP:CA	1:A:52:ASP:C	1:A:53:TRP:N	19	113.99
(1,309)	1:A:117:LEU:C	1:A:118:THR:N	1:A:118:THR:CA	1:A:118:THR:C	8	113.9
(1,344)	1:A:159:ILE:C	1:A:160:GLN:N	1:A:160:GLN:CA	1:A:160:GLN:C	2	113.85
(1,186)	1:A:20:ALA:C	1:A:21:GLY:N	1:A:21:GLY:CA	1:A:21:GLY:C	5	113.85
(1,268)	1:A:102:LEU:C	1:A:103:ASP:N	1:A:103:ASP:CA	1:A:103:ASP:C	17	113.83
(1,353)	1:A:162:LYS:C	1:A:163:GLU:N	1:A:163:GLU:CA	1:A:163:GLU:C	3	113.82
(1,276)	1:A:105:LYS:C	1:A:106:THR:N	1:A:106:THR:CA	1:A:106:THR:C	10	113.81
(1,203)	1:A:52:ASP:N	1:A:52:ASP:CA	1:A:52:ASP:C	1:A:53:TRP:N	5	113.81
(1,364)	1:A:166:ASN:C	1:A:167:GLN:N	1:A:167:GLN:CA	1:A:167:GLN:C	5	113.72
(1,387) $(1,187)$	1:A:21:GLY:N	1:A:21:GLY:CA	1:A:21:GLY:C	1:A:22:PRO:N	10	113.56
(1,174)	1:A:16:LEU:C	1:A:17:LYS:N	1:A:17:LYS:CA	1:A:17:LYS:C	6	113.55
(1,174) $(1,282)$	1:A:107:ALA:C	1:A:108:LYS:N	1:A:108:LYS:CA	1:A:108:LYS:C	12	113.54
(+,=02)	1.11.101.111111.0	1.11.100.110.11	1.11.100.110.011	1.11.100.110.0		ed on nert nage



	ed from previous po					
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (\circ)
(1,244)	1:A:93:THR:C	1:A:94:ALA:N	1:A:94:ALA:CA	1:A:94:ALA:C	6	113.42
(1,316)	1:A:119:ASP:C	1:A:120:HIS:N	1:A:120:HIS:CA	1:A:120:HIS:C	3	113.41
(1,309)	1:A:117:LEU:C	1:A:118:THR:N	1:A:118:THR:CA	1:A:118:THR:C	12	113.41
(1,316)	1:A:119:ASP:C	1:A:120:HIS:N	1:A:120:HIS:CA	1:A:120:HIS:C	12	113.25
(1,262)	1:A:100:PRO:C	1:A:101:GLU:N	1:A:101:GLU:CA	1:A:101:GLU:C	3	113.25
(1,262)	1:A:100:PRO:C	1:A:101:GLU:N	1:A:101:GLU:CA	1:A:101:GLU:C	12	113.21
(1,358)	1:A:164:LYS:C	1:A:165:CYS:N	1:A:165:CYS:CA	1:A:165:CYS:C	2	113.18
(1,298)	1:A:114:LYS:N	1:A:114:LYS:CA	1:A:114:LYS:C	1:A:115:ILE:N	7	113.1
(1,201)	1:A:51:ASN:C	1:A:52:ASP:N	1:A:52:ASP:CA	1:A:52:ASP:C	9	113.09
(1,162)	1:A:2:ALA:C	1:A:3:ASP:N	1:A:3:ASP:CA	1:A:3:ASP:C	20	113.08
(1,208)	1:A:59:ASN:C	1:A:60:LYS:N	1:A:60:LYS:CA	1:A:60:LYS:C	10	113.07
(1,309)	1:A:117:LEU:C	1:A:118:THR:N	1:A:118:THR:CA	1:A:118:THR:C	20	113.02
(1,309)	1:A:117:LEU:C	1:A:118:THR:N	1:A:118:THR:CA	1:A:118:THR:C	9	112.86
(1,361)	1:A:165:CYS:C	1:A:166:ASN:N	1:A:166:ASN:CA	1:A:166:ASN:C	7	112.72
(1,309)	1:A:117:LEU:C	1:A:118:THR:N	1:A:118:THR:CA	1:A:118:THR:C	1	112.63
(1,200)	1:A:51:ASN:N	1:A:51:ASN:CA	1:A:51:ASN:C	1:A:52:ASP:N	3	112.55
(1,187)	1:A:21:GLY:N	1:A:21:GLY:CA	1:A:21:GLY:C	1:A:22:PRO:N	13	112.49
(1,325)	1:A:131:LYS:C	1:A:132:PHE:N	1:A:132:PHE:CA	1:A:132:PHE:C	12	112.47
(1,200)	1:A:51:ASN:N	1:A:51:ASN:CA	1:A:51:ASN:C	1:A:52:ASP:N	8	112.44
(1,195)	1:A:24:ASP:N	1:A:24:ASP:CA	1:A:24:ASP:C	1:A:25:ARG:N	1	112.41
(1,224)	1:A:74:ASP:N	1:A:74:ASP:CA	1:A:74:ASP:C	1:A:75:LEU:N	9	112.26
(1,200)	1:A:51:ASN:N	1:A:51:ASN:CA	1:A:51:ASN:C	1:A:52:ASP:N	1	112.22
(1,237)	1:A:88:ILE:C	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:C	13	112.21
(1,187)	1:A:21:GLY:N	1:A:21:GLY:CA	1:A:21:GLY:C	1:A:22:PRO:N	14	112.19
(1,187)	1:A:21:GLY:N	1:A:21:GLY:CA	1:A:21:GLY:C	1:A:22:PRO:N	17	112.19
(1,286)	1:A:109:MET:N	1:A:109:MET:CA	1:A:109:MET:C	1:A:110:TYR:N	14	112.17
(1,182)	1:A:19:ASN:C	1:A:20:ALA:N	1:A:20:ALA:CA	1:A:20:ALA:C	20	112.13
(1,361)	1:A:165:CYS:C	1:A:166:ASN:N	1:A:166:ASN:CA	1:A:166:ASN:C	10	112.09
(1,208)	1:A:59:ASN:C	1:A:60:LYS:N	1:A:60:LYS:CA	1:A:60:LYS:C	20	112.09
(1,202)	1:A:51:ASN:C	1:A:52:ASP:N	1:A:52:ASP:CA	1:A:52:ASP:C	13	112.09
(1,187)	1:A:21:GLY:N	1:A:21:GLY:CA	1:A:21:GLY:C	1:A:22:PRO:N	4	112.05
(1,288)	1:A:109:MET:C	1:A:110:TYR:N	1:A:110:TYR:CA	1:A:110:TYR:C	10	111.85
(1,327)	1:A:132:PHE:C	1:A:133:GLY:N	1:A:133:GLY:CA	1:A:133:GLY:C	3	111.72
(1,187)	1:A:21:GLY:N	1:A:21:GLY:CA	1:A:21:GLY:C	1:A:22:PRO:N	5	111.71
(1,178)	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	1:A:19:ASN:N	5	111.65
(1,244)	1:A:93:THR:C	1:A:94:ALA:N	1:A:94:ALA:CA	1:A:94:ALA:C	4	111.62
(1,208)	1:A:59:ASN:C	1:A:60:LYS:N	1:A:60:LYS:CA	1:A:60:LYS:C	15	111.62
(1,187)	1:A:21:GLY:N	1:A:21:GLY:CA	1:A:21:GLY:C	1:A:22:PRO:N	2	111.61
(1,316)	1:A:119:ASP:C	1:A:120:HIS:N	1:A:120:HIS:CA	1:A:120:HIS:C	14	111.6
(1,203)	1:A:52:ASP:N	1:A:52:ASP:CA	1:A:52:ASP:C	1:A:53:TRP:N	15	111.6
(1,285)	1:A:108:LYS:C	1:A:109:MET:N	1:A:109:MET:CA	1:A:109:MET:C	3	111.55
(1,290)	1:A:110:TYR:C	1:A:111:ARG:N	1:A:111:ARG:CA	1:A:111:ARG:C	4	111.49
(1,200)	1:A:51:ASN:N	1:A:51:ASN:CA	1:A:51:ASN:C	1:A:52:ASP:N	18	111.48
(1,313)	1:A:118:THR:C	1:A:119:ASP:N	1:A:119:ASP:CA	1:A:119:ASP:C	11	111.47
(1,349)	1:A:161:HIS:C	1:A:162:LYS:N	1:A:162:LYS:CA	1:A:162:LYS:C	19	111.38
(1,337) $(1,237)$	1:A:88:ILE:C	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:C	7	111.37
(1,262)	1:A:100:PRO:C	1:A:101:GLU:N	1:A:101:GLU:CA	1:A:101:GLU:C	6	111.32
(1,291)	1:A:110:TYR:C	1:A:111:ARG:N	1:A:111:ARG:CA	1:A:111:ARG:C	10	111.29
(1,182)	1:A:19:ASN:C	1:A:20:ALA:N	1:A:20:ALA:CA	1:A:20:ALA:C	10	111.28
(1,195)	1:A:24:ASP:N	1:A:24:ASP:CA	1:A:24:ASP:C	1:A:25:ARG:N	10	111.23
(1,244)	1:A:93:THR:C	1:A:94:ALA:N	1:A:94:ALA:CA	1:A:94:ALA:C	20	111.17
(+,-1+)	1.11.00.11110.0	1.11.0 1.11111111	1.11.0 1.1111.011	1.11.0 1.11111.0		ad an nant mass



	ed from previous po					T T T T T T T T T T T T T T T T T T T
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (\circ)
(1,187)	1:A:21:GLY:N	1:A:21:GLY:CA	1:A:21:GLY:C	1:A:22:PRO:N	9	111.16
(1,203)	1:A:52:ASP:N	1:A:52:ASP:CA	1:A:52:ASP:C	1:A:53:TRP:N	17	111.15
(1,208)	1:A:59:ASN:C	1:A:60:LYS:N	1:A:60:LYS:CA	1:A:60:LYS:C	11	111.13
(1,362)	1:A:166:ASN:N	1:A:166:ASN:CA	1:A:166:ASN:C	1:A:167:GLN:N	2	111.11
(1,218)	1:A:65:TRP:C	1:A:66:PHE:N	1:A:66:PHE:CA	1:A:66:PHE:C	19	111.11
(1,200)	1:A:51:ASN:N	1:A:51:ASN:CA	1:A:51:ASN:C	1:A:52:ASP:N	6	111.11
(1,316)	1:A:119:ASP:C	1:A:120:HIS:N	1:A:120:HIS:CA	1:A:120:HIS:C	15	111.05
(1,331)	1:A:148:VAL:C	1:A:149:GLU:N	1:A:149:GLU:CA	1:A:149:GLU:C	10	111.01
(1,262)	1:A:100:PRO:C	1:A:101:GLU:N	1:A:101:GLU:CA	1:A:101:GLU:C	8	110.97
(1,352)	1:A:162:LYS:C	1:A:163:GLU:N	1:A:163:GLU:CA	1:A:163:GLU:C	6	110.95
(1,348)	1:A:161:HIS:N	1:A:161:HIS:CA	1:A:161:HIS:C	1:A:162:LYS:N	8	110.95
(1,280)	1:A:107:ALA:N	1:A:107:ALA:CA	1:A:107:ALA:C	1:A:108:LYS:N	4	110.92
(1,279)	1:A:106:THR:C	1:A:107:ALA:N	1:A:107:ALA:CA	1:A:107:ALA:C	20	110.9
(1,325)	1:A:131:LYS:C	1:A:132:PHE:N	1:A:132:PHE:CA	1:A:132:PHE:C	11	110.88
(1,195)	1:A:24:ASP:N	1:A:24:ASP:CA	1:A:24:ASP:C	1:A:25:ARG:N	13	110.73
(1,187)	1:A:21:GLY:N	1:A:21:GLY:CA	1:A:21:GLY:C	1:A:22:PRO:N	12	110.5
(1,364)	1:A:166:ASN:C	1:A:167:GLN:N	1:A:167:GLN:CA	1:A:167:GLN:C	19	110.19
(1,262)	1:A:100:PRO:C	1:A:101:GLU:N	1:A:101:GLU:CA	1:A:101:GLU:C	20	110.17
(1,291)	1:A:110:TYR:C	1:A:111:ARG:N	1:A:111:ARG:CA	1:A:111:ARG:C	11	110.1
(1,218)	1:A:65:TRP:C	1:A:66:PHE:N	1:A:66:PHE:CA	1:A:66:PHE:C	4	110.0
(1,174)	1:A:16:LEU:C	1:A:17:LYS:N	1:A:17:LYS:CA	1:A:17:LYS:C	8	109.97
(1,362)	1:A:166:ASN:N	1:A:166:ASN:CA	1:A:166:ASN:C	1:A:167:GLN:N	1	109.96
(1,218)	1:A:65:TRP:C	1:A:66:PHE:N	1:A:66:PHE:CA	1:A:66:PHE:C	15	109.95
(1,276)	1:A:105:LYS:C	1:A:106:THR:N	1:A:106:THR:CA	1:A:106:THR:C	9	109.9
(1,195)	1:A:24:ASP:N	1:A:24:ASP:CA	1:A:24:ASP:C	1:A:25:ARG:N	14	109.89
(1,177)	1:A:17:LYS:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	13	109.83
(1,316)	1:A:119:ASP:C	1:A:120:HIS:N	1:A:120:HIS:CA	1:A:120:HIS:C	2	109.82
(1,313)	1:A:118:THR:C	1:A:119:ASP:N	1:A:119:ASP:CA	1:A:119:ASP:C	6	109.68
(1,244)	1:A:93:THR:C	1:A:94:ALA:N	1:A:94:ALA:CA	1:A:94:ALA:C	8	109.51
(1,347)	1:A:160:GLN:C	1:A:161:HIS:N	1:A:161:HIS:CA	1:A:161:HIS:C	6	109.48
(1,205)	1:A:52:ASP:C	1:A:53:TRP:N	1:A:53:TRP:CA	1:A:53:TRP:C	13	109.47
(1,365)	1:A:167:GLN:N	1:A:167:GLN:CA	1:A:167:GLN:C	1:A:168:LEU:N	13	109.44
(1,177)	1:A:17:LYS:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	14	109.32
(1,237)	1:A:88:ILE:C	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:C	20	109.31
· · /		1:A:111:ARG:CA	1:A:111:ARG:C	1:A:112:GLY:N	7	109.26
(1,176)	1:A:17:LYS:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	12	109.21
(1,361)	1:A:165:CYS:C	1:A:166:ASN:N	1:A:166:ASN:CA	1:A:166:ASN:C	19	109.15
(1,353)	1:A:162:LYS:C	1:A:163:GLU:N	1:A:163:GLU:CA	1:A:163:GLU:C	17	109.14
(1,218)	1:A:65:TRP:C	1:A:66:PHE:N	1:A:66:PHE:CA	1:A:66:PHE:C	6	109.12
(1,359)	1:A:165:CYS:N	1:A:165:CYS:CA	1:A:165:CYS:C	1:A:166:ASN:N	14	109.06
(1,388)	1:A:109:MET:C	1:A:110:TYR:N	1:A:110:TYR:CA	1:A:110:TYR:C	5	109.02
(1,279)	1:A:106:THR:C	1:A:107:ALA:N	1:A:107:ALA:CA	1:A:107:ALA:C	5	108.91
(1,213) $(1,208)$	1:A:59:ASN:C	1:A:60:LYS:N	1:A:60:LYS:CA	1:A:60:LYS:C	19	108.88
(1,162)	1:A:2:ALA:C	1:A:3:ASP:N	1:A:3:ASP:CA	1:A:3:ASP:C	7	108.88
(1,359)	1:A:165:CYS:N	1:A:165:CYS:CA	1:A:165:CYS:C	1:A:166:ASN:N	13	108.8
(1,383) $(1,182)$	1:A:19:ASN:C	1:A:20:ALA:N	1:A:20:ALA:CA	1:A:20:ALA:C	17	108.75
(1,132) $(1,345)$	1:A:160:GLN:N	1:A:160:GLN:CA	1:A:160:GLN:C	1:A:161:HIS:N	19	108.66
(1,343) $(1,293)$	1:A:111:ARG:C	1:A:112:GLY:N	1:A:112:GLY:CA	1:A:112:GLY:C	13	108.63
(1,295) $(1,195)$	1:A:24:ASP:N	1:A:24:ASP:CA	1:A:24:ASP:C	1:A:25:ARG:N	2	108.58
(1,199) $(1,202)$	1:A:51:ASN:C	1:A:52:ASP:N	1:A:52:ASP:CA	1:A:52:ASP:C	20	108.51
(1,202) $(1,194)$	1:A:23:ARG:C	1:A:24:ASP:N	1:A:24:ASP:CA	1:A:24:ASP:C	10	108.4
(1,194)	1.A.23.ANG.U	1.A.24.A3F .IV	1.A.24.ASF :UA	1.A.24.ASF.O		100.4



(1.346)	Key	$rac{ed\ from\ previous\ po}{\mathbf{Atom-1}}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1.366) 1:A-160;GIN:C							· ,
(1,282) 1:A:100:PRO:C 1:A:101:GLUN 1:A:101:GLU:CA 1:A:101:GLU:C 2 108.35 (1,281) 1:A:65:TRP:C 1:A:66:PIIE:N 1:A:66:PIIE:C 1:A:101:GLU:C 1:A:103:JY:C 1:A:114:LYS:N 1:A:114:LYS:C 1:A:114:LYS:C 8 108.27 (1,181) 1:A:19:ASN:N 1:A:19:ASN:C 1:A:104:LLYS:C 1:A:104:LLYS:C 1:A:105:LLYS:C 1:A:132:PIIE:C 1:A:132:PIIE:C 16 107.99 (1,359) 1:A:165:CYS:N 1:A:165:CYS:C 1:A:166:LLYS:C 1:A:166:ASN:N 5 107.97 (1,359) 1:A:165:LLYS:C 1:A:165:LLYS:C 1:A:166:ASN:N 5 107.97 (1,359) 1:A:165:LLYS:C 1:A:165:LLYS:C 1:A:166:ASN:N 5 107.99 (1,350) 1:A:161:HIS:C 1:A:162:LYS:N 1:A:162:LYS:C 1:A:162:LYS:C 18 107.79 (1,351) 1:A:161:HIS:C 1:A:162:LYS:N 1:A:162:LYS:C 1:A:162:LYS:C 18 107.79 (1,351) 1:A:163:LHS:C 1:A:163:LHS:N 1:A:163:LYS:C 1:A:163:LHS:C 1:A:163	· · /					9	
(1,218 1:A-65-TRP-C	· · /						
(1,297)	· · /						
(1,151) 1:A:19:ASN:N	· · /						
(1,275) 1:A:105-LYS:C	· · /						
(1,325) 1:A:131:LYS:C	/						
(1,359)	/			1:A:132:PHE:CA			
(1,179) 1.A:18:THR:C 1:A:19:ASN:N 1:A:19:ASN:C 1:A:16:LYS:C 18 107.79 (1,330) 1:A:161:HHS:C 1:A:162:LYS:N 1:A:162:LYS:C 18 107.79 (1,231) 1:A:148:VALC 1:A:149:GU:N 1:A:149:GU:C 1:A:149:GU:C 1:A:149:GU:C 1:A:63:THR:C 1:A:63:THR:C 6 107.63 (1,269) 1:A:163:ASP:N 1:A:163:ASP:C 1:A:163:ASP:C 1:A:163:ASP:C 1:A:163:ASP:C 1:A:163:ASP:C 1:A:163:ASP:C 1:A:161:GLY:N 12 107.62 (1,290) 1:A:161:TYR:C 1:A:111:ARG:N 1:A:111:ARG:C 1:A:161:GLY:N 12 107.62 (1,290) 1:A:161:TYR:C 1:A:111:ARG:C 1:A:111:ARG:C 1:A:161:GLY:N 12 107.67 (1,195) 1:A:24:ASP:N 1:A:24:ASP:C 1:A:105:LY:C 1:A:24:ASP:C 1:A:24:ASP:C	/						
(1,350) 1.A.161:HISC 1.A.162:LYS:N 1.A.162:LYS:C 1.A.162:LYS:C 18 107.79 (1,331) 1.A.148:VALC 1.A.149:GLU:N 1.A.149:GLU:C 1.A.149:GLU:C 9 107.79 107.79 107.31 1.A.162:GLY:C 1.A.163:TIR:N 1.A.63:TIR:C 1.A.63:TIR:C 6 107.63 (1,269) 1.A.103:ASP:N 1.A.103:ASP:C 1.A.103:ASP:C 1.A.103:ASP:N 1.A.103:ASP:C 1.A.104:GLY:N 12 107.62 (1,290) 1.A.110:TYR:C 1.A.111:ARG:N 1.A.111:ARG:C 1.A.111:ARG:C 9 107.57 (1,195) 1.A.24:ASP:N 1.A.24-ASP:C 1.A.24-ASP:C 1.A.224-ASP:C 1.A.224-ASP:N 1.0.24-ASP:N 1.A.24-ASP:C 1.A.224-ASP:C 1.A.224-ASP:C 1.A.24-ASP:C 1.A.24-ASP:C 1.A.24-ASP:C 1.A.24-ASP:C 1.A.24-ASP:C 1.A.102:LEU:C 15 107.41 (1,265) 1.A.101:GLU:C 1.A.102:LEU:N 1.A.102:LEU:CA 1.A.102:LEU:C 1 107.38 (1,244) 1.A.93:THR:C 1.A.94:ALA:N 1.A.94:ALA:CA 1.A.94:ALA:C 10 107.38 (1,248) 1.A.65:TRP:C 1.A.66:PHE:N 1.A.96:PHE:CA 1.A.66:PHE:C 7 107.36 (1,218) 1.A.65:TRP:C 1.A.66:PHE:N 1.A.66:PHE:CA 1.A.66:PHE:C 7 107.36 (1,218) 1.A.108:LYS:N 1.A.108:LYS:C 1.A.10	/						
(1,311) 1.A.148.VAL; C 1.A.149.GLU; N 1.A.149.GLU; C 1.7.79 (1,216) 1.A.62.GLY; C 1.A.63.THR; N 1.A.63.THR; C 1.A.103.ASP; C 1.A.103.ASP; C 1.A.103.ASP; C 1.A.104.GLY; N 12 107.62 (1,290) 1.A.110.TYR; C 1.A.111.ARG; N 1.A.111.ARG; C 1.A.111.ARG; C 9 107.57 (1,195) 1.A.24.ASP; N 1.A.24.ASP; C 1.A.24.ASP; C 1.A.25.ARG; N 19 107.48 (1,244) 1.A.93.THR; C 1.A.94.ALA; N 1.A.94.ALA; C 1.A.94.ALA; C 15 107.41 (1,265) 1.A.101.GLU; C 1.A.102.LEU; N 1.A.102.LEU; C 1.A.102.LEU; C 11 107.38 (1,214) 1.A.93.THR; C 1.A.94.ALA; N 1.A.94.ALA; C 1.A.94.ALA; C 10 107.38 (1,218) 1.A.65.TRP; C 1.A.66.PHE; N 1.A.66.PHE; C 1.A.66.PHE; C 7 107.36 (1,218) 1.A.65.TRP; C 1.A.66.PHE; N 1.A.66.PHE; C 1.A.66.PHE; C 3 107.35 (1,283) 1.A.108.LYS; N 1.A.108.LYS; C 1.A.108.LYS; C 1.A.109.MET; N 17 107.33 (1,279) 1.A.106.THR; C 1.A.106.THR;	/	1:A:161:HIS:C					
(1,216) 1:A:62:GLY:C 1:A:63:THR:N 1:A:63:THR:C 1:A:63:THR:C 6 107.63 (1,269) 1:A:103:ASP:N 1:A:103:ASP:C 1:A:103:ASP:C 1:A:104:GLY:N 12 107.62 (1,290) 1:A:103:ASP:N 1:A:11:ARG:N 1:A:111:ARG:C 1:A:111:ARG:C 9 107.57 (1,195) 1:A:24:ASP:N 1:A:24:ASP:C 1:A:24:ASP:C 1:A:25:ARG:N 19 107.48 (1,244) 1:A:93:THR:C 1:A:94:ALA:N 1:A:94:ALA:C 1:A:104:ALA:C 15 107.41 (1,265) 1:A:101:GLU:C 1:A:102:LEU:N 1:A:102:LEU:C 1:A:102:LEU:C 1:D.738 (1,244) 1:A:93:THR:C 1:A:94:ALA:N 1:A:94:ALA:C 1:A:102:LEU:C 1:D.738 (1,244) 1:A:93:THR:C 1:A:94:ALA:N 1:A:94:ALA:C 1:A:102:LEU:C 1:D.738 (1,244) 1:A:93:THR:C 1:A:94:ALA:N 1:A:94:ALA:C 1:A:94:ALA:C 10 107.38 (1,218) 1:A:65:TRP:C 1:A:66:PHE:N 1:A:66:PHE:C 1:A:66:PHE:C 7 107.36 (1,218) 1:A:65:TRP:C 1:A:66:PHE:N 1:A:66:PHE:C 1:A:109:HE:C 3 107.35 (1,283) 1:A:105:LYS:C 1:A:105:LYS:C 1:A:109:HE:N 17 107.33 (1,279) 1:A:106:THR:C 1:A:107:ALA:N 1:A:107:ALA:C 1:A:107:ALA:C 9 107.3 (1,276) 1:A:105:LYS:C 1:A:106:THR:N 1:A:106:THR:C 1 107.28 (1,346) 1:A:160:GLN:C 1:A:	(, ,						
(1,269) 1:A:103:ASP:N 1:A:103:ASP:C 1:A:103:ASP:C 1:A:104:GLY:N 12 107.62 (1,290) 1:A:110:TYR:C 1:A:111:ARG:N 1:A:111:ARG:C 1:A:111:ARG:C 9 107.57 (1,195) 1:A:24:ASP:N 1:A:24:ASP:C 1:A:25:ARG:N 19 107.48 (1,244) 1:A:93:THR:C 1:A:94:ALA:N 1:A:94:ALA:C 1:A:25:ARG:C 15 107.41 (1,265) 1:A:101:GLU:C 1:A:102:LEU:N 1:A:102:LEU:C 1:A:102:LEU:C 1:D:7.38 (1,244) 1:A:93:THR:C 1:A:94:ALA:N 1:A:94:ALA:C 1:A:94:ALA:C 10 107.38 (1,244) 1:A:93:THR:C 1:A:66:PHE:N 1:A:66:PHE:C 1:A:66:PHE:C 7 107.36 (1,218) 1:A:65:TRP:C 1:A:66:PHE:N 1:A:66:PHE:CA 1:A:66:PHE:C 7 107.36 (1,218) 1:A:65:TRP:C 1:A:66:PHE:N 1:A:66:PHE:CA 1:A:66:PHE:C 3 107.35 (1,283) 1:A:108:LYS:N 1:A:108:LYS:C 1:A:108:LYS:C 1:A:109:MET:N 17 107.33 (1,276) 1:A:106:THR:C 1:A:107:ALA:C 1:A:106:THR:C 1:A:107:ALA:C 9 107.3 (1,276) 1:A:106:GDN:C 1:A:161:HIS:N 1:A:161:HIS:C 1:A:161:HIS:C 1 107.28 (1,344) 1:A:159:LEU:C 1:A:160:GLN:C 1:D:D:D:D:D:D:D:D:D:D:D:D:D:D:D:D:D:D:D	\ ' / I						
(1,290) 1:A:110:TYR:C 1:A:111:ARG:N 1:A:111:ARG:C 1:A:21-ARG:C (1,195) 1:A:24:ASP:N 1:A:24:ASP:C 1:A:24:ASP:C 1:A:25:ARG:N 19 107.48 (1,244) 1:A:93:THR:C 1:A:94:ALA:N 1:A:94:ALA:CA 1:A:94:ALA:C 15 107.41 (1,265) 1:A:101:GU:C 1:A:102:LEU:N 1:A:102:LEU:C 1:A:102:LEU:C 11 107.38 (1,244) 1:A:93:THR:C 1:A:94:ALA:N 1:A:94:ALA:CA 1:A:94:ALA:C 10 107.38 (1,244) 1:A:93:THR:C 1:A:94:ALA:N 1:A:94:ALA:CA 1:A:94:ALA:C 10 107.38 (1,218) 1:A:65:TRP:C 1:A:66:PHE:N 1:A:66:PHE:CA 1:A:66:PHE:C 7 107.36 (1,218) 1:A:65:TRP:C 1:A:66:PHE:N 1:A:66:PHE:CA 1:A:66:PHE:C 3 107.35 (1,283) 1:A:108:LYS:N 1:A:108:LYS:CA 1:A:108:LYS:C 1:A:109:MET:N 17 107.33 (1,279) 1:A:106:THR:C 1:A:107:ALA:N 1:A:107:ALA:CA 1:A:107:ALA:C 9 107.3 (1,276) 1:A:105:LYS:C 1:A:106:THR:N 1:A:106:THR:C 1:A:106	(' /						
(1,195	\ /						
(1,244) 1:A:93:THR:C	\ ' /						
(1,265) 1:A:101:GLU:C 1:A:102:LEU:N 1:A:102:LEU:CA 1:A:102:LEU:C 11 107.38 (1,244) 1:A:93:THR:C 1:A:94:ALA:N 1:A:94:ALA:CA 1:A:94:ALA:C 10 107.38 (1,218) 1:A:65:TRP:C 1:A:66:PHE:N 1:A:66:PHE:CA 1:A:66:PHE:C 7 107.36 (1,218) 1:A:65:TRP:C 1:A:66:PHE:N 1:A:66:PHE:CA 1:A:66:PHE:C 3 107.35 (1,283) 1:A:108:LYS:N 1:A:108:LYS:CA 1:A:108:LYS:C 1:A:109:MET:N 17 107.33 (1,279) 1:A:106:THR:C 1:A:107:ALA:N 1:A:107:ALA:CA 1:A:109:MET:N 17 107.33 (1,276) 1:A:106:THR:C 1:A:106:THR:N 1:A:106:THR:C 1:A:107:24 (1,344) 1:A:159:ILE:C 1:A:160:GLN:N 1:A:160:GLN:C 1:A	\ /						
(1,244)	\ /						
(1,218)	· · /						
(1,218) 1:A:65:TRP:C 1:A:66:PHE:N 1:A:66:PHE:CA 1:A:66:PHE:C 3 107.35 (1,283) 1:A:108:LYS:N 1:A:108:LYS:CA 1:A:108:LYS:C 1:A:109:MET:N 17 107.33 (1,276) 1:A:106:THR:C 1:A:107:ALA:N 1:A:106:THR:CA 1:A:107:ALA:C 9 107.3 (1,276) 1:A:160:GLN:C 1:A:160:THR:N 1:A:160:THR:CA 1:A:161:HIS:C 1 107.28 (1,346) 1:A:160:GLN:C 1:A:161:HIS:CA 1:A:161:HIS:C 1 107.24 (1,344) 1:A:159:ILE:C 1:A:160:GLN:N 1:A:160:GLN:CA 1:A:160:GLN:C 13 107.24 (1,195) 1:A:24:ASP:N 1:A:24:ASP:CA 1:A:24:ASP:C 1:A:25:ASP:C 1 107.13 (1,202) 1:A:51:ASN:C 1:A:166:ASN:N 1:A:166:ASN:CA 1:A:166:ASN:C 1 107.11 (1,351) 1:A:165:CYS:C 1:A:166:ASN:N 1:A:166:ASN:CA 1:A:166:GLV:C 12 106.94 (1,353) 1:A:16:EYS:C 1:A:163:GLV:C 1:A:165:GLV:C 1 106.94 <	· · /						
(1,283) 1:A:108:LYS:N 1:A:108:LYS:CA 1:A:108:LYS:C 1:A:109:MET:N 17 107.33 (1,279) 1:A:106:THR;C 1:A:107:ALA:N 1:A:107:ALA:CA 1:A:107:ALA:C 9 107.3 (1,276) 1:A:105:LYS:C 1:A:106:THR:N 1:A:106:THR:CA 1:A:106:THR:C 11 107.28 (1,346) 1:A:160:GLN:C 1:A:161:HIS:N 1:A:161:HIS:CA 1:A:161:HIS:C 1 107.24 (1,344) 1:A:159:ILE:C 1:A:160:GLN:N 1:A:160:GLN:CA 1:A:160:GLN:C 13 107.24 (1,195) 1:A:24:ASP:N 1:A:24:ASP:CA 1:A:24:ASP:C 1:A:25:ARG:N 8 107.13 (1,202) 1:A:51:ASN:C 1:A:52:ASP:N 1:A:52:ASP:CA 1:A:52:ASP:C 1 107.11 (1,361) 1:A:165:CYS:C 1:A:166:GSN:N 1:A:163:GLU:CA 1:A:163:GLU:C 1:A:163:GLU:C 1:A:163:GLU:CA 1:A:163:GLU:C 1:A:163:GLU:C	· · /						
(1,279) 1:A:106:THR:C 1:A:107:ALA:N 1:A:107:ALA:CA 1:A:107:ALA:C 9 107.3 (1,276) 1:A:105:LYS:C 1:A:106:THR:N 1:A:106:THR:CA 1:A:106:THR:C 11 107.28 (1,346) 1:A:160:GLN:C 1:A:161:HIS:N 1:A:161:HIS:CA 1:A:161:HIS:C 1 107.24 (1,344) 1:A:159:ILE:C 1:A:160:GLN:N 1:A:160:GLN:CA 1:A:161:HIS:C 1 107.24 (1,195) 1:A:24:ASP:N 1:A:24:ASP:CA 1:A:24:ASP:C 1:A:25:ASP:CA 1:A:25:ASP:CB 1 107.13 (1,202) 1:A:165:ASN:C 1:A:166:ASN:N 1:A:166:ASN:CA 1:A:166:ASN:C 2 106.94 (1,361) 1:A:162:LYS:C 1:A:166:ASN:N 1:A:166:ASN:CA 1:A:163:GLU:C 12 106.75 (1,361) 1:A:162:LYS:C 1:A:166:ASN:N 1:A:166:ASN:CA 1:A:163:GLU:C 12 106.75 (1,361) 1:A:162:LYS:C 1:A:163:GLU:N 1:A:133:GLY:CA 1:A:163:GLU:C 12 106.75 (1,347) 1:A:1319:ASP:C 1:A:110:HIS:N	/						
(1,276) 1:A:105:LYS:C 1:A:106:THR:N 1:A:106:THR:CA 1:A:106:THR:C 11 107.28 (1,346) 1:A:160:GLN:C 1:A:161:HIS:N 1:A:161:HIS:CA 1:A:161:HIS:C 1 107.24 (1,344) 1:A:159:ILE:C 1:A:160:GLN:N 1:A:160:GLN:CA 1:A:160:GLN:C 13 107.24 (1,344) 1:A:159:ILE:C 1:A:160:GLN:N 1:A:160:GLN:CA 1:A:160:GLN:C 13 107.24 (1,195) 1:A:24:ASP:N 1:A:24:ASP:CA 1:A:25:ASP:C 1:A:25:ASP:C 1 107.13 (1,202) 1:A:16:SCYS:C 1:A:166:ASN:N 1:A:166:ASN:CA 1:A:166:ASN:C 2 106.94 (1,353) 1:A:165:CYS:C 1:A:166:ASN:N 1:A:166:ASN:CA 1:A:163:GLU:C 12 106.75 (1,186) 1:A:22:HSY:C 1:A:133:GLY:N 1:A:21:GLY:CA 1:A:21:GLY:C 11 106.68 (1,327) 1:A:1319:ASP:C 1:A:161:HIS:N 1:A:161:HIS:CA 1:A:161:HIS:C 20 106.47 (1,347) 1:A:160:GLN:C 1:A:161:HIS:N 1:A:161:HIS:CA	· · /						
(1,346) 1:A:160:GLN:C 1:A:161:HIS:N 1:A:161:HIS:CA 1:A:161:HIS:C 1 107.24 (1,344) 1:A:159:ILE:C 1:A:160:GLN:N 1:A:160:GLN:CA 1:A:160:GLN:C 13 107.24 (1,195) 1:A:24:ASP:N 1:A:24:ASP:CA 1:A:24:ASP:C 1:A:25:ARG:N 8 107.13 (1,202) 1:A:165:CYS:C 1:A:166:ASN:N 1:A:166:ASN:CA 1:A:166:ASN:C 1 107.11 (1,361) 1:A:165:CYS:C 1:A:166:ASN:N 1:A:166:ASN:CA 1:A:166:ASN:C 2 106.94 (1,353) 1:A:162:LYS:C 1:A:163:GLU:N 1:A:163:GLU:CA 1:A:163:GLU:C 12 106.75 (1,186) 1:A:20:ALA:C 1:A:21:GLY:N 1:A:21:GLY:CA 1:A:133:GLY:C 12 106.67 (1,347) 1:A:160:GLN:C 1:A:161:HIS:N 1:A:161:HIS:CA 1:A:161:HIS:C 20 106.66 (1,347) 1:A:160:GLN:C 1:A:161:HIS:N 1:A:161:HIS:CA 1:A:161:HIS:C 20 106.67 (1,347) 1:A:160:GLN:C 1:A:161:HIS:N 1:A:161:HIS:CA <t< td=""><td>· · /</td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td></t<>	· · /						
(1,344) 1:A:159:ILE:C 1:A:160:GLN:N 1:A:160:GLN:CA 1:A:160:GLN:C 13 107.24 (1,195) 1:A:24:ASP:N 1:A:24:ASP:CA 1:A:24:ASP:C 1:A:25:ARG:N 8 107.13 (1,202) 1:A:51:ASN:C 1:A:52:ASP:N 1:A:52:ASP:CA 1:A:52:ASP:C 1 107.11 (1,361) 1:A:165:CYS:C 1:A:166:ASN:N 1:A:166:ASN:CA 1:A:166:ASN:C 2 106.94 (1,353) 1:A:162:LYS:C 1:A:163:GLU:N 1:A:163:GLU:CA 1:A:163:GLU:C 12 106.75 (1,186) 1:A:20:ALA:C 1:A:21:GLY:N 1:A:21:GLY:CA 1:A:21:GLY:C 11 106.68 (1,327) 1:A:132:PHE:C 1:A:133:GLY:N 1:A:133:GLY:CA 1:A:133:GLY:C 12 106.67 (1,347) 1:A:160:GLN:C 1:A:161:HIS:N 1:A:120:HIS:CA 1:A:161:HIS:C 20 106.46 (1,347) 1:A:162:GLY:N 1:A:120:HIS:CA 1:A:120:HIS:C 1 106.46 (1,316) 1:A:119:ASP:C 1:A:120:HIS:N 1:A:120:HIS:CA 1:A:120:HIS:C 1 </td <td> /</td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td>	/						
(1,195) 1:A:24:ASP:N 1:A:24:ASP:CA 1:A:24:ASP:C 1:A:25:ARG:N 8 107.13 (1,202) 1:A:51:ASN:C 1:A:52:ASP:N 1:A:52:ASP:CA 1:A:52:ASP:C 1 107.11 (1,361) 1:A:165:CYS:C 1:A:166:ASN:N 1:A:166:ASN:CA 1:A:166:ASN:C 2 106.94 (1,353) 1:A:162:LYS:C 1:A:163:GLU:N 1:A:163:GLU:CA 1:A:163:GLU:C 12 106.75 (1,186) 1:A:20:AL3:C 1:A:123:GLY:N 1:A:21:GLY:CA 1:A:21:GLY:C 11 106.68 (1,327) 1:A:132:PHE:C 1:A:133:GLY:N 1:A:133:GLY:CA 1:A:133:GLY:C 12 106.67 (1,347) 1:A:132:PHE:C 1:A:120:HIS:N 1:A:161:HIS:CA 1:A:161:HIS:C 20 106.66 (1,347) 1:A:19:ASP:C 1:A:20:HIS:N 1:A:120:HIS:CA 1:A:120:HIS:C 1 106.44 (1,187) 1:A:21:GLY:N 1:A:21:GLY:CA 1:A:21:GLY:C 1:A:22:PRO:N 15 106.36 (1,187) 1:A:21:GLY:N 1:A:21:GLY:CA 1:A:21:GLY:C 1:A:22:PRO:	/						
(1,202) 1:A:51:ASN:C 1:A:52:ASP:N 1:A:52:ASP:CA 1:A:52:ASP:C 1 107.11 (1,361) 1:A:165:CYS:C 1:A:166:ASN:N 1:A:166:ASN:CA 1:A:166:ASN:C 2 106.94 (1,353) 1:A:162:LYS:C 1:A:163:GLU:N 1:A:163:GLU:CA 1:A:163:GLU:C 12 106.75 (1,186) 1:A:20:ALA:C 1:A:133:GLY:N 1:A:21:GLY:CA 1:A:21:GLY:C 11 106.68 (1,327) 1:A:132:PHE:C 1:A:133:GLY:N 1:A:133:GLY:CA 1:A:133:GLY:C 12 106.67 (1,347) 1:A:132:PHE:C 1:A:161:HIS:N 1:A:161:HIS:CA 1:A:161:HIS:C 20 106.67 (1,347) 1:A:160:GLN:C 1:A:161:HIS:N 1:A:161:HIS:CA 1:A:161:HIS:C 20 106.67 (1,347) 1:A:19:ASP:C 1:A:120:HIS:N 1:A:161:HIS:CA 1:A:161:HIS:C 20 106.44 (1,187) 1:A:21:GLY:N 1:A:21:GLY:CA 1:A:21:GLY:C 1:A:22:PRO:N 15 106.36 (1,187) 1:A:21:GLY:N 1:A:10:TYR:N 1:A:10:TYR:C 1:A:1	/						
(1,361) 1:A:165:CYS:C 1:A:166:ASN:N 1:A:166:ASN:CA 1:A:166:ASN:C 2 106.94 (1,353) 1:A:162:LYS:C 1:A:163:GLU:N 1:A:163:GLU:CA 1:A:163:GLU:C 12 106.75 (1,186) 1:A:20:ALA:C 1:A:21:GLY:N 1:A:21:GLY:CA 1:A:21:GLY:C 11 106.68 (1,327) 1:A:132:PHE:C 1:A:133:GLY:N 1:A:133:GLY:CA 1:A:133:GLY:C 12 106.67 (1,347) 1:A:160:GLN:C 1:A:161:HIS:N 1:A:161:HIS:CA 1:A:161:HIS:C 20 106.46 (1,316) 1:A:119:ASP:C 1:A:120:HIS:N 1:A:120:HIS:CA 1:A:120:HIS:C 1 106.44 (1,187) 1:A:21:GLY:N 1:A:21:GLY:CA 1:A:21:GLY:C 1:A:22:PRO:N 15 106.36 (1,187) 1:A:21:GLY:N 1:A:21:GLY:CA 1:A:21:GLY:C 1:A:22:PRO:N 20 106.31 (1,288) 1:A:109:MET:C 1:A:110:TYR:N 1:A:110:TYR:CA 1:A:110:TYR:C 13 106.23 (1,741) 1:A:16:LEU:C 1:A:17:LYS:N 1:A:17:LYS:CA 1:A:	/						
(1,353) 1:A:162:LYS:C 1:A:163:GLU:N 1:A:163:GLU:CA 1:A:163:GLU:C 12 106.75 (1,186) 1:A:20:ALA:C 1:A:21:GLY:N 1:A:21:GLY:CA 1:A:21:GLY:C 11 106.68 (1,327) 1:A:132:PHE:C 1:A:133:GLY:N 1:A:133:GLY:CA 1:A:133:GLY:C 12 106.67 (1,347) 1:A:160:GLN:C 1:A:161:HIS:N 1:A:161:HIS:CA 1:A:161:HIS:C 20 106.46 (1,316) 1:A:119:ASP:C 1:A:120:HIS:N 1:A:120:HIS:CA 1:A:120:HIS:C 1 106.44 (1,187) 1:A:21:GLY:N 1:A:21:GLY:CA 1:A:21:GLY:C 1:A:22:PRO:N 15 106.36 (1,187) 1:A:109:MET:C 1:A:110:TYR:N 1:A:110:TYR:CA 1:A:110:TYR:C 13 106.23 (1,174) 1:A:16:LEU:C 1:A:17:LYS:N 1:A:17:LYS:CA 1:A:17:LYS:C 14 106.15 (1,262) 1:A:100:PRO:C 1:A:101:GLU:N 1:A:101:GLU:CA 1:A:101:GLU:C 1 106.13 (1,182) 1:A:119:ASN:C 1:A:120:HIS:N 1:A:120:HIS:CA 1	/						
(1,186) 1:A:20:ALA:C 1:A:21:GLY:N 1:A:21:GLY:CA 1:A:21:GLY:C 11 106.68 (1,327) 1:A:132:PHE:C 1:A:133:GLY:N 1:A:133:GLY:CA 1:A:133:GLY:C 12 106.67 (1,347) 1:A:160:GLN:C 1:A:161:HIS:N 1:A:161:HIS:CA 1:A:161:HIS:C 20 106.46 (1,316) 1:A:119:ASP:C 1:A:120:HIS:N 1:A:120:HIS:CA 1:A:120:HIS:C 1 106.44 (1,187) 1:A:21:GLY:N 1:A:21:GLY:CA 1:A:21:GLY:C 1:A:22:PRO:N 15 106.36 (1,187) 1:A:21:GLY:N 1:A:21:GLY:CA 1:A:21:GLY:C 1:A:22:PRO:N 20 106.31 (1,288) 1:A:109:MET:C 1:A:110:TYR:N 1:A:110:TYR:CA 1:A:110:TYR:C 13 106.23 (1,174) 1:A:16:LEU:C 1:A:17:LYS:N 1:A:17:LYS:CA 1:A:17:LYS:C 14 106.15 (1,262) 1:A:100:PRO:C 1:A:101:GLU:N 1:A:101:GLU:CA 1:A:101:GLU:C 1 106.13 (1,182) 1:A:119:ASP:C 1:A:120:HIS:N 1:A:120:HIS:CA 1:A:1	\ ' / I						
(1,327) 1:A:132:PHE:C 1:A:133:GLY:N 1:A:133:GLY:CA 1:A:133:GLY:C 12 106.67 (1,347) 1:A:160:GLN:C 1:A:161:HIS:N 1:A:161:HIS:CA 1:A:161:HIS:C 20 106.46 (1,347) 1:A:19:ASP:C 1:A:120:HIS:N 1:A:120:HIS:CA 1:A:120:HIS:C 1 106.46 (1,316) 1:A:119:ASP:C 1:A:120:HIS:N 1:A:120:HIS:CA 1:A:120:HIS:C 1 106.44 (1,187) 1:A:21:GLY:N 1:A:21:GLY:CA 1:A:21:GLY:C 1:A:22:PRO:N 15 106.36 (1,187) 1:A:21:GLY:N 1:A:21:GLY:CA 1:A:21:GLY:C 1:A:22:PRO:N 20 106.31 (1,288) 1:A:109:MET:C 1:A:110:TYR:N 1:A:110:TYR:CA 1:A:110:TYR:C 13 106.23 (1,174) 1:A:16:LEU:C 1:A:17:LYS:N 1:A:17:LYS:CA 1:A:110:TYR:C 13 106.23 (1,362) 1:A:100:PRO:C 1:A:101:GLU:N 1:A:101:GLU:CA 1:A:101:GLU:C 1 106.13 (1,316) 1:A:119:ASN:C 1:A:120:HIS:N 1:A:120:HIS:CA 1:	_ ` ' /						
(1,347) 1:A:160:GLN:C 1:A:161:HIS:N 1:A:161:HIS:CA 1:A:161:HIS:C 20 106.46 (1,316) 1:A:119:ASP:C 1:A:120:HIS:N 1:A:120:HIS:CA 1:A:120:HIS:C 1 106.44 (1,187) 1:A:21:GLY:N 1:A:21:GLY:CA 1:A:21:GLY:C 1:A:22:PRO:N 15 106.36 (1,187) 1:A:21:GLY:N 1:A:21:GLY:CA 1:A:21:GLY:C 1:A:22:PRO:N 20 106.31 (1,288) 1:A:109:MET:C 1:A:110:TYR:N 1:A:110:TYR:CA 1:A:110:TYR:C 13 106.23 (1,174) 1:A:16:LEU:C 1:A:17:LYS:N 1:A:17:LYS:CA 1:A:17:LYS:C 14 106.15 (1,262) 1:A:100:PRO:C 1:A:101:GLU:N 1:A:101:GLU:CA 1:A:101:GLU:C 1 106.13 (1,182) 1:A:19:ASN:C 1:A:20:ALA:N 1:A:20:ALA:CA 1:A:20:ALA:C 4 106.07 (1,316) 1:A:119:ASN:N 1:A:19:ASN:CA 1:A:19:ASN:C 1:A:120:HIS:C 7 105.97 (1,181) 1:A:131:LYS:C 1:A:132:PHE:N 1:A:132:PHE:CA 1:A:132:P	\ /	1:A:132:PHE:C	1:A:133:GLY:N	1:A:133:GLY:CA	1:A:133:GLY:C	12	
(1,316) 1:A:119:ASP:C 1:A:120:HIS:N 1:A:120:HIS:CA 1:A:120:HIS:C 1 106.44 (1,187) 1:A:21:GLY:N 1:A:21:GLY:CA 1:A:21:GLY:C 1:A:22:PRO:N 15 106.36 (1,187) 1:A:21:GLY:N 1:A:21:GLY:CA 1:A:21:GLY:C 1:A:22:PRO:N 20 106.31 (1,288) 1:A:109:MET:C 1:A:110:TYR:N 1:A:110:TYR:CA 1:A:110:TYR:C 13 106.23 (1,174) 1:A:16:LEU:C 1:A:17:LYS:N 1:A:17:LYS:CA 1:A:17:LYS:C 14 106.15 (1,262) 1:A:100:PRO:C 1:A:101:GLU:N 1:A:101:GLU:CA 1:A:101:GLU:C 1 106.13 (1,182) 1:A:19:ASN:C 1:A:20:ALA:N 1:A:20:ALA:CA 1:A:20:ALA:C 4 106.07 (1,316) 1:A:119:ASP:C 1:A:120:HIS:N 1:A:120:HIS:CA 1:A:120:HIS:C 7 105.97 (1,181) 1:A:19:ASN:N 1:A:19:ASN:CA 1:A:19:ASN:C 1:A:132:PHE:CA 1:A:132:PHE:C 5 105.92 (1,344) 1:A:159:ILE:C 1:A:160:GLN:N 1:A:160:GLN	/						
(1,187) 1:A:21:GLY:N 1:A:21:GLY:CA 1:A:21:GLY:C 1:A:22:PRO:N 15 106.36 (1,187) 1:A:21:GLY:N 1:A:21:GLY:CA 1:A:21:GLY:C 1:A:22:PRO:N 20 106.31 (1,288) 1:A:109:MET:C 1:A:110:TYR:N 1:A:110:TYR:CA 1:A:110:TYR:C 13 106.23 (1,174) 1:A:16:LEU:C 1:A:17:LYS:N 1:A:17:LYS:CA 1:A:17:LYS:C 14 106.15 (1,262) 1:A:100:PRO:C 1:A:101:GLU:N 1:A:101:GLU:CA 1:A:101:GLU:C 1 106.13 (1,182) 1:A:19:ASN:C 1:A:20:ALA:N 1:A:20:ALA:CA 1:A:20:ALA:C 4 106.07 (1,316) 1:A:119:ASP:C 1:A:120:HIS:N 1:A:120:HIS:CA 1:A:120:HIS:C 7 105.97 (1,181) 1:A:131:LYS:C 1:A:132:PHE:N 1:A:19:ASN:C 1:A:132:PHE:C 5 105.92 (1,344) 1:A:131:LYS:C 1:A:160:GLN:N 1:A:160:GLN:CA 1:A:160:GLN:C 16 105.83 (1,262) 1:A:100:PRO:C 1:A:101:GLU:N 1:A:101:GLU:CA 1:A:109:M	\ /	1:A:119:ASP:C		1:A:120:HIS:CA		1	
(1,187) 1:A:21:GLY:N 1:A:21:GLY:CA 1:A:21:GLY:C 1:A:22:PRO:N 20 106.31 (1,288) 1:A:109:MET:C 1:A:110:TYR:N 1:A:110:TYR:CA 1:A:110:TYR:C 13 106.23 (1,174) 1:A:16:LEU:C 1:A:17:LYS:N 1:A:17:LYS:CA 1:A:17:LYS:C 14 106.15 (1,262) 1:A:100:PRO:C 1:A:101:GLU:N 1:A:101:GLU:CA 1:A:101:GLU:C 1 106.13 (1,182) 1:A:19:ASN:C 1:A:20:ALA:N 1:A:20:ALA:CA 1:A:20:ALA:C 4 106.07 (1,316) 1:A:119:ASP:C 1:A:120:HIS:N 1:A:120:HIS:CA 1:A:120:HIS:C 7 105.97 (1,181) 1:A:131:LYS:C 1:A:19:ASN:CA 1:A:19:ASN:C 1:A:132:PHE:C 5 105.94 (1,325) 1:A:131:LYS:C 1:A:160:GLN:N 1:A:160:GLN:CA 1:A:132:PHE:C 5 105.92 (1,344) 1:A:159:ILE:C 1:A:160:GLN:N 1:A:160:GLN:CA 1:A:160:GLN:C 16 105.83 (1,262) 1:A:100:PRO:C 1:A:101:GLU:N 1:A:108:LYS:C 1:A:109		1:A:21:GLY:N	1:A:21:GLY:CA	1:A:21:GLY:C	1:A:22:PRO:N	15	106.36
(1,288) 1:A:109:MET:C 1:A:110:TYR:N 1:A:110:TYR:CA 1:A:110:TYR:C 13 106.23 (1,174) 1:A:16:LEU:C 1:A:17:LYS:N 1:A:17:LYS:CA 1:A:17:LYS:C 14 106.15 (1,262) 1:A:100:PRO:C 1:A:101:GLU:N 1:A:101:GLU:CA 1:A:101:GLU:C 1 106.13 (1,182) 1:A:19:ASN:C 1:A:20:ALA:N 1:A:20:ALA:CA 1:A:20:ALA:C 4 106.07 (1,316) 1:A:119:ASP:C 1:A:120:HIS:N 1:A:120:HIS:CA 1:A:120:HIS:C 7 105.97 (1,181) 1:A:19:ASN:N 1:A:19:ASN:CA 1:A:19:ASN:C 1:A:20:ALA:N 11 105.94 (1,325) 1:A:131:LYS:C 1:A:132:PHE:N 1:A:132:PHE:CA 1:A:132:PHE:C 5 105.92 (1,344) 1:A:159:ILE:C 1:A:160:GLN:N 1:A:160:GLN:CA 1:A:160:GLN:C 16 105.83 (1,262) 1:A:100:PRO:C 1:A:101:GLU:N 1:A:101:GLU:CA 1:A:101:GLU:C 18 105.64 (1,283) 1:A:108:LYS:N 1:A:19:ASN:CA 1:A:19:ASN:C 1:A:1			1:A:21:GLY:CA	1:A:21:GLY:C			
(1,174) 1:A:16:LEU:C 1:A:17:LYS:N 1:A:17:LYS:CA 1:A:17:LYS:C 14 106.15 (1,262) 1:A:100:PRO:C 1:A:101:GLU:N 1:A:101:GLU:CA 1:A:101:GLU:C 1 106.13 (1,182) 1:A:19:ASN:C 1:A:20:ALA:N 1:A:20:ALA:CA 1:A:20:ALA:C 4 106.07 (1,316) 1:A:119:ASP:C 1:A:120:HIS:N 1:A:120:HIS:CA 1:A:120:HIS:C 7 105.97 (1,181) 1:A:19:ASN:N 1:A:19:ASN:CA 1:A:19:ASN:C 1:A:20:ALA:N 11 105.94 (1,325) 1:A:131:LYS:C 1:A:132:PHE:N 1:A:132:PHE:CA 1:A:132:PHE:C 5 105.92 (1,344) 1:A:159:ILE:C 1:A:160:GLN:N 1:A:160:GLN:CA 1:A:160:GLN:C 16 105.83 (1,262) 1:A:100:PRO:C 1:A:101:GLU:N 1:A:101:GLU:CA 1:A:101:GLU:C 18 105.64 (1,283) 1:A:108:LYS:N 1:A:108:LYS:CA 1:A:108:LYS:C 1:A:109:MET:N 18 105.61 (1,181) 1:A:19:ASN:N 1:A:19:ASN:CA 1:A:19:ASN:C 1:A:20	` '	1:A:109:MET:C	1:A:110:TYR:N	1:A:110:TYR:CA	1:A:110:TYR:C	13	106.23
(1,262) 1:A:100:PRO:C 1:A:101:GLU:N 1:A:101:GLU:CA 1:A:101:GLU:C 1 106.13 (1,182) 1:A:19:ASN:C 1:A:20:ALA:N 1:A:20:ALA:CA 1:A:20:ALA:C 4 106.07 (1,316) 1:A:119:ASP:C 1:A:120:HIS:N 1:A:120:HIS:CA 1:A:120:HIS:C 7 105.97 (1,181) 1:A:19:ASN:N 1:A:19:ASN:CA 1:A:19:ASN:C 1:A:20:ALA:N 11 105.94 (1,325) 1:A:131:LYS:C 1:A:132:PHE:N 1:A:132:PHE:CA 1:A:132:PHE:C 5 105.92 (1,344) 1:A:159:ILE:C 1:A:160:GLN:N 1:A:160:GLN:CA 1:A:160:GLN:C 16 105.83 (1,262) 1:A:100:PRO:C 1:A:101:GLU:N 1:A:101:GLU:CA 1:A:101:GLU:C 18 105.64 (1,283) 1:A:108:LYS:N 1:A:108:LYS:CA 1:A:108:LYS:C 1:A:109:MET:N 18 105.61 (1,181) 1:A:19:ASN:N 1:A:19:ASN:CA 1:A:19:ASN:C 1:A:20:ALA:N 13 105.41							
(1,182) 1:A:19:ASN:C 1:A:20:ALA:N 1:A:20:ALA:CA 1:A:20:ALA:C 4 106.07 (1,316) 1:A:119:ASP:C 1:A:120:HIS:N 1:A:120:HIS:CA 1:A:120:HIS:C 7 105.97 (1,181) 1:A:19:ASN:N 1:A:19:ASN:CA 1:A:19:ASN:C 1:A:20:ALA:N 11 105.94 (1,325) 1:A:131:LYS:C 1:A:132:PHE:N 1:A:132:PHE:CA 1:A:132:PHE:C 5 105.92 (1,344) 1:A:159:ILE:C 1:A:160:GLN:N 1:A:160:GLN:CA 1:A:160:GLN:C 16 105.83 (1,262) 1:A:100:PRO:C 1:A:101:GLU:N 1:A:101:GLU:CA 1:A:101:GLU:C 18 105.64 (1,283) 1:A:108:LYS:N 1:A:108:LYS:CA 1:A:108:LYS:C 1:A:109:MET:N 18 105.61 (1,181) 1:A:19:ASN:N 1:A:19:ASN:CA 1:A:19:ASN:C 1:A:20:ALA:N 13 105.41	\ \ \ \ \ \ \ \ \ \ \ \ \ \ \ \ \ \ \						
(1,316) 1:A:119:ASP:C 1:A:120:HIS:N 1:A:120:HIS:CA 1:A:120:HIS:C 7 105.97 (1,181) 1:A:19:ASN:N 1:A:19:ASN:CA 1:A:19:ASN:C 1:A:20:ALA:N 11 105.94 (1,325) 1:A:131:LYS:C 1:A:132:PHE:N 1:A:132:PHE:CA 1:A:132:PHE:C 5 105.92 (1,344) 1:A:159:ILE:C 1:A:160:GLN:N 1:A:160:GLN:CA 1:A:160:GLN:C 16 105.83 (1,262) 1:A:100:PRO:C 1:A:101:GLU:N 1:A:101:GLU:CA 1:A:101:GLU:C 18 105.64 (1,283) 1:A:108:LYS:N 1:A:108:LYS:CA 1:A:108:LYS:C 1:A:109:MET:N 18 105.61 (1,181) 1:A:19:ASN:N 1:A:19:ASN:CA 1:A:19:ASN:C 1:A:20:ALA:N 13 105.41	\ \ \ \ \ \ \ \			1:A:20:ALA:CA		4	
(1,181) 1:A:19:ASN:N 1:A:19:ASN:CA 1:A:19:ASN:C 1:A:20:ALA:N 11 105.94 (1,325) 1:A:131:LYS:C 1:A:132:PHE:N 1:A:132:PHE:CA 1:A:132:PHE:C 5 105.92 (1,344) 1:A:159:ILE:C 1:A:160:GLN:N 1:A:160:GLN:CA 1:A:160:GLN:C 16 105.83 (1,262) 1:A:100:PRO:C 1:A:101:GLU:N 1:A:101:GLU:CA 1:A:101:GLU:C 18 105.64 (1,283) 1:A:108:LYS:N 1:A:108:LYS:CA 1:A:108:LYS:C 1:A:109:MET:N 18 105.61 (1,181) 1:A:19:ASN:N 1:A:19:ASN:CA 1:A:19:ASN:C 1:A:20:ALA:N 13 105.41	· · /						
(1,325) 1:A:131:LYS:C 1:A:132:PHE:N 1:A:132:PHE:CA 1:A:132:PHE:C 5 105.92 (1,344) 1:A:159:ILE:C 1:A:160:GLN:N 1:A:160:GLN:CA 1:A:160:GLN:C 16 105.83 (1,262) 1:A:100:PRO:C 1:A:101:GLU:N 1:A:101:GLU:CA 1:A:101:GLU:C 18 105.64 (1,283) 1:A:108:LYS:N 1:A:108:LYS:CA 1:A:108:LYS:C 1:A:109:MET:N 18 105.61 (1,181) 1:A:19:ASN:N 1:A:19:ASN:CA 1:A:19:ASN:C 1:A:20:ALA:N 13 105.41	· · /	1:A:19:ASN:N			1:A:20:ALA:N	11	
(1,344) 1:A:159:ILE:C 1:A:160:GLN:N 1:A:160:GLN:CA 1:A:160:GLN:C 16 105.83 (1,262) 1:A:100:PRO:C 1:A:101:GLU:N 1:A:101:GLU:CA 1:A:101:GLU:C 18 105.64 (1,283) 1:A:108:LYS:N 1:A:108:LYS:CA 1:A:108:LYS:C 1:A:109:MET:N 18 105.61 (1,181) 1:A:19:ASN:N 1:A:19:ASN:CA 1:A:19:ASN:C 1:A:20:ALA:N 13 105.41	/						
(1,262) 1:A:100:PRO:C 1:A:101:GLU:N 1:A:101:GLU:CA 1:A:101:GLU:C 18 105.64 (1,283) 1:A:108:LYS:N 1:A:108:LYS:CA 1:A:108:LYS:C 1:A:109:MET:N 18 105.61 (1,181) 1:A:19:ASN:N 1:A:19:ASN:CA 1:A:19:ASN:C 1:A:20:ALA:N 13 105.41							
(1,283) 1:A:108:LYS:N 1:A:108:LYS:CA 1:A:108:LYS:C 1:A:109:MET:N 18 105.61 (1,181) 1:A:19:ASN:N 1:A:19:ASN:CA 1:A:19:ASN:C 1:A:20:ALA:N 13 105.41			1:A:101:GLU:N				
(1,181) 1:A:19:ASN:N 1:A:19:ASN:CA 1:A:19:ASN:C 1:A:20:ALA:N 13 105.41					1:A:109:MET:N		105.61
	/						
+ (1,594) $+$ 1:A:105:GLU:N $+$ 1:A:105:GLU:CA $+$ 1:A:105:GLU:C $+$ 1:A:104:LY5:N $+$ 9 $+$ 105.33	(1,354)	1:A:163:GLU:N	1:A:163:GLU:CA	1:A:163:GLU:C	1:A:164:LYS:N	9	105.33
(1,200) 1:A:51:ASN:N 1:A:51:ASN:CA 1:A:51:ASN:C 1:A:52:ASP:N 20 105.25	_ ` ' /	1:A:51:ASN:N	1:A:51:ASN:CA	1:A:51:ASN:C	1:A:52:ASP:N	20	105.25
(1,331) 1:A:148:VAL:C 1:A:149:GLU:N 1:A:149:GLU:CA 1:A:149:GLU:C 12 105.16	\ /	1:A:148:VAL:C	1:A:149:GLU:N	1:A:149:GLU:CA	1:A:149:GLU:C	12	105.16
(1,275) 1:A:105:LYS:C 1:A:106:THR:N 1:A:106:THR:CA 1:A:106:THR:C 1 105.09	, ,	1:A:105:LYS:C	1:A:106:THR:N	1:A:106:THR:CA	1:A:106:THR:C	1	105.09



	ed from previous pe				36 11	T70 1 10 ()
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (\circ)
(1,316)	1:A:119:ASP:C	1:A:120:HIS:N	1:A:120:HIS:CA	1:A:120:HIS:C	5	105.07
(1,325)	1:A:131:LYS:C	1:A:132:PHE:N	1:A:132:PHE:CA	1:A:132:PHE:C	17	105.05
(1,237)	1:A:88:ILE:C	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:C	9	105.05
(1,179)	1:A:18:THR:C	1:A:19:ASN:N	1:A:19:ASN:CA	1:A:19:ASN:C	10	105.02
(1,316)	1:A:119:ASP:C	1:A:120:HIS:N	1:A:120:HIS:CA	1:A:120:HIS:C	20	104.97
(1,203)	1:A:52:ASP:N	1:A:52:ASP:CA	1:A:52:ASP:C	1:A:53:TRP:N	7	104.86
(1,194)	1:A:23:ARG:C	1:A:24:ASP:N	1:A:24:ASP:CA	1:A:24:ASP:C	4	104.84
(1,182)	1:A:19:ASN:C	1:A:20:ALA:N	1:A:20:ALA:CA	1:A:20:ALA:C	9	104.76
(1,365)	1:A:167:GLN:N	1:A:167:GLN:CA	1:A:167:GLN:C	1:A:168:LEU:N	11	104.73
(1,162)	1:A:2:ALA:C	1:A:3:ASP:N	1:A:3:ASP:CA	1:A:3:ASP:C	15	104.58
(1,194)	1:A:23:ARG:C	1:A:24:ASP:N	1:A:24:ASP:CA	1:A:24:ASP:C	12	104.52
(1,331)	1:A:148:VAL:C	1:A:149:GLU:N	1:A:149:GLU:CA	1:A:149:GLU:C	8	104.51
(1,365)	1:A:167:GLN:N	1:A:167:GLN:CA	1:A:167:GLN:C	1:A:168:LEU:N	10	104.44
(1,364)	1:A:166:ASN:C	1:A:167:GLN:N	1:A:167:GLN:CA	1:A:167:GLN:C	10	104.44
(1,284)	1:A:108:LYS:C	1:A:109:MET:N	1:A:109:MET:CA	1:A:109:MET:C	11	104.38
(1,216)	1:A:62:GLY:C	1:A:63:THR:N	1:A:63:THR:CA	1:A:63:THR:C	1	104.36
(1,344)	1:A:159:ILE:C	1:A:160:GLN:N	1:A:160:GLN:CA	1:A:160:GLN:C	1	104.35
(1,276)	1:A:105:LYS:C	1:A:106:THR:N	1:A:106:THR:CA	1:A:106:THR:C	20	104.35
(1,364)	1:A:166:ASN:C	1:A:167:GLN:N	1:A:167:GLN:CA	1:A:167:GLN:C	13	104.34
(1,327)	1:A:132:PHE:C	1:A:133:GLY:N	1:A:133:GLY:CA	1:A:133:GLY:C	5	104.32
(1,269)	1:A:103:ASP:N	1:A:103:ASP:CA	1:A:103:ASP:C	1:A:104:GLY:N	13	104.32
(1,325)	1:A:131:LYS:C	1:A:132:PHE:N	1:A:132:PHE:CA	1:A:132:PHE:C	3	104.26
(1,249)	1:A:96:GLU:N	1:A:96:GLU:CA	1:A:96:GLU:C	1:A:97:ILE:N	19	104.26
(1,316)	1:A:119:ASP:C	1:A:120:HIS:N	1:A:120:HIS:CA	1:A:120:HIS:C	6	104.21
(1,187)	1:A:21:GLY:N	1:A:21:GLY:CA	1:A:21:GLY:C	1:A:22:PRO:N	18	104.19
(1,237)	1:A:88:ILE:C	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:C	19	104.09
(1,283)	1:A:108:LYS:N	1:A:108:LYS:CA	1:A:108:LYS:C	1:A:109:MET:N	5	103.97
(1,361)	1:A:165:CYS:C	1:A:166:ASN:N	1:A:166:ASN:CA	1:A:166:ASN:C	4	103.95
(1,262)	1:A:100:PRO:C	1:A:101:GLU:N	1:A:101:GLU:CA	1:A:101:GLU:C	10	103.91
(1,362)	1:A:166:ASN:N	1:A:166:ASN:CA	1:A:166:ASN:C	1:A:167:GLN:N	16	103.88
(1,364)	1:A:166:ASN:C	1:A:167:GLN:N	1:A:167:GLN:CA	1:A:167:GLN:C	4	103.86
(1,347)	1:A:160:GLN:C	1:A:161:HIS:N	1:A:161:HIS:CA	1:A:161:HIS:C	17	103.83
(1,291)	1:A:110:TYR:C	1:A:111:ARG:N	1:A:111:ARG:CA	1:A:111:ARG:C	17	103.77
(1,244)	1:A:93:THR:C	1:A:94:ALA:N	1:A:94:ALA:CA	1:A:94:ALA:C	2	103.59
(1,237)	1:A:88:ILE:C	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:C	15	103.59
(1,203)	1:A:52:ASP:N	1:A:52:ASP:CA	1:A:52:ASP:C	1:A:53:TRP:N	11	103.53
(1,195)	1:A:24:ASP:N	1:A:24:ASP:CA	1:A:24:ASP:C	1:A:25:ARG:N	7	103.46
(1,351)	1:A:162:LYS:N	1:A:162:LYS:CA	1:A:162:LYS:C	1:A:163:GLU:N	8	103.45
(1,183)	1:A:19:ASN:C	1:A:20:ALA:N	1:A:20:ALA:CA	1:A:20:ALA:C	16	103.41
(1,282)	1:A:107:ALA:C	1:A:108:LYS:N	1:A:108:LYS:CA	1:A:108:LYS:C	11	103.33
(1,202)	1:A:51:ASN:C	1:A:52:ASP:N	1:A:52:ASP:CA	1:A:52:ASP:C	15	103.33
(1,331)	1:A:148:VAL:C	1:A:149:GLU:N	1:A:149:GLU:CA	1:A:149:GLU:C	19	103.32
(1,293)	1:A:111:ARG:C	1:A:112:GLY:N	1:A:112:GLY:CA	1:A:112:GLY:C	6	103.31
(1,325)	1:A:131:LYS:C	1:A:132:PHE:N	1:A:132:PHE:CA	1:A:132:PHE:C	13	103.2
(1,203)	1:A:52:ASP:N	1:A:52:ASP:CA	1:A:52:ASP:C	1:A:53:TRP:N	8	103.19
(1,179)	1:A:18:THR:C	1:A:19:ASN:N	1:A:19:ASN:CA	1:A:19:ASN:C	11	103.16
(1,278)	1:A:106:THR:C	1:A:107:ALA:N	1:A:107:ALA:CA	1:A:107:ALA:C	7	103.0
(1,174)	1:A:16:LEU:C	1:A:17:LYS:N	1:A:17:LYS:CA	1:A:17:LYS:C	2	102.93
(1,282)	1:A:107:ALA:C	1:A:108:LYS:N	1:A:108:LYS:CA	1:A:108:LYS:C	15	102.82
(1,237)	1:A:88:ILE:C	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:C	4	102.77
(1,265)	1:A:101:GLU:C	1:A:102:LEU:N	1:A:102:LEU:CA	1:A:102:LEU:C	9	102.67



Key	$rac{ed\ from\ previous\ po}{\mathbf{Atom-1}}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,265)	1:A:101:GLU:C	1:A:102:LEU:N	1:A:102:LEU:CA	1:A:102:LEU:C	6	102.64
(1,203)	1:A:52:ASP:N	1:A:52:ASP:CA	1:A:52:ASP:C	1:A:53:TRP:N	4	102.5
(1,316)	1:A:119:ASP:C	1:A:120:HIS:N	1:A:120:HIS:CA	1:A:120:HIS:C	11	102.36
(1,262)	1:A:100:PRO:C	1:A:101:GLU:N	1:A:101:GLU:CA	1:A:101:GLU:C	7	102.35
(1,200)	1:A:51:ASN:N	1:A:51:ASN:CA	1:A:51:ASN:C	1:A:52:ASP:N	4	102.3
(1,296)	1:A:113:GLY:C	1:A:114:LYS:N	1:A:114:LYS:CA	1:A:114:LYS:C	18	102.1
(1,279)	1:A:106:THR:C	1:A:107:ALA:N	1:A:107:ALA:CA	1:A:107:ALA:C	1	102.06
(1,177)	1:A:17:LYS:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	11	102.03
(1,182)	1:A:19:ASN:C	1:A:20:ALA:N	1:A:20:ALA:CA	1:A:20:ALA:C	15	101.97
(1,365)	1:A:167:GLN:N	1:A:167:GLN:CA	1:A:167:GLN:C	1:A:168:LEU:N	19	101.96
(1,202)	1:A:51:ASN:C	1:A:52:ASP:N	1:A:52:ASP:CA	1:A:52:ASP:C	3	101.94
(1,174)	1:A:16:LEU:C	1:A:17:LYS:N	1:A:17:LYS:CA	1:A:17:LYS:C	18	101.93
(1,282)	1:A:107:ALA:C	1:A:108:LYS:N	1:A:108:LYS:CA	1:A:108:LYS:C	4	101.89
(1,237)	1:A:88:ILE:C	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:C	2	101.81
(1,345)	1:A:160:GLN:N	1:A:160:GLN:CA	1:A:160:GLN:C	1:A:161:HIS:N	5	101.79
(1,205)	1:A:52:ASP:C	1:A:53:TRP:N	1:A:53:TRP:CA	1:A:53:TRP:C	17	101.78
(1,216)	1:A:62:GLY:C	1:A:63:THR:N	1:A:63:THR:CA	1:A:63:THR:C	17	101.76
(1,210) $(1,176)$	1:A:17:LYS:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	6	101.74
(1,170) $(1,293)$	1:A:111:ARG:C	1:A:112:GLY:N	1:A:112:GLY:CA	1:A:112:GLY:C	15	101.74
(1,258) $(1,358)$	1:A:164:LYS:C	1:A:165:CYS:N	1:A:165:CYS:CA	1:A:165:CYS:C	3	101.65
(1,344)	1:A:159:ILE:C	1:A:160:GLN:N	1:A:160:GLN:CA	1:A:160:GLN:C	12	101.64
(1,344) (1,200)	1:A:51:ASN:N	1:A:51:ASN:CA	1:A:51:ASN:C	1:A:52:ASP:N	13	101.62
(1,327)	1:A:132:PHE:C	1:A:133:GLY:N	1:A:133:GLY:CA	1:A:133:GLY:C	14	101.57
(1,321) $(1,194)$	1:A:23:ARG:C	1:A:24:ASP:N	1:A:24:ASP:CA	1:A:24:ASP:C	17	101.57
(1,134) (1,265)	1:A:101:GLU:C	1:A:102:LEU:N	1:A:102:LEU:CA	1:A:102:LEU:C	4	101.53
(1,265) $(1,265)$	1:A:101:GLU:C	1:A:102:LEU:N	1:A:102:LEU:CA	1:A:102:LEU:C	18	101.5
(1,283)	1:A:108:LYS:N	1:A:102:EE0:IV	1:A:108:LYS:C	1:A:109:MET:N	16	101.48
(1,218)	1:A:65:TRP:C	1:A:66:PHE:N	1:A:66:PHE:CA	1:A:66:PHE:C	8	101.45
(1,195)	1:A:24:ASP:N	1:A:24:ASP:CA	1:A:24:ASP:C	1:A:25:ARG:N	15	101.45
(1,304)	1:A:116:CYS:N	1:A:116:CYS:CA	1:A:116:CYS:C	1:A:117:LEU:N	1	101.3
(1,361) $(1,216)$	1:A:62:GLY:C	1:A:63:THR:N	1:A:63:THR:CA	1:A:63:THR:C	2	101.27
(1,354)	1:A:163:GLU:N	1:A:163:GLU:CA	1:A:163:GLU:C	1:A:164:LYS:N	13	101.25
(1,331)	1:A:148:VAL:C	1:A:149:GLU:N	1:A:149:GLU:CA	1:A:149:GLU:C	4	101.2
(1,343)	1:A:159:ILE:C	1:A:160:GLN:N	1:A:160:GLN:CA	1:A:160:GLN:C	5	101.15
(1,347)	1:A:160:GLN:C	1:A:161:HIS:N	1:A:161:HIS:CA	1:A:161:HIS:C	11	101.13
(1,327)	1:A:132:PHE:C	1:A:133:GLY:N	1:A:133:GLY:CA	1:A:133:GLY:C	20	101.1
(1,321) $(1,292)$	1:A:111:ARG:N	1:A:111:ARG:CA	1:A:111:ARG:C	1:A:112:GLY:N	14	101.02
(1,232) $(1,218)$	1:A:65:TRP:C	1:A:66:PHE:N	1:A:66:PHE:CA	1:A:66:PHE:C	1	101.02
(1,327)	1:A:132:PHE:C	1:A:133:GLY:N	1:A:133:GLY:CA	1:A:133:GLY:C	9	100.98
(1,321) $(1,195)$	1:A:24:ASP:N	1:A:24:ASP:CA	1:A:24:ASP:C	1:A:25:ARG:N	4	100.9
(1,195) $(1,195)$	1:A:24:ASP:N	1:A:24:ASP:CA	1:A:24:ASP:C	1:A:25:ARG:N	17	100.87
(1,180) $(1,181)$	1:A:19:ASN:N	1:A:19:ASN:CA	1:A:19:ASN:C	1:A:20:ALA:N	9	100.8
(1,131) $(1,237)$	1:A:88:ILE:C	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:C	11	100.79
(1,237) $(1,179)$	1:A:18:THR:C	1:A:19:ASN:N	1:A:19:ASN:CA	1:A:19:ASN:C	18	100.73
(1,173) $(1,194)$	1:A:23:ARG:C	1:A:24:ASP:N	1:A:24:ASP:CA	1:A:24:ASP:C	16	100.69
(1,134) $(1,279)$	1:A:106:THR:C	1:A:107:ALA:N	1:A:107:ALA:CA	1:A:107:ALA:C	16	100.68
(1,279) $(1,177)$	1:A:17:LYS:C	1:A:18:THR:N	1:A:107.ALA.CA 1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	3	100.68
(1,177) $(1,194)$	1:A:23:ARG:C	1:A:24:ASP:N	1:A:24:ASP:CA	1:A:24:ASP:C	8	100.67
(1,184) $(1,181)$	1:A:19:ASN:N	1:A:19:ASN:CA	1:A:19:ASN:C	1:A:20:ALA:N	4	100.66
(1,101) $(1,309)$	1:A:117:LEU:C	1:A:118:THR:N	1:A:118:THR:CA	1:A:118:THR:C	11	100.64
(1,309) $(1,195)$	1:A:24:ASP:N	1:A:24:ASP:CA	1:A:24:ASP:C	1:A:25:ARG:N	18	100.61
(1,130)	1.11.47.AD1 .IV	1.11.24.1101 .OA	1.11.24.701.0	1.11.20.AHG.N		ed on nert nage



	ed from previous po					
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (\circ)
(1,262)	1:A:100:PRO:C	1:A:101:GLU:N	1:A:101:GLU:CA	1:A:101:GLU:C	13	100.47
(1,331)	1:A:148:VAL:C	1:A:149:GLU:N	1:A:149:GLU:CA	1:A:149:GLU:C	11	100.43
(1,203)	1:A:52:ASP:N	1:A:52:ASP:CA	1:A:52:ASP:C	1:A:53:TRP:N	13	100.3
(1,279)	1:A:106:THR:C	1:A:107:ALA:N	1:A:107:ALA:CA	1:A:107:ALA:C	14	100.18
(1,237)	1:A:88:ILE:C	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:C	18	100.17
(1,195)	1:A:24:ASP:N	1:A:24:ASP:CA	1:A:24:ASP:C	1:A:25:ARG:N	16	100.1
(1,218)	1:A:65:TRP:C	1:A:66:PHE:N	1:A:66:PHE:CA	1:A:66:PHE:C	14	100.08
(1,182)	1:A:19:ASN:C	1:A:20:ALA:N	1:A:20:ALA:CA	1:A:20:ALA:C	13	100.04
(1,344)	1:A:159:ILE:C	1:A:160:GLN:N	1:A:160:GLN:CA	1:A:160:GLN:C	6	100.02
(1,347)	1:A:160:GLN:C	1:A:161:HIS:N	1:A:161:HIS:CA	1:A:161:HIS:C	19	100.01
(1,327)	1:A:132:PHE:C	1:A:133:GLY:N	1:A:133:GLY:CA	1:A:133:GLY:C	11	99.97
(1,177)	1:A:17:LYS:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	2	99.97
(1,364)	1:A:166:ASN:C	1:A:167:GLN:N	1:A:167:GLN:CA	1:A:167:GLN:C	20	99.87
(1,309)	1:A:117:LEU:C	1:A:118:THR:N	1:A:118:THR:CA	1:A:118:THR:C	6	99.86
(1,237)	1:A:88:ILE:C	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:C	5	99.81
(1,203)	1:A:52:ASP:N	1:A:52:ASP:CA	1:A:52:ASP:C	1:A:53:TRP:N	14	99.66
(1,288)	1:A:109:MET:C	1:A:110:TYR:N	1:A:110:TYR:CA	1:A:110:TYR:C	15	99.64
(1,279)	1:A:106:THR:C	1:A:107:ALA:N	1:A:107:ALA:CA	1:A:107:ALA:C	15	99.64
(1,187)	1:A:21:GLY:N	1:A:21:GLY:CA	1:A:21:GLY:C	1:A:22:PRO:N	8	99.55
(1,184)	1:A:20:ALA:N	1:A:20:ALA:CA	1:A:20:ALA:C	1:A:21:GLY:N	16	99.49
(1,178)	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	1:A:19:ASN:N	3	99.46
(1,359)	1:A:165:CYS:N	1:A:165:CYS:CA	1:A:165:CYS:C	1:A:166:ASN:N	20	99.45
(1,289)	1:A:110:TYR:N	1:A:110:TYR:CA	1:A:110:TYR:C	1:A:111:ARG:N	7	99.45
(1,162)	1:A:2:ALA:C	1:A:3:ASP:N	1:A:3:ASP:CA	1:A:3:ASP:C	2	99.43
(1,280)	1:A:107:ALA:N	1:A:107:ALA:CA	1:A:107:ALA:C	1:A:108:LYS:N	17	99.42
(1,297)	1:A:113:GLY:C	1:A:114:LYS:N	1:A:114:LYS:CA	1:A:114:LYS:C	14	99.32
(1,331)	1:A:148:VAL:C	1:A:149:GLU:N	1:A:149:GLU:CA	1:A:149:GLU:C	3	99.29
(1,237)	1:A:88:ILE:C	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:C	8	99.29
(1,216)	1:A:62:GLY:C	1:A:63:THR:N	1:A:63:THR:CA	1:A:63:THR:C	4	99.29
(1,348)	1:A:161:HIS:N	1:A:161:HIS:CA	1:A:161:HIS:C	1:A:162:LYS:N	2	99.22
(1,280)	1:A:107:ALA:N	1:A:107:ALA:CA	1:A:107:ALA:C	1:A:108:LYS:N	2	99.22
(1,216)	1:A:62:GLY:C	1:A:63:THR:N	1:A:63:THR:CA	1:A:63:THR:C	16	99.17
(1,202)	1:A:51:ASN:C	1:A:52:ASP:N	1:A:52:ASP:CA	1:A:52:ASP:C	17	99.1
(1,361)	1:A:165:CYS:C	1:A:166:ASN:N	1:A:166:ASN:CA	1:A:166:ASN:C	5	99.07
(, ,	1:A:101:GLU:C	1:A:102:LEU:N	1:A:102:LEU:CA	1:A:102:LEU:C	17	99.01
(1,162)	1:A:2:ALA:C	1:A:3:ASP:N	1:A:3:ASP:CA	1:A:3:ASP:C	9	98.98
(1,344)	1:A:159:ILE:C	1:A:160:GLN:N	1:A:160:GLN:CA	1:A:160:GLN:C	9	98.91
(1,182)	1:A:19:ASN:C	1:A:20:ALA:N	1:A:20:ALA:CA	1:A:20:ALA:C	12	98.91
(1,291)	1:A:110:TYR:C	1:A:111:ARG:N	1:A:111:ARG:CA	1:A:111:ARG:C	7	98.9
(1,216)	1:A:62:GLY:C	1:A:63:THR:N	1:A:63:THR:CA	1:A:63:THR:C	8	98.89
(1,283)	1:A:108:LYS:N	1:A:108:LYS:CA	1:A:108:LYS:C	1:A:109:MET:N	12	98.83
(1,276)	1:A:105:LYS:C	1:A:106:THR:N	1:A:106:THR:CA	1:A:106:THR:C	8	98.79
(1,350)	1:A:161:HIS:C	1:A:162:LYS:N	1:A:162:LYS:CA	1:A:162:LYS:C	8	98.78
(1,300) $(1,202)$	1:A:51:ASN:C	1:A:52:ASP:N	1:A:52:ASP:CA	1:A:52:ASP:C	16	98.73
(1,297)	1:A:113:GLY:C	1:A:114:LYS:N	1:A:114:LYS:CA	1:A:114:LYS:C	16	98.69
(1,174)	1:A:16:LEU:C	1:A:17:LYS:N	1:A:17:LYS:CA	1:A:17:LYS:C	9	98.68
(1,345)	1:A:160:GLN:N	1:A:160:GLN:CA	1:A:160:GLN:C	1:A:161:HIS:N	13	98.67
(1,216)	1:A:62:GLY:C	1:A:63:THR:N	1:A:63:THR:CA	1:A:63:THR:C	13	98.67
(1,178)	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	1:A:19:ASN:N	12	98.67
(1,288)	1:A:109:MET:C	1:A:110:TYR:N	1:A:110:TYR:CA	1:A:110:TYR:C	6	98.63
(1,269)	1:A:103:ASP:N	1:A:103:ASP:CA	1:A:103:ASP:C	1:A:104:GLY:N	16	98.61
(-,-00)	1.11.100.1101 .11			1.1.1.1011.011.111		od on nort nago



	ed from previous pe				36 11	T71 1 14 ()
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,195)	1:A:24:ASP:N	1:A:24:ASP:CA	1:A:24:ASP:C	1:A:25:ARG:N	3	98.59
(1,237)	1:A:88:ILE:C	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:C	12	98.57
(1,203)	1:A:52:ASP:N	1:A:52:ASP:CA	1:A:52:ASP:C	1:A:53:TRP:N	16	98.55
(1,363)	1:A:166:ASN:C	1:A:167:GLN:N	1:A:167:GLN:CA	1:A:167:GLN:C	6	98.53
(1,203)	1:A:52:ASP:N	1:A:52:ASP:CA	1:A:52:ASP:C	1:A:53:TRP:N	2	98.41
(1,218)	1:A:65:TRP:C	1:A:66:PHE:N	1:A:66:PHE:CA	1:A:66:PHE:C	20	98.39
(1,282)	1:A:107:ALA:C	1:A:108:LYS:N	1:A:108:LYS:CA	1:A:108:LYS:C	6	98.34
(1,204)	1:A:52:ASP:C	1:A:53:TRP:N	1:A:53:TRP:CA	1:A:53:TRP:C	10	98.33
(1,284)	1:A:108:LYS:C	1:A:109:MET:N	1:A:109:MET:CA	1:A:109:MET:C	10	98.29
(1,265)	1:A:101:GLU:C	1:A:102:LEU:N	1:A:102:LEU:CA	1:A:102:LEU:C	19	98.28
(1,265)	1:A:101:GLU:C	1:A:102:LEU:N	1:A:102:LEU:CA	1:A:102:LEU:C	1	98.24
(1,352)	1:A:162:LYS:C	1:A:163:GLU:N	1:A:163:GLU:CA	1:A:163:GLU:C	1	98.06
(1,282)	1:A:107:ALA:C	1:A:108:LYS:N	1:A:108:LYS:CA	1:A:108:LYS:C	16	98.04
(1,297)	1:A:113:GLY:C	1:A:114:LYS:N	1:A:114:LYS:CA	1:A:114:LYS:C	19	98.01
(1,200)	1:A:51:ASN:N	1:A:51:ASN:CA	1:A:51:ASN:C	1:A:52:ASP:N	5	97.96
(1,178)	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	1:A:19:ASN:N	15	97.83
(1,174)	1:A:16:LEU:C	1:A:17:LYS:N	1:A:17:LYS:CA	1:A:17:LYS:C	19	97.8
(1,350)	1:A:161:HIS:C	1:A:162:LYS:N	1:A:162:LYS:CA	1:A:162:LYS:C	13	97.7
(1,195)	1:A:24:ASP:N	1:A:24:ASP:CA	1:A:24:ASP:C	1:A:25:ARG:N	11	97.66
(1,346)	1:A:160:GLN:C	1:A:161:HIS:N	1:A:161:HIS:CA	1:A:161:HIS:C	16	97.57
(1,285)	1:A:108:LYS:C	1:A:109:MET:N	1:A:109:MET:CA	1:A:109:MET:C	20	97.5
(1,349)	1:A:161:HIS:C	1:A:162:LYS:N	1:A:162:LYS:CA	1:A:162:LYS:C	5	97.45
(1,177)	1:A:17:LYS:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	1	97.45
(1,362)	1:A:166:ASN:N	1:A:166:ASN:CA	1:A:166:ASN:C	1:A:167:GLN:N	15	97.41
(1,177)	1:A:17:LYS:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	18	97.41
(1,309)	1:A:117:LEU:C	1:A:118:THR:N	1:A:118:THR:CA	1:A:118:THR:C	3	97.38
(1,174)	1:A:16:LEU:C	1:A:17:LYS:N	1:A:17:LYS:CA	1:A:17:LYS:C	20	97.19
(1,283)	1:A:108:LYS:N	1:A:108:LYS:CA	1:A:108:LYS:C	1:A:109:MET:N	14	97.13
(1,276)	1:A:105:LYS:C	1:A:106:THR:N	1:A:106:THR:CA	1:A:106:THR:C	18	97.12
(1,200)	1:A:51:ASN:N	1:A:51:ASN:CA	1:A:51:ASN:C	1:A:52:ASP:N	19	97.06
(1,225)	1:A:74:ASP:C	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	1	97.03
(1,237)	1:A:88:ILE:C	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:C	3	96.98
(1,280)	1:A:107:ALA:N	1:A:107:ALA:CA	1:A:107:ALA:C	1:A:108:LYS:N	6	96.95
(1,364)	1:A:166:ASN:C	1:A:167:GLN:N	1:A:167:GLN:CA	1:A:167:GLN:C	12	96.94
(1,308)	1:A:117:LEU:C	1:A:118:THR:N	1:A:118:THR:CA	1:A:118:THR:C	17	96.85
(1,181)	1:A:19:ASN:N	1:A:19:ASN:CA	1:A:19:ASN:C	1:A:20:ALA:N	14	96.82
(1,330)	1:A:148:VAL:C	1:A:149:GLU:N	1:A:149:GLU:CA	1:A:149:GLU:C	18	96.81
(1,327)	1:A:132:PHE:C	1:A:133:GLY:N	1:A:133:GLY:CA	1:A:133:GLY:C	18	96.66
(1,265)	1:A:101:GLU:C	1:A:102:LEU:N	1:A:102:LEU:CA	1:A:102:LEU:C	10	96.58
(1,350)	1:A:161:HIS:C	1:A:162:LYS:N	1:A:162:LYS:CA	1:A:162:LYS:C	20	96.56
(1,177)	1:A:17:LYS:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	4	96.56
(1,216)	1:A:62:GLY:C	1:A:63:THR:N	1:A:63:THR:CA	1:A:63:THR:C	7	96.54
(1,198)	1:A:50:ASP:C	1:A:51:ASN:N	1:A:51:ASN:CA	1:A:51:ASN:C	8	96.52
(1,237)	1:A:88:ILE:C	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:C	10	96.48
(1,296)	1:A:113:GLY:C	1:A:114:LYS:N	1:A:114:LYS:CA	1:A:114:LYS:C	7	96.44
(1,286)	1:A:109:MET:N	1:A:109:MET:CA	1:A:109:MET:C	1:A:110:TYR:N	13	96.31
(1,303)	1:A:115:ILE:C	1:A:116:CYS:N	1:A:116:CYS:CA	1:A:116:T14:IX 1:A:116:CYS:C	11	96.29
(1,205)	1:A:52:ASP:C	1:A:53:TRP:N	1:A:53:TRP:CA	1:A:53:TRP:C	6	96.21
(1,285)	1:A:108:LYS:C	1:A:109:MET:N	1:A:109:MET:CA	1:A:109:MET:C	19	96.17
(1,237)	1:A:88:ILE:C	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:C	16	96.17
(1,162)	1:A:2:ALA:C	1:A:3:ASP:N	1:A:3:ASP:CA	1:A:3:ASP:C	8	96.16
(1,102)	1.11.2.11111.0	1.11.0.1101 .11	1.71.0.7101 .071	1.71.0.7101 .0		od on nort nage



(1,177)	Key	$rac{ed\ from\ previous\ po}{\mathbf{Atom-1}}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1.181) 1:A:19:ASN:N 1:A:19:ASN:C 1:A:20:AA:N 1 96.13 (1.195) 1:A:24:ASP:N 1:A:24:ASP:C 1:A:24:ASP:C 1:A:25:ARSP.C 1:A:25:ARSP.C 1:A:25:ARSP.C 1:A:25:ARSP.C 1:A:25:ARSP.C 1:A:35:THR.C 10 96.09 (1.218) 1:A:65:THR.C 1:A:66:THE.N 1:A:18:THR.C 10 96.08 (1.218) 1:A:65:THR.C 1:A:66:THE.N 1:A:66:THE.C 1:A:66:THE.C 10 96.08 (1.218) 1:A:65:THR.C 1:A:66:THE.C 1:A:66:THE.C 10 96.08 (1.358) 1:A:16:14:NSC 1:A:16:3G.UU:N 1:A:66:THS.C 1:A:16:5C.YS:C 17 99.53 (1.353) 1:A:16:14:NSC 1:A:16:3G.UU:N 1:A:16:3G.UU:C 15 99.53 (1.353) 1:A:16:14:NSC 1	-	1:A:17:LYS:C	1:A:18:THR:N			5	, ,
(1.195)	· · /		1:A:19:ASN:CA	1:A:19:ASN:C	1:A:20:ALA:N	1	96.13
(1.177)	· · /	1:A:24:ASP:N	1:A:24:ASP:CA	1:A:24:ASP:C	1:A:25:ARG:N	20	
(1,358) 1-A:464-LYS-C	· · /	1:A:17:LYS:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	10	
(1.358) 1:A:164:US:C	· · /	1:A:65:TRP:C	1:A:66:PHE:N	1:A:66:PHE:CA	1:A:66:PHE:C	10	96.01
(1,348) 1:A:162:IVS:C		1:A:164:LYS:C	1:A:165:CYS:N	1:A:165:CYS:CA	1:A:165:CYS:C	17	95.83
(1,348)		1:A:162:LYS:C	1:A:163:GLU:N	1:A:163:GLU:CA	1:A:163:GLU:C	15	95.83
(1,216	(1,348)	1:A:161:HIS:N	1:A:161:HIS:CA	1:A:161:HIS:C	1:A:162:LYS:N	15	95.81
(1,216 1-A-62-GLY-C		1:A:18:THR:C	1:A:19:ASN:N	1:A:19:ASN:CA	1:A:19:ASN:C	3	95.78
(1,292)		1:A:62:GLY:C	1:A:63:THR:N	1:A:63:THR:CA	1:A:63:THR:C	20	95.72
(1,94)		1:A:111:ARG:N	1:A:111:ARG:CA	1:A:111:ARG:C	1:A:112:GLY:N	17	95.69
(1,292)	(1,282)	1:A:107:ALA:C	1:A:108:LYS:N	1:A:108:LYS:CA	1:A:108:LYS:C	1	95.69
(1,363) 1:A:166:ASN:C	(1,194)	1:A:23:ARG:C	1:A:24:ASP:N	1:A:24:ASP:CA	1:A:24:ASP:C	13	95.6
(1,347)	(1,292)	1:A:111:ARG:N	1:A:111:ARG:CA	1:A:111:ARG:C	1:A:112:GLY:N	20	95.53
(1,346)	(1,363)	1:A:166:ASN:C	1:A:167:GLN:N	1:A:167:GLN:CA	1:A:167:GLN:C	8	95.5
(1,254) 1:A:97:ILE:C 1:A:98:ALA:N 1:A:98:ALA:CA 1:A:98:ALA:C 6 95.46 (1,182) 1:A:19:ASN:C 1:A:20:ALA:N 1:A:20:ALA:CA 1:A:20:ALA:C 5 95.45 (1,216) 1:A:62:GLY:C 1:A:63:THR:N 1:A:63:THR:CA 1:A:63:THR:C 18 95.44 (1,269) 1:A:103:ASP:N 1:A:103:ASP:CA 1:A:103:ASP:C 1:A:104:GLY:N 14 95.42 (1,350) 1:A:161:HIS:C 1:A:162:LVS:N 1:A:162:LVS:CA 1:A:104:GLY:N 14 95.42 (1,350) 1:A:161:HIS:C 1:A:149:GLU:N 1:A:149:GLU:CA 1:A:149:GLU:CA 1:A:149:GLU:N 3 95.37 (1,331) 1:A:48:VAL:C 1:A:103:ASP:N 1:A:103:ASP:CA 1:A:103:ASP:CA 1:A:104:GLY:N 3 95.36 (1,237) 1:A:88:ILE:C 1:A:89:THR:N 1:A:89:THR:CA 1:A:169:GLY:N 3 95.36 (1,237) 1:A:28-LA:C 1:A:3:ASP:N 1:A:3:ASP:CA 1:A:3:ASP:C 5 95.22 (1,364) 1:A:166:ASN:C 1:A:167:GLN:N 1:A:167:GLN:CA 1:A:167:GLN:C 15 95.09 (1,265) 1:A:117:LEU:C 1:A:118:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:167:GLN:C 15 95.09 (1,265) 1:A:101:GU:C 1:A:102:LEU:N 1:A:102:LEU:CA 1:A:138:THR:C 15 95.09 (1,265) 1:A:101:GU:C 1:A:132:PHE:N 1:A:132:PHE:CA 1:A:133:THR:C 5 95.03 (1,304) 1:A:166:CYS:N 1:A:116:CYS:CA 1:A:116:CYS:C 1:A:117:LEU:N 5 94.93 (1,181) 1:A:19:ASN:N 1:A:109:MET:C 1:A:100:MET:C 1:A:	(1,347)	1:A:160:GLN:C	1:A:161:HIS:N	1:A:161:HIS:CA	1:A:161:HIS:C	14	95.5
(1,254) 1:A:97:ILE:C 1:A:98:ALA:N 1:A:98:ALA:CA 1:A:98:ALA:C 6 95.46 (1,182) 1:A:19:ASN:C 1:A:20:ALA:N 1:A:20:ALA:CA 1:A:20:ALA:C 5 95.45 (1,216) 1:A:62:GLY:C 1:A:63:THR:N 1:A:63:THR:CA 1:A:63:THR:C 18 95.44 (1,269) 1:A:103:ASP:N 1:A:103:ASP:CA 1:A:103:ASP:C 1:A:104:GLY:N 14 95.42 (1,350) 1:A:161:HIS:C 1:A:162:LVS:N 1:A:162:LVS:CA 1:A:104:GLY:N 14 95.42 (1,350) 1:A:161:HIS:C 1:A:149:GLU:N 1:A:149:GLU:CA 1:A:149:GLU:CA 1:A:149:GLU:N 3 95.37 (1,331) 1:A:48:VAL:C 1:A:103:ASP:N 1:A:103:ASP:CA 1:A:103:ASP:CA 1:A:104:GLY:N 3 95.36 (1,237) 1:A:88:ILE:C 1:A:89:THR:N 1:A:89:THR:CA 1:A:169:GLY:N 3 95.36 (1,237) 1:A:28-LA:C 1:A:3:ASP:N 1:A:3:ASP:CA 1:A:3:ASP:C 5 95.22 (1,364) 1:A:166:ASN:C 1:A:167:GLN:N 1:A:167:GLN:CA 1:A:167:GLN:C 15 95.09 (1,265) 1:A:117:LEU:C 1:A:118:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:167:GLN:C 15 95.09 (1,265) 1:A:101:GU:C 1:A:102:LEU:N 1:A:102:LEU:CA 1:A:138:THR:C 15 95.09 (1,265) 1:A:101:GU:C 1:A:132:PHE:N 1:A:132:PHE:CA 1:A:133:THR:C 5 95.03 (1,304) 1:A:166:CYS:N 1:A:116:CYS:CA 1:A:116:CYS:C 1:A:117:LEU:N 5 94.93 (1,181) 1:A:19:ASN:N 1:A:109:MET:C 1:A:100:MET:C 1:A:	· · /	1:A:160:GLN:C	1:A:161:HIS:N	1:A:161:HIS:CA	1:A:161:HIS:C	15	95.49
(1,182) 1:A:19:ASN:C 1:A:20:ALA:N 1:A:20:ALA:CA 1:A:20:ALA:C 5 95.45 (1,216) 1:A:62:GLY:C 1:A:63:THR:N 1:A:63:THR:CA 1:A:63:THR:C 18 95.44 (1,269) 1:A:103:ASP:N 1:A:103:ASP:CA 1:A:103:ASP:C 1:A:104:GLY:N 14 95.42 (1,350) 1:A:161:HIS:C 1:A:162:LYS:N 1:A:162:LYS:CA 1:A:162:LYS:C 10 95.39 (1,331) 1:A:148:VAL:C 1:A:149:GLU:N 1:A:149:GLU:CA 1:A:149:GLU:C 13 95.37 (1,269) 1:A:103:ASP:N 1:A:103:ASP:CA 1:A:103:ASP:C 1:A:104:GLY:N 3 95.36 (1,237) 1:A:88:LE:C 1:A:89:THR:N 1:A:89:THR:CA 1:A:89:THR:CA 6 95.31 (1,162) 1:A:2:ALA:C 1:A:3:ASP:N 1:A:3:ASP:CA 1:A:167:GLN:C 5 95.22 (1,364) 1:A:166:ASN:C 1:A:167:GLN:N 1:A:187:THR:CA 1:A:187:THR:C 15 95.09 (1,309) 1:A:117:LEU:C 1:A:118:THR:N 1:A:118:THR:CA 1:A:118:THR:C 15 95.09 (1,265) 1:A:101:GLU:C 1:A:103:LEU:N 1:A:102:LEU:CA 1:A:103:THR:C 5 95.03 (1,235) 1:A:131:LYS:C 1:A:132:PHE:N 1:A:132:PHE:CA 1:A:132:PHE:C 8 95.01 (1,304) 1:A:116:CYS:N 1:A:116:CYS:CA 1:A:116:CYS:C 1:A:116:CYS:C 1:A:116:CYS:C 1:A:116:CYS:C 1:A:110:THR:N 1:A:19:ASN:C 1:A:109:MET:C 1:A:109:MET:C 1:A:109:MET:C 1:A:109:MET:C 1:A:109:MET:C 1:A:109:MET:C 1:A:109:MET:C 1:A:110:TYR:N 9 94.9 (1,288) 1:A:109:MET:N 1:A:110:TYR:N 1:A:100:MET:C 1:A:110:TYR:C 12 94.82 (1,288) 1:A:109:MET:N 1:A:110:TYR:N 1:A:110:TYR:C 12 94.82 (1,288) 1:A:169:MET:N 1:A:110:TYR:N 1:A:110:TYR:C 12 94.82 (1,288) 1:A:169:MET:N 1:A:110:TYR:N 1:A:110:TYR:C 12 94.82 (1,288) 1:A:65:TRP:C 1:A:66:PHE:N 1:A:66:PHE:CA 1:A:66:PHE:C 17 94.82 (1,288) 1:A:65:TRP:C 1:A:69:GLU:C 1:A:69:GLU:C 1:A:69:GLU:C 1:A:99:ALA:N 12 94.92 (1,249) 1:A:96:GLU:N 1:A:96:GLU:C 1:A:96:GLU:C 1:A:96:GLU:C 1:A:96:GLU:C 1:A:96:GLU:C 1:A:97:LE:N 8 94.67 (1,249) 1:A:96:GLU:N 1:A:96:GLU:C 1:A:36:THR:C 1:A:16:37:HE:C 1:A:96:GLU:C	· · /		1:A:98:ALA:N	1:A:98:ALA:CA		6	
(1,216) 1:A:62:GLY:C 1:A:63:THR:N 1:A:63:THR:CA 1:A:63:THR:C 18 95.44 (1,269) 1:A:103:ASP:N 1:A:103:ASP:CA 1:A:103:ASP:C 1:A:104:GLY:N 14 95.42 (1,350) 1:A:161:HIS:C 1:A:162:LYS:N 1:A:162:LYS:CA 1:A:162:LYS:C 10 95.39 (1,331) 1:A:148:VAL:C 1:A:149:GLU:N 1:A:149:GLU:C 1:A:149:GLU:C 13 95.37 (1,269) 1:A:183:VAL:C 1:A:103:ASP:CA 1:A:103:ASP:C 1:A:104:GUY.N 3 95.36 (1,269) 1:A:166:ASN:C 1:A:389:THR:N 1:A:89:THR:CA 1:A:48:PTR:C 6 95.31 (1,162) 1:A:2:ALA:C 1:A:3ASP:N 1:A:3:ASP:CA 1:A:3:ASP:C 5 95.22 (1,364) 1:A:16:ASN:C 1:A:18:THR:CA 1:A:16:GUN:C 15 95.09 (1,304) 1:A:117:LEU:C 1:A:118:THR:N 1:A:118:THR:CA 1:A:118:THR:C 15 95.09 (1,265) 1:A:10:IGUU:C 1:A:118:THR:N 1:A:118:THR:CA 1:A:118:THR:C 15 <t< td=""><td>· · /</td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td></t<>	· · /						
(1,269) 1:A:103:ASP:N 1:A:103:ASP:CA 1:A:103:ASP:CA 1:A:104:GLY:N 14 95.42 (1,350) 1:A:161:HIS:C 1:A:162:LYS:N 1:A:162:LYS:CA 1:A:162:LYS:C 10 95.39 (1,331) 1:A:148:VAL:C 1:A:149:GLU:N 1:A:149:GLU:CA 1:A:149:GLU:N 3 95.37 (1,269) 1:A:103:ASP:N 1:A:103:ASP:CA 1:A:103:ASP:CA 1:A:149:GLU:N 3 95.36 (1,237) 1:A:88:HE:C 1:A:89:THR:N 1:A:38SP:CA 1:A:189:THR:C 6 95.31 (1,162) 1:A:2*ALA:C 1:A:3:ASP:N 1:A:3:ASP:CA 1:A:3:ASP:C 5 95.22 (1,364) 1:A:166:ASN:C 1:A:167:GLN:N 1:A:167:GLN:CA 1:A:167:GLN:C 15 95.09 (1,265) 1:A:101:GLU:C 1:A:118:THR:N 1:A:167:GLN:CA 1:A:167:GLN:CA 1:A:161:HIR:C 15 95.09 (1,216) 1:A:20:GLV:C 1:A:131:PHE:N 1:A:63:THR:N 1:A:63:THR:CA 1:A:162:HIR:C 15 95.09 (1,265) 1:A:131:LYS:C 1:A:132:PHE:N </td <td>· · /</td> <td>1:A:62:GLY:C</td> <td>1:A:63:THR:N</td> <td></td> <td></td> <td>18</td> <td></td>	· · /	1:A:62:GLY:C	1:A:63:THR:N			18	
(1,350) 1:A:161:HIS:C 1:A:162:LYS:N 1:A:162:LYS:CA 1:A:162:LYS:C 10 95.39 (1,331) 1:A:148:VAL:C 1:A:149:GLU:N 1:A:149:GLU:CA 1:A:149:GLU:C 13 95.37 (1,269) 1:A:103:ASP:N 1:A:103:ASP:N 1:A:103:ASP:C 1:A:104:GLY:N 3 95.36 (1,237) 1:A:38:EE:C 1:A:88:THR:N 1:A:389:THR:CA 1:A:38-SP:THR:C 6 95.31 (1,162) 1:A:2:ALA:C 1:A:3:ASP:N 1:A:3:ASP:CA 1:A:3:ASP:C 5 95.22 (1,364) 1:A:167:GLN:C 1:A:167:GLN:C 1:A:167:GLN:C 15 95.09 (1,309) 1:A:117:LEU:C 1:A:118:THR:N 1:A:118:THR:CA 1:A:118:THR:C 15 95.09 (1,265) 1:A:106:LU:C 1:A:160:LEU:C 1:A:102:LEU:CA 1:A:118:THR:C 15 95.09 (1,216) 1:A:462:GLY:C 1:A:63:THR:N 1:A:162:HR:CA 1:A:163:THR:C 5 95.03 (1,216) 1:A:419:ASI:M:CA 1:A:160:CYS:N 1:A:161:CYS:CA 1:A:116:CYS:CA 1:A:117:LE	· · /	1:A:103:ASP:N				14	
(1,331) 1:A:148:VAL:C 1:A:149:GLU:N 1:A:149:GLU:CA 1:A:149:GLU:C 13 95.37 (1,269) 1:A:103:ASP:N 1:A:103:ASP:CA 1:A:103:ASP:C 1:A:104:GLY:N 3 95.36 (1,237) 1:A:88:ILE:C 1:A:89:THR:N 1:A:89:THR:CA 1:A:89:THR:C 6 95.31 (1,162) 1:A:2:ALA:C 1:A:3:ASP:N 1:A:3:ASP:CA 1:A:89:THR:C 6 95.31 (1,364) 1:A:166:ASN:C 1:A:167:GLN:N 1:A:167:GLN:C 1:A:167:GLN:C 15 95.09 (1,364) 1:A:101:GLU:C 1:A:118:THR:N 1:A:118:THR:CA 1:A:118:THR:C 15 95.09 (1,265) 1:A:101:GLU:C 1:A:102:LEU:CA 1:A:102:LEU:C2 2 95.08 (1,216) 1:A:62:GLY:C 1:A:63:THR:N 1:A:63:THR:CA 1:A:63:THR:C 5 95.03 (1,325) 1:A:131:LYS:C 1:A:132:PHE:N 1:A:132:PHE:CA 1:A:132:PHE:C 8 95.01 (1,304) 1:A:131:LYS:C 1:A:19:ASN:CA 1:A:116:CYS:C 1:A:117:LEU:N 5 <td< td=""><td> /</td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td></td<>	/						
(1,269 1:A:103:ASP:N 1:A:103:ASP:CA 1:A:103:ASP:C 1:A:104:GLY:N 3 95.36 (1,237 1:A:88:ILE:C 1:A:89:THR:N 1:A:89:THR:CA 1:A:89:THR:C 6 95.31 (1,162 1:A:2:ALA:C 1:A:3:ASP:N 1:A:89:THR:CA 1:A:3:ASP:C 5 95.22 (1,364 1:A:166:ASN:C 1:A:167:GLN:N 1:A:167:GLN:C 1:A:167:GLN:C 15 95.09 (1,309 1:A:117:LEU:C 1:A:118:THR:N 1:A:118:THR:CA 1:A:118:THR:C 15 95.09 (1,265 1:A:101:GLU:C 1:A:102:LEU:N 1:A:102:LEU:CA 1:A:102:LEU:C 2 95.08 (1,216 1:A:62:GLY:C 1:A:63:THR:N 1:A:163:THR:CA 1:A:63:THR:C 5 95.03 (1,325 1:A:131:LYS:C 1:A:132:PHE:N 1:A:132:PHE:CA 1:A:132:PHE:C 8 95.01 (1,304 1:A:116:CYS:N 1:A:116:CYS:CA 1:A:116:CYS:C 1:A:117:LEU:N 5 94.93 (1,181) 1:A:19:ASN:N 1:A:19:ASN:CA 1:A:109:MET:C 1:A:109:MET:N 1:A:109:MET:CA 1:A:109:MET:C 1:A:109:MET:C 1:A:109:MET:C 1:A:109:MET:C 1:A:109:MET:C 1:A:109:MET:C 1:A:110:TYR:N 9 94.9 (1,218 1:A:65:TRP:C 1:A:66:PHE:N 1:A:110:TYR:C 1:A:110:TYR:N 9 94.8 (1,254 1:A:97:ILE:C 1:A:101:TYR:N 1:A:110:TYR:C 1:A:110:TYR:C 1:A:10:TYR:C 1:A:1	/		1:A:149:GLU:N	1:A:149:GLU:CA	1:A:149:GLU:C	13	95.37
(1,237) 1:A:88:ILE:C 1:A:89:THR:N 1:A:89:THR:CA 1:A:89:THR:C 6 95.31 (1,162) 1:A:2:ALA:C 1:A:3:ASP:N 1:A:3:ASP:CA 1:A:3:ASP:C 5 95.22 (1,364) 1:A:16:ASN:C 1:A:16:G:ASN:C 1:A:16:GLN:C 1:5 95.09 (1,309) 1:A:117:LEU:C 1:A:118:THR:N 1:A:118:THR:CA 1:A:118:THR:C 15 95.09 (1,265) 1:A:101:GUU:C 1:A:102:LEU:N 1:A:102:LEU:CA 1:A:102:LEU:C 2 95.08 (1,216) 1:A:62:GLY:C 1:A:63:THR:N 1:A:63:THR:CA 1:A:63:THR:C 5 95.03 (1,236) 1:A:131:LYS:C 1:A:132:PHE:N 1:A:63:THR:CA 1:A:132:PHE:C 8 95.01 (1,304) 1:A:116:CYS:N 1:A:116:CYS:CA 1:A:117:LEU:N 5 94.93 (1,181) 1:A:19:ASN:N 1:A:109:MET:CA 1:A:100:MET:C 1:A:110:TYR:N 9 94.9 (1,286) 1:A:109:MET:C 1:A:100:MET:C 1:A:110:TYR:N 9 94.9 (1,218) 1		1:A:103:ASP:N				3	95.36
(1,162) 1:A:2:ALA:C 1:A:3:ASP:N 1:A:3:ASP:CA 1:A:3:ASP:C 5 95.22 (1,364) 1:A:166:ASN:C 1:A:167:GLN:N 1:A:167:GLN:CA 1:A:167:GLN:C 15 95.09 (1,364) 1:A:101:GLU:C 1:A:118:THR:N 1:A:118:THR:CA 1:A:118:THR:C 15 95.09 (1,265) 1:A:101:GLU:C 1:A:102:LEU:N 1:A:102:LEU:CA 1:A:130:CLU:C 2 95.08 (1,216) 1:A:62:GLY:C 1:A:63:THR:N 1:A:63:THR:CA 1:A:63:THR:C 5 95.03 (1,325) 1:A:131:LYS:C 1:A:132:PHE:N 1:A:132:PHE:CA 1:A:132:PHE:C 8 95.01 (1,304) 1:A:116:CYS:N 1:A:116:CYS:CA 1:A:116:CYS:C 1:A:117:LEU:N 5 94.93 (1,181) 1:A:19:ASN:N 1:A:116:CYS:CA 1:A:116:CYS:C 1:A:110:TYR:N 9 94.92 (1,286) 1:A:109:MET:N 1:A:109:MET:CA 1:A:100:MET:N 19 94.92 (1,218) 1:A:66:TRP:C 1:A:66:PHE:N 1:A:66:PHE:CA 1:A:66:PHE:CA 1:A:100:TYR:C	· · /					6	
(1,364) 1:A:166:ASN:C 1:A:167:GLN:N 1:A:167:GLN:CA 1:A:167:GLN:C 15 95.09 (1,309) 1:A:117:LEU:C 1:A:118:THR:N 1:A:118:THR:CA 1:A:118:THR:C 15 95.09 (1,265) 1:A:101:GLU:C 1:A:102:LEU:N 1:A:102:LEU:CA 1:A:1102:LEU:C 2 95.08 (1,216) 1:A:63:THR:N 1:A:63:THR:CA 1:A:63:THR:C 5 95.03 (1,325) 1:A:131:LYS:C 1:A:32:PHE:N 1:A:132:PHE:CA 1:A:132:PHE:C 8 95.01 (1,304) 1:A:116:CYS:N 1:A:116:CYS:CA 1:A:116:CYS:C 1:A:117:LEU:N 5 94.93 (1,181) 1:A:19:ASN:N 1:A:19:ASN:CA 1:A:19:ASN:C 1:A:10:TYR:N 9 94.9 (1,286) 1:A:109:MET:C 1:A:109:MET:CA 1:A:109:MET:C 1:A:100:MET:CA 1:A:110:TYR:N 9 94.9 (1,218) 1:A:66:PHE:CA 1:A:11						5	
(1,309) 1:A:117:LEU:C 1:A:118:THR:N 1:A:118:THR:CA 1:A:118:THR:C 15 95.09 (1,265) 1:A:101:GLU:C 1:A:102:LEU:N 1:A:102:LEU:CA 1:A:102:LEU:C 2 95.08 (1,216) 1:A:62:GIY:C 1:A:63:THR:N 1:A:63:THR:CA 1:A:63:THR:C 5 95.03 (1,325) 1:A:131:LYS:C 1:A:132:PHE:N 1:A:132:PHE:CA 1:A:132:PHE:C 8 95.01 (1,304) 1:A:116:CYS:N 1:A:116:CYS:CA 1:A:116:CYS:C 1:A:116:CYS:C 1:A:117:LEU:N 5 94.93 (1,181) 1:A:19:ASN:N 1:A:19:ASN:CA 1:A:19:ASN:C 1:A:20:ALA:N 12 94.92 (1,286) 1:A:109:MET:N 1:A:109:MET:CA 1:A:100:MET:C 1:A:100:MET:C 1:A:100:MET:CA 1:A:66:PHE:CA		1:A:166:ASN:C	1:A:167:GLN:N	1:A:167:GLN:CA	1:A:167:GLN:C	15	95.09
(1,216) 1:A:62:GLY:C 1:A:63:THR:N 1:A:63:THR:CA 1:A:63:THR:C 5 95.03 (1,325) 1:A:131:LYS:C 1:A:132:PHE:N 1:A:132:PHE:CA 1:A:132:PHE:C 8 95.01 (1,304) 1:A:116:CYS:N 1:A:116:CYS:CA 1:A:116:CYS:C 1:A:117:LEU:N 5 94.93 (1,181) 1:A:10:ASN:N 1:A:19:ASN:CA 1:A:19:ASN:C 1:A:20:ALA:N 12 94.92 (1,286) 1:A:10:MET:N 1:A:109:MET:CA 1:A:109:MET:C 1:A:109:MET:C 1:A:66:PHE:CA 1:A:66:PHE:C 17 94.82 (1,288) 1:A:109:MET:C 1:A:10:TYR:N 1:A:110:TYR:CA 1:A:110:TYR:C 12 94.82 (1,288) 1:A:109:MET:C 1:A:110:TYR:N 1:A:110:TYR:CA 1:A:110:TYR:C 12 94.82 (1,288) 1:A:19:ASP:ALA:N 1:A:49:BALA:N 1:A:49:BALA:CA 1:A:4110:TYR:C 12 94.82 (1,254) 1:A:49:THR:N 1:A:49:8*ALA:N 1:A:49:8*ALA:CA 1:A:4110:TYR:C 12 94.76 (1,310) 1:A:418:THR:N 1:A:4	(1,309)		1:A:118:THR:N	1:A:118:THR:CA	1:A:118:THR:C	15	95.09
(1,325) 1:A:131:LYS:C 1:A:132:PHE:N 1:A:132:PHE:CA 1:A:132:PHE:C 8 95.01 (1,304) 1:A:116:CYS:N 1:A:116:CYS:CA 1:A:116:CYS:C 1:A:117:LEU:N 5 94.93 (1,181) 1:A:19:ASN:N 1:A:19:ASN:CA 1:A:19:ASN:C 1:A:20:ALA:N 12 94.92 (1,286) 1:A:109:MET:N 1:A:109:MET:CA 1:A:109:MET:C 1:A:110:TYR:N 9 94.9 (1,218) 1:A:65:TRP:C 1:A:66:PHE:N 1:A:66:PHE:CA 1:A:66:PHE:C 17 94.82 (1,288) 1:A:109:MET:C 1:A:110:TYR:N 1:A:110:TYR:C 12 94.8 (1,254) 1:A:97:ILE:C 1:A:98:ALA:N 1:A:98:ALA:CA 1:A:98:ALA:C 9 94.76 (1,310) 1:A:118:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:118:THR:C 1:A:119:ASP:N 18 94.74 (1,203) 1:A:52:ASP:N 1:A:52:ASP:CA 1:A:52:ASP:C 1:A:53:TRP:N 18 94.67 (1,249) 1:A:66:GLU:N 1:A:63:THR:N 1:A:63:THR:C 1:A:97:ILE:N 17 94.62	(1,265)	1:A:101:GLU:C	1:A:102:LEU:N	1:A:102:LEU:CA	1:A:102:LEU:C	2	95.08
(1,304) 1:A:116:CYS:N 1:A:116:CYS:CA 1:A:116:CYS:C 1:A:117:LEU:N 5 94.93 (1,181) 1:A:19:ASN:N 1:A:19:ASN:CA 1:A:19:ASN:C 1:A:20:ALA:N 12 94.92 (1,286) 1:A:109:MET:N 1:A:109:MET:CA 1:A:109:MET:C 1:A:110:TYR:N 9 94.9 (1,218) 1:A:65:TRP:C 1:A:66:PHE:N 1:A:66:PHE:CA 1:A:66:PHE:C 17 94.82 (1,288) 1:A:109:MET:C 1:A:110:TYR:N 1:A:110:TYR:CA 1:A:110:TYR:C 12 94.8 (1,254) 1:A:97:ILE:C 1:A:98:ALA:N 1:A:98:ALA:CA 1:A:98:ALA:C 9 94.76 (1,310) 1:A:118:THR:N 1:A:118:THR:CA 1:A:118:THR:C 1:A:119:ASP:N 18 94.74 (1,203) 1:A:52:ASP:N 1:A:52:ASP:CA 1:A:52:ASP:C 1:A:53:TRP:N 18 94.67 (1,249) 1:A:96:GLU:N 1:A:63:THR:N 1:A:63:THR:C 1:A:97:ILE:N 17 94.65 (1,216) 1:A:62:GLY:C 1:A:63:THR:N 1:A:63:THR:C 1:A:96:GLU:N	(1,216)	1:A:62:GLY:C	1:A:63:THR:N	1:A:63:THR:CA	1:A:63:THR:C	5	95.03
(1,181) 1:A:19:ASN:N 1:A:19:ASN:CA 1:A:19:ASN:C 1:A:20:ALA:N 12 94.92 (1,286) 1:A:109:MET:N 1:A:109:MET:CA 1:A:109:MET:C 1:A:110:TYR:N 9 94.9 (1,218) 1:A:65:TRP:C 1:A:66:PHE:N 1:A:66:PHE:CA 1:A:66:PHE:C 17 94.82 (1,288) 1:A:109:MET:C 1:A:110:TYR:N 1:A:110:TYR:CA 1:A:110:TYR:C 12 94.8 (1,254) 1:A:97:ILE:C 1:A:98:ALA:N 1:A:98:ALA:CA 1:A:98:ALA:C 9 94.76 (1,310) 1:A:118:THR:N 1:A:118:THR:CA 1:A:118:THR:C 1:A:119:ASP:N 18 94.74 (1,203) 1:A:52:ASP:N 1:A:52:ASP:CA 1:A:52:ASP:C 1:A:53:TRP:N 18 94.67 (1,249) 1:A:96:GLU:N 1:A:63:THR:N 1:A:63:THR:CA 1:A:63:THR:CA 1:A:63:THR:C 1 94.62 (1,249) 1:A:66:GLU:N 1:A:63:THR:N 1:A:63:THR:CA 1:A:63:THR:C 12 94.55 (1,249) 1:A:96:GLU:N 1:A:69:GLU:CA 1:A:69:GLU:C <	(1,325)	1:A:131:LYS:C	1:A:132:PHE:N	1:A:132:PHE:CA	1:A:132:PHE:C	8	95.01
(1,286) 1:A:109:MET:N 1:A:109:MET:CA 1:A:109:MET:C 1:A:110:TYR:N 9 94.9 (1,218) 1:A:65:TRP:C 1:A:66:PHE:N 1:A:66:PHE:CA 1:A:66:PHE:C 17 94.82 (1,288) 1:A:109:MET:C 1:A:110:TYR:N 1:A:110:TYR:CA 1:A:110:TYR:C 12 94.8 (1,254) 1:A:97:ILE:C 1:A:98:ALA:N 1:A:98:ALA:CA 1:A:98:ALA:C 9 94.76 (1,310) 1:A:118:THR:N 1:A:118:THR:CA 1:A:118:THR:C 1:A:119:ASP:N 18 94.74 (1,203) 1:A:52:ASP:N 1:A:52:ASP:CA 1:A:52:ASP:C 1:A:53:TRP:N 18 94.67 (1,249) 1:A:96:GLU:N 1:A:63:THR:N 1:A:63:THR:CA 1:A:63:THR:C 1 94.62 (1,216) 1:A:62:GLY:C 1:A:63:THR:N 1:A:63:THR:CA 1:A:63:THR:C 1 94.55 (1,249) 1:A:96:GLU:N 1:A:63:THR:N 1:A:63:THR:CA 1:A:63:THR:C 1 94.52 (1,325) 1:A:131:LYS:C 1:A:132:PHE:N 1:A:96:GLU:C 1:A:97:ILE:N <th< td=""><td>(1,304)</td><td>1:A:116:CYS:N</td><td>1:A:116:CYS:CA</td><td>1:A:116:CYS:C</td><td>1:A:117:LEU:N</td><td>5</td><td>94.93</td></th<>	(1,304)	1:A:116:CYS:N	1:A:116:CYS:CA	1:A:116:CYS:C	1:A:117:LEU:N	5	94.93
(1,218) 1:A:65:TRP:C 1:A:66:PHE:N 1:A:66:PHE:CA 1:A:66:PHE:C 17 94.82 (1,288) 1:A:109:MET:C 1:A:110:TYR:N 1:A:110:TYR:CA 1:A:110:TYR:C 12 94.8 (1,254) 1:A:97:ILE:C 1:A:98:ALA:N 1:A:98:ALA:CA 1:A:98:ALA:C 9 94.76 (1,310) 1:A:118:THR:N 1:A:118:THR:CA 1:A:118:THR:C 1:A:119:ASP:N 18 94.74 (1,203) 1:A:52:ASP:N 1:A:52:ASP:CA 1:A:52:ASP:C 1:A:53:TRP:N 18 94.67 (1,249) 1:A:96:GLU:N 1:A:96:GLU:CA 1:A:96:GLU:C 1:A:463:THR:C 1 94.62 (1,216) 1:A:62:GLY:C 1:A:63:THR:N 1:A:63:THR:CA 1:A:63:THR:C 1 94.62 (1,249) 1:A:96:GLU:N 1:A:96:GLU:CA 1:A:96:GLU:CA 1:A:496:GLU:C 1:A:497:ILE:N 8 94.52 (1,349) 1:A:131:LYS:C 1:A:132:PHE:N 1:A:132:PHE:CA 1:A:132:PHE:C 7 94.49 (1,365) 1:A:167:GLN:N 1:A:167:GLN:CA 1:A:167:GLN:C	(1,181)	1:A:19:ASN:N	1:A:19:ASN:CA	1:A:19:ASN:C	1:A:20:ALA:N	12	94.92
(1,288) 1:A:109:MET:C 1:A:110:TYR:N 1:A:110:TYR:CA 1:A:110:TYR:C 12 94.8 (1,254) 1:A:97:ILE:C 1:A:98:ALA:N 1:A:98:ALA:CA 1:A:98:ALA:C 9 94.76 (1,310) 1:A:118:THR:N 1:A:118:THR:CA 1:A:118:THR:C 1:A:119:ASP:N 18 94.74 (1,203) 1:A:52:ASP:N 1:A:52:ASP:CA 1:A:52:ASP:C 1:A:53:TRP:N 18 94.67 (1,249) 1:A:96:GLU:N 1:A:96:GLU:CA 1:A:96:GLU:C 1:A:97:ILE:N 17 94.65 (1,216) 1:A:62:GLY:C 1:A:63:THR:N 1:A:63:THR:CA 1:A:63:THR:C 11 94.62 (1,216) 1:A:62:GLY:C 1:A:63:THR:N 1:A:63:THR:CA 1:A:63:THR:C 12 94.55 (1,249) 1:A:96:GLU:N 1:A:96:GLU:CA 1:A:96:GLU:C 1:A:97:ILE:N 8 94.52 (1,325) 1:A:131:LYS:C 1:A:132:PHE:N 1:A:132:PHE:CA 1:A:132:PHE:C 7 94.49 (1,365) 1:A:167:GLN:N 1:A:167:GLN:CA 1:A:167:GLN:C 1:A:168:LEU:N	(1,286)	1:A:109:MET:N	1:A:109:MET:CA	1:A:109:MET:C	1:A:110:TYR:N	9	94.9
(1,254) 1:A:97:ILE:C 1:A:98:ALA:N 1:A:98:ALA:CA 1:A:98:ALA:C 9 94.76 (1,310) 1:A:118:THR:N 1:A:118:THR:CA 1:A:118:THR:C 1:A:119:ASP:N 18 94.74 (1,203) 1:A:52:ASP:N 1:A:52:ASP:CA 1:A:52:ASP:C 1:A:53:TRP:N 18 94.67 (1,249) 1:A:96:GLU:N 1:A:96:GLU:CA 1:A:96:GLU:C 1:A:97:ILE:N 17 94.65 (1,216) 1:A:62:GLY:C 1:A:63:THR:N 1:A:63:THR:CA 1:A:63:THR:C 11 94.62 (1,249) 1:A:62:GLY:C 1:A:63:THR:N 1:A:63:THR:CA 1:A:63:THR:C 12 94.55 (1,249) 1:A:96:GLU:N 1:A:96:GLU:CA 1:A:96:GLU:C 1:A:97:ILE:N 8 94.52 (1,249) 1:A:3:96:GLU:N 1:A:19:GCU:CA 1:A:96:GLU:C 1:A:97:ILE:N 8 94.52 (1,325) 1:A:131:LYS:C 1:A:132:PHE:N 1:A:132:PHE:CA 1:A:168:LEU:N 9 94.46 (1,365) 1:A:167:GLN:N 1:A:167:GLN:CA 1:A:168:LEU:N 9 94.46 </td <td>(1,218)</td> <td>1:A:65:TRP:C</td> <td>1:A:66:PHE:N</td> <td>1:A:66:PHE:CA</td> <td>1:A:66:PHE:C</td> <td>17</td> <td>94.82</td>	(1,218)	1:A:65:TRP:C	1:A:66:PHE:N	1:A:66:PHE:CA	1:A:66:PHE:C	17	94.82
(1,310) 1:A:118:THR:N 1:A:118:THR:CA 1:A:118:THR:C 1:A:119:ASP:N 18 94.74 (1,203) 1:A:52:ASP:N 1:A:52:ASP:CA 1:A:52:ASP:C 1:A:53:TRP:N 18 94.67 (1,249) 1:A:96:GLU:N 1:A:96:GLU:CA 1:A:96:GLU:C 1:A:97:ILE:N 17 94.65 (1,216) 1:A:62:GLY:C 1:A:63:THR:N 1:A:63:THR:CA 1:A:63:THR:C 11 94.62 (1,249) 1:A:96:GLU:C 1:A:63:THR:CA 1:A:63:THR:C 12 94.55 (1,249) 1:A:96:GLU:N 1:A:96:GLU:CA 1:A:96:GLU:C 1:A:97:ILE:N 8 94.52 (1,325) 1:A:131:LYS:C 1:A:132:PHE:N 1:A:132:PHE:CA 1:A:132:PHE:C 7 94.49 (1,365) 1:A:167:GLN:N 1:A:167:GLN:CA 1:A:167:GLN:C 1:A:168:LEU:N 9 94.46 (1,181) 1:A:19:ASN:N 1:A:19:ASN:CA 1:A:19:ASN:C 1:A:20:ALA:N 3 94.46 (1,195) 1:A:24:ASP:N 1:A:24:ASP:CA 1:A:24:ASP:C 1:A:25:ARG:N 6 94.45 <td>(1,288)</td> <td>1:A:109:MET:C</td> <td>1:A:110:TYR:N</td> <td>1:A:110:TYR:CA</td> <td>1:A:110:TYR:C</td> <td>12</td> <td>94.8</td>	(1,288)	1:A:109:MET:C	1:A:110:TYR:N	1:A:110:TYR:CA	1:A:110:TYR:C	12	94.8
(1,203) 1:A:52:ASP:N 1:A:52:ASP:CA 1:A:52:ASP:C 1:A:53:TRP:N 18 94.67 (1,249) 1:A:96:GLU:N 1:A:96:GLU:CA 1:A:96:GLU:C 1:A:97:ILE:N 17 94.65 (1,216) 1:A:62:GLY:C 1:A:63:THR:N 1:A:63:THR:CA 1:A:63:THR:C 11 94.62 (1,216) 1:A:62:GLY:C 1:A:63:THR:N 1:A:63:THR:CA 1:A:63:THR:C 12 94.55 (1,249) 1:A:96:GLU:N 1:A:96:GLU:CA 1:A:96:GLU:C 1:A:97:ILE:N 8 94.52 (1,325) 1:A:131:LYS:C 1:A:132:PHE:N 1:A:132:PHE:CA 1:A:132:PHE:C 7 94.49 (1,365) 1:A:167:GLN:N 1:A:167:GLN:CA 1:A:167:GLN:C 1:A:168:LEU:N 9 94.46 (1,181) 1:A:19:ASN:N 1:A:19:ASN:CA 1:A:19:ASN:C 1:A:20:ALA:N 3 94.46 (1,163) 1:A:3:ASP:N 1:A:3:ASP:CA 1:A:3:ASP:C 1:A:4:GLU:N 13 94.46 (1,269) 1:A:103:ASP:N 1:A:103:ASP:CA 1:A:103:ASP:C 1:A:104:GLY:N 2	(1,254)	1:A:97:ILE:C	1:A:98:ALA:N	1:A:98:ALA:CA	1:A:98:ALA:C	9	94.76
(1,249) 1:A:96:GLU:N 1:A:96:GLU:CA 1:A:96:GLU:C 1:A:97:ILE:N 17 94.65 (1,216) 1:A:62:GLY:C 1:A:63:THR:N 1:A:63:THR:CA 1:A:63:THR:C 11 94.62 (1,216) 1:A:62:GLY:C 1:A:63:THR:N 1:A:63:THR:CA 1:A:63:THR:C 12 94.55 (1,249) 1:A:96:GLU:N 1:A:96:GLU:CA 1:A:96:GLU:C 1:A:97:ILE:N 8 94.52 (1,325) 1:A:131:LYS:C 1:A:132:PHE:N 1:A:132:PHE:CA 1:A:132:PHE:C 7 94.49 (1,365) 1:A:167:GLN:N 1:A:167:GLN:CA 1:A:167:GLN:C 1:A:168:LEU:N 9 94.46 (1,181) 1:A:19:ASN:N 1:A:19:ASN:CA 1:A:19:ASN:C 1:A:20:ALA:N 3 94.46 (1,163) 1:A:3:ASP:N 1:A:3:ASP:CA 1:A:3:ASP:C 1:A:4:GLU:N 13 94.46 (1,195) 1:A:24:ASP:N 1:A:103:ASP:CA 1:A:103:ASP:C 1:A:104:GLY:N 2 94.43 (1,361) 1:A:165:CYS:C 1:A:166:ASN:N 1:A:166:ASN:CA 1:A:166:ASN:C <th< td=""><td>(1,310)</td><td>1:A:118:THR:N</td><td>1:A:118:THR:CA</td><td>1:A:118:THR:C</td><td>1:A:119:ASP:N</td><td>18</td><td>94.74</td></th<>	(1,310)	1:A:118:THR:N	1:A:118:THR:CA	1:A:118:THR:C	1:A:119:ASP:N	18	94.74
(1,216) 1:A:62:GLY:C 1:A:63:THR:N 1:A:63:THR:CA 1:A:63:THR:C 11 94.62 (1,216) 1:A:62:GLY:C 1:A:63:THR:N 1:A:63:THR:CA 1:A:63:THR:C 12 94.55 (1,249) 1:A:96:GLU:N 1:A:96:GLU:CA 1:A:96:GLU:C 1:A:97:ILE:N 8 94.52 (1,325) 1:A:131:LYS:C 1:A:132:PHE:N 1:A:132:PHE:CA 1:A:132:PHE:C 7 94.49 (1,365) 1:A:167:GLN:N 1:A:167:GLN:CA 1:A:167:GLN:C 1:A:168:LEU:N 9 94.46 (1,181) 1:A:19:ASN:N 1:A:19:ASN:CA 1:A:19:ASN:C 1:A:20:ALA:N 3 94.46 (1,163) 1:A:3:ASP:N 1:A:3:ASP:CA 1:A:3:ASP:C 1:A:4:GLU:N 13 94.46 (1,195) 1:A:24:ASP:N 1:A:24:ASP:CA 1:A:24:ASP:C 1:A:25:ARG:N 6 94.45 (1,269) 1:A:103:ASP:N 1:A:166:ASN:N 1:A:166:ASN:CA 1:A:166:ASN:C 16 94.33	(1,203)	1:A:52:ASP:N	1:A:52:ASP:CA	1:A:52:ASP:C	1:A:53:TRP:N	18	94.67
(1,216) 1:A:62:GLY:C 1:A:63:THR:N 1:A:63:THR:CA 1:A:63:THR:C 12 94.55 (1,249) 1:A:96:GLU:N 1:A:96:GLU:CA 1:A:96:GLU:C 1:A:97:ILE:N 8 94.52 (1,325) 1:A:131:LYS:C 1:A:132:PHE:N 1:A:132:PHE:CA 1:A:132:PHE:C 7 94.49 (1,365) 1:A:167:GLN:N 1:A:167:GLN:CA 1:A:167:GLN:C 1:A:168:LEU:N 9 94.46 (1,181) 1:A:19:ASN:N 1:A:19:ASN:CA 1:A:19:ASN:C 1:A:20:ALA:N 3 94.46 (1,163) 1:A:3:ASP:N 1:A:3:ASP:CA 1:A:3:ASP:C 1:A:4:GLU:N 13 94.46 (1,195) 1:A:24:ASP:N 1:A:24:ASP:CA 1:A:24:ASP:C 1:A:25:ARG:N 6 94.45 (1,269) 1:A:103:ASP:N 1:A:103:ASP:CA 1:A:103:ASP:C 1:A:104:GLY:N 2 94.43 (1,361) 1:A:165:CYS:C 1:A:166:ASN:N 1:A:166:ASN:CA 1:A:166:ASN:C 16 94.33	(1,249)	1:A:96:GLU:N	1:A:96:GLU:CA	1:A:96:GLU:C	1:A:97:ILE:N	17	94.65
(1,249) 1:A:96:GLU:N 1:A:96:GLU:CA 1:A:96:GLU:C 1:A:97:ILE:N 8 94.52 (1,325) 1:A:131:LYS:C 1:A:132:PHE:N 1:A:132:PHE:CA 1:A:132:PHE:C 7 94.49 (1,365) 1:A:167:GLN:N 1:A:167:GLN:CA 1:A:167:GLN:C 1:A:168:LEU:N 9 94.46 (1,181) 1:A:19:ASN:N 1:A:19:ASN:CA 1:A:19:ASN:C 1:A:20:ALA:N 3 94.46 (1,163) 1:A:3:ASP:N 1:A:3:ASP:CA 1:A:3:ASP:C 1:A:4:GLU:N 13 94.46 (1,195) 1:A:24:ASP:N 1:A:24:ASP:CA 1:A:24:ASP:C 1:A:25:ARG:N 6 94.45 (1,269) 1:A:103:ASP:N 1:A:103:ASP:CA 1:A:103:ASP:C 1:A:104:GLY:N 2 94.43 (1,361) 1:A:165:CYS:C 1:A:166:ASN:N 1:A:166:ASN:CA 1:A:166:ASN:C 16 94.33	(1,216)	1:A:62:GLY:C	1:A:63:THR:N	1:A:63:THR:CA	1:A:63:THR:C	11	94.62
(1,325) 1:A:131:LYS:C 1:A:132:PHE:N 1:A:132:PHE:CA 1:A:132:PHE:C 7 94.49 (1,365) 1:A:167:GLN:N 1:A:167:GLN:CA 1:A:167:GLN:C 1:A:168:LEU:N 9 94.46 (1,181) 1:A:19:ASN:N 1:A:19:ASN:CA 1:A:19:ASN:C 1:A:20:ALA:N 3 94.46 (1,163) 1:A:3:ASP:N 1:A:3:ASP:CA 1:A:3:ASP:C 1:A:4:GLU:N 13 94.46 (1,195) 1:A:24:ASP:N 1:A:24:ASP:CA 1:A:24:ASP:C 1:A:25:ARG:N 6 94.45 (1,269) 1:A:103:ASP:N 1:A:103:ASP:CA 1:A:103:ASP:C 1:A:104:GLY:N 2 94.43 (1,361) 1:A:165:CYS:C 1:A:166:ASN:N 1:A:166:ASN:CA 1:A:166:ASN:C 16 94.33	(1,216)	1:A:62:GLY:C	1:A:63:THR:N	1:A:63:THR:CA	1:A:63:THR:C	12	94.55
(1,365) 1:A:167:GLN:N 1:A:167:GLN:CA 1:A:167:GLN:C 1:A:168:LEU:N 9 94.46 (1,181) 1:A:19:ASN:N 1:A:19:ASN:CA 1:A:19:ASN:C 1:A:20:ALA:N 3 94.46 (1,163) 1:A:3:ASP:N 1:A:3:ASP:CA 1:A:3:ASP:C 1:A:4:GLU:N 13 94.46 (1,195) 1:A:24:ASP:N 1:A:24:ASP:CA 1:A:24:ASP:C 1:A:25:ARG:N 6 94.45 (1,269) 1:A:103:ASP:N 1:A:103:ASP:CA 1:A:103:ASP:C 1:A:104:GLY:N 2 94.43 (1,361) 1:A:165:CYS:C 1:A:166:ASN:N 1:A:166:ASN:CA 1:A:166:ASN:C 16 94.33	(1,249)	1:A:96:GLU:N	1:A:96:GLU:CA	1:A:96:GLU:C	1:A:97:ILE:N	8	94.52
(1,181) 1:A:19:ASN:N 1:A:19:ASN:CA 1:A:19:ASN:C 1:A:20:ALA:N 3 94.46 (1,163) 1:A:3:ASP:N 1:A:3:ASP:CA 1:A:3:ASP:C 1:A:4:GLU:N 13 94.46 (1,195) 1:A:24:ASP:N 1:A:24:ASP:CA 1:A:24:ASP:C 1:A:25:ARG:N 6 94.45 (1,269) 1:A:103:ASP:N 1:A:103:ASP:CA 1:A:103:ASP:C 1:A:104:GLY:N 2 94.43 (1,361) 1:A:165:CYS:C 1:A:166:ASN:N 1:A:166:ASN:CA 1:A:166:ASN:C 16 94.33	(1,325)	1:A:131:LYS:C	1:A:132:PHE:N	1:A:132:PHE:CA	1:A:132:PHE:C	7	94.49
(1,163) 1:A:3:ASP:N 1:A:3:ASP:CA 1:A:3:ASP:C 1:A:4:GLU:N 13 94.46 (1,195) 1:A:24:ASP:N 1:A:24:ASP:CA 1:A:24:ASP:C 1:A:25:ARG:N 6 94.45 (1,269) 1:A:103:ASP:N 1:A:103:ASP:CA 1:A:103:ASP:C 1:A:104:GLY:N 2 94.43 (1,361) 1:A:165:CYS:C 1:A:166:ASN:N 1:A:166:ASN:CA 1:A:166:ASN:C 16 94.33	(1,365)	1:A:167:GLN:N	1:A:167:GLN:CA	1:A:167:GLN:C	1:A:168:LEU:N		94.46
(1,195) 1:A:24:ASP:N 1:A:24:ASP:CA 1:A:24:ASP:C 1:A:25:ARG:N 6 94.45 (1,269) 1:A:103:ASP:N 1:A:103:ASP:CA 1:A:103:ASP:C 1:A:104:GLY:N 2 94.43 (1,361) 1:A:165:CYS:C 1:A:166:ASN:N 1:A:166:ASN:CA 1:A:166:ASN:C 16 94.33	(1,181)	1:A:19:ASN:N	1:A:19:ASN:CA	1:A:19:ASN:C	1:A:20:ALA:N		94.46
(1,269) 1:A:103:ASP:N 1:A:103:ASP:CA 1:A:103:ASP:C 1:A:104:GLY:N 2 94.43 (1,361) 1:A:165:CYS:C 1:A:166:ASN:N 1:A:166:ASN:CA 1:A:166:ASN:C 16 94.33	(1,163)	1:A:3:ASP:N	1:A:3:ASP:CA	1:A:3:ASP:C	1:A:4:GLU:N	13	94.46
(1,361) 1:A:165:CYS:C 1:A:166:ASN:N 1:A:166:ASN:CA 1:A:166:ASN:C 16 94.33	(1,195)	1:A:24:ASP:N	1:A:24:ASP:CA	1:A:24:ASP:C	1:A:25:ARG:N		94.45
	(1,269)	1:A:103:ASP:N	1:A:103:ASP:CA	1:A:103:ASP:C	1:A:104:GLY:N	2	94.43
(1,284) 1:A:108:LYS:C 1:A:109:MET:N 1:A:109:MET:CA 1:A:109:MET:C 5 94.26	(1,361)	1:A:165:CYS:C	1:A:166:ASN:N	1:A:166:ASN:CA	1:A:166:ASN:C	16	94.33
	(1,284)	1:A:108:LYS:C	1:A:109:MET:N	1:A:109:MET:CA	1:A:109:MET:C	5	94.26



	ed from previous pe	•	A		26 11	T 71 1
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	$\textbf{Violation} \ (\circ)$
(1,216)	1:A:62:GLY:C	1:A:63:THR:N	1:A:63:THR:CA	1:A:63:THR:C	15	94.26
(1,331)	1:A:148:VAL:C	1:A:149:GLU:N	1:A:149:GLU:CA	1:A:149:GLU:C	16	94.25
(1,288)	1:A:109:MET:C	1:A:110:TYR:N	1:A:110:TYR:CA	1:A:110:TYR:C	2	94.24
(1,284)	1:A:108:LYS:C	1:A:109:MET:N	1:A:109:MET:CA	1:A:109:MET:C	2	94.24
(1,292)	1:A:111:ARG:N	1:A:111:ARG:CA	1:A:111:ARG:C	1:A:112:GLY:N	15	94.22
(1,325)	1:A:131:LYS:C	1:A:132:PHE:N	1:A:132:PHE:CA	1:A:132:PHE:C	19	94.18
(1,203)	1:A:52:ASP:N	1:A:52:ASP:CA	1:A:52:ASP:C	1:A:53:TRP:N	12	94.13
(1,265)	1:A:101:GLU:C	1:A:102:LEU:N	1:A:102:LEU:CA	1:A:102:LEU:C	14	94.04
(1,216)	1:A:62:GLY:C	1:A:63:THR:N	1:A:63:THR:CA	1:A:63:THR:C	10	94.03
(1,283)	1:A:108:LYS:N	1:A:108:LYS:CA	1:A:108:LYS:C	1:A:109:MET:N	7	93.9
(1,296)	1:A:113:GLY:C	1:A:114:LYS:N	1:A:114:LYS:CA	1:A:114:LYS:C	11	93.89
(1,354)	1:A:163:GLU:N	1:A:163:GLU:CA	1:A:163:GLU:C	1:A:164:LYS:N	12	93.88
(1,249)	1:A:96:GLU:N	1:A:96:GLU:CA	1:A:96:GLU:C	1:A:97:ILE:N	5	93.83
(1,310)	1:A:118:THR:N	1:A:118:THR:CA	1:A:118:THR:C	1:A:119:ASP:N	6	93.81
(1,195)	1:A:24:ASP:N	1:A:24:ASP:CA	1:A:24:ASP:C	1:A:25:ARG:N	5	93.72
(1,354)	1:A:163:GLU:N	1:A:163:GLU:CA	1:A:163:GLU:C	1:A:164:LYS:N	5	93.61
(1,174)	1:A:16:LEU:C	1:A:17:LYS:N	1:A:17:LYS:CA	1:A:17:LYS:C	16	93.59
(1,203)	1:A:52:ASP:N	1:A:52:ASP:CA	1:A:52:ASP:C	1:A:53:TRP:N	9	93.57
(1,285)	1:A:108:LYS:C	1:A:109:MET:N	1:A:109:MET:CA	1:A:109:MET:C	4	93.55
(1,310)	1:A:118:THR:N	1:A:118:THR:CA	1:A:118:THR:C	1:A:119:ASP:N	15	93.48
(1,302)	1:A:115:ILE:C	1:A:116:CYS:N	1:A:116:CYS:CA	1:A:116:CYS:C	13	93.47
(1,249)	1:A:96:GLU:N	1:A:96:GLU:CA	1:A:96:GLU:C	1:A:97:ILE:N	7	93.44
(1,325)	1:A:131:LYS:C	1:A:132:PHE:N	1:A:132:PHE:CA	1:A:132:PHE:C	14	93.36
(1,194)	1:A:23:ARG:C	1:A:24:ASP:N	1:A:24:ASP:CA	1:A:24:ASP:C	1	93.34
(1,180)	1:A:18:THR:C	1:A:19:ASN:N	1:A:19:ASN:CA	1:A:19:ASN:C	8	93.29
(1,194)	1:A:23:ARG:C	1:A:24:ASP:N	1:A:24:ASP:CA	1:A:24:ASP:C	5	93.26
(1,297)	1:A:113:GLY:C	1:A:114:LYS:N	1:A:114:LYS:CA	1:A:114:LYS:C	2	93.2
(1,200)	1:A:51:ASN:N	1:A:51:ASN:CA	1:A:51:ASN:C	1:A:52:ASP:N	15	93.17
(1,361)	1:A:165:CYS:C	1:A:166:ASN:N	1:A:166:ASN:CA	1:A:166:ASN:C	9	93.16
(1,325)	1:A:131:LYS:C	1:A:132:PHE:N	1:A:132:PHE:CA	1:A:132:PHE:C	1	93.16
(1,202)	1:A:51:ASN:C	1:A:52:ASP:N	1:A:52:ASP:CA	1:A:52:ASP:C	5	93.15
(1,292)	1:A:111:ARG:N	1:A:111:ARG:CA	1:A:111:ARG:C	1:A:112:GLY:N	6	93.14
(1,288)	1:A:109:MET:C	1:A:110:TYR:N	1:A:110:TYR:CA	1:A:110:TYR:C	17	93.14
(1,303)	1:A:115:ILE:C	1:A:116:CYS:N	1:A:116:CYS:CA	1:A:116:CYS:C	16	93.06
(1,199)	1:A:50:ASP:C	1:A:51:ASN:N	1:A:51:ASN:CA	1:A:51:ASN:C	12	93.04
(1,218)	1:A:65:TRP:C	1:A:66:PHE:N	1:A:66:PHE:CA	1:A:66:PHE:C	12	92.87
(1,359)	1:A:165:CYS:N	1:A:165:CYS:CA	1:A:165:CYS:C	1:A:166:ASN:N	8	92.86
(1,283)	1:A:108:LYS:N	1:A:108:LYS:CA	1:A:108:LYS:C	1:A:109:MET:N	8	92.84
(1,357)	1:A:164:LYS:C	1:A:165:CYS:N	1:A:165:CYS:CA	1:A:165:CYS:C	1	92.82
(1,275)	1:A:105:LYS:C	1:A:106:THR:N	1:A:106:THR:CA	1:A:106:THR:C	14	92.81
(1,195)	1:A:24:ASP:N	1:A:24:ASP:CA	1:A:24:ASP:C	1:A:25:ARG:N	9	92.81
(1,288)	1:A:109:MET:C	1:A:110:TYR:N	1:A:110:TYR:CA	1:A:110:TYR:C	20	92.79
(1,254)	1:A:97:ILE:C	1:A:98:ALA:N	1:A:98:ALA:CA	1:A:98:ALA:C	1	92.76
(1,234) $(1,216)$	1:A:62:GLY:C	1:A:63:THR:N	1:A:63:THR:CA	1:A:63:THR:C	19	92.74
(1,210) $(1,292)$	1:A:111:ARG:N	1:A:111:ARG:CA	1:A:111:ARG:C	1:A:112:GLY:N	2	92.66
(1,252) $(1,255)$	1:A:98:ALA:N	1:A:98:ALA:CA	1:A:98:ALA:C	1:A:112.GL1.N 1:A:99:VAL:N	6	92.62
(1,233) $(1,194)$	1:A:23:ARG:C	1:A:98:ALA:CA 1:A:24:ASP:N	1:A:98:ALA:C 1:A:24:ASP:CA	1:A:24:ASP:C	14	92.56
(1,194) $(1,269)$	1:A:103:ASP:N	1:A:24:ASF:N 1:A:103:ASP:CA	1:A:103:ASP:C	1:A:104:GLY:N	9	92.55
(1,209) $(1,202)$	1:A:105:ASP:N 1:A:51:ASN:C	1:A:103:ASP:CA 1:A:52:ASP:N	1:A:52:ASP:CA	1:A:104:GLY:N 1:A:52:ASP:C	19	92.44
· · /	1:A:103:ASP:N	1:A:32:ASP:N 1:A:103:ASP:CA	1:A:32:ASP:CA 1:A:103:ASP:C	1:A:32:ASF:C 1:A:104:GLY:N	10	92.44
(1,269)	1:A:103:ASP:N 1:A:118:THR:N				3	92.41
(1,310)	1:A:118:1HK:N	1:A:118:THR:CA	1:A:118:THR:C	1:A:119:ASP:N		92.39



	ed from previous po					
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	$Violation (\circ)$
(1,254)	1:A:97:ILE:C	1:A:98:ALA:N	1:A:98:ALA:CA	1:A:98:ALA:C	18	92.38
(1,363)	1:A:166:ASN:C	1:A:167:GLN:N	1:A:167:GLN:CA	1:A:167:GLN:C	17	92.35
(1,218)	1:A:65:TRP:C	1:A:66:PHE:N	1:A:66:PHE:CA	1:A:66:PHE:C	11	92.25
(1,345)	1:A:160:GLN:N	1:A:160:GLN:CA	1:A:160:GLN:C	1:A:161:HIS:N	4	92.18
(1,357)	1:A:164:LYS:C	1:A:165:CYS:N	1:A:165:CYS:CA	1:A:165:CYS:C	9	92.15
(1,181)	1:A:19:ASN:N	1:A:19:ASN:CA	1:A:19:ASN:C	1:A:20:ALA:N	7	92.11
(1,316)	1:A:119:ASP:C	1:A:120:HIS:N	1:A:120:HIS:CA	1:A:120:HIS:C	4	92.09
(1,283)	1:A:108:LYS:N	1:A:108:LYS:CA	1:A:108:LYS:C	1:A:109:MET:N	4	92.05
(1,283)	1:A:108:LYS:N	1:A:108:LYS:CA	1:A:108:LYS:C	1:A:109:MET:N	10	92.04
(1,225)	1:A:74:ASP:C	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	14	92.04
(1,173)	1:A:16:LEU:C	1:A:17:LYS:N	1:A:17:LYS:CA	1:A:17:LYS:C	12	92.04
(1,363)	1:A:166:ASN:C	1:A:167:GLN:N	1:A:167:GLN:CA	1:A:167:GLN:C	14	91.83
(1,327)	1:A:132:PHE:C	1:A:133:GLY:N	1:A:133:GLY:CA	1:A:133:GLY:C	4	91.78
(1,310)	1:A:118:THR:N	1:A:118:THR:CA	1:A:118:THR:C	1:A:119:ASP:N	17	91.75
(1,354)	1:A:163:GLU:N	1:A:163:GLU:CA	1:A:163:GLU:C	1:A:164:LYS:N	2	91.66
(1,316)	1:A:119:ASP:C	1:A:120:HIS:N	1:A:120:HIS:CA	1:A:120:HIS:C	18	91.61
(1,249)	1:A:96:GLU:N	1:A:96:GLU:CA	1:A:96:GLU:C	1:A:97:ILE:N	14	91.58
(1,362)	1:A:166:ASN:N	1:A:166:ASN:CA	1:A:166:ASN:C	1:A:167:GLN:N	6	91.57
(1,194)	1:A:23:ARG:C	1:A:24:ASP:N	1:A:24:ASP:CA	1:A:24:ASP:C	11	91.57
(1,310)	1:A:118:THR:N	1:A:118:THR:CA	1:A:118:THR:C	1:A:119:ASP:N	13	91.52
(1,200)	1:A:51:ASN:N	1:A:51:ASN:CA	1:A:51:ASN:C	1:A:52:ASP:N	16	91.52
(1,218)	1:A:65:TRP:C	1:A:66:PHE:N	1:A:66:PHE:CA	1:A:66:PHE:C	16	91.5
(1,237)	1:A:88:ILE:C	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:C	14	91.48
(1,218)	1:A:65:TRP:C	1:A:66:PHE:N	1:A:66:PHE:CA	1:A:66:PHE:C	2	91.46
(1,297)	1:A:113:GLY:C	1:A:114:LYS:N	1:A:114:LYS:CA	1:A:114:LYS:C	20	91.44
(1,292)	1:A:111:ARG:N	1:A:111:ARG:CA	1:A:111:ARG:C	1:A:112:GLY:N	3	91.42
(1,292)	1:A:111:ARG:N	1:A:111:ARG:CA	1:A:111:ARG:C	1:A:112:GLY:N	11	91.4
(1,276)	1:A:105:LYS:C	1:A:106:THR:N	1:A:106:THR:CA	1:A:106:THR:C	6	91.4
(1,177)	1:A:17:LYS:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	19	91.36
(1,310)	1:A:118:THR:N	1:A:118:THR:CA	1:A:118:THR:C	1:A:119:ASP:N	8	91.31
(1,289)	1:A:110:TYR:N	1:A:110:TYR:CA	1:A:110:TYR:C	1:A:111:ARG:N	4	91.3
(1,202)	1:A:51:ASN:C	1:A:52:ASP:N	1:A:52:ASP:CA	1:A:52:ASP:C	2	91.3
(1,357)	1:A:164:LYS:C	1:A:165:CYS:N	1:A:165:CYS:CA	1:A:165:CYS:C	10	91.22
(1,182)	1:A:19:ASN:C	1:A:20:ALA:N	1:A:20:ALA:CA	1:A:20:ALA:C	11	91.08
(1,218)	1:A:65:TRP:C	1:A:66:PHE:N	1:A:66:PHE:CA	1:A:66:PHE:C	18	91.04
(1,352)	1:A:162:LYS:C	1:A:163:GLU:N	1:A:163:GLU:CA	1:A:163:GLU:C	16	91.02
(1,349)	1:A:161:HIS:C	1:A:162:LYS:N	1:A:162:LYS:CA	1:A:162:LYS:C	4	90.96
(1,303)	1:A:115:ILE:C	1:A:116:CYS:N	1:A:116:CYS:CA	1:A:116:CYS:C	20	90.89
(1,275)	1:A:105:LYS:C	1:A:106:THR:N	1:A:106:THR:CA	1:A:106:THR:C	16	90.88
(1,291)	1:A:110:TYR:C	1:A:111:ARG:N	1:A:111:ARG:CA	1:A:111:ARG:C	16	90.81
(1,285)	1:A:108:LYS:C	1:A:109:MET:N	1:A:109:MET:CA	1:A:109:MET:C	14	90.72
(1,293)	1:A:111:ARG:C	1:A:112:GLY:N	1:A:112:GLY:CA	1:A:112:GLY:C	5	90.71
(1,310)	1:A:118:THR:N	1:A:118:THR:CA	1:A:118:THR:C	1:A:119:ASP:N	11	90.52
(1,249)	1:A:96:GLU:N	1:A:96:GLU:CA	1:A:96:GLU:C	1:A:97:ILE:N	18	90.46
(1,194)	1:A:23:ARG:C	1:A:24:ASP:N	1:A:24:ASP:CA	1:A:24:ASP:C	7	90.38
(1,325)	1:A:131:LYS:C	1:A:132:PHE:N	1:A:132:PHE:CA	1:A:132:PHE:C	6	90.35
(1,179)	1:A:18:THR:C	1:A:19:ASN:N	1:A:19:ASN:CA	1:A:19:ASN:C	2	90.24
(1,174)	1:A:16:LEU:C	1:A:17:LYS:N	1:A:17:LYS:CA	1:A:17:LYS:C	5	90.24
(1,348)	1:A:161:HIS:N	1:A:161:HIS:CA	1:A:161:HIS:C	1:A:162:LYS:N	14	90.16
(1,350)	1:A:161:HIS:C	1:A:162:LYS:N	1:A:162:LYS:CA	1:A:162:LYS:C	15	90.12
(1,353)	1:A:162:LYS:C	1:A:163:GLU:N	1:A:163:GLU:CA	1:A:163:GLU:C	5	90.08



	ed from previous po		A 1 9	A 1 4	N (F 1 1	T 7* 1 ()
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (°)
(1,330)	1:A:148:VAL:C	1:A:149:GLU:N	1:A:149:GLU:CA	1:A:149:GLU:C	7	90.08
(1,284)	1:A:108:LYS:C	1:A:109:MET:N	1:A:109:MET:CA	1:A:109:MET:C	1	90.06
(1,350)	1:A:161:HIS:C	1:A:162:LYS:N	1:A:162:LYS:CA	1:A:162:LYS:C	2	90.05
(1,276)	1:A:105:LYS:C	1:A:106:THR:N	1:A:106:THR:CA	1:A:106:THR:C	7	90.02
(1,289)	1:A:110:TYR:N	1:A:110:TYR:CA	1:A:110:TYR:C	1:A:111:ARG:N	13	89.94
(1,282)	1:A:107:ALA:C	1:A:108:LYS:N	1:A:108:LYS:CA	1:A:108:LYS:C	18	89.93
(1,347)	1:A:160:GLN:C	1:A:161:HIS:N	1:A:161:HIS:CA	1:A:161:HIS:C	5	89.92
(1,345)	1:A:160:GLN:N	1:A:160:GLN:CA	1:A:160:GLN:C	1:A:161:HIS:N	8	89.9
(1,216)	1:A:62:GLY:C	1:A:63:THR:N	1:A:63:THR:CA	1:A:63:THR:C	9	89.8
(1,179)	1:A:18:THR:C	1:A:19:ASN:N	1:A:19:ASN:CA	1:A:19:ASN:C	15	89.76
(1,304)	1:A:116:CYS:N	1:A:116:CYS:CA	1:A:116:CYS:C	1:A:117:LEU:N	6	89.68
(1,198)	1:A:50:ASP:C	1:A:51:ASN:N	1:A:51:ASN:CA	1:A:51:ASN:C	3	89.67
(1,254)	1:A:97:ILE:C	1:A:98:ALA:N	1:A:98:ALA:CA	1:A:98:ALA:C	12	89.62
(1,358)	1:A:164:LYS:C	1:A:165:CYS:N	1:A:165:CYS:CA	1:A:165:CYS:C	7	89.61
(1,279)	1:A:106:THR:C	1:A:107:ALA:N	1:A:107:ALA:CA	1:A:107:ALA:C	17	89.56
(1,330)	1:A:148:VAL:C	1:A:149:GLU:N	1:A:149:GLU:CA	1:A:149:GLU:C	5	89.5
(1,298)	1:A:114:LYS:N	1:A:114:LYS:CA	1:A:114:LYS:C	1:A:115:ILE:N	9	89.47
(1,310)	1:A:118:THR:N	1:A:118:THR:CA	1:A:118:THR:C	1:A:119:ASP:N	14	89.42
(1,325)	1:A:131:LYS:C	1:A:132:PHE:N	1:A:132:PHE:CA	1:A:132:PHE:C	9	89.35
(1,195)	1:A:24:ASP:N	1:A:24:ASP:CA	1:A:24:ASP:C	1:A:25:ARG:N	12	89.35
(1,359)	1:A:165:CYS:N	1:A:165:CYS:CA	1:A:165:CYS:C	1:A:166:ASN:N	3	89.29
(1,331)	1:A:148:VAL:C	1:A:149:GLU:N	1:A:149:GLU:CA	1:A:149:GLU:C	1	89.26
(1,199)	1:A:50:ASP:C	1:A:51:ASN:N	1:A:51:ASN:CA	1:A:51:ASN:C	15	89.24
(1,178)	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	1:A:19:ASN:N	19	89.24
(1,358)	1:A:164:LYS:C	1:A:165:CYS:N	1:A:165:CYS:CA	1:A:165:CYS:C	14	89.16
(1,280)	1:A:107:ALA:N	1:A:107:ALA:CA	1:A:107:ALA:C	1:A:108:LYS:N	18	89.08
(1,288)	1:A:109:MET:C	1:A:110:TYR:N	1:A:110:TYR:CA	1:A:110:TYR:C	8	88.9
(1,272)	1:A:104:GLY:C	1:A:105:LYS:N	1:A:105:LYS:CA	1:A:105:LYS:C	20	88.85
(1,282)	1:A:107:ALA:C	1:A:108:LYS:N	1:A:108:LYS:CA	1:A:108:LYS:C	2	88.81
(1,331)	1:A:148:VAL:C	1:A:149:GLU:N	1:A:149:GLU:CA	1:A:149:GLU:C	15	88.74
(1,286)	1:A:109:MET:N	1:A:109:MET:CA	1:A:109:MET:C	1:A:110:TYR:N	7	88.55
(1,310)	1:A:118:THR:N	1:A:118:THR:CA	1:A:118:THR:C	1:A:119:ASP:N	16	88.51
(1,297)	1:A:113:GLY:C	1:A:114:LYS:N	1:A:114:LYS:CA	1:A:114:LYS:C	1	88.49
(1,304)	1:A:116:CYS:N	1:A:116:CYS:CA	1:A:116:CYS:C	1:A:117:LEU:N	11	88.46
(1,198)	1:A:50:ASP:C	1:A:51:ASN:N	1:A:51:ASN:CA	1:A:51:ASN:C	14	88.44
(1,255)	1:A:98:ALA:N	1:A:98:ALA:CA	1:A:98:ALA:C	1:A:99:VAL:N	7	88.34
(1,303)	1:A:115:ILE:C	1:A:116:CYS:N	1:A:116:CYS:CA	1:A:116:CYS:C	9	88.17
(1,177)	1:A:17:LYS:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	9	88.17
(1,346)	1:A:160:GLN:C	1:A:161:HIS:N	1:A:161:HIS:CA	1:A:161:HIS:C	18	88.16
(1,163)	1:A:3:ASP:N	1:A:3:ASP:CA	1:A:3:ASP:C	1:A:4:GLU:N	3	88.16
(1,345)	1:A:160:GLN:N	1:A:160:GLN:CA	1:A:160:GLN:C	1:A:161:HIS:N	10	88.14
(1,265)	1:A:101:GLU:C	1:A:102:LEU:N	1:A:102:LEU:CA	1:A:102:LEU:C	15	88.13
(1,254)	1:A:97:ILE:C	1:A:98:ALA:N	1:A:98:ALA:CA	1:A:98:ALA:C	11	88.02
(1,285)	1:A:108:LYS:C	1:A:109:MET:N	1:A:109:MET:CA	1:A:109:MET:C	16	87.99
(1,199)	1:A:50:ASP:C	1:A:51:ASN:N	1:A:51:ASN:CA	1:A:51:ASN:C	10	87.83
(1,365)	1:A:167:GLN:N	1:A:167:GLN:CA	1:A:167:GLN:C	1:A:168:LEU:N	17	87.72
(1,265)	1:A:101:GLU:C	1:A:102:LEU:N	1:A:102:LEU:CA	1:A:102:LEU:C	12	87.7
(1,225)	1:A:74:ASP:C	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	18	87.64
(1,265)	1:A:101:GLU:C	1:A:102:LEU:N	1:A:102:LEU:CA	1:A:102:LEU:C	16	87.58
() ~~/ [1:A:19:ASN:C	7	87.56
(1,179)	1:A:18:THR:C	1:A:19:ASN:N	1:A:19:ASN:CA	1:A:19:A5N:U	(06.10



	d from previous pa		A		26 1 1	T 71 1
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,359)	1:A:165:CYS:N	1:A:165:CYS:CA	1:A:165:CYS:C	1:A:166:ASN:N	15	87.4
(1,255)	1:A:98:ALA:N	1:A:98:ALA:CA	1:A:98:ALA:C	1:A:99:VAL:N	1	87.36
(1,265)	1:A:101:GLU:C	1:A:102:LEU:N	1:A:102:LEU:CA	1:A:102:LEU:C	20	87.34
(1,205)	1:A:52:ASP:C	1:A:53:TRP:N	1:A:53:TRP:CA	1:A:53:TRP:C	15	87.15
(1,179)	1:A:18:THR:C	1:A:19:ASN:N	1:A:19:ASN:CA	1:A:19:ASN:C	6	87.1
(1,310)	1:A:118:THR:N	1:A:118:THR:CA	1:A:118:THR:C	1:A:119:ASP:N	9	87.09
(1,179)	1:A:18:THR:C	1:A:19:ASN:N	1:A:19:ASN:CA	1:A:19:ASN:C	9	87.04
(1,303)	1:A:115:ILE:C	1:A:116:CYS:N	1:A:116:CYS:CA	1:A:116:CYS:C	3	87.03
(1,347)	1:A:160:GLN:C	1:A:161:HIS:N	1:A:161:HIS:CA	1:A:161:HIS:C	10	86.97
(1,310)	1:A:118:THR:N	1:A:118:THR:CA	1:A:118:THR:C	1:A:119:ASP:N	1	86.97
(1,178)	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	1:A:19:ASN:N	13	86.95
(1,296)	1:A:113:GLY:C	1:A:114:LYS:N	1:A:114:LYS:CA	1:A:114:LYS:C	17	86.89
(1,174)	1:A:16:LEU:C	1:A:17:LYS:N	1:A:17:LYS:CA	1:A:17:LYS:C	13	86.78
(1,265)	1:A:101:GLU:C	1:A:102:LEU:N	1:A:102:LEU:CA	1:A:102:LEU:C	3	86.72
(1,182)	1:A:19:ASN:C	1:A:20:ALA:N	1:A:20:ALA:CA	1:A:20:ALA:C	1	86.71
(1,348)	1:A:161:HIS:N	1:A:161:HIS:CA	1:A:161:HIS:C	1:A:162:LYS:N	3	86.68
(1,279)	1:A:106:THR:C	1:A:107:ALA:N	1:A:107:ALA:CA	1:A:107:ALA:C	18	86.66
(1,181)	1:A:19:ASN:N	1:A:19:ASN:CA	1:A:19:ASN:C	1:A:20:ALA:N	8	86.64
(1,198)	1:A:50:ASP:C	1:A:51:ASN:N	1:A:51:ASN:CA	1:A:51:ASN:C	18	86.52
(1,361)	1:A:165:CYS:C	1:A:166:ASN:N	1:A:166:ASN:CA	1:A:166:ASN:C	13	86.36
(1,269)	1:A:103:ASP:N	1:A:103:ASP:CA	1:A:103:ASP:C	1:A:104:GLY:N	15	86.24
(1,221)	1:A:66:PHE:C	1:A:67:GLY:N	1:A:67:GLY:CA	1:A:67:GLY:C	5	86.24
(1,199)	1:A:50:ASP:C	1:A:51:ASN:N	1:A:51:ASN:CA	1:A:51:ASN:C	4	86.22
(1,270)	1:A:103:ASP:C	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	19	86.21
(1,216)	1:A:62:GLY:C	1:A:63:THR:N	1:A:63:THR:CA	1:A:63:THR:C	14	86.21
(1,361)	1:A:165:CYS:C	1:A:166:ASN:N	1:A:166:ASN:CA	1:A:166:ASN:C	14	86.15
(1,280)	1:A:107:ALA:N	1:A:107:ALA:CA	1:A:107:ALA:C	1:A:108:LYS:N	16	85.97
(1,304)	1:A:116:CYS:N	1:A:116:CYS:CA	1:A:116:CYS:C	1:A:117:LEU:N	20	85.94
(1,354)	1:A:163:GLU:N	1:A:163:GLU:CA	1:A:163:GLU:C	1:A:164:LYS:N	10	85.92
(1,292)	1:A:111:ARG:N	1:A:111:ARG:CA	1:A:111:ARG:C	1:A:112:GLY:N	10	85.9
(1,202)	1:A:51:ASN:C	1:A:52:ASP:N	1:A:52:ASP:CA	1:A:52:ASP:C	18	85.65
(1,216)	1:A:62:GLY:C	1:A:63:THR:N	1:A:63:THR:CA	1:A:63:THR:C	3	85.58
(1,256)	1:A:98:ALA:C	1:A:99:VAL:N	1:A:99:VAL:CA	1:A:99:VAL:C	19	85.55
(1,218)	1:A:65:TRP:C	1:A:66:PHE:N	1:A:66:PHE:CA	1:A:66:PHE:C	5	85.4
(1,181)	1:A:19:ASN:N	1:A:19:ASN:CA	1:A:19:ASN:C	1:A:20:ALA:N	17	85.37
(1,249)	1:A:96:GLU:N	1:A:96:GLU:CA	1:A:96:GLU:C	1:A:97:ILE:N	12	85.18
(1,303)	1:A:115:ILE:C	1:A:116:CYS:N	1:A:116:CYS:CA	1:A:116:CYS:C	4	85.15
(1,200)	1:A:51:ASN:N	1:A:51:ASN:CA	1:A:51:ASN:C	1:A:52:ASP:N	17	85.15
(1,310)	1:A:118:THR:N	1:A:118:THR:CA	1:A:118:THR:C	1:A:119:ASP:N	19	85.13
(1,205)	1:A:52:ASP:C	1:A:53:TRP:N	1:A:53:TRP:CA	1:A:53:TRP:C	19	85.11
(1,174)	1:A:16:LEU:C	1:A:17:LYS:N	1:A:17:LYS:CA	1:A:17:LYS:C	11	85.09
(1,283)	1:A:108:LYS:N	1:A:108:LYS:CA	1:A:108:LYS:C	1:A:109:MET:N	20	85.07
(1,303)	1:A:115:ILE:C	1:A:116:CYS:N	1:A:116:CYS:CA	1:A:116:CYS:C	12	85.06
(1,204)	1:A:52:ASP:C	1:A:53:TRP:N	1:A:53:TRP:CA	1:A:53:TRP:C	9	85.04
(1,303)	1:A:115:ILE:C	1:A:116:CYS:N	1:A:116:CYS:CA	1:A:116:CYS:C	19	84.98
(1,218)	1:A:65:TRP:C	1:A:66:PHE:N	1:A:66:PHE:CA	1:A:66:PHE:C	9	84.84
(1,205)	1:A:52:ASP:C	1:A:53:TRP:N	1:A:53:TRP:CA	1:A:53:TRP:C	3	84.75
(1,310)	1:A:118:THR:N	1:A:118:THR:CA	1:A:118:THR:C	1:A:119:ASP:N	12	84.67
(1,297)	1:A:113:GLY:C	1:A:114:LYS:N	1:A:114:LYS:CA	1:A:114:LYS:C	15	84.58
(1,348)	1:A:161:HIS:N	1:A:161:HIS:CA	1:A:161:HIS:C	1:A:162:LYS:N	4	84.54
(1,040)						



	ed from previous pe	*		.	25 11	T71 1
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (°)
(1,181)	1:A:19:ASN:N	1:A:19:ASN:CA	1:A:19:ASN:C	1:A:20:ALA:N	18	84.35
(1,285)	1:A:108:LYS:C	1:A:109:MET:N	1:A:109:MET:CA	1:A:109:MET:C	17	84.34
(1,256)	1:A:98:ALA:C	1:A:99:VAL:N	1:A:99:VAL:CA	1:A:99:VAL:C	13	84.33
(1,328)	1:A:140:LEU:C	1:A:141:GLY:N	1:A:141:GLY:CA	1:A:141:GLY:C	19	84.29
(1,254)	1:A:97:ILE:C	1:A:98:ALA:N	1:A:98:ALA:CA	1:A:98:ALA:C	13	84.28
(1,361)	1:A:165:CYS:C	1:A:166:ASN:N	1:A:166:ASN:CA	1:A:166:ASN:C	6	84.27
(1,358)	1:A:164:LYS:C	1:A:165:CYS:N	1:A:165:CYS:CA	1:A:165:CYS:C	6	84.21
(1,294)	1:A:112:GLY:C	1:A:113:GLY:N	1:A:113:GLY:CA	1:A:113:GLY:C	14	84.09
(1,343)	1:A:159:ILE:C	1:A:160:GLN:N	1:A:160:GLN:CA	1:A:160:GLN:C	10	83.97
(1,304)	1:A:116:CYS:N	1:A:116:CYS:CA	1:A:116:CYS:C	1:A:117:LEU:N	7	83.94
(1,282)	1:A:107:ALA:C	1:A:108:LYS:N	1:A:108:LYS:CA	1:A:108:LYS:C	17	83.82
(1,256)	1:A:98:ALA:C	1:A:99:VAL:N	1:A:99:VAL:CA	1:A:99:VAL:C	17	83.8
(1,298)	1:A:114:LYS:N	1:A:114:LYS:CA	1:A:114:LYS:C	1:A:115:ILE:N	3	83.68
(1,361)	1:A:165:CYS:C	1:A:166:ASN:N	1:A:166:ASN:CA	1:A:166:ASN:C	18	83.57
(1,181)	1:A:19:ASN:N	1:A:19:ASN:CA	1:A:19:ASN:C	1:A:20:ALA:N	10	83.56
(1,202)	1:A:51:ASN:C	1:A:52:ASP:N	1:A:52:ASP:CA	1:A:52:ASP:C	8	83.54
(1,281)	1:A:107:ALA:C	1:A:108:LYS:N	1:A:108:LYS:CA	1:A:108:LYS:C	10	83.53
(1,325)	1:A:131:LYS:C	1:A:132:PHE:N	1:A:132:PHE:CA	1:A:132:PHE:C	4	83.44
(1,270)	1:A:103:ASP:C	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	17	83.43
(1,256)	1:A:98:ALA:C	1:A:99:VAL:N	1:A:99:VAL:CA	1:A:99:VAL:C	15	83.41
(1,299)	1:A:114:LYS:N	1:A:114:LYS:CA	1:A:114:LYS:C	1:A:115:ILE:N	4	83.23
(1,298)	1:A:114:LYS:N	1:A:114:LYS:CA	1:A:114:LYS:C	1:A:115:ILE:N	15	83.14
(1,297)	1:A:113:GLY:C	1:A:114:LYS:N	1:A:114:LYS:CA	1:A:114:LYS:C	3	83.13
(1,365)	1:A:167:GLN:N	1:A:167:GLN:CA	1:A:167:GLN:C	1:A:168:LEU:N	3	83.03
(1,324)	1:A:131:LYS:C	1:A:132:PHE:N	1:A:132:PHE:CA	1:A:132:PHE:C	20	83.01
(1,321) $(1,272)$	1:A:104:GLY:C	1:A:105:LYS:N	1:A:105:LYS:CA	1:A:105:LYS:C	4	82.96
(1,256)	1:A:98:ALA:C	1:A:99:VAL:N	1:A:99:VAL:CA	1:A:99:VAL:C	5	82.78
(1,350)	1:A:161:HIS:C	1:A:162:LYS:N	1:A:162:LYS:CA	1:A:162:LYS:C	6	82.75
(1,254)	1:A:97:ILE:C	1:A:98:ALA:N	1:A:98:ALA:CA	1:A:98:ALA:C	7	82.72
(1,199)	1:A:50:ASP:C	1:A:51:ASN:N	1:A:51:ASN:CA	1:A:51:ASN:C	9	82.72
(1,361)	1:A:165:CYS:C	1:A:166:ASN:N	1:A:166:ASN:CA	1:A:166:ASN:C	8	82.38
(1,301) $(1,317)$	1:A:120:HIS:N	1:A:120:HIS:CA	1:A:120:HIS:C	1:A:121:PHE:N	11	82.27
(1,317) $(1,186)$	1:A:20:ALA:C	1:A:21:GLY:N	1:A:21:GLY:CA	1:A:21:GLY:C	14	82.27
(1,340)	1:A:158:VAL:C	1:A:159:ILE:N	1:A:159:ILE:CA	1:A:159:ILE:C	17	82.2
(1,347)	1:A:160:GLN:C	1:A:161:HIS:N	1:A:161:HIS:CA	1:A:161:HIS:C	4	82.14
(1,347) $(1,255)$	1:A:98:ALA:N	1:A:98:ALA:CA	1:A:98:ALA:C	1:A:99:VAL:N	13	82.0
(1,233) $(1,348)$	1:A:161:HIS:N	1:A:161:HIS:CA	1:A:161:HIS:C	1:A:162:LYS:N	13	81.96
(1,345) $(1,345)$	1:A:160:GLN:N	1:A:160:GLN:CA	1:A:160:GLN:C	1:A:161:HIS:N	7	81.69
(1,343) $(1,278)$	1:A:100:GLN:N 1:A:106:THR:C	1:A:100:GLN:CA 1:A:107:ALA:N	1:A:100:GLN:C 1:A:107:ALA:CA	1:A:107:ALA:C	6	81.65
(1,278) $(1,221)$	1:A:66:PHE:C	1:A:67:GLY:N	1:A:107:ALA:CA 1:A:67:GLY:CA	1:A:107:ALA:C 1:A:67:GLY:C	9	81.62
	1:A:20:ALA:N	1:A:07:GLY:N 1:A:20:ALA:CA	1:A:07:GLY:CA 1:A:20:ALA:C	1:A:07:GLY:C 1:A:21:GLY:N		81.62
(1,184)					14 18	
(1,287)	1:A:109:MET:C	1:A:110:TYR:N	1:A:110:TYR:CA	1:A:110:TYR:C		81.54
(1,298)	1:A:114:LYS:N	1:A:114:LYS:CA	1:A:114:LYS:C	1:A:115:ILE:N	20	81.5
(1,293)	1:A:111:ARG:C	1:A:112:GLY:N	1:A:112:GLY:CA	1:A:112:GLY:C	2	81.5
(1,304)	1:A:116:CYS:N	1:A:116:CYS:CA	1:A:116:CYS:C	1:A:117:LEU:N	14	81.47
(1,249)	1:A:96:GLU:N	1:A:96:GLU:CA	1:A:96:GLU:C	1:A:97:ILE:N	20	81.47
(1,186)	1:A:20:ALA:C	1:A:21:GLY:N	1:A:21:GLY:CA	1:A:21:GLY:C	15	81.47
(1,358)	1:A:164:LYS:C	1:A:165:CYS:N	1:A:165:CYS:CA	1:A:165:CYS:C	4	81.43
(1,310)	1:A:118:THR:N	1:A:118:THR:CA	1:A:118:THR:C	1:A:119:ASP:N	20	81.2
(1,361)	1:A:165:CYS:C	1:A:166:ASN:N	1:A:166:ASN:CA	1:A:166:ASN:C	3	81.13
(1,284)	1:A:108:LYS:C	1:A:109:MET:N	1:A:109:MET:CA	1:A:109:MET:C	8	81.13



	ed from previous po					
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (\circ)
(1,262)	1:A:100:PRO:C	1:A:101:GLU:N	1:A:101:GLU:CA	1:A:101:GLU:C	4	81.05
(1,269)	1:A:103:ASP:N	1:A:103:ASP:CA	1:A:103:ASP:C	1:A:104:GLY:N	18	81.0
(1,331)	1:A:148:VAL:C	1:A:149:GLU:N	1:A:149:GLU:CA	1:A:149:GLU:C	14	80.98
(1,162)	1:A:2:ALA:C	1:A:3:ASP:N	1:A:3:ASP:CA	1:A:3:ASP:C	12	80.96
(1,317)	1:A:120:HIS:N	1:A:120:HIS:CA	1:A:120:HIS:C	1:A:121:PHE:N	16	80.93
(1,255)	1:A:98:ALA:N	1:A:98:ALA:CA	1:A:98:ALA:C	1:A:99:VAL:N	4	80.9
(1,364)	1:A:166:ASN:C	1:A:167:GLN:N	1:A:167:GLN:CA	1:A:167:GLN:C	18	80.89
(1,182)	1:A:19:ASN:C	1:A:20:ALA:N	1:A:20:ALA:CA	1:A:20:ALA:C	14	80.83
(1,325)	1:A:131:LYS:C	1:A:132:PHE:N	1:A:132:PHE:CA	1:A:132:PHE:C	2	80.8
(1,310)	1:A:118:THR:N	1:A:118:THR:CA	1:A:118:THR:C	1:A:119:ASP:N	10	80.68
(1,204)	1:A:52:ASP:C	1:A:53:TRP:N	1:A:53:TRP:CA	1:A:53:TRP:C	2	80.5
(1,184)	1:A:20:ALA:N	1:A:20:ALA:CA	1:A:20:ALA:C	1:A:21:GLY:N	5	80.5
(1,284)	1:A:108:LYS:C	1:A:109:MET:N	1:A:109:MET:CA	1:A:109:MET:C	15	80.49
(1,303)	1:A:115:ILE:C	1:A:116:CYS:N	1:A:116:CYS:CA	1:A:116:CYS:C	5	80.47
(1,203)	1:A:52:ASP:N	1:A:52:ASP:CA	1:A:52:ASP:C	1:A:53:TRP:N	20	80.4
(1,186)	1:A:20:ALA:C	1:A:21:GLY:N	1:A:21:GLY:CA	1:A:21:GLY:C	3	80.38
(1,198)	1:A:50:ASP:C	1:A:51:ASN:N	1:A:51:ASN:CA	1:A:51:ASN:C	16	80.3
(1,302)	1:A:115:ILE:C	1:A:116:CYS:N	1:A:116:CYS:CA	1:A:116:CYS:C	14	80.29
(1,256)	1:A:98:ALA:C	1:A:99:VAL:N	1:A:99:VAL:CA	1:A:99:VAL:C	6	80.28
(1,179)	1:A:18:THR:C	1:A:19:ASN:N	1:A:19:ASN:CA	1:A:19:ASN:C	19	80.24
(1,210)	1:A:60:LYS:N	1:A:60:LYS:CA	1:A:60:LYS:C	1:A:61:GLU:N	13	80.2
(1,304)	1:A:116:CYS:N	1:A:116:CYS:CA	1:A:116:CYS:C	1:A:117:LEU:N	8	80.15
(1,200)	1:A:51:ASN:N	1:A:51:ASN:CA	1:A:51:ASN:C	1:A:52:ASP:N	2	80.1
(1,269)	1:A:103:ASP:N	1:A:103:ASP:CA	1:A:103:ASP:C	1:A:104:GLY:N	6	80.09
(1,163)	1:A:3:ASP:N	1:A:3:ASP:CA	1:A:3:ASP:C	1:A:4:GLU:N	19	80.09
(1,205)	1:A:52:ASP:C	1:A:53:TRP:N	1:A:53:TRP:CA	1:A:53:TRP:C	1	80.06
(1,330)	1:A:148:VAL:C	1:A:149:GLU:N	1:A:149:GLU:CA	1:A:149:GLU:C	2	80.01
(1,346)	1:A:160:GLN:C	1:A:161:HIS:N	1:A:161:HIS:CA	1:A:161:HIS:C	7	80.0
(1,305)	1:A:116:CYS:C	1:A:117:LEU:N	1:A:117:LEU:CA	1:A:117:LEU:C	15	79.97
(1,297)	1:A:113:GLY:C	1:A:114:LYS:N	1:A:114:LYS:CA	1:A:114:LYS:C	13	79.94
(1,303)	1:A:115:ILE:C	1:A:116:CYS:N	1:A:116:CYS:CA	1:A:116:CYS:C	18	79.9
(1,297)	1:A:113:GLY:C	1:A:114:LYS:N	1:A:114:LYS:CA	1:A:114:LYS:C	6	79.84
(1,254)	1:A:97:ILE:C	1:A:98:ALA:N	1:A:98:ALA:CA	1:A:98:ALA:C	17	79.81
(1,179)	1:A:18:THR:C	1:A:19:ASN:N	1:A:19:ASN:CA	1:A:19:ASN:C	5	79.62
(1,255)	1:A:98:ALA:N	1:A:98:ALA:CA	1:A:98:ALA:C	1:A:99:VAL:N	8	79.53
(1,163)	1:A:3:ASP:N	1:A:3:ASP:CA	1:A:3:ASP:C	1:A:4:GLU:N	20	79.5
(1,317)	1:A:120:HIS:N	1:A:120:HIS:CA	1:A:120:HIS:C	1:A:121:PHE:N	17	79.46
(1,302)	1:A:115:ILE:C	1:A:116:CYS:N	1:A:116:CYS:CA	1:A:116:CYS:C	15	79.46
(1,256)	1:A:98:ALA:C	1:A:99:VAL:N	1:A:99:VAL:CA	1:A:99:VAL:C	2	79.43
(1,210)	1:A:60:LYS:N	1:A:60:LYS:CA	1:A:60:LYS:C	1:A:61:GLU:N	19	79.43
(1,254)	1:A:97:ILE:C	1:A:98:ALA:N	1:A:98:ALA:CA	1:A:98:ALA:C	5	79.42
(1,180)	1:A:18:THR:C	1:A:19:ASN:N	1:A:19:ASN:CA	1:A:19:ASN:C	13	79.3
(1,364)	1:A:166:ASN:C	1:A:167:GLN:N	1:A:167:GLN:CA	1:A:167:GLN:C	2	79.27
(1,296)	1:A:113:GLY:C	1:A:114:LYS:N	1:A:114:LYS:CA	1:A:114:LYS:C	12	79.24
(1,204)	1:A:52:ASP:C	1:A:53:TRP:N	1:A:53:TRP:CA	1:A:53:TRP:C	18	79.24
(1,328)	1:A:140:LEU:C	1:A:141:GLY:N	1:A:141:GLY:CA	1:A:141:GLY:C	16	79.23
(1,249)	1:A:96:GLU:N	1:A:96:GLU:CA	1:A:96:GLU:C	1:A:97:ILE:N	13	79.17
(1,357)	1:A:164:LYS:C	1:A:165:CYS:N	1:A:165:CYS:CA	1:A:165:CYS:C	12	79.15
(1,178)	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	1:A:19:ASN:N	4	79.14
(1,254)	1:A:97:ILE:C	1:A:98:ALA:N	1:A:98:ALA:CA	1:A:98:ALA:C	15	79.11
(1,317)	1:A:120:HIS:N	1:A:120:HIS:CA	1:A:120:HIS:C	1:A:121:PHE:N	4	79.07
					<u> </u>	od on nort nago



	ed from previous po				3.5 1.1	T70 1 .0 ()
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	$\textbf{Violation} \ (\circ)$
(1,256)	1:A:98:ALA:C	1:A:99:VAL:N	1:A:99:VAL:CA	1:A:99:VAL:C	7	79.04
(1,176)	1:A:17:LYS:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	8	79.02
(1,362)	1:A:166:ASN:N	1:A:166:ASN:CA	1:A:166:ASN:C	1:A:167:GLN:N	3	78.97
(1,204)	1:A:52:ASP:C	1:A:53:TRP:N	1:A:53:TRP:CA	1:A:53:TRP:C	12	78.97
(1,265)	1:A:101:GLU:C	1:A:102:LEU:N	1:A:102:LEU:CA	1:A:102:LEU:C	7	78.91
(1,247)	1:A:95:PRO:C	1:A:96:GLU:N	1:A:96:GLU:CA	1:A:96:GLU:C	6	78.89
(1,174)	1:A:16:LEU:C	1:A:17:LYS:N	1:A:17:LYS:CA	1:A:17:LYS:C	1	78.77
(1,204)	1:A:52:ASP:C	1:A:53:TRP:N	1:A:53:TRP:CA	1:A:53:TRP:C	8	78.72
(1,225)	1:A:74:ASP:C	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	20	78.57
(1,328)	1:A:140:LEU:C	1:A:141:GLY:N	1:A:141:GLY:CA	1:A:141:GLY:C	15	78.54
(1,256)	1:A:98:ALA:C	1:A:99:VAL:N	1:A:99:VAL:CA	1:A:99:VAL:C	16	78.52
(1,210)	1:A:60:LYS:N	1:A:60:LYS:CA	1:A:60:LYS:C	1:A:61:GLU:N	11	78.5
(1,178)	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	1:A:19:ASN:N	11	78.41
(1,264)	1:A:101:GLU:C	1:A:102:LEU:N	1:A:102:LEU:CA	1:A:102:LEU:C	13	78.38
(1,174)	1:A:16:LEU:C	1:A:17:LYS:N	1:A:17:LYS:CA	1:A:17:LYS:C	10	78.37
(1,317)	1:A:120:HIS:N	1:A:120:HIS:CA	1:A:120:HIS:C	1:A:121:PHE:N	5	78.33
(1,325)	1:A:131:LYS:C	1:A:132:PHE:N	1:A:132:PHE:CA	1:A:132:PHE:C	10	78.32
(1,304)	1:A:116:CYS:N	1:A:116:CYS:CA	1:A:116:CYS:C	1:A:117:LEU:N	2	78.29
(1,299)	1:A:114:LYS:N	1:A:114:LYS:CA	1:A:114:LYS:C	1:A:115:ILE:N	18	78.27
(1,362)	1:A:166:ASN:N	1:A:166:ASN:CA	1:A:166:ASN:C	1:A:167:GLN:N	11	78.13
(1,249)	1:A:96:GLU:N	1:A:96:GLU:CA	1:A:96:GLU:C	1:A:97:ILE:N	9	78.13
(1,350)	1:A:161:HIS:C	1:A:162:LYS:N	1:A:162:LYS:CA	1:A:162:LYS:C	14	78.12
(1,275)	1:A:105:LYS:C	1:A:106:THR:N	1:A:106:THR:CA	1:A:106:THR:C	13	78.12
(1,163)	1:A:3:ASP:N	1:A:3:ASP:CA	1:A:3:ASP:C	1:A:4:GLU:N	12	78.04
(1,304)	1:A:116:CYS:N	1:A:116:CYS:CA	1:A:116:CYS:C	1:A:117:LEU:N	3	78.02
(1,249)	1:A:96:GLU:N	1:A:96:GLU:CA	1:A:96:GLU:C	1:A:97:ILE:N	10	78.01
(1,198)	1:A:50:ASP:C	1:A:51:ASN:N	1:A:51:ASN:CA	1:A:51:ASN:C	11	77.99
(1,254)	1:A:97:ILE:C	1:A:98:ALA:N	1:A:98:ALA:CA	1:A:98:ALA:C	19	77.94
(1,331)	1:A:148:VAL:C	1:A:149:GLU:N	1:A:149:GLU:CA	1:A:149:GLU:C	20	77.93
(1,198)	1:A:50:ASP:C	1:A:51:ASN:N	1:A:51:ASN:CA	1:A:51:ASN:C	2	77.9
(1,254)	1:A:97:ILE:C	1:A:98:ALA:N	1:A:98:ALA:CA	1:A:98:ALA:C	10	77.85
(1,256)	1:A:98:ALA:C	1:A:99:VAL:N	1:A:99:VAL:CA	1:A:99:VAL:C	10	77.83
(1,182)	1:A:19:ASN:C	1:A:20:ALA:N	1:A:20:ALA:CA	1:A:20:ALA:C	3	77.68
(1,163)	1:A:3:ASP:N	1:A:3:ASP:CA	1:A:3:ASP:C	1:A:4:GLU:N	4	77.68
(1,249)	1:A:96:GLU:N	1:A:96:GLU:CA	1:A:96:GLU:C	1:A:97:ILE:N	11	77.67
(1,173)	1:A:16:LEU:C	1:A:17:LYS:N	1:A:17:LYS:CA	1:A:17:LYS:C	3	77.64
(1,181)	1:A:19:ASN:N	1:A:19:ASN:CA	1:A:19:ASN:C	1:A:20:ALA:N	5	77.63
(1,254)	1:A:97:ILE:C	1:A:98:ALA:N	1:A:98:ALA:CA	1:A:98:ALA:C	4	77.55
(1,276)	1:A:105:LYS:C	1:A:106:THR:N	1:A:106:THR:CA	1:A:106:THR:C	15	77.5
(1,345)	1:A:160:GLN:N	1:A:160:GLN:CA	1:A:160:GLN:C	1:A:161:HIS:N	12	77.45
(1,177)	1:A:17:LYS:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	7	77.39
(1,360)	1:A:165:CYS:C	1:A:166:ASN:N	1:A:166:ASN:CA	1:A:166:ASN:C	15	77.15
(1,304)	1:A:116:CYS:N	1:A:116:CYS:CA	1:A:116:CYS:C	1:A:117:LEU:N	9	77.08
(1,310)	1:A:118:THR:N	1:A:118:THR:CA	1:A:118:THR:C	1:A:119:ASP:N	5	77.07
(1,198)	1:A:50:ASP:C	1:A:51:ASN:N	1:A:51:ASN:CA	1:A:51:ASN:C	19	77.07
(1,162)	1:A:2:ALA:C	1:A:3:ASP:N	1:A:3:ASP:CA	1:A:3:ASP:C	10	77.01
` '	1:A:165:CYS:N	1:A:165:CYS:CA	1:A:165:CYS:C	1:A:166:ASN:N	4	76.98
` ′	1:A:160:GLN:N	1:A:160:GLN:CA	1:A:160:GLN:C	1:A:161:HIS:N	6	76.87
(1,186)	1:A:20:ALA:C	1:A:21:GLY:N	1:A:21:GLY:CA	1:A:21:GLY:C	18	76.82
` '	1:A:105:LYS:C	1:A:106:THR:N	1:A:106:THR:CA	1:A:106:THR:C	19	76.73
(1,347)	1:A:160:GLN:C	1:A:161:HIS:N	1:A:161:HIS:CA	1:A:161:HIS:C	8	76.72
(1,310) $(1,198)$ $(1,162)$ $(1,359)$ $(1,345)$ $(1,186)$ $(1,276)$	1:A:118:THR:N 1:A:50:ASP:C 1:A:2:ALA:C 1:A:165:CYS:N 1:A:160:GLN:N 1:A:20:ALA:C 1:A:105:LYS:C	1:A:118:THR:CA 1:A:51:ASN:N 1:A:3:ASP:N 1:A:165:CYS:CA 1:A:160:GLN:CA 1:A:21:GLY:N 1:A:106:THR:N	1:A:118:THR:C 1:A:51:ASN:CA 1:A:3:ASP:CA 1:A:165:CYS:C 1:A:160:GLN:C 1:A:21:GLY:CA 1:A:106:THR:CA	1:A:119:ASP:N 1:A:51:ASN:C 1:A:3:ASP:C 1:A:166:ASN:N 1:A:161:HIS:N 1:A:21:GLY:C 1:A:106:THR:C	5 19 10 4 6 18	77.0 77.0 77.0 76.9 76.8 76.8



	ed from previous po		A		36 11	T 71 1 11 ()
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,283)	1:A:108:LYS:N	1:A:108:LYS:CA	1:A:108:LYS:C	1:A:109:MET:N	6	76.69
(1,184)	1:A:20:ALA:N	1:A:20:ALA:CA	1:A:20:ALA:C	1:A:21:GLY:N	12	76.63
(1,181)	1:A:19:ASN:N	1:A:19:ASN:CA	1:A:19:ASN:C	1:A:20:ALA:N	15	76.59
(1,256)	1:A:98:ALA:C	1:A:99:VAL:N	1:A:99:VAL:CA	1:A:99:VAL:C	14	76.56
(1,303)	1:A:115:ILE:C	1:A:116:CYS:N	1:A:116:CYS:CA	1:A:116:CYS:C	10	76.42
(1,269)	1:A:103:ASP:N	1:A:103:ASP:CA	1:A:103:ASP:C	1:A:104:GLY:N	1	76.33
(1,365)	1:A:167:GLN:N	1:A:167:GLN:CA	1:A:167:GLN:C	1:A:168:LEU:N	12	76.31
(1,284)	1:A:108:LYS:C	1:A:109:MET:N	1:A:109:MET:CA	1:A:109:MET:C	6	76.27
(1,178)	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	1:A:19:ASN:N	20	76.22
(1,304)	1:A:116:CYS:N	1:A:116:CYS:CA	1:A:116:CYS:C	1:A:117:LEU:N	12	76.19
(1,255)	1:A:98:ALA:N	1:A:98:ALA:CA	1:A:98:ALA:C	1:A:99:VAL:N	10	76.12
(1,256)	1:A:98:ALA:C	1:A:99:VAL:N	1:A:99:VAL:CA	1:A:99:VAL:C	3	76.09
(1,275)	1:A:105:LYS:C	1:A:106:THR:N	1:A:106:THR:CA	1:A:106:THR:C	5	76.07
(1,255)	1:A:98:ALA:N	1:A:98:ALA:CA	1:A:98:ALA:C	1:A:99:VAL:N	15	76.07
(1,205)	1:A:52:ASP:C	1:A:53:TRP:N	1:A:53:TRP:CA	1:A:53:TRP:C	14	76.06
(1,265)	1:A:101:GLU:C	1:A:102:LEU:N	1:A:102:LEU:CA	1:A:102:LEU:C	5	76.01
(1,184)	1:A:20:ALA:N	1:A:20:ALA:CA	1:A:20:ALA:C	1:A:21:GLY:N	10	76.01
(1,161)	1:A:2:ALA:C	1:A:3:ASP:N	1:A:3:ASP:CA	1:A:3:ASP:C	4	75.92
(1,292)	1:A:111:ARG:N	1:A:111:ARG:CA	1:A:111:ARG:C	1:A:112:GLY:N	19	75.81
(1,288)	1:A:109:MET:C	1:A:110:TYR:N	1:A:110:TYR:CA	1:A:110:TYR:C	16	75.78
(1,179)	1:A:18:THR:C	1:A:19:ASN:N	1:A:19:ASN:CA	1:A:19:ASN:C	14	75.77
(1,345)	1:A:160:GLN:N	1:A:160:GLN:CA	1:A:160:GLN:C	1:A:161:HIS:N	9	75.69
(1,194)	1:A:23:ARG:C	1:A:24:ASP:N	1:A:24:ASP:CA	1:A:24:ASP:C	6	75.67
(1,317)	1:A:120:HIS:N	1:A:120:HIS:CA	1:A:120:HIS:C	1:A:121:PHE:N	12	75.65
(1,297)	1:A:113:GLY:C	1:A:114:LYS:N	1:A:114:LYS:CA	1:A:114:LYS:C	5	75.64
(1,254)	1:A:97:ILE:C	1:A:98:ALA:N	1:A:98:ALA:CA	1:A:98:ALA:C	16	75.62
(1,305)	1:A:116:CYS:C	1:A:117:LEU:N	1:A:117:LEU:CA	1:A:117:LEU:C	19	75.61
(1,204)	1:A:52:ASP:C	1:A:53:TRP:N	1:A:53:TRP:CA	1:A:53:TRP:C	16	75.61
(1,255)	1:A:98:ALA:N	1:A:98:ALA:CA	1:A:98:ALA:C	1:A:99:VAL:N	16	75.47
(1,179)	1:A:18:THR:C	1:A:19:ASN:N	1:A:19:ASN:CA	1:A:19:ASN:C	17	75.43
(1,193)	1:A:23:ARG:C	1:A:24:ASP:N	1:A:24:ASP:CA	1:A:24:ASP:C	18	75.38
(1,198)	1:A:50:ASP:C	1:A:51:ASN:N	1:A:51:ASN:CA	1:A:51:ASN:C	20	75.24
(1,331)	1:A:148:VAL:C	1:A:149:GLU:N	1:A:149:GLU:CA	1:A:149:GLU:C	6	75.18
(1,310)	1:A:118:THR:N	1:A:118:THR:CA	1:A:118:THR:C	1:A:119:ASP:N	4	75.18
(1,343)	1:A:159:ILE:C		1:A:160:GLN:CA	1:A:160:GLN:C	19	75.14
(1,345)	1:A:160:GLN:N	1:A:160:GLN:CA	1:A:160:GLN:C	1:A:161:HIS:N	3	75.12
(1,304)	1:A:116:CYS:N	1:A:116:CYS:CA	1:A:116:CYS:C	1:A:117:LEU:N	4	75.11
(1,304) $(1,210)$	1:A:60:LYS:N	1:A:60:LYS:CA	1:A:60:LYS:C	1:A:61:GLU:N	15	75.11
(1,270) $(1,277)$	1:A:106:THR:N	1:A:106:THR:CA	1:A:106:THR:C	1:A:107:ALA:N	9	75.06
(1,217) $(1,290)$	1:A:110:TYR:C	1:A:111:ARG:N	1:A:111:ARG:CA	1:A:111:ARG:C	13	75.01
(1,230) $(1,317)$	1:A:120:HIS:N	1:A:120:HIS:CA	1:A:120:HIS:C	1:A:121:PHE:N	3	74.99
(1,317) $(1,256)$	1:A:98:ALA:C	1:A:99:VAL:N	1:A:99:VAL:CA	1:A:99:VAL:C	4	74.98
(1,256) $(1,256)$	1:A:98:ALA:C	1:A:99:VAL:N	1:A:99:VAL:CA	1:A:99:VAL:C	1	74.96
(1,250) $(1,255)$	1:A:98:ALA:N	1:A:98:ALA:CA	1:A:98:ALA:C	1:A:99:VAL:N	14	74.9
(1,293) $(1,198)$	1:A:50:ASP:C	1:A:51:ASN:N	1:A:51:ASN:CA	1:A:51:ASN:C	14	74.82
(1,198) $(1,174)$	1:A:16:LEU:C	1:A:31:ASN:N 1:A:17:LYS:N	1:A:17:LYS:CA	1:A:17:LYS:C	4	74.76
(1,174) $(1,194)$	1:A:10:LEU:C 1:A:23:ARG:C	1:A:17:L15:N 1:A:24:ASP:N	1:A:24:ASP:CA	1:A:17:L15:C 1:A:24:ASP:C	3	74.75
(1,194) $(1,328)$	1:A:140:LEU:C	1:A:24:ASF:N 1:A:141:GLY:N	1:A:24:ASF:CA 1:A:141:GLY:CA	1:A:24:ASF:C 1:A:141:GLY:C	12	74.66
(1,328) $(1,348)$	1:A:140:LEO:C 1:A:161:HIS:N	1:A:141:GL1:N 1:A:161:HIS:CA	1:A:141:GL1:CA 1:A:161:HIS:C	1:A:141:GL1:C 1:A:162:LYS:N	6	74.62
	1:A:101:HIS:N 1:A:97:ILE:C	1:A:101:HIS:CA 1:A:98:ALA:N	1:A:101:HIS:C 1:A:98:ALA:CA	1:A:162:LYS:N 1:A:98:ALA:C	2	74.62
(1,253)					17	
(1,361)	1:A:165:CYS:C	1:A:166:ASN:N	1:A:166:ASN:CA	1:A:166:ASN:C		74.58



	ed from previous po		.		36 11	T70 1 .0 ()
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (\circ)
(1,256)	1:A:98:ALA:C	1:A:99:VAL:N	1:A:99:VAL:CA	1:A:99:VAL:C	20	74.57
(1,298)	1:A:114:LYS:N	1:A:114:LYS:CA	1:A:114:LYS:C	1:A:115:ILE:N	19	74.49
(1,302)	1:A:115:ILE:C	1:A:116:CYS:N	1:A:116:CYS:CA	1:A:116:CYS:C	17	74.44
(1,289)	1:A:110:TYR:N	1:A:110:TYR:CA	1:A:110:TYR:C	1:A:111:ARG:N	6	74.35
(1,174)	1:A:16:LEU:C	1:A:17:LYS:N	1:A:17:LYS:CA	1:A:17:LYS:C	15	74.3
(1,255)	1:A:98:ALA:N	1:A:98:ALA:CA	1:A:98:ALA:C	1:A:99:VAL:N	19	74.25
(1,299)	1:A:114:LYS:N	1:A:114:LYS:CA	1:A:114:LYS:C	1:A:115:ILE:N	8	74.19
(1,177)	1:A:17:LYS:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	20	74.18
(1,276)	1:A:105:LYS:C	1:A:106:THR:N	1:A:106:THR:CA	1:A:106:THR:C	4	74.15
(1,328)	1:A:140:LEU:C	1:A:141:GLY:N	1:A:141:GLY:CA	1:A:141:GLY:C	5	74.13
(1,205)	1:A:52:ASP:C	1:A:53:TRP:N	1:A:53:TRP:CA	1:A:53:TRP:C	11	73.87
(1,303)	1:A:115:ILE:C	1:A:116:CYS:N	1:A:116:CYS:CA	1:A:116:CYS:C	1	73.86
(1,354)	1:A:163:GLU:N	1:A:163:GLU:CA	1:A:163:GLU:C	1:A:164:LYS:N	3	73.8
(1,180)	1:A:18:THR:C	1:A:19:ASN:N	1:A:19:ASN:CA	1:A:19:ASN:C	12	73.76
(1,253)	1:A:97:ILE:C	1:A:98:ALA:N	1:A:98:ALA:CA	1:A:98:ALA:C	8	73.71
(1,178)	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	1:A:19:ASN:N	18	73.6
(1,294)	1:A:112:GLY:C	1:A:113:GLY:N	1:A:113:GLY:CA	1:A:113:GLY:C	17	73.48
(1,269)	1:A:103:ASP:N	1:A:103:ASP:CA	1:A:103:ASP:C	1:A:104:GLY:N	20	73.48
(1,285)	1:A:108:LYS:C	1:A:109:MET:N	1:A:109:MET:CA	1:A:109:MET:C	18	73.4
(1,279)	1:A:106:THR:C	1:A:107:ALA:N	1:A:107:ALA:CA	1:A:107:ALA:C	3	73.39
(1,198)	1:A:50:ASP:C	1:A:51:ASN:N	1:A:51:ASN:CA	1:A:51:ASN:C	5	73.39
(1,256)	1:A:98:ALA:C	1:A:99:VAL:N	1:A:99:VAL:CA	1:A:99:VAL:C	8	73.32
(1,253)	1:A:97:ILE:C	1:A:98:ALA:N	1:A:98:ALA:CA	1:A:98:ALA:C	20	73.27
(1,184)	1:A:20:ALA:N	1:A:20:ALA:CA	1:A:20:ALA:C	1:A:21:GLY:N	11	73.08
(1,303)	1:A:115:ILE:C	1:A:116:CYS:N	1:A:116:CYS:CA	1:A:116:CYS:C	7	72.91
(1,272)	1:A:104:GLY:C	1:A:105:LYS:N	1:A:105:LYS:CA	1:A:105:LYS:C	19	72.88
(1,345)	1:A:160:GLN:N	1:A:160:GLN:CA	1:A:160:GLN:C	1:A:161:HIS:N	18	72.83
(1,249)	1:A:96:GLU:N	1:A:96:GLU:CA	1:A:96:GLU:C	1:A:97:ILE:N	16	72.82
(1,198)	1:A:50:ASP:C	1:A:51:ASN:N	1:A:51:ASN:CA	1:A:51:ASN:C	6	72.81
(1,194)	1:A:23:ARG:C	1:A:24:ASP:N	1:A:24:ASP:CA	1:A:24:ASP:C	20	72.76
(1,317)	1:A:120:HIS:N	1:A:120:HIS:CA	1:A:120:HIS:C	1:A:121:PHE:N	6	72.74
(1,198)	1:A:50:ASP:C	1:A:51:ASN:N	1:A:51:ASN:CA	1:A:51:ASN:C	7	72.66
(1,289)	1:A:110:TYR:N	1:A:110:TYR:CA	1:A:110:TYR:C	1:A:111:ARG:N	11	72.59
(1,180)	1:A:18:THR:C	1:A:19:ASN:N	1:A:19:ASN:CA	1:A:19:ASN:C	4	72.51
(1,204)		1:A:53:TRP:N	1:A:53:TRP:CA	1:A:53:TRP:C	5	72.28
(1,210)	1:A:60:LYS:N	1:A:60:LYS:CA	1:A:60:LYS:C	1:A:61:GLU:N	2	72.27
(1,299)	1:A:114:LYS:N	1:A:114:LYS:CA	1:A:114:LYS:C	1:A:115:ILE:N	17	72.24
(1,194)	1:A:23:ARG:C	1:A:24:ASP:N	1:A:24:ASP:CA	1:A:24:ASP:C	15	72.24
(1,272)	1:A:104:GLY:C	1:A:105:LYS:N	1:A:105:LYS:CA	1:A:105:LYS:C	7	72.22
(1,199)	1:A:50:ASP:C	1:A:51:ASN:N	1:A:51:ASN:CA	1:A:51:ASN:C	17	72.13
(1,314)	1:A:119:ASP:N	1:A:119:ASP:CA	1:A:119:ASP:C	1:A:120:HIS:N	6	72.12
(1,314) $(1,194)$	1:A:23:ARG:C	1:A:24:ASP:N	1:A:24:ASP:CA	1:A:24:ASP:C	19	72.12
(1,154) $(1,254)$	1:A:97:ILE:C	1:A:98:ALA:N	1:A:98:ALA:CA	1:A:98:ALA:C	14	72.04
(1,328)	1:A:140:LEU:C	1:A:141:GLY:N	1:A:141:GLY:CA	1:A:141:GLY:C	18	72.02
(1,320) $(1,254)$	1:A:97:ILE:C	1:A:98:ALA:N	1:A:98:ALA:CA	1:A:98:ALA:C	3	71.92
(1,254) $(1,353)$	1:A:162:LYS:C	1:A:163:GLU:N	1:A:163:GLU:CA	1:A:163:GLU:C	18	71.92
(1,359) $(1,359)$	1:A:165:CYS:N	1:A:165:CYS:CA	1:A:165:CYS:C	1:A:166:ASN:N	18	71.79
(1,339) $(1,249)$	1:A:96:GLU:N	1:A:96:GLU:CA	1:A:96:GLU:C	1:A:97:ILE:N	1	71.79
(1,249) $(1,276)$	1:A:105:LYS:C	1:A:106:THR:N	1:A:106:THR:CA	1:A:106:THR:C	17	71.79
(1,270) $(1,293)$	1:A:111:ARG:C	1:A:112:GLY:N	1:A:112:GLY:CA	1:A:112:GLY:C	17	71.7
(1,293) $(1,345)$	1:A:111:ARG:C 1:A:160:GLN:N	1:A:112:GL1:N 1:A:160:GLN:CA	1:A:112:GL1:CA 1:A:160:GLN:C	1:A:112:GL1:C 1:A:161:HIS:N	16	71.69
(1,340)	1.A:100:GLN:IN	1.A:100:GLN:CA	1:A:100:GLN:C	1:A:101:III5:IN		(1.09



Key	$rac{ed\ from\ previous\ po}{\mathbf{Atom-1}}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,181)	1:A:19:ASN:N	1:A:19:ASN:CA	1:A:19:ASN:C	1:A:20:ALA:N	19	71.64
(1,348)	1:A:161:HIS:N	1:A:161:HIS:CA	1:A:161:HIS:C	1:A:162:LYS:N	20	71.6
(1,193)	1:A:23:ARG:C	1:A:24:ASP:N	1:A:24:ASP:CA	1:A:24:ASP:C	9	71.6
(1,279)	1:A:106:THR:C	1:A:107:ALA:N	1:A:107:ALA:CA	1:A:107:ALA:C	2	71.59
(1,344)	1:A:159:ILE:C	1:A:160:GLN:N	1:A:160:GLN:CA	1:A:160:GLN:C	18	71.39
(1,303)	1:A:115:ILE:C	1:A:116:CYS:N	1:A:116:CYS:CA	1:A:116:CYS:C	6	71.37
(1,304)	1:A:116:CYS:N	1:A:116:CYS:CA	1:A:116:CYS:C	1:A:117:LEU:N	18	71.24
(1,285)	1:A:108:LYS:C	1:A:109:MET:N	1:A:109:MET:CA	1:A:109:MET:C	7	71.23
(1,276)	1:A:105:LYS:C	1:A:106:THR:N	1:A:106:THR:CA	1:A:106:THR:C	3	71.17
(1,194)	1:A:23:ARG:C	1:A:24:ASP:N	1:A:24:ASP:CA	1:A:24:ASP:C	2	71.17
(1,272)	1:A:104:GLY:C	1:A:105:LYS:N	1:A:105:LYS:CA	1:A:105:LYS:C	13	71.08
(1,220)	1:A:66:PHE:N	1:A:66:PHE:CA	1:A:66:PHE:C	1:A:67:GLY:N	7	71.06
(1,304)	1:A:116:CYS:N	1:A:116:CYS:CA	1:A:116:CYS:C	1:A:117:LEU:N	16	70.96
(1,199)	1:A:50:ASP:C	1:A:51:ASN:N	1:A:51:ASN:CA	1:A:51:ASN:C	13	70.92
(1,255)	1:A:98:ALA:N	1:A:98:ALA:CA	1:A:98:ALA:C	1:A:99:VAL:N	5	70.86
(1,182)	1:A:19:ASN:C	1:A:20:ALA:N	1:A:20:ALA:CA	1:A:20:ALA:C	7	70.86
(1,286)	1:A:109:MET:N	1:A:109:MET:CA	1:A:109:MET:C	1:A:110:TYR:N	15	70.78
(1,303)	1:A:115:ILE:C	1:A:116:CYS:N	1:A:116:CYS:CA	1:A:116:CYS:C	2	70.73
(1,205)	1:A:52:ASP:C	1:A:53:TRP:N	1:A:53:TRP:CA	1:A:53:TRP:C	7	70.67
(1,348)	1:A:161:HIS:N	1:A:161:HIS:CA	1:A:161:HIS:C	1:A:162:LYS:N	11	70.62
(1,328)	1:A:140:LEU:C	1:A:141:GLY:N	1:A:141:GLY:CA	1:A:141:GLY:C	3	70.61
(1,286)	1:A:109:MET:N	1:A:109:MET:CA	1:A:109:MET:C	1:A:110:TYR:N	3	70.61
(1,299)	1:A:114:LYS:N	1:A:114:LYS:CA	1:A:114:LYS:C	1:A:115:ILE:N	16	70.6
(1,281)	1:A:107:ALA:C	1:A:108:LYS:N	1:A:108:LYS:CA	1:A:108:LYS:C	5	70.49
(1,272)	1:A:104:GLY:C	1:A:105:LYS:N	1:A:105:LYS:CA	1:A:105:LYS:C	11	70.49
(1,317)	1:A:120:HIS:N	1:A:120:HIS:CA	1:A:120:HIS:C	1:A:121:PHE:N	8	70.32
(1,351)	1:A:162:LYS:N	1:A:162:LYS:CA	1:A:162:LYS:C	1:A:163:GLU:N	3	70.22
(1,184)	1:A:20:ALA:N	1:A:20:ALA:CA	1:A:20:ALA:C	1:A:21:GLY:N	18	70.17
(1,210)	1:A:60:LYS:N	1:A:60:LYS:CA	1:A:60:LYS:C	1:A:61:GLU:N	10	70.15
(1,288)	1:A:109:MET:C	1:A:110:TYR:N	1:A:110:TYR:CA	1:A:110:TYR:C	4	70.08
(1,325)	1:A:131:LYS:C	1:A:132:PHE:N	1:A:132:PHE:CA	1:A:132:PHE:C	15	70.06
(1,255)	1:A:98:ALA:N	1:A:98:ALA:CA	1:A:98:ALA:C	1:A:99:VAL:N	3	70.0
(1,324)	1:A:131:LYS:C	1:A:132:PHE:N	1:A:132:PHE:CA	1:A:132:PHE:C	15	69.94
(1,287)	1:A:109:MET:C	1:A:110:TYR:N	1:A:110:TYR:CA	1:A:110:TYR:C	4	69.92
(1,163)	1:A:3:ASP:N	1:A:3:ASP:CA	1:A:3:ASP:C	1:A:4:GLU:N	17	69.85
(1,270)	1:A:103:ASP:C	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	4	69.8
(1,184)	1:A:20:ALA:N	1:A:20:ALA:CA	1:A:20:ALA:C	1:A:21:GLY:N	7	69.68
(1,317)	1:A:120:HIS:N	1:A:120:HIS:CA	1:A:120:HIS:C	1:A:121:PHE:N	7	69.57
(1,282)	1:A:107:ALA:C	1:A:108:LYS:N	1:A:108:LYS:CA	1:A:108:LYS:C	5	69.51
(1,348)	1:A:161:HIS:N	1:A:161:HIS:CA	1:A:161:HIS:C	1:A:162:LYS:N	5	69.45
(1,317)	1:A:120:HIS:N	1:A:120:HIS:CA	1:A:120:HIS:C	1:A:121:PHE:N	20	69.43
(1,204)	1:A:52:ASP:C	1:A:53:TRP:N	1:A:53:TRP:CA	1:A:53:TRP:C	7	69.33
(1,302)	1:A:115:ILE:C	1:A:116:CYS:N	1:A:116:CYS:CA	1:A:116:CYS:C	2	69.27
(1,304)	1:A:116:CYS:N	1:A:116:CYS:CA	1:A:116:CYS:C	1:A:117:LEU:N	17	69.14
(1,183)	1:A:19:ASN:C	1:A:20:ALA:N	1:A:20:ALA:CA	1:A:20:ALA:C	7	69.14
(1,178)	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	1:A:19:ASN:N	9	69.11
(1,198)	1:A:50:ASP:C	1:A:51:ASN:N	1:A:51:ASN:CA	1:A:51:ASN:C	13	69.08
(1,292)	1:A:111:ARG:N	1:A:111:ARG:CA	1:A:111:ARG:C	1:A:112:GLY:N	8	69.07
(1,203)	1:A:52:ASP:N	1:A:52:ASP:CA	1:A:52:ASP:C	1:A:53:TRP:N	6	68.93
(1,294)	1:A:112:GLY:C	1:A:113:GLY:N	1:A:113:GLY:CA	1:A:113:GLY:C	1	68.89
(1,249)	1:A:96:GLU:N	1:A:96:GLU:CA	1:A:96:GLU:C	1:A:97:ILE:N	15	68.84
(1,210)	1.11.00.GE0.11	1.11.00.010.011	1.11.00.GE0.0	1.11.0,.111.11		ed on nert nage



	ed from previous po				3.5.1.1	T70 1 10 ()
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,275)	1:A:105:LYS:C	1:A:106:THR:N	1:A:106:THR:CA	1:A:106:THR:C	3	68.83
(1,193)	1:A:23:ARG:C	1:A:24:ASP:N	1:A:24:ASP:CA	1:A:24:ASP:C	2	68.83
(1,284)	1:A:108:LYS:C	1:A:109:MET:N	1:A:109:MET:CA	1:A:109:MET:C	7	68.77
(1,310)	1:A:118:THR:N	1:A:118:THR:CA	1:A:118:THR:C	1:A:119:ASP:N	7	68.67
(1,184)	1:A:20:ALA:N	1:A:20:ALA:CA	1:A:20:ALA:C	1:A:21:GLY:N	9	68.65
(1,302)	1:A:115:ILE:C	1:A:116:CYS:N	1:A:116:CYS:CA	1:A:116:CYS:C	6	68.63
(1,343)	1:A:159:ILE:C	1:A:160:GLN:N	1:A:160:GLN:CA	1:A:160:GLN:C	18	68.61
(1,298)	1:A:114:LYS:N	1:A:114:LYS:CA	1:A:114:LYS:C	1:A:115:ILE:N	11	68.49
(1,278)	1:A:106:THR:C	1:A:107:ALA:N	1:A:107:ALA:CA	1:A:107:ALA:C	2	68.41
(1,194)	1:A:23:ARG:C	1:A:24:ASP:N	1:A:24:ASP:CA	1:A:24:ASP:C	9	68.4
(1,178)	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	1:A:19:ASN:N	14	68.36
(1,186)	1:A:20:ALA:C	1:A:21:GLY:N	1:A:21:GLY:CA	1:A:21:GLY:C	8	68.29
(1,328)	1:A:140:LEU:C	1:A:141:GLY:N	1:A:141:GLY:CA	1:A:141:GLY:C	14	68.24
(1,275)	1:A:105:LYS:C	1:A:106:THR:N	1:A:106:THR:CA	1:A:106:THR:C	17	68.23
(1,181)	1:A:19:ASN:N	1:A:19:ASN:CA	1:A:19:ASN:C	1:A:20:ALA:N	20	68.19
(1,184)	1:A:20:ALA:N	1:A:20:ALA:CA	1:A:20:ALA:C	1:A:21:GLY:N	20	68.15
(1,352)	1:A:162:LYS:C	1:A:163:GLU:N	1:A:163:GLU:CA	1:A:163:GLU:C	18	68.1
(1,277)	1:A:106:THR:N	1:A:106:THR:CA	1:A:106:THR:C	1:A:107:ALA:N	13	68.08
(1,253)	1:A:97:ILE:C	1:A:98:ALA:N	1:A:98:ALA:CA	1:A:98:ALA:C	3	68.08
(1,253)	1:A:97:ILE:C	1:A:98:ALA:N	1:A:98:ALA:CA	1:A:98:ALA:C	14	67.96
(1,328)	1:A:140:LEU:C	1:A:141:GLY:N	1:A:141:GLY:CA	1:A:141:GLY:C	2	67.91
(1,193)	1:A:23:ARG:C	1:A:24:ASP:N	1:A:24:ASP:CA	1:A:24:ASP:C	19	67.91
(1,198)	1:A:50:ASP:C	1:A:51:ASN:N	1:A:51:ASN:CA	1:A:51:ASN:C	17	67.87
(1,249)	1:A:96:GLU:N	1:A:96:GLU:CA	1:A:96:GLU:C	1:A:97:ILE:N	6	67.85
(1,193)	1:A:23:ARG:C	1:A:24:ASP:N	1:A:24:ASP:CA	1:A:24:ASP:C	15	67.76
(1,205)	1:A:52:ASP:C	1:A:53:TRP:N	1:A:53:TRP:CA	1:A:53:TRP:C	5	67.72
(1,328)	1:A:140:LEU:C	1:A:141:GLY:N	1:A:141:GLY:CA	1:A:141:GLY:C	1	67.55
(1,255)	1:A:98:ALA:N	1:A:98:ALA:CA	1:A:98:ALA:C	1:A:99:VAL:N	17	67.53
(1,348)	1:A:161:HIS:N	1:A:161:HIS:CA	1:A:161:HIS:C	1:A:162:LYS:N	12	67.49
(1,298)	1:A:114:LYS:N	1:A:114:LYS:CA	1:A:114:LYS:C	1:A:115:ILE:N	12	67.49
(1,179)	1:A:18:THR:C	1:A:19:ASN:N	1:A:19:ASN:CA	1:A:19:ASN:C	4	67.49
(1,228)	1:A:75:LEU:C	1:A:76:LEU:N	1:A:76:LEU:CA	1:A:76:LEU:C	18	67.38
(1,199)	1:A:50:ASP:C	1:A:51:ASN:N	1:A:51:ASN:CA	1:A:51:ASN:C	7	67.34
(1,294)	1:A:112:GLY:C	1:A:113:GLY:N	1:A:113:GLY:CA	1:A:113:GLY:C	8	67.33
(1,328)	1:A:140:LEU:C	1:A:141:GLY:N	1:A:141:GLY:CA	1:A:141:GLY:C	17	67.32
(1,193)	1:A:23:ARG:C	1:A:24:ASP:N	1:A:24:ASP:CA	1:A:24:ASP:C	20	67.24
(1,199)	1:A:50:ASP:C	1:A:51:ASN:N	1:A:51:ASN:CA	1:A:51:ASN:C	6	67.19
(1,302)	1:A:115:ILE:C	1:A:116:CYS:N	1:A:116:CYS:CA	1:A:116:CYS:C	7	67.09
(1,210)	1:A:60:LYS:N	1:A:60:LYS:CA	1:A:60:LYS:C	1:A:61:GLU:N	6	67.06
(1,310)	1:A:118:THR:N	1:A:118:THR:CA	1:A:118:THR:C	1:A:119:ASP:N	2	66.93
(1,254)	1:A:97:ILE:C	1:A:98:ALA:N	1:A:98:ALA:CA	1:A:98:ALA:C	20	66.73
(1,328)	1:A:140:LEU:C	1:A:141:GLY:N	1:A:141:GLY:CA	1:A:141:GLY:C	6	66.72
(1,317)	1:A:120:HIS:N	1:A:120:HIS:CA	1:A:120:HIS:C	1:A:121:PHE:N	15	66.71
(1,257)	1:A:98:ALA:C	1:A:99:VAL:N	1:A:99:VAL:CA	1:A:99:VAL:C	8	66.68
(1,255)	1:A:98:ALA:N	1:A:98:ALA:CA	1:A:98:ALA:C	1:A:99:VAL:N	2	66.62
(1,278)	1:A:106:THR:C	1:A:107:ALA:N	1:A:107:ALA:CA	1:A:107:ALA:C	3	66.61
(1,199)	1:A:50:ASP:C	1:A:51:ASN:N	1:A:51:ASN:CA	1:A:51:ASN:C	5	66.61
(1,304)	1:A:116:CYS:N	1:A:116:CYS:CA	1:A:116:CYS:C	1:A:117:LEU:N	19	66.6
(1,284)	1:A:108:LYS:C	1:A:109:MET:N	1:A:109:MET:CA	1:A:109:MET:C	18	66.6
(1,178)	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	1:A:19:ASN:N	8	66.52
(1,317)	1:A:120:HIS:N	1:A:120:HIS:CA	1:A:120:HIS:C	1:A:121:PHE:N	9	66.49



Key	$rac{ed\ from\ previous\ po}{\mathbf{Atom-1}}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,228)	1:A:75:LEU:C	1:A:76:LEU:N	1:A:76:LEU:CA	1:A:76:LEU:C	1	66.47
(1,220)	1:A:66:PHE:N	1:A:66:PHE:CA	1:A:66:PHE:C	1:A:67:GLY:N	9	66.44
(1,254)	1:A:97:ILE:C	1:A:98:ALA:N	1:A:98:ALA:CA	1:A:98:ALA:C	8	66.29
(1,179)	1:A:18:THR:C	1:A:19:ASN:N	1:A:19:ASN:CA	1:A:19:ASN:C	12	66.24
(1,302)	1:A:115:ILE:C	1:A:116:CYS:N	1:A:116:CYS:CA	1:A:116:CYS:C	1	66.14
(1,204)	1:A:52:ASP:C	1:A:53:TRP:N	1:A:53:TRP:CA	1:A:53:TRP:C	11	66.13
(1,228)	1:A:75:LEU:C	1:A:76:LEU:N	1:A:76:LEU:CA	1:A:76:LEU:C	17	66.08
(1,203)	1:A:52:ASP:N	1:A:52:ASP:CA	1:A:52:ASP:C	1:A:53:TRP:N	10	66.07
(1,359)	1:A:165:CYS:N	1:A:165:CYS:CA	1:A:165:CYS:C	1:A:166:ASN:N	2	65.86
(1,275)	1:A:105:LYS:C	1:A:106:THR:N	1:A:106:THR:CA	1:A:106:THR:C	4	65.85
(1,210)	1:A:60:LYS:N	1:A:60:LYS:CA	1:A:60:LYS:C	1:A:61:GLU:N	18	65.85
(1,176)	1:A:17:LYS:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	20	65.82
(1,184)	1:A:20:ALA:N	1:A:20:ALA:CA	1:A:20:ALA:C	1:A:21:GLY:N	17	65.7
(1,173)	1:A:16:LEU:C	1:A:17:LYS:N	1:A:17:LYS:CA	1:A:17:LYS:C	15	65.7
(1,220)	1:A:66:PHE:N	1:A:66:PHE:CA	1:A:66:PHE:C	1:A:67:GLY:N	5	65.68
(1,303)	1:A:115:ILE:C	1:A:116:CYS:N	1:A:116:CYS:CA	1:A:116:CYS:C	17	65.56
(1,328)	1:A:140:LEU:C	1:A:141:GLY:N	1:A:141:GLY:CA	1:A:141:GLY:C	10	65.43
(1,257)	1:A:98:ALA:C	1:A:99:VAL:N	1:A:99:VAL:CA	1:A:99:VAL:C	20	65.43
(1,360)	1:A:165:CYS:C	1:A:166:ASN:N	1:A:166:ASN:CA	1:A:166:ASN:C	17	65.42
(1,254)	1:A:97:ILE:C	1:A:98:ALA:N	1:A:98:ALA:CA	1:A:98:ALA:C	2	65.38
(1,298)	1:A:114:LYS:N	1:A:114:LYS:CA	1:A:114:LYS:C	1:A:115:ILE:N	13	65.32
(1,193)	1:A:23:ARG:C	1:A:24:ASP:N	1:A:24:ASP:CA	1:A:24:ASP:C	3	65.25
(1,173)	1:A:16:LEU:C	1:A:17:LYS:N	1:A:17:LYS:CA	1:A:17:LYS:C	4	65.24
(1,249)	1:A:96:GLU:N	1:A:96:GLU:CA	1:A:96:GLU:C	1:A:97:ILE:N	3	65.2
(1,199)	1:A:50:ASP:C	1:A:51:ASN:N	1:A:51:ASN:CA	1:A:51:ASN:C	1	65.18
(1,318)	1:A:127:ARG:C	1:A:128:ASN:N	1:A:128:ASN:CA	1:A:128:ASN:C	2	65.11
(1,210)	1:A:60:LYS:N	1:A:60:LYS:CA	1:A:60:LYS:C	1:A:61:GLU:N	16	65.06
(1,257)	1:A:98:ALA:C	1:A:99:VAL:N	1:A:99:VAL:CA	1:A:99:VAL:C	1	65.04
(1,257)	1:A:98:ALA:C	1:A:99:VAL:N	1:A:99:VAL:CA	1:A:99:VAL:C	4	65.02
(1,163)	1:A:3:ASP:N	1:A:3:ASP:CA	1:A:3:ASP:C	1:A:4:GLU:N	14	65.01
(1,291)	1:A:110:TYR:C	1:A:111:ARG:N	1:A:111:ARG:CA	1:A:111:ARG:C	13	64.99
(1,178)	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	1:A:19:ASN:N	17	64.98
(1,317)	1:A:120:HIS:N	1:A:120:HIS:CA	1:A:120:HIS:C	1:A:121:PHE:N	1	64.97
(1,317)	1:A:120:HIS:N	1:A:120:HIS:CA	1:A:120:HIS:C	1:A:121:PHE:N	14	64.95
(1,344)	1:A:159:ILE:C	1:A:160:GLN:N	1:A:160:GLN:CA	1:A:160:GLN:C	19	64.86
(1,330)	1:A:148:VAL:C	1:A:149:GLU:N	1:A:149:GLU:CA	1:A:149:GLU:C	6	64.82
(1,199)	1:A:50:ASP:C	1:A:51:ASN:N	1:A:51:ASN:CA	1:A:51:ASN:C	20	64.76
(1,255)	1:A:98:ALA:N	1:A:98:ALA:CA	1:A:98:ALA:C	1:A:99:VAL:N	20	64.69
(1,194)	1:A:23:ARG:C	1:A:24:ASP:N	1:A:24:ASP:CA	1:A:24:ASP:C	18	64.62
(1,294)	1:A:112:GLY:C	1:A:113:GLY:N	1:A:113:GLY:CA	1:A:113:GLY:C	6	64.61
(1,230)	1:A:76:LEU:N	1:A:76:LEU:CA	1:A:76:LEU:C	1:A:77:LYS:N	7	64.61
(1,180)	1:A:18:THR:C	1:A:19:ASN:N	1:A:19:ASN:CA	1:A:19:ASN:C	17	64.57
(1,299)	1:A:114:LYS:N	1:A:114:LYS:CA	1:A:114:LYS:C	1:A:115:ILE:N	10	64.55
(1,345)	1:A:160:GLN:N	1:A:160:GLN:CA	1:A:160:GLN:C	1:A:161:HIS:N	2	64.44
(1,205)	1:A:52:ASP:C	1:A:53:TRP:N	1:A:53:TRP:CA	1:A:53:TRP:C	16	64.39
(1,253)	1:A:97:ILE:C	1:A:98:ALA:N	1:A:98:ALA:CA	1:A:98:ALA:C	16	64.38
(1,296)	1:A:113:GLY:C	1:A:114:LYS:N	1:A:114:LYS:CA	1:A:114:LYS:C	5	64.36
(1,193)	1:A:23:ARG:C	1:A:24:ASP:N	1:A:24:ASP:CA	1:A:24:ASP:C	6	64.33
(1,180)	1:A:18:THR:C	1:A:19:ASN:N	1:A:19:ASN:CA	1:A:19:ASN:C	14	64.23
(1,287)	1:A:109:MET:C	1:A:110:TYR:N	1:A:110:TYR:CA	1:A:110:TYR:C	16	64.22
(1,286)	1:A:109:MET:N	1:A:109:MET:CA	1:A:109:MET:C	1:A:110:TYR:N	16	64.21



	ed from previous po				36 11	T70 1 10 ()
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,298)	1:A:114:LYS:N	1:A:114:LYS:CA	1:A:114:LYS:C	1:A:115:ILE:N	5	64.18
(1,247)	1:A:95:PRO:C	1:A:96:GLU:N	1:A:96:GLU:CA	1:A:96:GLU:C	10	64.09
(1,162)	1:A:2:ALA:C	1:A:3:ASP:N	1:A:3:ASP:CA	1:A:3:ASP:C	4	64.08
(1,228)	1:A:75:LEU:C	1:A:76:LEU:N	1:A:76:LEU:CA	1:A:76:LEU:C	16	64.06
(1,264)	1:A:101:GLU:C	1:A:102:LEU:N	1:A:102:LEU:CA	1:A:102:LEU:C	5	63.99
(1,348)	1:A:161:HIS:N	1:A:161:HIS:CA	1:A:161:HIS:C	1:A:162:LYS:N	7	63.97
(1,210)	1:A:60:LYS:N	1:A:60:LYS:CA	1:A:60:LYS:C	1:A:61:GLU:N	12	63.95
(1,204)	1:A:52:ASP:C	1:A:53:TRP:N	1:A:53:TRP:CA	1:A:53:TRP:C	14	63.94
(1,276)	1:A:105:LYS:C	1:A:106:THR:N	1:A:106:THR:CA	1:A:106:THR:C	5	63.93
(1,257)	1:A:98:ALA:C	1:A:99:VAL:N	1:A:99:VAL:CA	1:A:99:VAL:C	3	63.91
(1,318)	1:A:127:ARG:C	1:A:128:ASN:N	1:A:128:ASN:CA	1:A:128:ASN:C	12	63.85
(1,299)	1:A:114:LYS:N	1:A:114:LYS:CA	1:A:114:LYS:C	1:A:115:ILE:N	1	63.81
(1,285)	1:A:108:LYS:C	1:A:109:MET:N	1:A:109:MET:CA	1:A:109:MET:C	6	63.73
(1,228)	1:A:75:LEU:C	1:A:76:LEU:N	1:A:76:LEU:CA	1:A:76:LEU:C	14	63.69
(1,314)	1:A:119:ASP:N	1:A:119:ASP:CA	1:A:119:ASP:C	1:A:120:HIS:N	19	63.61
(1,210)	1:A:60:LYS:N	1:A:60:LYS:CA	1:A:60:LYS:C	1:A:61:GLU:N	5	63.61
(1,302)	1:A:115:ILE:C	1:A:116:CYS:N	1:A:116:CYS:CA	1:A:116:CYS:C	10	63.58
(1,163)	1:A:3:ASP:N	1:A:3:ASP:CA	1:A:3:ASP:C	1:A:4:GLU:N	11	63.57
(1,270)	1:A:103:ASP:C	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	11	63.5
(1,355)	1:A:163:GLU:C	1:A:164:LYS:N	1:A:164:LYS:CA	1:A:164:LYS:C	1	63.48
(1,257)	1:A:98:ALA:C	1:A:99:VAL:N	1:A:99:VAL:CA	1:A:99:VAL:C	14	63.44
(1,317)	1:A:120:HIS:N	1:A:120:HIS:CA	1:A:120:HIS:C	1:A:121:PHE:N	13	63.42
(1,354)	1:A:163:GLU:N	1:A:163:GLU:CA	1:A:163:GLU:C	1:A:164:LYS:N	4	63.35
(1,280)	1:A:107:ALA:N	1:A:107:ALA:CA	1:A:107:ALA:C	1:A:108:LYS:N	1	63.34
(1,346)	1:A:160:GLN:C	1:A:161:HIS:N	1:A:161:HIS:CA	1:A:161:HIS:C	8	63.28
(1,275)	1:A:105:LYS:C	1:A:106:THR:N	1:A:106:THR:CA	1:A:106:THR:C	19	63.27
(1,184)	1:A:20:ALA:N	1:A:20:ALA:CA	1:A:20:ALA:C	1:A:21:GLY:N	3	63.23
(1,327)	1:A:132:PHE:C	1:A:133:GLY:N	1:A:133:GLY:CA	1:A:133:GLY:C	19	63.21
(1,328)	1:A:140:LEU:C	1:A:141:GLY:N	1:A:141:GLY:CA	1:A:141:GLY:C	13	63.16
(1,230)	1:A:76:LEU:N	1:A:76:LEU:CA	1:A:76:LEU:C	1:A:77:LYS:N	8	63.14
(1,311)	1:A:118:THR:N	1:A:118:THR:CA	1:A:118:THR:C	1:A:119:ASP:N	2	63.07
(1,298)	1:A:114:LYS:N	1:A:114:LYS:CA	1:A:114:LYS:C	1:A:115:ILE:N	14	62.99
(1,161)	1:A:2:ALA:C	1:A:3:ASP:N	1:A:3:ASP:CA	1:A:3:ASP:C	10	62.99
(1,199)	1:A:50:ASP:C	1:A:51:ASN:N	1:A:51:ASN:CA	1:A:51:ASN:C	19	62.93
(1,317)	1:A:120:HIS:N	1:A:120:HIS:CA	1:A:120:HIS:C	1:A:121:PHE:N	2	62.89
(1,361)	1:A:165:CYS:C	1:A:166:ASN:N	1:A:166:ASN:CA	1:A:166:ASN:C	15	62.85
(1,247)	1:A:95:PRO:C	1:A:96:GLU:N	1:A:96:GLU:CA	1:A:96:GLU:C	16	62.75
(1,340)	1:A:158:VAL:C	1:A:159:ILE:N	1:A:159:ILE:CA	1:A:159:ILE:C	18	62.73
(1,365)	1:A:167:GLN:N	1:A:167:GLN:CA	1:A:167:GLN:C	1:A:168:LEU:N	5	62.69
(1,200)	1:A:51:ASN:N	1:A:51:ASN:CA	1:A:51:ASN:C	1:A:52:ASP:N	9	62.63
(1,184)	1:A:20:ALA:N	1:A:20:ALA:CA	1:A:20:ALA:C	1:A:21:GLY:N	19	62.62
(1,176)	1:A:17:LYS:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	7	62.61
(1,298)	1:A:114:LYS:N	1:A:114:LYS:CA	1:A:114:LYS:C	1:A:115:ILE:N	2	62.54
(1,275)	1:A:105:LYS:C	1:A:106:THR:N	1:A:106:THR:CA	1:A:106:THR:C	15	62.5
(1,340)	1:A:158:VAL:C	1:A:159:ILE:N	1:A:159:ILE:CA	1:A:159:ILE:C	11	62.48
(1,253)	1:A:97:ILE:C	1:A:98:ALA:N	1:A:98:ALA:CA	1:A:98:ALA:C	4	62.45
(1,230)	1:A:76:LEU:N	1:A:76:LEU:CA	1:A:76:LEU:C	1:A:77:LYS:N	10	62.45
(1,307)	1:A:117:LEU:N	1:A:117:LEU:CA	1:A:117:LEU:C	1:A:118:THR:N	8	62.44
(1,228)	1:A:75:LEU:C	1:A:76:LEU:N	1:A:76:LEU:CA	1:A:76:LEU:C	10	62.4
(1,249)	1:A:96:GLU:N	1:A:96:GLU:CA	1:A:96:GLU:C	1:A:97:ILE:N	4	62.36
(1,174)	1:A:16:LEU:C	1:A:17:LYS:N	1:A:17:LYS:CA	1:A:17:LYS:C	3	62.36



Key	$rac{ed\ from\ previous\ po}{\mathbf{Atom-1}}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,351)	1:A:162:LYS:N	1:A:162:LYS:CA	1:A:162:LYS:C	1:A:163:GLU:N	1	62.32
(1,183)	1:A:19:ASN:C	1:A:20:ALA:N	1:A:20:ALA:CA	1:A:20:ALA:C	3	62.32
(1,348)	1:A:161:HIS:N	1:A:161:HIS:CA	1:A:161:HIS:C	1:A:162:LYS:N	18	62.28
(1,163)	1:A:3:ASP:N	1:A:3:ASP:CA	1:A:3:ASP:C	1:A:4:GLU:N	6	62.24
(1,228)	1:A:75:LEU:C	1:A:76:LEU:N	1:A:76:LEU:CA	1:A:76:LEU:C	8	62.18
(1,257)	1:A:98:ALA:C	1:A:99:VAL:N	1:A:99:VAL:CA	1:A:99:VAL:C	10	62.17
(1,253)	1:A:97:ILE:C	1:A:98:ALA:N	1:A:98:ALA:CA	1:A:98:ALA:C	10	62.15
(1,230)	1:A:76:LEU:N	1:A:76:LEU:CA	1:A:76:LEU:C	1:A:77:LYS:N	2	62.14
(1,286)	1:A:109:MET:N	1:A:109:MET:CA	1:A:109:MET:C	1:A:110:TYR:N	12	62.12
(1,199)	1:A:50:ASP:C	1:A:51:ASN:N	1:A:51:ASN:CA	1:A:51:ASN:C	2	62.1
(1,365)	1:A:167:GLN:N	1:A:167:GLN:CA	1:A:167:GLN:C	1:A:168:LEU:N	18	62.09
(1,330)	1:A:148:VAL:C	1:A:149:GLU:N	1:A:149:GLU:CA	1:A:149:GLU:C	20	62.07
(1,253)	1:A:97:ILE:C	1:A:98:ALA:N	1:A:98:ALA:CA	1:A:98:ALA:C	19	62.06
(1,199)	1:A:50:ASP:C	1:A:51:ASN:N	1:A:51:ASN:CA	1:A:51:ASN:C	11	62.01
(1,298)	1:A:114:LYS:N	1:A:114:LYS:CA	1:A:114:LYS:C	1:A:115:ILE:N	6	61.91
(1,349)	1:A:161:HIS:C	1:A:162:LYS:N	1:A:162:LYS:CA	1:A:162:LYS:C	14	61.88
(1,276)	1:A:105:LYS:C	1:A:106:THR:N	1:A:106:THR:CA	1:A:106:THR:C	13	61.88
(1,328)	1:A:140:LEU:C	1:A:141:GLY:N	1:A:141:GLY:CA	1:A:141:GLY:C	4	61.77
(1,247)	1:A:95:PRO:C	1:A:96:GLU:N	1:A:96:GLU:CA	1:A:96:GLU:C	1	61.71
(1,324)	1:A:131:LYS:C	1:A:132:PHE:N	1:A:132:PHE:CA	1:A:132:PHE:C	10	61.68
(1,230)	1:A:76:LEU:N	1:A:76:LEU:CA	1:A:76:LEU:C	1:A:77:LYS:N	16	61.67
(1,294)	1:A:112:GLY:C	1:A:113:GLY:N	1:A:113:GLY:CA	1:A:113:GLY:C	16	61.66
(1,173)	1:A:16:LEU:C	1:A:17:LYS:N	1:A:17:LYS:CA	1:A:17:LYS:C	10	61.63
(1,265)	1:A:101:GLU:C	1:A:102:LEU:N	1:A:102:LEU:CA	1:A:102:LEU:C	13	61.62
(1,210)	1:A:60:LYS:N	1:A:60:LYS:CA	1:A:60:LYS:C	1:A:61:GLU:N	14	61.55
(1,257)	1:A:98:ALA:C	1:A:99:VAL:N	1:A:99:VAL:CA	1:A:99:VAL:C	16	61.48
(1,359)	1:A:165:CYS:N	1:A:165:CYS:CA	1:A:165:CYS:C	1:A:166:ASN:N	9	61.46
(1,270)	1:A:103:ASP:C	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	6	61.37
(1,311)	1:A:118:THR:N	1:A:118:THR:CA	1:A:118:THR:C	1:A:119:ASP:N	7	61.33
(1,186)	1:A:20:ALA:C	1:A:21:GLY:N	1:A:21:GLY:CA	1:A:21:GLY:C	7	61.29
(1,205)	1:A:52:ASP:C	1:A:53:TRP:N	1:A:53:TRP:CA	1:A:53:TRP:C	8	61.28
(1,173)	1:A:16:LEU:C	1:A:17:LYS:N	1:A:17:LYS:CA	1:A:17:LYS:C	1	61.23
(1,362)	1:A:166:ASN:N	1:A:166:ASN:CA	1:A:166:ASN:C	1:A:167:GLN:N	18	61.21
(1,264)	1:A:101:GLU:C	1:A:102:LEU:N	1:A:102:LEU:CA	1:A:102:LEU:C	7	61.09
(1,205)	1:A:52:ASP:C	1:A:53:TRP:N	1:A:53:TRP:CA	1:A:53:TRP:C	12	61.03
(1,318)	1:A:127:ARG:C	1:A:128:ASN:N	1:A:128:ASN:CA	1:A:128:ASN:C	14	61.0
(1,269)	1:A:103:ASP:N	1:A:103:ASP:CA	1:A:103:ASP:C	1:A:104:GLY:N	7	60.99
(1,177)	1:A:17:LYS:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	8	60.98
(1,257)	1:A:98:ALA:C	1:A:99:VAL:N	1:A:99:VAL:CA	1:A:99:VAL:C	7	60.96
(1,210)	1:A:60:LYS:N	1:A:60:LYS:CA	1:A:60:LYS:C	1:A:61:GLU:N	3	60.96
(1,228)	1:A:75:LEU:C	1:A:76:LEU:N	1:A:76:LEU:CA	1:A:76:LEU:C	9	60.93
(1,253)	1:A:97:ILE:C	1:A:98:ALA:N	1:A:98:ALA:CA	1:A:98:ALA:C	15	60.89
(1,358)	1:A:164:LYS:C	1:A:165:CYS:N	1:A:165:CYS:CA	1:A:165:CYS:C	12	60.85
(1,318)	1:A:127:ARG:C	1:A:128:ASN:N	1:A:128:ASN:CA	1:A:128:ASN:C	15	60.81
(1,297)	1:A:113:GLY:C	1:A:114:LYS:N	1:A:114:LYS:CA	1:A:114:LYS:C	12	60.76
(1,205)	1:A:52:ASP:C	1:A:53:TRP:N	1:A:53:TRP:CA	1:A:53:TRP:C	18	60.76
(1,363)	1:A:166:ASN:C	1:A:167:GLN:N	1:A:167:GLN:CA	1:A:167:GLN:C	2	60.73
(1,230)	1:A:76:LEU:N	1:A:76:LEU:CA	1:A:76:LEU:C	1:A:77:LYS:N	9	60.73
(1,179)	1:A:18:THR:C	1:A:19:ASN:N	1:A:19:ASN:CA	1:A:19:ASN:C	13	60.7
		1. A.OO. AT A.NI	1. 4.00. 41 4.04	1:A:98:ALA:C	5	60.58
(1,253)	1:A:97:ILE:C	1:A:98:ALA:N	1:A:98:ALA:CA	1.A.96.ALA.C	0	00.56



	ed from previous po		A	A	26 11	T 7* 1 .
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (\circ)
(1,303)	1:A:115:ILE:C	1:A:116:CYS:N	1:A:116:CYS:CA	1:A:116:CYS:C	15	60.54
(1,293)	1:A:111:ARG:C	1:A:112:GLY:N	1:A:112:GLY:CA	1:A:112:GLY:C	14	60.48
(1,184)	1:A:20:ALA:N	1:A:20:ALA:CA	1:A:20:ALA:C	1:A:21:GLY:N	1	60.43
(1,314)	1:A:119:ASP:N	1:A:119:ASP:CA	1:A:119:ASP:C	1:A:120:HIS:N	11	60.42
(1,230)	1:A:76:LEU:N	1:A:76:LEU:CA	1:A:76:LEU:C	1:A:77:LYS:N	6	60.4
(1,180)	1:A:18:THR:C	1:A:19:ASN:N	1:A:19:ASN:CA	1:A:19:ASN:C	5	60.38
(1,326)	1:A:132:PHE:N	1:A:132:PHE:CA	1:A:132:PHE:C	1:A:133:GLY:N	19	60.34
(1,286)	1:A:109:MET:N	1:A:109:MET:CA	1:A:109:MET:C	1:A:110:TYR:N	4	60.26
(1,253)	1:A:97:ILE:C	1:A:98:ALA:N	1:A:98:ALA:CA	1:A:98:ALA:C	17	60.19
(1,318)	1:A:127:ARG:C	1:A:128:ASN:N	1:A:128:ASN:CA	1:A:128:ASN:C	9	60.16
(1,296)	1:A:113:GLY:C	1:A:114:LYS:N	1:A:114:LYS:CA	1:A:114:LYS:C	6	60.16
(1,210)	1:A:60:LYS:N	1:A:60:LYS:CA	1:A:60:LYS:C	1:A:61:GLU:N	9	60.11
(1,302)	1:A:115:ILE:C	1:A:116:CYS:N	1:A:116:CYS:CA	1:A:116:CYS:C	18	60.1
(1,314)	1:A:119:ASP:N	1:A:119:ASP:CA	1:A:119:ASP:C	1:A:120:HIS:N	18	60.06
(1,296)	1:A:113:GLY:C	1:A:114:LYS:N	1:A:114:LYS:CA	1:A:114:LYS:C	13	60.06
(1,362)	1:A:166:ASN:N	1:A:166:ASN:CA	1:A:166:ASN:C	1:A:167:GLN:N	13	60.03
(1,347)	1:A:160:GLN:C	1:A:161:HIS:N	1:A:161:HIS:CA	1:A:161:HIS:C	7	60.0
(1,331)	1:A:148:VAL:C	1:A:149:GLU:N	1:A:149:GLU:CA	1:A:149:GLU:C	2	59.99
(1,204)	1:A:52:ASP:C	1:A:53:TRP:N	1:A:53:TRP:CA	1:A:53:TRP:C	1	59.94
(1,314)	1:A:119:ASP:N	1:A:119:ASP:CA	1:A:119:ASP:C	1:A:120:HIS:N	5	59.91
(1,340)	1:A:158:VAL:C	1:A:159:ILE:N	1:A:159:ILE:CA	1:A:159:ILE:C	5	59.86
(1,221)	1:A:66:PHE:C	1:A:67:GLY:N	1:A:67:GLY:CA	1:A:67:GLY:C	7	59.8
(1,178)	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	1:A:19:ASN:N	2	59.79
(1,301)	1:A:115:ILE:N	1:A:115:ILE:CA	1:A:115:ILE:C	1:A:116:CYS:N	9	59.76
(1,180)	1:A:18:THR:C	1:A:19:ASN:N	1:A:19:ASN:CA	1:A:19:ASN:C	19	59.76
(1,257)	1:A:98:ALA:C	1:A:99:VAL:N	1:A:99:VAL:CA	1:A:99:VAL:C	6	59.72
(1,303)	1:A:115:ILE:C	1:A:116:CYS:N	1:A:116:CYS:CA	1:A:116:CYS:C	14	59.71
(1,199)	1:A:50:ASP:C	1:A:51:ASN:N	1:A:51:ASN:CA	1:A:51:ASN:C	16	59.7
(1,314)	1:A:119:ASP:N	1:A:119:ASP:CA	1:A:119:ASP:C	1:A:120:HIS:N	1	59.62
(1,302)	1:A:115:ILE:C	1:A:116:CYS:N	1:A:116:CYS:CA	1:A:116:CYS:C	5	59.53
(1,285)	1:A:108:LYS:C	1:A:109:MET:N	1:A:109:MET:CA	1:A:109:MET:C	15	59.51
(1,247)	1:A:95:PRO:C	1:A:96:GLU:N	1:A:96:GLU:CA	1:A:96:GLU:C	3	59.5
(1,205)	1:A:52:ASP:C	1:A:53:TRP:N	1:A:53:TRP:CA	1:A:53:TRP:C	2	59.5
(1,301)	1:A:115:ILE:N	1:A:115:ILE:CA	1:A:115:ILE:C	1:A:116:CYS:N	10	59.49
(1,365)	1:A:167:GLN:N	1:A:167:GLN:CA	1:A:167:GLN:C	1:A:168:LEU:N	14	59.38
(1,185)	1:A:20:ALA:N	1:A:20:ALA:CA	1:A:20:ALA:C	1:A:21:GLY:N	13	59.37
(1,324)	1:A:131:LYS:C	1:A:132:PHE:N	1:A:132:PHE:CA	1:A:132:PHE:C	2	59.2
(1,183)	1:A:19:ASN:C	1:A:20:ALA:N	1:A:20:ALA:CA	1:A:20:ALA:C	14	59.17
(1,230)	1:A:76:LEU:N	1:A:76:LEU:CA	1:A:76:LEU:C	1:A:77:LYS:N	20	59.16
(1,178)	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	1:A:19:ASN:N	10	59.14
(1,363)	1:A:166:ASN:C	1:A:167:GLN:N	1:A:167:GLN:CA	1:A:167:GLN:C	18	59.11
(1,365)	1:A:167:GLN:N	1:A:167:GLN:CA	1:A:167:GLN:C	1:A:168:LEU:N	7	59.09
(1,318)	1:A:127:ARG:C	1:A:128:ASN:N	1:A:128:ASN:CA	1:A:128:ASN:C	7	59.07
(1,355)	1:A:163:GLU:C	1:A:164:LYS:N	1:A:164:LYS:CA	1:A:164:LYS:C	12	59.06
(1,161)	1:A:2:ALA:C	1:A:3:ASP:N	1:A:3:ASP:CA	1:A:3:ASP:C	12	59.04
(1,330)	1:A:148:VAL:C	1:A:149:GLU:N	1:A:149:GLU:CA	1:A:149:GLU:C	14	59.02
(1,318)	1:A:127:ARG:C	1:A:128:ASN:N	1:A:128:ASN:CA	1:A:128:ASN:C	5	59.01
(1,246)	1:A:95:PRO:N	1:A:95:PRO:CA	1:A:95:PRO:C	1:A:96:GLU:N	4	59.0
(1,210) $(1,210)$	1:A:60:LYS:N	1:A:60:LYS:CA	1:A:60:LYS:C	1:A:61:GLU:N	8	58.96
(1,261)	1:A:100:PRO:C	1:A:101:GLU:N	1:A:101:GLU:CA	1:A:101:GLU:C	4	58.95
(1,360)	1:A:165:CYS:C	1:A:166:ASN:N	1:A:166:ASN:CA	1:A:166:ASN:C	3	58.87
(1,500)	1.11.100.010.0	1.11.100.11011.11	1.11.100.11.011.011	1.11.100.11011.0		od on next nage



	ed from previous po		A		36 11	37.9 1 . 9 ()
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,285)	1:A:108:LYS:C	1:A:109:MET:N	1:A:109:MET:CA	1:A:109:MET:C	8	58.87
(1,186)	1:A:20:ALA:C	1:A:21:GLY:N	1:A:21:GLY:CA	1:A:21:GLY:C	2	58.77
(1,305)	1:A:116:CYS:C	1:A:117:LEU:N	1:A:117:LEU:CA	1:A:117:LEU:C	13	58.75
(1,181)	1:A:19:ASN:N	1:A:19:ASN:CA	1:A:19:ASN:C	1:A:20:ALA:N	16	58.66
(1,357)	1:A:164:LYS:C	1:A:165:CYS:N	1:A:165:CYS:CA	1:A:165:CYS:C	4	58.57
(1,286)	1:A:109:MET:N	1:A:109:MET:CA	1:A:109:MET:C	1:A:110:TYR:N	1	58.56
(1,246)	1:A:95:PRO:N	1:A:95:PRO:CA	1:A:95:PRO:C	1:A:96:GLU:N	2	58.53
(1,288)	1:A:109:MET:C	1:A:110:TYR:N	1:A:110:TYR:CA	1:A:110:TYR:C	18	58.46
(1,293)	1:A:111:ARG:C	1:A:112:GLY:N	1:A:112:GLY:CA	1:A:112:GLY:C	11	58.43
(1,279)	1:A:106:THR:C	1:A:107:ALA:N	1:A:107:ALA:CA	1:A:107:ALA:C	6	58.35
(1,365)	1:A:167:GLN:N	1:A:167:GLN:CA	1:A:167:GLN:C	1:A:168:LEU:N	2	58.33
(1,228)	1:A:75:LEU:C	1:A:76:LEU:N	1:A:76:LEU:CA	1:A:76:LEU:C	20	58.27
(1,337)	1:A:157:GLY:C	1:A:158:VAL:N	1:A:158:VAL:CA	1:A:158:VAL:C	4	58.2
(1,355)	1:A:163:GLU:C	1:A:164:LYS:N	1:A:164:LYS:CA	1:A:164:LYS:C	15	58.18
(1,203)	1:A:52:ASP:N	1:A:52:ASP:CA	1:A:52:ASP:C	1:A:53:TRP:N	1	58.14
(1,299)	1:A:114:LYS:N	1:A:114:LYS:CA	1:A:114:LYS:C	1:A:115:ILE:N	6	58.09
(1,314)	1:A:119:ASP:N	1:A:119:ASP:CA	1:A:119:ASP:C	1:A:120:HIS:N	9	58.07
(1,355)	1:A:163:GLU:C	1:A:164:LYS:N	1:A:164:LYS:CA	1:A:164:LYS:C	9	58.04
(1,210)	1:A:60:LYS:N	1:A:60:LYS:CA	1:A:60:LYS:C	1:A:61:GLU:N	20	57.99
(1,346)	1:A:160:GLN:C	1:A:161:HIS:N	1:A:161:HIS:CA	1:A:161:HIS:C	4	57.86
(1,230)	1:A:76:LEU:N	1:A:76:LEU:CA	1:A:76:LEU:C	1:A:77:LYS:N	18	57.75
(1,360)	1:A:165:CYS:C	1:A:166:ASN:N	1:A:166:ASN:CA	1:A:166:ASN:C	8	57.62
(1,299)	1:A:114:LYS:N	1:A:114:LYS:CA	1:A:114:LYS:C	1:A:115:ILE:N	2	57.46
(1,277)	1:A:106:THR:N	1:A:106:THR:CA	1:A:106:THR:C	1:A:107:ALA:N	11	57.39
(1,247)	1:A:95:PRO:C	1:A:96:GLU:N	1:A:96:GLU:CA	1:A:96:GLU:C	9	57.3
(1,253)	1:A:97:ILE:C	1:A:98:ALA:N	1:A:98:ALA:CA	1:A:98:ALA:C	7	57.28
(1,198)	1:A:50:ASP:C	1:A:51:ASN:N	1:A:51:ASN:CA	1:A:51:ASN:C	9	57.28
(1,349)	1:A:161:HIS:C	1:A:162:LYS:N	1:A:162:LYS:CA	1:A:162:LYS:C	6	57.25
(1,220)	1:A:66:PHE:N	1:A:66:PHE:CA	1:A:66:PHE:C	1:A:67:GLY:N	8	57.24
(1,257)	1:A:98:ALA:C	1:A:99:VAL:N	1:A:99:VAL:CA	1:A:99:VAL:C	5	57.22
(1,318)	1:A:127:ARG:C	1:A:128:ASN:N	1:A:128:ASN:CA	1:A:128:ASN:C	8	57.14
(1,294)	1:A:112:GLY:C	1:A:113:GLY:N	1:A:113:GLY:CA	1:A:113:GLY:C	15	57.13
(1,280)	1:A:107:ALA:N	1:A:107:ALA:CA	1:A:107:ALA:C	1:A:108:LYS:N	5	57.05
(1,299)	1:A:114:LYS:N	1:A:114:LYS:CA	1:A:114:LYS:C	1:A:115:ILE:N	14	57.01
(1,325)	1:A:131:LYS:C	1:A:132:PHE:N	1:A:132:PHE:CA	1:A:132:PHE:C	20	56.99
(1,220)	1:A:66:PHE:N	1:A:66:PHE:CA	1:A:66:PHE:C	1:A:67:GLY:N	11	56.96
(1,186)	1:A:20:ALA:C	1:A:21:GLY:N	1:A:21:GLY:CA	1:A:21:GLY:C	9	56.94
(1,272)	1:A:104:GLY:C	1:A:105:LYS:N	1:A:105:LYS:CA	1:A:105:LYS:C	2	56.9
(1,296)	1:A:113:GLY:C	1:A:114:LYS:N	1:A:114:LYS:CA	1:A:114:LYS:C	3	56.87
(1,210)	1:A:60:LYS:N	1:A:60:LYS:CA	1:A:60:LYS:C	1:A:61:GLU:N	17	56.7
(1,345)	1:A:160:GLN:N	1:A:160:GLN:CA	1:A:160:GLN:C	1:A:161:HIS:N	15	56.68
(1,250)	1:A:96:GLU:C	1:A:97:ILE:N	1:A:97:ILE:CA	1:A:97:ILE:C	3	56.64
(1,257)	1:A:98:ALA:C	1:A:99:VAL:N	1:A:99:VAL:CA	1:A:99:VAL:C	15	56.59
(1,210)	1:A:60:LYS:N	1:A:60:LYS:CA	1:A:60:LYS:C	1:A:61:GLU:N	1	56.57
(1,324)	1:A:131:LYS:C	1:A:132:PHE:N	1:A:132:PHE:CA	1:A:132:PHE:C	4	56.56
(1,247)	1:A:95:PRO:C	1:A:96:GLU:N	1:A:96:GLU:CA	1:A:96:GLU:C	20	56.5
(1,186)	1:A:20:ALA:C	1:A:21:GLY:N	1:A:21:GLY:CA	1:A:21:GLY:C	10	56.5
(1,342)	1:A:159:ILE:N	1:A:159:ILE:CA	1:A:159:ILE:C	1:A:160:GLN:N	7	56.48
(1,282)	1:A:107:ALA:C	1:A:108:LYS:N	1:A:108:LYS:CA	1:A:108:LYS:C	10	56.47
(1,201)	1:A:51:ASN:C	1:A:52:ASP:N	1:A:52:ASP:CA	1:A:52:ASP:C	8	56.46
(1,360)	1:A:165:CYS:C	1:A:166:ASN:N	1:A:166:ASN:CA	1:A:166:ASN:C	18	56.43



Key	$rac{ed\ from\ previous\ po}{\mathbf{Atom-1}}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,342)	1:A:159:ILE:N	1:A:159:ILE:CA	1:A:159:ILE:C	1:A:160:GLN:N	4	56.38
(1,184)	1:A:20:ALA:N	1:A:20:ALA:CA	1:A:20:ALA:C	1:A:21:GLY:N	2	56.38
(1,280)	1:A:107:ALA:N	1:A:107:ALA:CA	1:A:107:ALA:C	1:A:108:LYS:N	19	56.36
(1,272)	1:A:104:GLY:C	1:A:105:LYS:N	1:A:105:LYS:CA	1:A:105:LYS:C	6	56.25
(1,257)	1:A:98:ALA:C	1:A:99:VAL:N	1:A:99:VAL:CA	1:A:99:VAL:C	17	56.2
(1,298)	1:A:114:LYS:N	1:A:114:LYS:CA	1:A:114:LYS:C	1:A:115:ILE:N	1	56.19
(1,281)	1:A:107:ALA:C	1:A:108:LYS:N	1:A:108:LYS:CA	1:A:108:LYS:C	17	56.18
(1,328)	1:A:140:LEU:C	1:A:141:GLY:N	1:A:141:GLY:CA	1:A:141:GLY:C	8	56.17
(1,186)	1:A:20:ALA:C	1:A:21:GLY:N	1:A:21:GLY:CA	1:A:21:GLY:C	4	56.17
(1,272)	1:A:104:GLY:C	1:A:105:LYS:N	1:A:105:LYS:CA	1:A:105:LYS:C	18	56.08
(1,344)	1:A:159:ILE:C	1:A:160:GLN:N	1:A:160:GLN:CA	1:A:160:GLN:C	10	56.03
(1,301)	1:A:115:ILE:N	1:A:115:ILE:CA	1:A:115:ILE:C	1:A:116:CYS:N	20	55.89
(1,220)	1:A:66:PHE:N	1:A:66:PHE:CA	1:A:66:PHE:C	1:A:67:GLY:N	20	55.88
(1,299)	1:A:114:LYS:N	1:A:114:LYS:CA	1:A:114:LYS:C	1:A:115:ILE:N	5	55.82
(1,357)	1:A:164:LYS:C	1:A:165:CYS:N	1:A:165:CYS:CA	1:A:165:CYS:C	6	55.79
(1,220)	1:A:66:PHE:N	1:A:66:PHE:CA	1:A:66:PHE:C	1:A:67:GLY:N	10	55.75
(1,360)	1:A:165:CYS:C	1:A:166:ASN:N	1:A:166:ASN:CA	1:A:166:ASN:C	6	55.73
(1,253)	1:A:97:ILE:C	1:A:98:ALA:N	1:A:98:ALA:CA	1:A:98:ALA:C	13	55.72
(1,257)	1:A:98:ALA:C	1:A:99:VAL:N	1:A:99:VAL:CA	1:A:99:VAL:C	13	55.67
(1,186)	1:A:20:ALA:C	1:A:21:GLY:N	1:A:21:GLY:CA	1:A:21:GLY:C	1	55.67
(1,340)	1:A:158:VAL:C	1:A:159:ILE:N	1:A:159:ILE:CA	1:A:159:ILE:C	10	55.66
(1,284)	1:A:108:LYS:C	1:A:109:MET:N	1:A:109:MET:CA	1:A:109:MET:C	17	55.66
(1,177)	1:A:17:LYS:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	17	55.62
(1,185)	1:A:20:ALA:N	1:A:20:ALA:CA	1:A:20:ALA:C	1:A:21:GLY:N	6	55.52
(1,168)	1:A:14:PRO:N	1:A:14:PRO:CA	1:A:14:PRO:C	1:A:15:VAL:N	3	55.48
(1,283)	1:A:108:LYS:N	1:A:108:LYS:CA	1:A:108:LYS:C	1:A:109:MET:N	3	55.44
(1,296)	1:A:113:GLY:C	1:A:114:LYS:N	1:A:114:LYS:CA	1:A:114:LYS:C	15	55.42
(1,294)	1:A:112:GLY:C	1:A:113:GLY:N	1:A:113:GLY:CA	1:A:113:GLY:C	4	55.42
(1,230)	1:A:76:LEU:N	1:A:76:LEU:CA	1:A:76:LEU:C	1:A:77:LYS:N	14	55.39
(1,359)	1:A:165:CYS:N	1:A:165:CYS:CA	1:A:165:CYS:C	1:A:166:ASN:N	6	55.33
(1,178)	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	1:A:19:ASN:N	7	55.33
(1,93)	1:A:72:ILE:C	1:A:73:HIS:N	1:A:73:HIS:CA	1:A:73:HIS:C	18	55.28
(1,204)	1:A:52:ASP:C	1:A:53:TRP:N	1:A:53:TRP:CA	1:A:53:TRP:C	3	55.25
(1,362)	1:A:166:ASN:N	1:A:166:ASN:CA	1:A:166:ASN:C	1:A:167:GLN:N	12	55.23
(1,219)	1:A:65:TRP:C	1:A:66:PHE:N	1:A:66:PHE:CA	1:A:66:PHE:C	9	55.16
(1,342)	1:A:159:ILE:N	1:A:159:ILE:CA	1:A:159:ILE:C	1:A:160:GLN:N	20	55.13
(1,305)	1:A:116:CYS:C	1:A:117:LEU:N	1:A:117:LEU:CA	1:A:117:LEU:C	8	55.12
(1,337)	1:A:157:GLY:C	1:A:158:VAL:N	1:A:158:VAL:CA	1:A:158:VAL:C	5	55.11
(1,272)	1:A:104:GLY:C	1:A:105:LYS:N	1:A:105:LYS:CA	1:A:105:LYS:C	5	55.08
(1,302)	1:A:115:ILE:C	1:A:116:CYS:N	1:A:116:CYS:CA	1:A:116:CYS:C	19	55.02
(1,355)	1:A:163:GLU:C	1:A:164:LYS:N	1:A:164:LYS:CA	1:A:164:LYS:C	6	54.97
(1,314)	1:A:119:ASP:N	1:A:119:ASP:CA	1:A:119:ASP:C	1:A:120:HIS:N	14	54.97
(1,337)	1:A:157:GLY:C	1:A:158:VAL:N	1:A:158:VAL:CA	1:A:158:VAL:C	19	54.96
(1,205)	1:A:52:ASP:C	1:A:53:TRP:N	1:A:53:TRP:CA	1:A:53:TRP:C	9	54.96
(1,302)	1:A:115:ILE:C	1:A:116:CYS:N	1:A:116:CYS:CA	1:A:116:CYS:C	12	54.94
(1,173)	1:A:16:LEU:C	1:A:17:LYS:N	1:A:17:LYS:CA	1:A:17:LYS:C	11	54.91
(1,204)	1:A:52:ASP:C	1:A:53:TRP:N	1:A:53:TRP:CA	1:A:53:TRP:C	19	54.89
(1,302)	1:A:115:ILE:C	1:A:116:CYS:N	1:A:116:CYS:CA	1:A:116:CYS:C	4	54.85
(1,311)	1:A:118:THR:N	1:A:118:THR:CA	1:A:118:THR:C	1:A:119:ASP:N	4	54.82
(1,186)	1:A:20:ALA:C	1:A:21:GLY:N	1:A:21:GLY:CA	1:A:21:GLY:C	19	54.76
(1,317)	1:A:120:HIS:N	1:A:120:HIS:CA	1:A:120:HIS:C	1:A:121:PHE:N	19	54.74
(/ /		I		I .		ed on nert nage



Atom-3		ed from previous p					
(1.290) I:A:66:PHEN I:A:66:PHECA I:A:66:PHECA I:A:66:PHECA I:A:66:PHECA I:A:66:PHEN IIIIIIIIIIIIIIIIIIIIIIIIIIIIIIIIIIII							\ /
(1.299)	, ,						
(1.219)	(1,220)	1:A:66:PHE:N		1:A:66:PHE:C	1:A:67:GLY:N		54.7
(1.365) 1:A:1561/SCC 1:A:157-GDY:N 1:A:157-GDY:C 6 54.58	(1,299)	1:A:114:LYS:N	1:A:114:LYS:CA	1:A:114:LYS:C	1:A:115:ILE:N	13	54.68
(1.168) 1:A:14-PRO:N 1:A:14-PRO:C 1:A:14-PRO:C 1:A:15-VAL:N 11 54.54 (1.257) 1:A:98-ALA:C 1:A:99-VAL:N 1:A:99-VAL:CA 1:A:99-VAL:N 19 54.45 (1.215) 1:A:62-GIY:C 1:A:63-THR:N 1:A:63-THR:CA 1:A:69-VAL:CA 1:A:69-VAL:	(1,219)	1:A:65:TRP:C	1:A:66:PHE:N	1:A:66:PHE:CA	1:A:66:PHE:C	5	54.6
(1.257) 1:A-98-ALA-C	(1,335)	1:A:156:LYS:C	1:A:157:GLY:N	1:A:157:GLY:CA	1:A:157:GLY:C	6	54.58
(1,215 1:A-62:GIY-C	(1,168)	1:A:14:PRO:N	1:A:14:PRO:CA	1:A:14:PRO:C	1:A:15:VAL:N	11	54.54
(1,201) 1:A:66:PHEN	(1,257)	1:A:98:ALA:C	1:A:99:VAL:N	1:A:99:VAL:CA	1:A:99:VAL:C	19	54.45
(1,201 1:A-51:ASN-C 1:A-52:ASP:CA 1:A-52:ASP:CA 1:A-52:ASP:C 18 54.35 (1,344 1:A-119:ASP:N 1:A-119:ASP:C 1:A-129:ASP:C 1:A-52:ASP:N 10 54.31 (1,200 1:A-51:ASN:N 1:A-51:ASN:CA 1:A-51:ASP:C 1:A-52:ASP:N 14 54.29 (1,342 1:A-159:ILE:N 1:A-51:ASN:CA 1:A-51:ASN:C 1:A-52:ASP:N 14 54.29 (1,342 1:A-159:ILE:N 1:A-159:ILE:CA 1:A-159:ILE:C 1:A-160:ILN:N 3 54.28 (1,283 1:A-108:IVS:N 1:A-108:IVS:CA 1:A-108:IVS:C 1:A-109:ILE:N 19 54.25 (1,317 1:A-120:IIIS:N 1:A-120:IIIS:CA 1:A-120:IIIS:C 1:A-121:IPIE:N 10 54.02 (1,339 1:A-121:IE:C 1:A-131:IIS:N 1:A-120:IIIS:CA 1:A-131:IS:CA 1:A-131:IPIE:N 10 54.02 (1,330 1:A-132:IPIE:C 1:A-133:IPIE:CA 1:A-132:IPIE:C 1:A-133:IIS:CA 1:A-	(1,215)	1:A:62:GLY:C	1:A:63:THR:N	1:A:63:THR:CA	1:A:63:THR:C	3	54.42
(1,200 1:A:151:ASN:N 1:A:151:ASN:CA 1:A:151:ASN:C 1:A:20:HIS:N 10 54.31 (1,200 1:A:51:ASN:N 1:A:155:HEEN	(1,220)	1:A:66:PHE:N	1:A:66:PHE:CA	1:A:66:PHE:C	1:A:67:GLY:N	19	54.35
(1,300)	(1,201)	1:A:51:ASN:C	1:A:52:ASP:N	1:A:52:ASP:CA	1:A:52:ASP:C	18	54.35
(1,342)	(1,314)	1:A:119:ASP:N	1:A:119:ASP:CA	1:A:119:ASP:C	1:A:120:HIS:N	10	54.31
(1,283)	(1,200)	1:A:51:ASN:N	1:A:51:ASN:CA	1:A:51:ASN:C	1:A:52:ASP:N	14	54.29
(1,283) 1:A:108:LVS:N	(1,342)	1:A:159:ILE:N	1:A:159:ILE:CA	1:A:159:ILE:C	1:A:160:GLN:N	3	54.28
(1,317 1:\(\alpha:120:HIS:\text{N} 1:\(\alpha:120:HIS:\text{C} 1:\(\alpha:120:HIS:\text{C} 1:\(\alpha:120:HIS:\text{C} 1:\(\alpha:120:HIS:\text{C} 1:\(\alpha:120:HIS:\text{C} 1:\(\alpha:166:ASN:\text{C} 1:\(\alpha:166:ASN:\text{C} 1:\(\alpha:166:ASN:\text{C} 1:\(\alpha:166:ASN:\text{C} 1:\(\alpha:166:ASN:\text{C} 1:\(\alpha:130:HIS:\text{C} 1:\(\alpha:132:PHE:\text{C} 1:\(\alpha:132:PHE:\text{C} 1:\(\alpha:133:HIS:\text{C} 1:\(\alpha:133:GLY:\text{N} 9 53.83 \\ (1,294) 1:\(\alpha:112:GLY:\text{C} 1:\(\alpha:113:GLY:\text{C} 1:	,	1:A:108:LYS:N	1:A:108:LYS:CA	1:A:108:LYS:C	1:A:109:MET:N	19	54.25
(1,93) 1:A:72:ILE:C 1:A:73:HIS:N 1:A:73:HIS:CA 1:A:73:HIS:C 3 53.89 (1,960) 1:A:165:CYS:C 1:A:166:ASN:N 1:A:166:ASN:CA 1:A:166:ASN:C 14 53.85 (1,326) 1:A:132:PHE:N 1:A:132:PHE:N 1:A:132:PHE:N 1:A:132:PHE:N 1:A:132:PHE:N 1:A:132:PHE:N 1:A:133:PHE:N 1:A:133:CHY:N 1:A:113:GLY:C 2 53.81 (1,294) 1:A:112:GLY:C 1:A:113:GLY:N 1:A:113:GLY:CA 1:A:113:GLY:C 2 53.81 (1,328) 1:A:140:LEU:C 1:A:141:GLY:N 1:A:141:GLY:CA 1:A:141:GLY:C 20 53.79 (1,215) 1:A:62:GLY:C 1:A:63:THR:N 1:A:63:THR:CA 1:A:63:THR:C 14 53.79 (1,198) 1:A:50:ASP:C 1:A:51:ASN:N 1:A:51:ASN:CA 1:A:63:THR:C 14 53.79 (1,198) 1:A:50:ASP:C 1:A:51:ASN:N 1:A:51:ASN:CA 1:A:51:ASN:C 4 53.78 (1,230) 1:A:76:LEU:N 1:A:76:LEU:CA 1:A:76:LEU:C 1:A:77:LYS:N 17 53.71 (1,360) 1:A:76:LEU:N 1:A:76:LEU:CA 1:A:76:LEU:CA 1:A:166:ASN:CA 1:A:166:ASN:C 13 53.64 (1,318) 1:A:127:ARG:C 1:A:128:ASN:N 1:A:166:ASN:CA 1:A:128:ASN:C 16 53.61 (1,328) 1:A:140:LEU:C 1:A:141:GLY:N 1:A:141:GLY:CA 1:A:141:GLY:C 9 53.6 (1,270) 1:A:103:ASP:C 1:A:104:GLY:N 1:A:104:GLY:CA 1:A:104:GLY:C 1 4 53.58 (1,272) 1:A:104:GLY:C 1:A:105:LYS:N 1:A:104:GLY:C 1 1:A:104:GLY:N 1:A:104:GLY:C 1 1:A:104:GLY:C 1 1:A:104:GLY:N 1:A:104:GLY:C 1 1:A:104:GLY:N 1:A:104:GLY:C 1 1:A:104:GLY:N 1:	,	1:A:120:HIS:N	1:A:120:HIS:CA	1:A:120:HIS:C	1:A:121:PHE:N	10	54.02
(1,360) 1:A:165:CYS;C	,			1:A:73:HIS:CA		3	
(1,326) 1:A:132:PHE:N	· · /						
	· · /						
(1,328) 1:A:140:LEU:C 1:A:141:GLY:N 1:A:141:GLY:CA 1:A:141:GLY:C 20 53.79 (1,215) 1:A:62:GLY:C 1:A:63:THR:N 1:A:63:THR:CA 1:A:63:THR:C 14 53.79 (1,198) 1:A:50:ASP:C 1:A:51:ASN:N 1:A:51:ASN:CA 1:A:51:ASN:C 4 53.78 (1,230) 1:A:165:CYS:C 1:A:51:ASN:N 1:A:51:ASN:CA 1:A:51:ASN:C 17 53.71 (1,360) 1:A:165:CYS:C 1:A:166:ASN:N 1:A:166:ASN:CA 1:A:166:ASN:C 13 53.64 (1,318) 1:A:127:ARG:C 1:A:128:ASN:N 1:A:166:ASN:CA 1:A:166:ASN:C 13 53.64 (1,318) 1:A:127:ARG:C 1:A:128:ASN:N 1:A:128:ASN:CA 1:A:128:ASN:C 16 53.61 (1,328) 1:A:140:LEU:C 1:A:141:GLY:N 1:A:141:GLY:CA 1:A:141:GLY:C 9 53.6 (1,270) 1:A:103:ASP:C 1:A:104:GLY:N 1:A:104:GLY:CA 1:A:141:GLY:C 14 53.58 (1,272) 1:A:104:GLY:C 1:A:105:LYS:N 1:A:104:GLY:C 1:A:104:GLY:C 14 53.56 (1,272) 1:A:104:GLY:C 1:A:131:SLY:N 1:A:105:LYS:CA 1:A:105:LYS:C 12 53.56 (1,331) 1:A:72:LLE:C 1:A:73:HLS:C 1:A:73:HLS:CA 1:A:13:GLU:N 9 53.52 (1,199) 1:A:162:LYS:N 1:A:162:LYS:C 1:A:162:LYS:C 1:A:163:LYS:C 1:A:163:LYS:N 1:A:162:LYS:C 1:A:163:LYS:C 1:A:163:LYS:N 1:A:163:LYS:C 1:A:163:	` '					I .	
(1,215) 1:A:62:GLY:C 1:A:63:THR:N 1:A:63:THR:CA 1:A:63:THR:C 14 53.79 (1,198) 1:A:50:ASP:C 1:A:51:ASN:N 1:A:51:ASN:CA 1:A:51:ASN:C 4 53.78 (1,230) 1:A:76:LEU:N 1:A:76:LEU:CA 1:A:76:LEU:C 1:A:77:LYS:N 17 53.71 (1,360) 1:A:76:LEU:N 1:A:76:LEU:CA 1:A:76:LEU:C 1:A:77:LYS:N 17 53.71 (1,360) 1:A:165:CYS:C 1:A:166:ASN:N 1:A:166:ASN:CA 1:A:166:ASN:C 13 53.64 (1,318) 1:A:127:ARG:C 1:A:128:ASN:N 1:A:128:ASN:CA 1:A:128:ASN:C 16 53.61 (1,338) 1:A:140:LEU:C 1:A:141:GLY:N 1:A:141:GLY:CA 1:A:141:GLY:C 9 53.6 (1,270) 1:A:103:ASP:C 1:A:104:GLY:N 1:A:104:GLY:CA 1:A:104:GLY:C 14 53.58 (1,272) 1:A:104:GLY:C 1:A:105:LYS:N 1:A:105:LYS:CA 1:A:104:GLY:C 12 53.56 (1,272) 1:A:104:GLY:C 1:A:105:LYS:N 1:A:105:LYS:CA 1:A:15:LYS:C 12 53.56 (1,331) 1:A:162:LYS:N 1:A:162:LYS:N 1:A:162:LYS:C 12 53.56 (1,93) 1:A:152:LE:C 1:A:73:HIS:N 1:A:73:HIS:CA 1:A:73:HIS:C 19 53.53 (1,351) 1:A:162:LYS:N 1:A:162:LYS:CA 1:A:162:LYS:C 1:A:163:GLU:N 9 53.52 (1,199) 1:A:50:ASP:C 1:A:51:ASN:N 1:A:51:ASN:CA 1:A:151:ASN:C 18 53.48 (1,278) 1:A:106:THR:C 1:A:73:HIS:N 1:A:73:HIS:CA 1:A:73:HIS:C 14 53.38 (1,278) 1:A:106:THR:C 1:A:73:HIS:N 1:A:73:HIS:CA 1:A:73:HIS:C 14 53.38 (1,278) 1:A:106:THR:C 1:A:107:ALA:N 1:A:107:ALA:CA 1:A:107:ALA:C 18 53.34 (1,183) 1:A:19:ASN:C 1:A:20:ALA:N 1:A:107:ALA:CA 1:A:107:ALA:C 18 53.34 (1,183) 1:A:19:ASN:C 1:A:14:PRO:N 1:A:14:PRO:C 1:A:14:PRO:C 1:A:14:PRO:C 1:A:14:PRO:C 1:A:14:PRO:C 1:A:15:VAL:N 13 53.29 (1,168) 1:A:14:PRO:N 1:A:14:PRO:CA 1:A:14:PRO:C 1:A:15:VAL:N 13 53.29 (1,168) 1:A:14:PRO:N 1:A:14:PRO:CA 1:A:14:PRO:C 1:A:15:VAL:N 15 53.24 (1,173) 1:A:16:LEU:C 1:A:17:LYS:N 1:A:102:LEU:CA 1:A:101:CHU:C 1:A:15:JUS:CA 1:A:117:LEU:C 9 53.21 (1,305) 1:A:116:CYS:C 1:A:117:LEU:N 1:A:117:LEU:CA 1:A:117:LEU:C 9 53.03 (1,346) 1:A:149:RO:N 1:A:149:RO:N 1:A:149:RO:C 1:A:116:HIS:C 10 53.03 (1,346) 1:A:160:GLN:C 1:A:116:HIS:N 1:A:116:	· · /						
(1,198) 1:A:50:ASP:C 1:A:51:ASN:N 1:A:51:ASN:CA 1:A:51:ASN:C 4 53.78 (1,230) 1:A:76:LEU:N 1:A:76:LEU:CA 1:A:76:LEU:C 1:A:77:LYS:N 17 53.71 (1,360) 1:A:165:CYS:C 1:A:166:ASN:N 1:A:166:ASN:CA 1:A:166:ASN:CC 13 53.64 (1,318) 1:A:127:ARG:C 1:A:128:ASN:N 1:A:128:ASN:CA 1:A:166:ASN:C 16 53.61 (1,328) 1:A:140:LEU:C 1:A:141:GLY:N 1:A:141:GLY:CA 1:A:141:GLY:C 9 53.6 (1,270) 1:A:104:GLY:C 1:A:104:GLY:N 1:A:104:GLY:CA 1:A:104:GLY:C 1:A:53:BS (1,272) 1:A:104:GLY:C 1:A:105:LYS:N 1:A:105:LYS:CA 1:A:105:LYS:C 12 53.56 (1,272) 1:A:162:LYS:N 1:A:162:LYS:CA 1:A:162:LYS:C 1:A:163:GLU:N 9 53.52 (1,93) 1:A:72:ILE:C 1:A:51:ASN:N 1:A:36:ASS:CA 1:A:51:ASS:CA 1:A:51:ASS:CA 1:A:51:ASS:CA 1:A:51:ASS:CA 1:A:51:ASS:CA 1:A:51:ASS:CA 1:A:51:ASS:CA 1:A:51:ASS:CA	/						
(1,230) 1:A:76:LEU:N 1:A:76:LEU:CA 1:A:76:LEU:C 1:A:77:LYS:N 17 53.71 (1,360) 1:A:166:CYS:C 1:A:166:ASN:N 1:A:166:ASN:CA 1:A:166:ASN:C 13 53.64 (1,318) 1:A:127:ARG:C 1:A:128:ASN:N 1:A:14:16:LY:CA 1:A:14:GIY:C 16 53.61 (1,328) 1:A:140:EU:C 1:A:141:GIY:N 1:A:141:GIY:CA 1:A:141:GIY:C 9 53.6 (1,270) 1:A:103:ASP:C 1:A:104:GLY:N 1:A:104:GLY:CA 1:A:104:GLY:C 14 53.58 (1,272) 1:A:104:GLY:C 1:A:105:LYS:N 1:A:105:LYS:CA 1:A:105:LYS:C 12 53.56 (1,93) 1:A:72:ILE:C 1:A:162:LYS:N 1:A:162:LYS:CA 1:A:162:LYS:C 1:A:162:LYS:C 19 53.53 (1,351) 1:A:162:LYS:N 1:A:162:LYS:CA 1:A:162:LYS:C	(, ,			1:A:51:ASN:CA			
(1,360) 1:A:165:CYS:C 1:A:166:ASN:N 1:A:166:ASN:CA 1:A:166:ASN:C 13 53.64 (1,318) 1:A:127:ARG:C 1:A:128:ASN:N 1:A:128:ASN:CA 1:A:128:ASN:C 16 53.61 (1,318) 1:A:140:LEU:C 1:A:141:GLY:N 1:A:141:GLY:CA 1:A:141:GLY:C 9 53.6 (1,270) 1:A:104:GLY:C 1:A:104:GLY:N 1:A:105:LYS:CA 1:A:104:GLY:C 14 53.58 (1,272) 1:A:104:GLY:C 1:A:105:LYS:N 1:A:105:LYS:CA 1:A:105:LYS:C 12 53.56 (1,93) 1:A:72:ILE:C 1:A:73:HIS:N 1:A:73:HIS:CA 1:A:73:HIS:C 19 53.53 (1,351) 1:A:162:LYS:N 1:A:162:LYS:CA 1:A:163:GLU:N 9 53.52 (1,199) 1:A:56:ASP:C 1:A:13:ASN:N 1:A:73:HIS:CA 1:A:163:GLU:N 9 53.52 (1,193) 1:A:162:LYS:N 1:A:162:LYS:CA 1:A:162:LYS:C 1:A:163:GLU:N 9 53.52 (1,193) 1:A:162:LSU:S 1:A:162:LYS:C 1:A:163:GLU:N 9 53.52	/						
(1,318) 1:A:127:ARG:C 1:A:128:ASN:N 1:A:128:ASN:CA 1:A:128:ASN:C 16 53.61 (1,328) 1:A:140:LEU:C 1:A:141:GLY:N 1:A:141:GLY:CA 1:A:141:GLY:C 9 53.6 (1,270) 1:A:103:ASP:C 1:A:104:GLY:N 1:A:104:GLY:CA 1:A:105:LYS:C 14 53.58 (1,272) 1:A:104:GLY:C 1:A:105:LYS:N 1:A:105:LYS:CA 1:A:105:LYS:C 12 53.56 (1,93) 1:A:72:ILE:C 1:A:73:HIS:N 1:A:73:HIS:CA 1:A:73:HIS:C 19 53.53 (1,351) 1:A:162:LYS:N 1:A:162:LYS:CA 1:A:162:LYS:C 1:A:163:GLU:N 9 53.52 (1,199) 1:A:50:ASP:C 1:A:51:ASN:N 1:A:162:LYS:C 1:A:163:GLU:N 9 53.52 (1,199) 1:A:160:ASP:C 1:A:51:ASN:N 1:A:162:LYS:C 1:A:163:GLU:N 9 53.52 (1,199) 1:A:162:ASP:C 1:A:13:HS:CA 1:A:163:GLU:N 9 53.52 (1,193) 1:A:162:ASP:C 1:A:13:HS:ASN:CA 1:A:163:GLU:N 1 53.32	· · /						
(1,328) 1:A:140:LEU:C 1:A:141:GLY:N 1:A:141:GLY:CA 1:A:141:GLY:C 9 53.6 (1,270) 1:A:103:ASP:C 1:A:104:GLY:N 1:A:104:GLY:CA 1:A:104:GLY:C 14 53.58 (1,272) 1:A:104:GLY:C 1:A:105:LYS:N 1:A:105:LYS:CA 1:A:105:LYS:C 1:2:53.56 (1,93) 1:A:72:ILE:C 1:A:73:HIS:N 1:A:73:HIS:CA 1:A:163:GLU:N 9 53.53 (1,351) 1:A:162:LYS:N 1:A:162:LYS:CA 1:A:163:GLU:N 9 53.52 (1,199) 1:A:50:ASP:C 1:A:4162:LYS:CA 1:A:163:GLU:N 9 53.52 (1,199) 1:A:50:ASP:C 1:A:43:SSN:N 1:A:162:LYS:C 1:A:163:GLU:N 9 53.52 (1,199) 1:A:160:ASP:C 1:A:163:GLU:N 9 53.52 1 1 1 1 1 1 3 3 4 1 3 4 1 3 3 4 1 3 3 3 3 8 1 3 3 3 3	· · /						
(1,270) 1:A:103:ASP:C 1:A:104:GLY:N 1:A:104:GLY:CA 1:A:104:GLY:C 14 53.58 (1,272) 1:A:104:GLY:C 1:A:105:LYS:N 1:A:105:LYS:CA 1:A:105:LYS:C 12 53.56 (1,93) 1:A:72:ILE:C 1:A:73:HIS:N 1:A:73:HIS:CA 1:A:73:HIS:C 19 53.53 (1,351) 1:A:162:LYS:N 1:A:162:LYS:CA 1:A:162:LYS:C 1:A:163:GLU:N 9 53.52 (1,199) 1:A:50:ASP:C 1:A:51:ASN:C 1:A:51:ASN:C 18 53.48 (1,93) 1:A:72:ILE:C 1:A:73:HIS:N 1:A:51:ASN:CA 1:A:51:ASN:C 18 53.48 (1,93) 1:A:106:THR:C 1:A:107:ALA:N 1:A:107:ALA:CA 1:A:107:ALA:C 18 53.34 (1,278) 1:A:106:THR:C 1:A:1407:ALA:N 1:A:107:ALA:CA 1:A:107:ALA:C 18 53.34 (1,183) 1:A:14:PRO:N 1:A:14:PRO:CA 1:A:14:PRO:C 1:A:14:PRO:C 1:A:14:PRO:C 1:A:15:VAL:N 13 53.29 (1,168) 1:A:14:PRO:N 1:A:14:PRO:C 1:A:14:PRO:C	· · /						
(1,272) 1:A:104:GLY:C 1:A:105:LYS:N 1:A:105:LYS:CA 1:A:105:LYS:C 12 53.56 (1,93) 1:A:72:ILE:C 1:A:73:HIS:N 1:A:73:HIS:CA 1:A:73:HIS:C 19 53.53 (1,351) 1:A:162:LYS:N 1:A:162:LYS:CA 1:A:162:LYS:C 1:A:163:GLU:N 9 53.52 (1,199) 1:A:50:ASP:C 1:A:51:ASN:N 1:A:51:ASN:CA 1:A:163:GLU:N 9 53.52 (1,199) 1:A:50:ASP:C 1:A:451:ASN:N 1:A:451:ASN:CA 1:A:451:ASN:C 18 53.48 (1,93) 1:A:72:ILE:C 1:A:73:HIS:N 1:A:73:HIS:CA 1:A:73:HIS:CA 14 53.38 (1,278) 1:A:10:GHR:C 1:A:10:ALA:N 1:A:107:ALA:CA 1:A:73:HIS:CA 14 53.38 (1,183) 1:A:14:PRO:C 1:A:14:PRO:CA 1:A:14:PRO:CA 1:A:14:PRO:CA 1:A:14:PRO:CA 1:A:14:PRO:CA 1:A:14:PRO:CA 1:A:15:VAL:N 13 53.29 (1,264) 1:A:14:PRO:N 1:A:14:PRO:CA 1:A:14:PRO:C 1:A:15:VAL:N 15 53.24 (1,168)		1:A:103:ASP:C	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	14	
(1,93) 1:A:72:ILE:C 1:A:73:HIS:N 1:A:73:HIS:CA 1:A:73:HIS:C 19 53.53 (1,351) 1:A:162:LYS:N 1:A:162:LYS:CA 1:A:162:LYS:C 1:A:163:GLU:N 9 53.52 (1,199) 1:A:50:ASP:C 1:A:51:ASN:N 1:A:51:ASN:CA 1:A:51:ASN:C 18 53.48 (1,93) 1:A:72:ILE:C 1:A:73:HIS:N 1:A:73:HIS:CA 1:A:73:HIS:C 14 53.38 (1,278) 1:A:106:THR:C 1:A:107:ALA:N 1:A:107:ALA:CA 1:A:107:ALA:C 18 53.34 (1,183) 1:A:19:ASN:C 1:A:20:ALA:N 1:A:20:ALA:CA 1:A:107:ALA:C 1 53.29 (1,168) 1:A:14:PRO:N 1:A:14:PRO:CA 1:A:14:PRO:C 1:A:15:VAL:N 13 53.29 (1,264) 1:A:14:PRO:N 1:A:14:PRO:CA 1:A:14:PRO:C 1:A:15:VAL:N 15 53.24 (1,173) 1:A:16:LEU:C 1:A:17:LYS:N 1:A:17:LYS:CA 1:A:17:LYS:C 13 53.22 (1,305) 1:A:113:GLY:C 1:A:114:LYS:N 1:A:114:LYS:C 1:A:114:LYS:C <	· · /	1:A:104:GLY:C	1:A:105:LYS:N	1:A:105:LYS:CA	1:A:105:LYS:C		
(1,351) 1:A:162:LYS:N 1:A:162:LYS:CA 1:A:162:LYS:C 1:A:163:GLU:N 9 53.52 (1,199) 1:A:50:ASP:C 1:A:51:ASN:N 1:A:51:ASN:CA 1:A:51:ASN:C 18 53.48 (1,93) 1:A:72:ILE:C 1:A:73:HIS:N 1:A:73:HIS:CA 1:A:73:HIS:C 14 53.38 (1,278) 1:A:106:THR:C 1:A:107:ALA:N 1:A:107:ALA:CA 1:A:107:ALA:C 18 53.34 (1,183) 1:A:19:ASN:C 1:A:20:ALA:N 1:A:20:ALA:CA 1:A:20:ALA:C 1 53.29 (1,168) 1:A:14:PRO:N 1:A:14:PRO:CA 1:A:14:PRO:C 1:A:15:VAL:N 13 53.29 (1,264) 1:A:101:GLU:C 1:A:102:LEU:N 1:A:102:LEU:CA 1:A:15:VAL:N 15 53.28 (1,168) 1:A:14:PRO:N 1:A:14:PRO:CA 1:A:17:LYS:CA 1:A:15:VAL:N 15 53.24 (1,173) 1:A:16:LEU:C 1:A:17:LYS:N 1:A:17:LYS:CA 1:A:117:LEU:C 9 53.21 (1,297) 1:A:113:GLY:C 1:A:114:LYS:N 1:A:114:LYS:CA 1:A:114:LYS:C	· · /	1:A:72:ILE:C	1:A:73:HIS:N	1:A:73:HIS:CA	1:A:73:HIS:C	19	
(1,199) 1:A:50:ASP:C 1:A:51:ASN:N 1:A:51:ASN:CA 1:A:51:ASN:C 18 53.48 (1,93) 1:A:72:ILE:C 1:A:73:HIS:N 1:A:73:HIS:CA 1:A:73:HIS:C 14 53.38 (1,278) 1:A:106:THR:C 1:A:107:ALA:N 1:A:107:ALA:CA 1:A:107:ALA:C 18 53.34 (1,183) 1:A:19:ASN:C 1:A:20:ALA:N 1:A:20:ALA:CA 1:A:20:ALA:C 1 53.29 (1,168) 1:A:14:PRO:N 1:A:14:PRO:CA 1:A:14:PRO:C 1:A:15:VAL:N 13 53.29 (1,264) 1:A:101:GLU:C 1:A:14:PRO:CA 1:A:14:PRO:C 1:A:15:VAL:N 13 53.29 (1,168) 1:A:14:PRO:N 1:A:14:PRO:CA 1:A:14:PRO:C 1:A:15:VAL:N 15 53.24 (1,173) 1:A:16:LEU:C 1:A:17:LYS:N 1:A:17:LYS:CA 1:A:17:LYS:C 13 53.22 (1,305) 1:A:13:GLY:C 1:A:114:LYS:N 1:A:114:LYS:C 1:A:114:LYS:C 17 53.11 (1,342) 1:A:15:P:ILE:N 1:A:15:P:ILE:CA 1:A:116:GLS:N 1:A:16:HS:N	, ,	1:A:162:LYS:N	1:A:162:LYS:CA	1:A:162:LYS:C	1:A:163:GLU:N	9	
(1,93) 1:A:72:ILE:C 1:A:73:HIS:N 1:A:73:HIS:CA 1:A:73:HIS:C 14 53.38 (1,278) 1:A:106:THR:C 1:A:107:ALA:N 1:A:107:ALA:CA 1:A:107:ALA:C 18 53.34 (1,183) 1:A:19:ASN:C 1:A:20:ALA:N 1:A:20:ALA:CA 1:A:20:ALA:C 1 53.29 (1,168) 1:A:14:PRO:N 1:A:14:PRO:CA 1:A:14:PRO:C 1:A:15:VAL:N 13 53.29 (1,264) 1:A:10:GLU:C 1:A:102:LEU:N 1:A:102:LEU:CA 1:A:15:VAL:N 13 53.29 (1,264) 1:A:14:PRO:N 1:A:14:PRO:CA 1:A:14:PRO:C 1:A:15:VAL:N 13 53.29 (1,264) 1:A:14:PRO:N 1:A:14:PRO:CA 1:A:14:PRO:C 1:A:15:VAL:N 15 53.28 (1,168) 1:A:14:PRO:N 1:A:14:PRO:CA 1:A:14:PRO:C 1:A:15:VAL:N 15 53.24 (1,173) 1:A:16:LEU:C 1:A:17:LYS:CA 1:A:17:LYS:C 13 53.22 (1,305) 1:A:116:CYS:C 1:A:117:LEU:C 1:A:117:LEU:C 9 53.21 <t< td=""><td>,</td><td>1:A:50:ASP:C</td><td>1:A:51:ASN:N</td><td>1:A:51:ASN:CA</td><td></td><td>18</td><td></td></t<>	,	1:A:50:ASP:C	1:A:51:ASN:N	1:A:51:ASN:CA		18	
(1,278) 1:A:106:THR:C 1:A:107:ALA:N 1:A:107:ALA:CA 1:A:107:ALA:C 18 53.34 (1,183) 1:A:19:ASN:C 1:A:20:ALA:N 1:A:20:ALA:CA 1:A:20:ALA:C 1 53.29 (1,168) 1:A:14:PRO:N 1:A:14:PRO:CA 1:A:14:PRO:C 1:A:15:VAL:N 13 53.29 (1,264) 1:A:101:GLU:C 1:A:102:LEU:N 1:A:102:LEU:CA 1:A:102:LEU:C 3 53.28 (1,168) 1:A:14:PRO:N 1:A:14:PRO:CA 1:A:14:PRO:C 1:A:15:VAL:N 15 53.24 (1,173) 1:A:16:EU:C 1:A:17:LYS:N 1:A:17:LYS:CA 1:A:17:LYS:C 13 53.22 (1,305) 1:A:116:CYS:C 1:A:117:LEU:N 1:A:117:LEU:CA 1:A:117:LEU:C 9 53.21 (1,297) 1:A:13:GLY:C 1:A:114:LYS:N 1:A:114:LYS:CA 1:A:114:LYS:C 17 53.11 (1,342) 1:A:159:ILE:N 1:A:159:ILE:CA 1:A:159:ILE:C 1:A:160:GLN:N 11 53.07 (1,168) 1:A:14:PRO:N 1:A:161:HIS:N 1:A:161:HIS:CA 1:A:161:HIS:C	,	1:A:72:ILE:C		1:A:73:HIS:CA		14	
(1,183) 1:A:19:ASN:C 1:A:20:ALA:N 1:A:20:ALA:CA 1:A:20:ALA:C 1 53.29 (1,168) 1:A:14:PRO:N 1:A:14:PRO:CA 1:A:14:PRO:C 1:A:15:VAL:N 13 53.29 (1,264) 1:A:101:GLU:C 1:A:102:LEU:N 1:A:102:LEU:CA 1:A:102:LEU:C 3 53.28 (1,168) 1:A:14:PRO:N 1:A:14:PRO:CA 1:A:14:PRO:C 1:A:15:VAL:N 15 53.24 (1,173) 1:A:16:LEU:C 1:A:17:LYS:N 1:A:17:LYS:CA 1:A:17:LYS:C 13 53.22 (1,305) 1:A:116:CYS:C 1:A:117:LEU:N 1:A:117:LEU:CA 1:A:117:LEU:C 9 53.21 (1,297) 1:A:113:GLY:C 1:A:114:LYS:N 1:A:114:LYS:CA 1:A:114:LYS:C 17 53.11 (1,342) 1:A:159:ILE:N 1:A:159:ILE:CA 1:A:159:ILE:C 1:A:160:GLN:N 11 53.07 (1,168) 1:A:14:PRO:N 1:A:14:PRO:CA 1:A:16:HIS:CA 1:A:16:HIS:C 10 53.03 (1,286) 1:A:19:MET:N 1:A:16:CYS:CA 1:A:110:TYR:N 10	,	1:A:106:THR:C					
(1,168) 1:A:14:PRO:N 1:A:14:PRO:CA 1:A:14:PRO:C 1:A:15:VAL:N 13 53.29 (1,264) 1:A:101:GLU:C 1:A:102:LEU:N 1:A:102:LEU:CA 1:A:102:LEU:C 3 53.28 (1,168) 1:A:14:PRO:N 1:A:14:PRO:CA 1:A:14:PRO:C 1:A:15:VAL:N 15 53.24 (1,173) 1:A:16:LEU:C 1:A:17:LYS:N 1:A:17:LYS:CA 1:A:17:LYS:C 13 53.22 (1,305) 1:A:116:CYS:C 1:A:117:LEU:N 1:A:117:LEU:CA 1:A:117:LEU:C 9 53.21 (1,297) 1:A:113:GLY:C 1:A:114:LYS:N 1:A:114:LYS:CA 1:A:114:LYS:C 17 53.11 (1,342) 1:A:159:ILE:N 1:A:159:ILE:CA 1:A:159:ILE:C 1:A:160:GLN:N 11 53.07 (1,168) 1:A:14:PRO:N 1:A:14:PRO:CA 1:A:14:PRO:C 1:A:15:VAL:N 20 53.04 (1,346) 1:A:16:GYS:C 1:A:16:HIS:C 10 53.03 (1,286) 1:A:19:MET:N 1:A:109:MET:C 1:A:110:TYR:N 10 53.03 (1,302)	,						
(1,264) 1:A:101:GLU:C 1:A:102:LEU:N 1:A:102:LEU:CA 1:A:102:LEU:C 3 53.28 (1,168) 1:A:14:PRO:N 1:A:14:PRO:CA 1:A:14:PRO:C 1:A:15:VAL:N 15 53.24 (1,173) 1:A:16:LEU:C 1:A:17:LYS:N 1:A:17:LYS:CA 1:A:17:LYS:C 13 53.22 (1,305) 1:A:116:CYS:C 1:A:117:LEU:N 1:A:117:LEU:CA 1:A:117:LEU:C 9 53.21 (1,297) 1:A:113:GIY:C 1:A:114:LYS:N 1:A:114:LYS:CA 1:A:114:LYS:C 17 53.11 (1,342) 1:A:159:ILE:N 1:A:159:ILE:CA 1:A:159:ILE:C 1:A:160:GLN:N 11 53.07 (1,168) 1:A:14:PRO:N 1:A:14:PRO:CA 1:A:14:PRO:C 1:A:15:VAL:N 20 53.04 (1,346) 1:A:160:GLN:C 1:A:161:HIS:N 1:A:161:HIS:CA 1:A:161:HIS:C 10 53.03 (1,286) 1:A:109:MET:N 1:A:109:MET:CA 1:A:110:TYR:N 10 53.03 (1,302) 1:A:115:ILE:C 1:A:116:CYS:N 1:A:116:CYS:CA 1:A:116:CYS:C 3		1:A:14:PRO:N	1:A:14:PRO:CA	1:A:14:PRO:C	1:A:15:VAL:N	13	
(1,168) 1:A:14:PRO:N 1:A:14:PRO:CA 1:A:14:PRO:C 1:A:15:VAL:N 15 53.24 (1,173) 1:A:16:LEU:C 1:A:17:LYS:N 1:A:17:LYS:CA 1:A:17:LYS:C 13 53.22 (1,305) 1:A:116:CYS:C 1:A:117:LEU:N 1:A:117:LEU:CA 1:A:117:LEU:C 9 53.21 (1,297) 1:A:113:GLY:C 1:A:114:LYS:N 1:A:114:LYS:CA 1:A:114:LYS:C 17 53.11 (1,342) 1:A:159:ILE:N 1:A:159:ILE:CA 1:A:159:ILE:C 1:A:160:GLN:N 11 53.07 (1,168) 1:A:14:PRO:N 1:A:14:PRO:CA 1:A:14:PRO:C 1:A:15:VAL:N 20 53.04 (1,346) 1:A:16:GYS:N 1:A:16:HIS:CA 1:A:16:HIS:C 10 53.03 (1,346) 1:A:160:GLN:C 1:A:161:HIS:N 1:A:161:HIS:CA 1:A:161:HIS:C 10 53.03 (1,286) 1:A:109:MET:N 1:A:160:MET:N 1:A:116:CYS:CA 1:A:110:TYR:N 10 53.03 (1,302) 1:A:115:ILE:C 1:A:116:CYS:N 1:A:116:CYS:CA 1:A:116:CYS:C 3						I .	
(1,173) 1:A:16:LEU:C 1:A:17:LYS:N 1:A:17:LYS:CA 1:A:17:LYS:C 13 53.22 (1,305) 1:A:116:CYS:C 1:A:117:LEU:N 1:A:117:LEU:CA 1:A:117:LEU:C 9 53.21 (1,297) 1:A:113:GLY:C 1:A:114:LYS:N 1:A:114:LYS:CA 1:A:114:LYS:C 17 53.11 (1,342) 1:A:159:ILE:N 1:A:159:ILE:CA 1:A:159:ILE:C 1:A:160:GLN:N 11 53.07 (1,168) 1:A:14:PRO:N 1:A:14:PRO:CA 1:A:14:PRO:C 1:A:15:VAL:N 20 53.04 (1,346) 1:A:160:GLN:C 1:A:161:HIS:N 1:A:161:HIS:CA 1:A:161:HIS:C 10 53.03 (1,286) 1:A:109:MET:N 1:A:109:MET:CA 1:A:109:MET:C 1:A:110:TYR:N 10 53.03 (1,302) 1:A:115:ILE:C 1:A:116:CYS:N 1:A:116:CYS:CA 1:A:116:CYS:C 3 52.97 (1,180) 1:A:18:THR:C 1:A:19:ASN:N 1:A:19:ASN:CA 1:A:19:ASN:C 9 52.96 (1,311) 1:A:118:THR:N 1:A:118:THR:CA 1:A:118:THR:C 1:A:119:ASN	· · /						
(1,305) 1:A:116:CYS:C 1:A:117:LEU:N 1:A:117:LEU:CA 1:A:117:LEU:C 9 53.21 (1,297) 1:A:113:GLY:C 1:A:114:LYS:N 1:A:114:LYS:CA 1:A:114:LYS:C 17 53.11 (1,342) 1:A:159:ILE:N 1:A:159:ILE:CA 1:A:159:ILE:C 1:A:160:GLN:N 11 53.07 (1,168) 1:A:14:PRO:N 1:A:14:PRO:CA 1:A:14:PRO:C 1:A:15:VAL:N 20 53.04 (1,346) 1:A:160:GLN:C 1:A:161:HIS:N 1:A:161:HIS:CA 1:A:161:HIS:C 10 53.03 (1,286) 1:A:109:MET:N 1:A:109:MET:CA 1:A:110:TYR:N 10 53.03 (1,302) 1:A:115:ILE:C 1:A:116:CYS:N 1:A:116:CYS:CA 1:A:116:CYS:C 3 52.97 (1,180) 1:A:18:THR:C 1:A:19:ASN:N 1:A:29:ASN:CA 1:A:21:GLY:N 4 52.94 (1,311) 1:A:18:THR:N 1:A:19:ASN:N 1:A:19:ASN:CA 1:A:19:ASN:C 6 52.93 (1,204) 1:A:52:ASP:C 1:A:53:TRP:N 1:A:53:TRP:CA 1:A:53:TRP:C 15	(, ,						
(1,297) 1:A:113:GLY:C 1:A:114:LYS:N 1:A:114:LYS:CA 1:A:114:LYS:C 17 53.11 (1,342) 1:A:159:ILE:N 1:A:159:ILE:CA 1:A:159:ILE:C 1:A:160:GLN:N 11 53.07 (1,168) 1:A:14:PRO:N 1:A:14:PRO:CA 1:A:14:PRO:C 1:A:15:VAL:N 20 53.04 (1,346) 1:A:160:GLN:C 1:A:161:HIS:N 1:A:161:HIS:CA 1:A:161:HIS:C 10 53.03 (1,286) 1:A:109:MET:N 1:A:109:MET:CA 1:A:109:MET:C 1:A:110:TYR:N 10 53.03 (1,302) 1:A:115:ILE:C 1:A:116:CYS:N 1:A:116:CYS:CA 1:A:116:CYS:C 3 52.97 (1,180) 1:A:18:THR:C 1:A:19:ASN:N 1:A:20:ALA:C 1:A:21:GLY:N 4 52.94 (1,311) 1:A:118:THR:N 1:A:118:THR:CA 1:A:118:THR:C 1:A:119:ASN:C 6 52.93 (1,180) 1:A:15:A:19:ASN:N 1:A:19:ASN:CA 1:A:19:ASN:C 6 52.93 (1,204) 1:A:52:ASP:C 1:A:53:TRP:N 1:A:53:TRP:CA 1:A:53:TRP:C 15	(, ,						
(1,342) 1:A:159:ILE:N 1:A:159:ILE:CA 1:A:159:ILE:C 1:A:160:GLN:N 11 53.07 (1,168) 1:A:14:PRO:N 1:A:14:PRO:CA 1:A:14:PRO:C 1:A:15:VAL:N 20 53.04 (1,346) 1:A:160:GLN:C 1:A:161:HIS:N 1:A:161:HIS:CA 1:A:161:HIS:C 10 53.03 (1,286) 1:A:109:MET:N 1:A:109:MET:CA 1:A:109:MET:C 1:A:110:TYR:N 10 53.03 (1,302) 1:A:115:ILE:C 1:A:116:CYS:N 1:A:116:CYS:CA 1:A:116:CYS:C 3 52.97 (1,180) 1:A:18:THR:C 1:A:19:ASN:N 1:A:19:ASN:CA 1:A:19:ASN:C 9 52.96 (1,311) 1:A:118:THR:N 1:A:118:THR:CA 1:A:118:THR:C 1:A:119:ASN:N 5 52.93 (1,180) 1:A:18:THR:C 1:A:19:ASN:N 1:A:19:ASN:CA 1:A:19:ASN:C 6 52.9 (1,204) 1:A:52:ASP:C 1:A:53:TRP:N 1:A:53:TRP:CA 1:A:53:TRP:C 15 52.85	· · /						
(1,168) 1:A:14:PRO:N 1:A:14:PRO:CA 1:A:14:PRO:C 1:A:15:VAL:N 20 53.04 (1,346) 1:A:160:GLN:C 1:A:161:HIS:N 1:A:161:HIS:CA 1:A:161:HIS:C 10 53.03 (1,286) 1:A:109:MET:N 1:A:109:MET:CA 1:A:109:MET:C 1:A:110:TYR:N 10 53.03 (1,302) 1:A:115:ILE:C 1:A:116:CYS:N 1:A:116:CYS:CA 1:A:116:CYS:C 3 52.97 (1,180) 1:A:18:THR:C 1:A:19:ASN:N 1:A:29:ASN:CA 1:A:19:ASN:C 9 52.96 (1,311) 1:A:118:THR:N 1:A:118:THR:CA 1:A:118:THR:C 1:A:119:ASP:N 5 52.93 (1,180) 1:A:18:THR:C 1:A:19:ASN:N 1:A:19:ASN:CA 1:A:19:ASN:C 6 52.9 (1,204) 1:A:52:ASP:C 1:A:53:TRP:N 1:A:53:TRP:CA 1:A:53:TRP:C 15 52.85	· · /						
(1,346) 1:A:160:GLN:C 1:A:161:HIS:N 1:A:161:HIS:CA 1:A:161:HIS:C 10 53.03 (1,286) 1:A:109:MET:N 1:A:109:MET:CA 1:A:109:MET:C 1:A:110:TYR:N 10 53.03 (1,302) 1:A:115:ILE:C 1:A:116:CYS:N 1:A:116:CYS:CA 1:A:116:CYS:C 3 52.97 (1,180) 1:A:18:THR:C 1:A:19:ASN:N 1:A:19:ASN:CA 1:A:19:ASN:C 9 52.96 (1,184) 1:A:20:ALA:N 1:A:20:ALA:CA 1:A:20:ALA:C 1:A:21:GLY:N 4 52.94 (1,311) 1:A:118:THR:N 1:A:118:THR:CA 1:A:118:THR:C 1:A:119:ASP:N 5 52.93 (1,180) 1:A:18:THR:C 1:A:19:ASN:N 1:A:19:ASN:CA 1:A:19:ASN:C 6 52.9 (1,204) 1:A:52:ASP:C 1:A:53:TRP:N 1:A:53:TRP:CA 1:A:53:TRP:C 15 52.85	· · /						
(1,286) 1:A:109:MET:N 1:A:109:MET:CA 1:A:109:MET:C 1:A:110:TYR:N 10 53.03 (1,302) 1:A:115:ILE:C 1:A:116:CYS:N 1:A:116:CYS:CA 1:A:116:CYS:C 3 52.97 (1,180) 1:A:18:THR:C 1:A:19:ASN:N 1:A:19:ASN:CA 1:A:19:ASN:C 9 52.96 (1,184) 1:A:20:ALA:N 1:A:20:ALA:CA 1:A:20:ALA:C 1:A:21:GLY:N 4 52.94 (1,311) 1:A:118:THR:N 1:A:118:THR:CA 1:A:118:THR:C 1:A:119:ASP:N 5 52.93 (1,180) 1:A:18:THR:C 1:A:19:ASN:N 1:A:19:ASN:CA 1:A:19:ASN:C 6 52.9 (1,204) 1:A:52:ASP:C 1:A:53:TRP:N 1:A:53:TRP:CA 1:A:53:TRP:C 15 52.85	· · /						
(1,302) 1:A:115:ILE:C 1:A:116:CYS:N 1:A:116:CYS:CA 1:A:116:CYS:C 3 52.97 (1,180) 1:A:18:THR:C 1:A:19:ASN:N 1:A:19:ASN:CA 1:A:19:ASN:C 9 52.96 (1,184) 1:A:20:ALA:N 1:A:20:ALA:CA 1:A:20:ALA:C 1:A:21:GLY:N 4 52.94 (1,311) 1:A:118:THR:N 1:A:118:THR:CA 1:A:118:THR:C 1:A:119:ASP:N 5 52.93 (1,180) 1:A:18:THR:C 1:A:19:ASN:N 1:A:19:ASN:CA 1:A:19:ASN:C 6 52.9 (1,204) 1:A:52:ASP:C 1:A:53:TRP:N 1:A:53:TRP:CA 1:A:53:TRP:C 15 52.85							
(1,180) 1:A:18:THR:C 1:A:19:ASN:N 1:A:19:ASN:CA 1:A:19:ASN:C 9 52.96 (1,184) 1:A:20:ALA:N 1:A:20:ALA:CA 1:A:20:ALA:C 1:A:21:GLY:N 4 52.94 (1,311) 1:A:118:THR:N 1:A:118:THR:CA 1:A:118:THR:C 1:A:119:ASP:N 5 52.93 (1,180) 1:A:18:THR:C 1:A:19:ASN:CA 1:A:19:ASN:C 6 52.9 (1,204) 1:A:52:ASP:C 1:A:53:TRP:N 1:A:53:TRP:CA 1:A:53:TRP:C 15 52.85							
(1,184) 1:A:20:ALA:N 1:A:20:ALA:CA 1:A:20:ALA:C 1:A:21:GLY:N 4 52.94 (1,311) 1:A:118:THR:N 1:A:118:THR:CA 1:A:118:THR:C 1:A:119:ASP:N 5 52.93 (1,180) 1:A:18:THR:C 1:A:19:ASN:N 1:A:19:ASN:CA 1:A:19:ASN:C 6 52.9 (1,204) 1:A:52:ASP:C 1:A:53:TRP:N 1:A:53:TRP:CA 1:A:53:TRP:C 15 52.85	· · /						
(1,311) 1:A:118:THR:N 1:A:118:THR:CA 1:A:118:THR:C 1:A:119:ASP:N 5 52.93 (1,180) 1:A:18:THR:C 1:A:19:ASN:N 1:A:19:ASN:CA 1:A:19:ASN:C 6 52.9 (1,204) 1:A:52:ASP:C 1:A:53:TRP:N 1:A:53:TRP:CA 1:A:53:TRP:C 15 52.85	,						
(1,180) 1:A:18:THR:C 1:A:19:ASN:N 1:A:19:ASN:CA 1:A:19:ASN:C 6 52.9 (1,204) 1:A:52:ASP:C 1:A:53:TRP:N 1:A:53:TRP:CA 1:A:53:TRP:C 15 52.85	,						
(1,204) 1:A:52:ASP:C 1:A:53:TRP:N 1:A:53:TRP:CA 1:A:53:TRP:C 15 52.85	` ' /						
	· · /						
	(1,314)	1:A:119:ASP:N					



	ed from previous po					
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	$\textbf{Violation} \ (\ \circ \)$
(1,294)	1:A:112:GLY:C	1:A:113:GLY:N	1:A:113:GLY:CA	1:A:113:GLY:C	5	52.66
(1,264)	1:A:101:GLU:C	1:A:102:LEU:N	1:A:102:LEU:CA	1:A:102:LEU:C	20	52.66
(1,220)	1:A:66:PHE:N	1:A:66:PHE:CA	1:A:66:PHE:C	1:A:67:GLY:N	3	52.58
(1,93)	1:A:72:ILE:C	1:A:73:HIS:N	1:A:73:HIS:CA	1:A:73:HIS:C	4	52.54
(1,302)	1:A:115:ILE:C	1:A:116:CYS:N	1:A:116:CYS:CA	1:A:116:CYS:C	8	52.54
(1,299)	1:A:114:LYS:N	1:A:114:LYS:CA	1:A:114:LYS:C	1:A:115:ILE:N	12	52.51
(1,286)	1:A:109:MET:N	1:A:109:MET:CA	1:A:109:MET:C	1:A:110:TYR:N	18	52.48
(1,314)	1:A:119:ASP:N	1:A:119:ASP:CA	1:A:119:ASP:C	1:A:120:HIS:N	15	52.46
(1,180)	1:A:18:THR:C	1:A:19:ASN:N	1:A:19:ASN:CA	1:A:19:ASN:C	7	52.44
(1,264)	1:A:101:GLU:C	1:A:102:LEU:N	1:A:102:LEU:CA	1:A:102:LEU:C	16	52.42
(1,318)	1:A:127:ARG:C	1:A:128:ASN:N	1:A:128:ASN:CA	1:A:128:ASN:C	17	52.41
(1,365)	1:A:167:GLN:N	1:A:167:GLN:CA	1:A:167:GLN:C	1:A:168:LEU:N	4	52.39
(1,351)	1:A:162:LYS:N	1:A:162:LYS:CA	1:A:162:LYS:C	1:A:163:GLU:N	19	52.39
(1,184)	1:A:20:ALA:N	1:A:20:ALA:CA	1:A:20:ALA:C	1:A:21:GLY:N	15	52.39
(1,337)	1:A:157:GLY:C	1:A:158:VAL:N	1:A:158:VAL:CA	1:A:158:VAL:C	9	52.37
(1,342)	1:A:159:ILE:N	1:A:159:ILE:CA	1:A:159:ILE:C	1:A:160:GLN:N	12	52.32
(1,264)	1:A:101:GLU:C	1:A:102:LEU:N	1:A:102:LEU:CA	1:A:102:LEU:C	12	52.3
(1,198)	1:A:50:ASP:C	1:A:51:ASN:N	1:A:51:ASN:CA	1:A:51:ASN:C	10	52.17
(1,277)	1:A:106:THR:N	1:A:106:THR:CA	1:A:106:THR:C	1:A:107:ALA:N	4	52.12
(1,284)	1:A:108:LYS:C	1:A:109:MET:N	1:A:109:MET:CA	1:A:109:MET:C	16	52.01
(1,253)	1:A:97:ILE:C	1:A:98:ALA:N	1:A:98:ALA:CA	1:A:98:ALA:C	11	51.98
(1,228)	1:A:75:LEU:C	1:A:76:LEU:N	1:A:76:LEU:CA	1:A:76:LEU:C	5	51.96
(1,168)	1:A:14:PRO:N	1:A:14:PRO:CA	1:A:14:PRO:C	1:A:15:VAL:N	9	51.96
(1,359)	1:A:165:CYS:N	1:A:165:CYS:CA	1:A:165:CYS:C	1:A:166:ASN:N	16	51.88
(1,264)	1:A:101:GLU:C	1:A:102:LEU:N	1:A:102:LEU:CA	1:A:102:LEU:C	15	51.87
(1,347)	1:A:160:GLN:C	1:A:161:HIS:N	1:A:161:HIS:CA	1:A:161:HIS:C	18	51.84
(1,302)	1:A:115:ILE:C	1:A:116:CYS:N	1:A:116:CYS:CA	1:A:116:CYS:C	9	51.83
(1,176)	1:A:17:LYS:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	9	51.83
(1,345)	1:A:160:GLN:N	1:A:160:GLN:CA	1:A:160:GLN:C	1:A:161:HIS:N	14	51.77
(1,184)	1:A:20:ALA:N	1:A:20:ALA:CA	1:A:20:ALA:C	1:A:21:GLY:N	8	51.75
(1,246)	1:A:95:PRO:N	1:A:95:PRO:CA	1:A:95:PRO:C	1:A:96:GLU:N	5	51.59
(1,199)	1:A:50:ASP:C	1:A:51:ASN:N	1:A:51:ASN:CA	1:A:51:ASN:C	14	51.56
(1,355)	1:A:163:GLU:C	1:A:164:LYS:N	1:A:164:LYS:CA	1:A:164:LYS:C	7	51.53
(1,299)	1:A:114:LYS:N	1:A:114:LYS:CA	1:A:114:LYS:C	1:A:115:ILE:N	11	51.51
(1,296)	1:A:113:GLY:C	1:A:114:LYS:N	1:A:114:LYS:CA	1:A:114:LYS:C	1	51.51
(1,328)	1:A:140:LEU:C	1:A:141:GLY:N	1:A:141:GLY:CA	1:A:141:GLY:C	7	51.41
(1,230)	1:A:76:LEU:N	1:A:76:LEU:CA	1:A:76:LEU:C	1:A:77:LYS:N	1	51.33
(1,181)	1:A:19:ASN:N	1:A:19:ASN:CA	1:A:19:ASN:C	1:A:20:ALA:N	6	51.32
(1,93)	1:A:72:ILE:C	1:A:73:HIS:N	1:A:73:HIS:CA	1:A:73:HIS:C	12	51.31
(1,301)	1:A:115:ILE:N	1:A:115:ILE:CA	1:A:115:ILE:C	1:A:116:CYS:N	17	51.29
(1,330)	1:A:148:VAL:C	1:A:149:GLU:N	1:A:149:GLU:CA	1:A:149:GLU:C	15	51.26
(1,281)	1:A:107:ALA:C	1:A:108:LYS:N	1:A:108:LYS:CA	1:A:108:LYS:C	2	51.19
(1,287)	1:A:109:MET:C	1:A:110:TYR:N	1:A:110:TYR:CA	1:A:110:TYR:C	8	51.1
(1,318)	1:A:127:ARG:C	1:A:128:ASN:N	1:A:128:ASN:CA	1:A:128:ASN:C	19	51.07
(1,348)	1:A:161:HIS:N	1:A:161:HIS:CA	1:A:161:HIS:C	1:A:162:LYS:N	19	51.0
(1,318)	1:A:127:ARG:C	1:A:128:ASN:N	1:A:128:ASN:CA	1:A:128:ASN:C	3	50.96
(1,93)	1:A:72:ILE:C	1:A:73:HIS:N	1:A:73:HIS:CA	1:A:73:HIS:C	20	50.93
(1,270)	1:A:103:ASP:C	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	1	50.86
(1,357)	1:A:164:LYS:C	1:A:165:CYS:N	1:A:165:CYS:CA	1:A:165:CYS:C	14	50.84
(1,342)	1:A:159:ILE:N	1:A:159:ILE:CA	1:A:159:ILE:C	1:A:160:GLN:N	2	50.84
(1,93)	1:A:72:ILE:C	1:A:73:HIS:N	1:A:73:HIS:CA	1:A:73:HIS:C	15	50.79



	ed from previous po					
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (\circ)
(1,342)	1:A:159:ILE:N	1:A:159:ILE:CA	1:A:159:ILE:C	1:A:160:GLN:N	14	50.79
(1,198)	1:A:50:ASP:C	1:A:51:ASN:N	1:A:51:ASN:CA	1:A:51:ASN:C	15	50.76
(1,330)	1:A:148:VAL:C	1:A:149:GLU:N	1:A:149:GLU:CA	1:A:149:GLU:C	1	50.74
(1,324)	1:A:131:LYS:C	1:A:132:PHE:N	1:A:132:PHE:CA	1:A:132:PHE:C	9	50.65
(1,272)	1:A:104:GLY:C	1:A:105:LYS:N	1:A:105:LYS:CA	1:A:105:LYS:C	17	50.63
(1,318)	1:A:127:ARG:C	1:A:128:ASN:N	1:A:128:ASN:CA	1:A:128:ASN:C	1	50.62
(1,331)	1:A:148:VAL:C	1:A:149:GLU:N	1:A:149:GLU:CA	1:A:149:GLU:C	5	50.5
(1,328)	1:A:140:LEU:C	1:A:141:GLY:N	1:A:141:GLY:CA	1:A:141:GLY:C	11	50.49
(1,278)	1:A:106:THR:C	1:A:107:ALA:N	1:A:107:ALA:CA	1:A:107:ALA:C	17	50.44
(1,357)	1:A:164:LYS:C	1:A:165:CYS:N	1:A:165:CYS:CA	1:A:165:CYS:C	7	50.39
(1,326)	1:A:132:PHE:N	1:A:132:PHE:CA	1:A:132:PHE:C	1:A:133:GLY:N	14	50.39
(1,253)	1:A:97:ILE:C	1:A:98:ALA:N	1:A:98:ALA:CA	1:A:98:ALA:C	12	50.38
(1,199)	1:A:50:ASP:C	1:A:51:ASN:N	1:A:51:ASN:CA	1:A:51:ASN:C	3	50.33
(1,246)	1:A:95:PRO:N	1:A:95:PRO:CA	1:A:95:PRO:C	1:A:96:GLU:N	18	50.3
(1,345)	1:A:160:GLN:N	1:A:160:GLN:CA	1:A:160:GLN:C	1:A:161:HIS:N	20	50.27
(1,180)	1:A:18:THR:C	1:A:19:ASN:N	1:A:19:ASN:CA	1:A:19:ASN:C	15	50.24
(1,215)	1:A:62:GLY:C	1:A:63:THR:N	1:A:63:THR:CA	1:A:63:THR:C	9	50.2
(1,346)	1:A:160:GLN:C	1:A:161:HIS:N	1:A:161:HIS:CA	1:A:161:HIS:C	5	50.08
(1,281)	1:A:107:ALA:C	1:A:108:LYS:N	1:A:108:LYS:CA	1:A:108:LYS:C	18	50.07
(1,275)	1:A:105:LYS:C	1:A:106:THR:N	1:A:106:THR:CA	1:A:106:THR:C	7	49.98
(1,349)	1:A:161:HIS:C	1:A:162:LYS:N	1:A:162:LYS:CA	1:A:162:LYS:C	2	49.95
(1,285)	1:A:108:LYS:C	1:A:109:MET:N	1:A:109:MET:CA	1:A:109:MET:C	1	49.94
(1,220)	1:A:66:PHE:N	1:A:66:PHE:CA	1:A:66:PHE:C	1:A:67:GLY:N	12	49.94
(1,352)	1:A:162:LYS:C	1:A:163:GLU:N	1:A:163:GLU:CA	1:A:163:GLU:C	5	49.92
(1,331)	1:A:148:VAL:C	1:A:149:GLU:N	1:A:149:GLU:CA	1:A:149:GLU:C	7	49.92
(1,246)	1:A:95:PRO:N	1:A:95:PRO:CA	1:A:95:PRO:C	1:A:96:GLU:N	14	49.91
(1,349)	1:A:161:HIS:C	1:A:162:LYS:N	1:A:162:LYS:CA	1:A:162:LYS:C	15	49.88
(1,200)	1:A:51:ASN:N	1:A:51:ASN:CA	1:A:51:ASN:C	1:A:52:ASP:N	7	49.85
(1,340)	1:A:158:VAL:C	1:A:159:ILE:N	1:A:159:ILE:CA	1:A:159:ILE:C	14	49.83
(1,280)	1:A:107:ALA:N	1:A:107:ALA:CA	1:A:107:ALA:C	1:A:108:LYS:N	11	49.77
(1,180)	1:A:18:THR:C	1:A:19:ASN:N	1:A:19:ASN:CA	1:A:19:ASN:C	2	49.76
(1,173)	1:A:16:LEU:C	1:A:17:LYS:N	1:A:17:LYS:CA	1:A:17:LYS:C	5	49.76
(1,340)	1:A:158:VAL:C	1:A:159:ILE:N	1:A:159:ILE:CA	1:A:159:ILE:C	16	49.74
(1,277)	1:A:106:THR:N	1:A:106:THR:CA	1:A:106:THR:C	1:A:107:ALA:N	10	49.73
(1,163)	1:A:3:ASP:N	1:A:3:ASP:CA	1:A:3:ASP:C	1:A:4:GLU:N	18	49.71
(1,337)	1:A:157:GLY:C	1:A:158:VAL:N	1:A:158:VAL:CA	1:A:158:VAL:C	11	49.69
(1,324)	1:A:131:LYS:C	1:A:132:PHE:N	1:A:132:PHE:CA	1:A:132:PHE:C	6	49.65
(1,193)	1:A:23:ARG:C	1:A:24:ASP:N	1:A:24:ASP:CA	1:A:24:ASP:C	7	49.62
(1,289)	1:A:110:TYR:N	1:A:110:TYR:CA	1:A:110:TYR:C	1:A:111:ARG:N	12	49.51
(1,298)	1:A:114:LYS:N	1:A:114:LYS:CA	1:A:114:LYS:C	1:A:115:ILE:N	16	49.4
(1,242)	1:A:93:THR:N	1:A:93:THR:CA	1:A:93:THR:C	1:A:94:ALA:N	7	49.36
(1,311)	1:A:118:THR:N	1:A:118:THR:CA	1:A:118:THR:C	1:A:119:ASP:N	10	49.32
(1,342)	1:A:93:THR:N	1:A:93:THR:CA	1:A:93:THR:C	1:A:94:ALA:N	20	49.3
(1,284)	1:A:108:LYS:C	1:A:109:MET:N	1:A:109:MET:CA	1:A:109:MET:C	14	49.28
(1,290)	1:A:110:TYR:C	1:A:111:ARG:N	1:A:111:ARG:CA	1:A:111:ARG:C	16	49.19
(1,276)	1:A:105:LYS:C	1:A:106:THR:N	1:A:106:THR:CA	1:A:106:THR:C	16	49.12
(1,302)	1:A:115:ILE:C	1:A:116:CYS:N	1:A:116:CYS:CA	1:A:116:CYS:C	20	49.11
(1,350)	1:A:161:HIS:C	1:A:162:LYS:N	1:A:162:LYS:CA	1:A:162:LYS:C	4	49.04
(1,353)	1:A:162:LYS:C	1:A:163:GLU:N	1:A:163:GLU:CA	1:A:163:GLU:C	16	48.98
(1,219)	1:A:65:TRP:C	1:A:66:PHE:N	1:A:66:PHE:CA	1:A:66:PHE:C	18	48.96
(1,183)	1:A:19:ASN:C	1:A:20:ALA:N	1:A:20:ALA:CA	1:A:20:ALA:C	11	48.92
()/			1			ed on next page



Key	$rac{ed\ from\ previous\ po}{\mathbf{Atom-1}}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,168)	1:A:14:PRO:N	1:A:14:PRO:CA	1:A:14:PRO:C	1:A:15:VAL:N	4	48.91
(1,355)	1:A:163:GLU:C	1:A:164:LYS:N	1:A:164:LYS:CA	1:A:164:LYS:C	18	48.9
(1,311)	1:A:118:THR:N	1:A:118:THR:CA	1:A:118:THR:C	1:A:119:ASP:N	20	48.8
(1,358)	1:A:164:LYS:C	1:A:165:CYS:N	1:A:165:CYS:CA	1:A:165:CYS:C	10	48.78
(1,301)	1:A:115:ILE:N	1:A:115:ILE:CA	1:A:115:ILE:C	1:A:116:CYS:N	19	48.77
(1,230)	1:A:76:LEU:N	1:A:76:LEU:CA	1:A:76:LEU:C	1:A:77:LYS:N	13	48.75
(1,305)	1:A:116:CYS:C	1:A:117:LEU:N	1:A:117:LEU:CA	1:A:117:LEU:C	6	48.74
(1,168)	1:A:14:PRO:N	1:A:14:PRO:CA	1:A:14:PRO:C	1:A:15:VAL:N	8	48.71
(1,201)	1:A:51:ASN:C	1:A:52:ASP:N	1:A:52:ASP:CA	1:A:52:ASP:C	2	48.7
(1,314)	1:A:119:ASP:N	1:A:119:ASP:CA	1:A:119:ASP:C	1:A:120:HIS:N	13	48.67
(1,277)	1:A:106:THR:N	1:A:106:THR:CA	1:A:106:THR:C	1:A:107:ALA:N	17	48.65
(1,176)	1:A:17:LYS:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	19	48.64
(1,275)	1:A:105:LYS:C	1:A:106:THR:N	1:A:106:THR:CA	1:A:106:THR:C	6	48.6
(1,220)	1:A:66:PHE:N	1:A:66:PHE:CA	1:A:66:PHE:C	1:A:67:GLY:N	1	48.57
(1,296)	1:A:113:GLY:C	1:A:114:LYS:N	1:A:114:LYS:CA	1:A:114:LYS:C	20	48.56
(1,230)	1:A:76:LEU:N	1:A:76:LEU:CA	1:A:76:LEU:C	1:A:77:LYS:N	15	48.56
(1,272)	1:A:104:GLY:C	1:A:105:LYS:N	1:A:105:LYS:CA	1:A:105:LYS:C	16	48.55
(1,219)	1:A:65:TRP:C	1:A:66:PHE:N	1:A:66:PHE:CA	1:A:66:PHE:C	2	48.54
(1,236)	1:A:88:ILE:C	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:C	14	48.52
(1,246)	1:A:95:PRO:N	1:A:95:PRO:CA	1:A:95:PRO:C	1:A:96:GLU:N	15	48.51
(1,219)	1:A:65:TRP:C	1:A:66:PHE:N	1:A:66:PHE:CA	1:A:66:PHE:C	16	48.5
(1,272)	1:A:104:GLY:C	1:A:105:LYS:N	1:A:105:LYS:CA	1:A:105:LYS:C	10	48.47
(1,252)	1:A:97:ILE:N	1:A:97:ILE:CA	1:A:97:ILE:C	1:A:98:ALA:N	4	48.47
(1,193)	1:A:23:ARG:C	1:A:24:ASP:N	1:A:24:ASP:CA	1:A:24:ASP:C	11	48.43
(1,315)	1:A:119:ASP:C	1:A:120:HIS:N	1:A:120:HIS:CA	1:A:120:HIS:C	18	48.39
(1,247)	1:A:95:PRO:C	1:A:96:GLU:N	1:A:96:GLU:CA	1:A:96:GLU:C	8	48.34
(1,301)	1:A:115:ILE:N	1:A:115:ILE:CA	1:A:115:ILE:C	1:A:116:CYS:N	5	48.31
(1,203)	1:A:52:ASP:N	1:A:52:ASP:CA	1:A:52:ASP:C	1:A:53:TRP:N	3	48.29
(1,185)	1:A:20:ALA:N	1:A:20:ALA:CA	1:A:20:ALA:C	1:A:21:GLY:N	8	48.25
(1,340)	1:A:158:VAL:C	1:A:159:ILE:N	1:A:159:ILE:CA	1:A:159:ILE:C	8	48.21
(1,340)	1:A:158:VAL:C	1:A:159:ILE:N	1:A:159:ILE:CA	1:A:159:ILE:C	3	48.19
(1,364)	1:A:166:ASN:C	1:A:167:GLN:N	1:A:167:GLN:CA	1:A:167:GLN:C	14	48.17
(1,247)	1:A:95:PRO:C	1:A:96:GLU:N	1:A:96:GLU:CA	1:A:96:GLU:C	7	48.17
(1,247)	1:A:95:PRO:C	1:A:96:GLU:N	1:A:96:GLU:CA	1:A:96:GLU:C	12	48.06
(1,280)	1:A:107:ALA:N	1:A:107:ALA:CA	1:A:107:ALA:C	1:A:108:LYS:N	15	48.01
(1,174)	1:A:16:LEU:C	1:A:17:LYS:N	1:A:17:LYS:CA	1:A:17:LYS:C	12	47.96
(1,168)	1:A:14:PRO:N	1:A:14:PRO:CA	1:A:14:PRO:C	1:A:15:VAL:N	17	47.96
(1,315)	1:A:119:ASP:C	1:A:120:HIS:N	1:A:120:HIS:CA	1:A:120:HIS:C	4	47.91
(1,365)	1:A:167:GLN:N	1:A:167:GLN:CA	1:A:167:GLN:C	1:A:168:LEU:N	16	47.88
(1,335)	1:A:156:LYS:C	1:A:157:GLY:N	1:A:157:GLY:CA	1:A:157:GLY:C	15	47.86
(1,358)	1:A:164:LYS:C	1:A:165:CYS:N	1:A:165:CYS:CA	1:A:165:CYS:C	9	47.85
(1,250)	1:A:96:GLU:C	1:A:97:ILE:N	1:A:97:ILE:CA	1:A:97:ILE:C	20	47.79
(1,305)	1:A:116:CYS:C	1:A:117:LEU:N	1:A:117:LEU:CA	1:A:117:LEU:C	3	47.77
(1,354)	1:A:163:GLU:N	1:A:163:GLU:CA	1:A:163:GLU:C	1:A:164:LYS:N	15	47.76
(1,298)	1:A:114:LYS:N	1:A:114:LYS:CA	1:A:114:LYS:C	1:A:115:ILE:N	17	47.76
(1,219)	1:A:65:TRP:C	1:A:66:PHE:N	1:A:66:PHE:CA	1:A:66:PHE:C	11	47.75
(1,317)	1:A:120:HIS:N	1:A:120:HIS:CA	1:A:120:HIS:C	1:A:121:PHE:N	18	47.71
(1,307)	1:A:117:LEU:N	1:A:117:LEU:CA	1:A:117:LEU:C	1:A:118:THR:N	1	47.68
(1,305)	1:A:116:CYS:C	1:A:117:LEU:N	1:A:117:LEU:CA	1:A:117:LEU:C	11	47.68
(1,364)	1:A:166:ASN:C	1:A:167:GLN:N	1:A:167:GLN:CA	1:A:167:GLN:C	17	47.65
(1,253)	1:A:97:ILE:C	1:A:98:ALA:N	1:A:98:ALA:CA	1:A:98:ALA:C	18	47.62
` ' '	l	I .	1	I		ed on nert nage



	ed from previous pe	•	A		26 11	T 71 1
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (\circ)
(1,185)	1:A:20:ALA:N	1:A:20:ALA:CA	1:A:20:ALA:C	1:A:21:GLY:N	15	47.61
(1,342)	1:A:159:ILE:N	1:A:159:ILE:CA	1:A:159:ILE:C	1:A:160:GLN:N	8	47.59
(1,201)	1:A:51:ASN:C	1:A:52:ASP:N	1:A:52:ASP:CA	1:A:52:ASP:C	19	47.56
(1,348)	1:A:161:HIS:N	1:A:161:HIS:CA	1:A:161:HIS:C	1:A:162:LYS:N	16	47.52
(1,337)	1:A:157:GLY:C	1:A:158:VAL:N	1:A:158:VAL:CA	1:A:158:VAL:C	16	47.46
(1,193)	1:A:23:ARG:C	1:A:24:ASP:N	1:A:24:ASP:CA	1:A:24:ASP:C	14	47.44
(1,272)	1:A:104:GLY:C	1:A:105:LYS:N	1:A:105:LYS:CA	1:A:105:LYS:C	1	47.34
(1,293)	1:A:111:ARG:C	1:A:112:GLY:N	1:A:112:GLY:CA	1:A:112:GLY:C	20	47.32
(1,242)	1:A:93:THR:N	1:A:93:THR:CA	1:A:93:THR:C	1:A:94:ALA:N	18	47.26
(1,215)	1:A:62:GLY:C	1:A:63:THR:N	1:A:63:THR:CA	1:A:63:THR:C	19	47.26
(1,253)	1:A:97:ILE:C	1:A:98:ALA:N	1:A:98:ALA:CA	1:A:98:ALA:C	1	47.24
(1,270)	1:A:103:ASP:C	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	3	47.23
(1,287)	1:A:109:MET:C	1:A:110:TYR:N	1:A:110:TYR:CA	1:A:110:TYR:C	20	47.21
(1,276)	1:A:105:LYS:C	1:A:106:THR:N	1:A:106:THR:CA	1:A:106:THR:C	14	47.19
(1,358)	1:A:164:LYS:C	1:A:165:CYS:N	1:A:165:CYS:CA	1:A:165:CYS:C	1	47.18
(1,219)	1:A:65:TRP:C	1:A:66:PHE:N	1:A:66:PHE:CA	1:A:66:PHE:C	12	47.13
(1,292)	1:A:111:ARG:N	1:A:111:ARG:CA	1:A:111:ARG:C	1:A:112:GLY:N	1	47.12
(1,362)	1:A:166:ASN:N	1:A:166:ASN:CA	1:A:166:ASN:C	1:A:167:GLN:N	5	47.11
(1,168)	1:A:14:PRO:N	1:A:14:PRO:CA	1:A:14:PRO:C	1:A:15:VAL:N	1	47.11
(1,185)	1:A:20:ALA:N	1:A:20:ALA:CA	1:A:20:ALA:C	1:A:21:GLY:N	4	47.06
(1,301)	1:A:115:ILE:N	1:A:115:ILE:CA	1:A:115:ILE:C	1:A:116:CYS:N	3	47.02
(1,198)	1:A:50:ASP:C	1:A:51:ASN:N	1:A:51:ASN:CA	1:A:51:ASN:C	12	46.96
(1,340)	1:A:158:VAL:C	1:A:159:ILE:N	1:A:159:ILE:CA	1:A:159:ILE:C	2	46.95
(1,228)	1:A:75:LEU:C	1:A:76:LEU:N	1:A:76:LEU:CA	1:A:76:LEU:C	6	46.95
(1,302)	1:A:115:ILE:C	1:A:116:CYS:N	1:A:116:CYS:CA	1:A:116:CYS:C	16	46.94
(1,228)	1:A:75:LEU:C	1:A:76:LEU:N	1:A:76:LEU:CA	1:A:76:LEU:C	4	46.91
(1,342)	1:A:159:ILE:N	1:A:159:ILE:CA	1:A:159:ILE:C	1:A:160:GLN:N	1	46.88
(1,287)	1:A:109:MET:C	1:A:110:TYR:N	1:A:110:TYR:CA	1:A:110:TYR:C	17	46.86
(1,201)	1:A:51:ASN:C	1:A:52:ASP:N	1:A:52:ASP:CA	1:A:52:ASP:C	5	46.85
(1,360)	1:A:165:CYS:C	1:A:166:ASN:N	1:A:166:ASN:CA	1:A:166:ASN:C	9	46.84
(1,324)	1:A:131:LYS:C	1:A:132:PHE:N	1:A:132:PHE:CA	1:A:132:PHE:C	1	46.84
(1,296)	1:A:113:GLY:C	1:A:114:LYS:N	1:A:114:LYS:CA	1:A:114:LYS:C	2	46.8
(1,277)	1:A:106:THR:N	1:A:106:THR:CA	1:A:106:THR:C	1:A:107:ALA:N	14	46.8
(1,233)	1:A:87:PRO:N	1:A:87:PRO:CA	1:A:87:PRO:C	1:A:88:ILE:N	2	46.78
(1,220)	1:A:66:PHE:N	1:A:66:PHE:CA	1:A:66:PHE:C	1:A:67:GLY:N	18	46.77
(1,193)	1:A:23:ARG:C	1:A:24:ASP:N	1:A:24:ASP:CA	1:A:24:ASP:C	5	46.74
(1,242)	1:A:93:THR:N	1:A:93:THR:CA	1:A:93:THR:C	1:A:94:ALA:N	1	46.73
(1,179)	1:A:18:THR:C	1:A:19:ASN:N	1:A:19:ASN:CA	1:A:19:ASN:C	8	46.71
(1,314)	1:A:119:ASP:N	1:A:119:ASP:CA	1:A:119:ASP:C	1:A:120:HIS:N	12	46.67
(1,193)	1:A:23:ARG:C	1:A:24:ASP:N	1:A:24:ASP:CA	1:A:24:ASP:C	1	46.66
(1,324)	1:A:131:LYS:C	1:A:132:PHE:N	1:A:132:PHE:CA	1:A:132:PHE:C	14	46.64
(1,337)	1:A:157:GLY:C	1:A:158:VAL:N	1:A:158:VAL:CA	1:A:158:VAL:C	6	46.62
(1,335)	1:A:156:LYS:C	1:A:157:GLY:N	1:A:157:GLY:CA	1:A:157:GLY:C	13	46.6
(1,303)	1:A:115:ILE:C	1:A:116:CYS:N	1:A:116:CYS:CA	1:A:116:CYS:C	13	46.53
(1,233)	1:A:87:PRO:N	1:A:87:PRO:CA	1:A:87:PRO:C	1:A:88:ILE:N	11	46.5
(1,284)	1:A:108:LYS:C	1:A:109:MET:N	1:A:109:MET:CA	1:A:109:MET:C	4	46.45
(1,254) $(1,252)$	1:A:97:ILE:N	1:A:97:ILE:CA	1:A:97:ILE:C	1:A:98:ALA:N	20	46.42
(1,173)	1:A:16:LEU:C	1:A:17:LYS:N	1:A:17:LYS:CA	1:A:17:LYS:C	16	46.41
(1,305)	1:A:116:CYS:C	1:A:117:LEU:N	1:A:117:LEU:CA	1:A:117:LEU:C	10	46.37
(1,368) $(1,168)$	1:A:14:PRO:N	1:A:14:PRO:CA	1:A:14:PRO:C	1:A:15:VAL:N	5	46.36
(1,100) $(1,307)$	1:A:117:LEU:N	1:A:117:LEU:CA	1:A:117:LEU:C	1:A:118:THR:N	3	46.31
(1,507)	1.A.111.LEU.N	1.A.111.DEU.UA	1.A.111.LEU:C	1.V.110.11IIV:IA		40.31



	ed from previous po		.		36 11	T70 1 .0 ()
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,233)	1:A:87:PRO:N	1:A:87:PRO:CA	1:A:87:PRO:C	1:A:88:ILE:N	14	46.22
(1,305)	1:A:116:CYS:C	1:A:117:LEU:N	1:A:117:LEU:CA	1:A:117:LEU:C	20	46.19
(1,297)	1:A:113:GLY:C	1:A:114:LYS:N	1:A:114:LYS:CA	1:A:114:LYS:C	11	46.11
(1,348)	1:A:161:HIS:N	1:A:161:HIS:CA	1:A:161:HIS:C	1:A:162:LYS:N	17	46.09
(1,337)	1:A:157:GLY:C	1:A:158:VAL:N	1:A:158:VAL:CA	1:A:158:VAL:C	20	46.07
(1,163)	1:A:3:ASP:N	1:A:3:ASP:CA	1:A:3:ASP:C	1:A:4:GLU:N	7	45.98
(1,215)	1:A:62:GLY:C	1:A:63:THR:N	1:A:63:THR:CA	1:A:63:THR:C	10	45.97
(1,264)	1:A:101:GLU:C	1:A:102:LEU:N	1:A:102:LEU:CA	1:A:102:LEU:C	14	45.96
(1,335)	1:A:156:LYS:C	1:A:157:GLY:N	1:A:157:GLY:CA	1:A:157:GLY:C	10	45.92
(1,324)	1:A:131:LYS:C	1:A:132:PHE:N	1:A:132:PHE:CA	1:A:132:PHE:C	19	45.82
(1,342)	1:A:159:ILE:N	1:A:159:ILE:CA	1:A:159:ILE:C	1:A:160:GLN:N	13	45.81
(1,298)	1:A:114:LYS:N	1:A:114:LYS:CA	1:A:114:LYS:C	1:A:115:ILE:N	8	45.81
(1,287)	1:A:109:MET:C	1:A:110:TYR:N	1:A:110:TYR:CA	1:A:110:TYR:C	2	45.76
(1,285)	1:A:108:LYS:C	1:A:109:MET:N	1:A:109:MET:CA	1:A:109:MET:C	2	45.76
(1,330)	1:A:148:VAL:C	1:A:149:GLU:N	1:A:149:GLU:CA	1:A:149:GLU:C	16	45.75
(1,362)	1:A:166:ASN:N	1:A:166:ASN:CA	1:A:166:ASN:C	1:A:167:GLN:N	10	45.74
(1,285)	1:A:108:LYS:C	1:A:109:MET:N	1:A:109:MET:CA	1:A:109:MET:C	5	45.74
(1,215)	1:A:62:GLY:C	1:A:63:THR:N	1:A:63:THR:CA	1:A:63:THR:C	15	45.74
(1,360)	1:A:165:CYS:C	1:A:166:ASN:N	1:A:166:ASN:CA	1:A:166:ASN:C	16	45.67
(1,242)	1:A:93:THR:N	1:A:93:THR:CA	1:A:93:THR:C	1:A:94:ALA:N	19	45.56
(1,324)	1:A:131:LYS:C	1:A:132:PHE:N	1:A:132:PHE:CA	1:A:132:PHE:C	7	45.51
(1,299)	1:A:114:LYS:N	1:A:114:LYS:CA	1:A:114:LYS:C	1:A:115:ILE:N	19	45.51
(1,168)	1:A:14:PRO:N	1:A:14:PRO:CA	1:A:14:PRO:C	1:A:15:VAL:N	10	45.49
(1,335)	1:A:156:LYS:C	1:A:157:GLY:N	1:A:157:GLY:CA	1:A:157:GLY:C	12	45.45
(1,215)	1:A:62:GLY:C	1:A:63:THR:N	1:A:63:THR:CA	1:A:63:THR:C	12	45.45
(1,293)	1:A:111:ARG:C	1:A:112:GLY:N	1:A:112:GLY:CA	1:A:112:GLY:C	12	45.39
(1,215)	1:A:62:GLY:C	1:A:63:THR:N	1:A:63:THR:CA	1:A:63:THR:C	11	45.38
(1,311)	1:A:118:THR:N	1:A:118:THR:CA	1:A:118:THR:C	1:A:119:ASP:N	12	45.33
(1,351)	1:A:162:LYS:N	1:A:162:LYS:CA	1:A:162:LYS:C	1:A:163:GLU:N	14	45.26
(1,253)	1:A:97:ILE:C	1:A:98:ALA:N	1:A:98:ALA:CA	1:A:98:ALA:C	9	45.24
(1,307)	1:A:117:LEU:N	1:A:117:LEU:CA	1:A:117:LEU:C	1:A:118:THR:N	19	45.2
(1,287)	1:A:109:MET:C	1:A:110:TYR:N	1:A:110:TYR:CA	1:A:110:TYR:C	12	45.2
(1,219)	1:A:65:TRP:C	1:A:66:PHE:N	1:A:66:PHE:CA	1:A:66:PHE:C	17	45.18
(1,283)	1:A:108:LYS:N	1:A:108:LYS:CA	1:A:108:LYS:C	1:A:109:MET:N	13	45.14
(1,324)	1:A:131:LYS:C	1:A:132:PHE:N	1:A:132:PHE:CA	1:A:132:PHE:C	8	44.99
(1,355)	1:A:163:GLU:C	1:A:164:LYS:N	1:A:164:LYS:CA	1:A:164:LYS:C	3	44.98
(1,270)	1:A:103:ASP:C	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	18	44.97
(1,215)	1:A:62:GLY:C	1:A:63:THR:N	1:A:63:THR:CA	1:A:63:THR:C	5	44.97
(1,264)	1:A:101:GLU:C	1:A:102:LEU:N	1:A:102:LEU:CA	1:A:102:LEU:C	2	44.92
(1,363)	1:A:166:ASN:C	1:A:167:GLN:N	1:A:167:GLN:CA	1:A:167:GLN:C	15	44.91
(1,308)	1:A:117:LEU:C	1:A:118:THR:N	1:A:118:THR:CA	1:A:118:THR:C	15	44.91
(1,300) $(1,311)$	1:A:118:THR:N	1:A:118:THR:CA	1:A:118:THR:C	1:A:119:ASP:N	19	44.87
(1,311) $(1,246)$	1:A:95:PRO:N	1:A:95:PRO:CA	1:A:95:PRO:C	1:A:96:GLU:N	17	44.82
(1,240) $(1,161)$	1:A:2:ALA:C	1:A:3:ASP:N	1:A:3:ASP:CA	1:A:3:ASP:C	5	44.78
(1,101) $(1,236)$	1:A:88:ILE:C	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:C	6	44.69
(1,233) $(1,233)$	1:A:87:PRO:N	1:A:87:PRO:CA	1:A:87:PRO:C	1:A:88:ILE:N	3	44.69
(1,233) $(1,330)$	1:A:148:VAL:C	1:A:149:GLU:N	1:A:149:GLU:CA	1:A:149:GLU:C	13	44.63
(1,349)	1:A:161:HIS:C	1:A:162:LYS:N	1:A:162:LYS:CA	1:A:162:LYS:C	10	44.61
(1,349) $(1,215)$	1:A:62:GLY:C	1:A:63:THR:N	1:A:63:THR:CA	1:A:63:THR:C	18	44.56
(1,213) $(1,183)$	1:A:19:ASN:C	1:A:20:ALA:N	1:A:20:ALA:CA	1:A:20:ALA:C	5	44.55
(1,183) $(1,294)$	1:A:19:ASN:C 1:A:112:GLY:C	1:A:20:ALA:N 1:A:113:GLY:N	1:A:20:ALA:CA 1:A:113:GLY:CA	1:A:113:GLY:C	11	44.54
(1,294)	1:A:112:GL1:C	1:A:115:GLY:N	1:A:115:GLY:CA	1:A:115:GLY:C		44.54



Key Atom-1 Atom-2 Atom-3 Atom-4 Model Vio (1,253) 1:A:97:ILE:C 1:A:98:ALA:N 1:A:98:ALA:CA 1:A:98:ALA:C 6 (1,347) 1:A:160:GLN:C 1:A:161:HIS:N 1:A:161:HIS:CA 1:A:161:HIS:C 15 (1,364) 1:A:166:ASN:C 1:A:161:HIS:N 1:A:161:HIS:CA 1:A:161:HIS:C 8 (1,346) 1:A:160:GLN:C 1:A:161:HIS:N 1:A:161:HIS:CA 1:A:161:HIS:C 14 (1,184) 1:A:20:ALA:N 1:A:20:ALA:CA 1:A:20:ALA:C 1:A:21:GLY:N 6 (1,193) 1:A:23:ARG:C 1:A:24:ASP:N 1:A:24:ASP:CA 1:A:24:ASP:C 13 (1,220) 1:A:66:PHE:N 1:A:66:PHE:CA 1:A:66:PHE:C 1:A:67:GLY:N 6 (1,318) 1:A:127:ARG:C 1:A:128:ASN:N 1:A:128:ASN:CA 1:A:128:ASN:C 20 (1,242) 1:A:93:THR:N 1:A:60:LYS:N 1:A:60:LYS:CA 1:A:60:LYS:C 1:A:61:GLU:N 7 (1,299) 1:A:60:LYS:N 1:A:60:LYS:N 1:A:60:LYS:N 1:A:108:LYS:C	dation (°) 44.54 44.51 44.5 44.5 44.48 44.49 44.36 44.36 44.31 44.28 44.22 44.17 43.99
(1,347) 1:A:160:GLN:C 1:A:161:HIS:N 1:A:161:HIS:CA 1:A:161:HIS:C 15 (1,364) 1:A:166:ASN:C 1:A:167:GLN:N 1:A:167:GLN:CA 1:A:167:GLN:C 8 (1,346) 1:A:160:GLN:C 1:A:161:HIS:N 1:A:161:HIS:CA 1:A:161:HIS:C 14 (1,184) 1:A:20:ALA:N 1:A:20:ALA:CA 1:A:20:ALA:C 1:A:21:GLY:N 6 (1,193) 1:A:23:ARG:C 1:A:24:ASP:N 1:A:24:ASP:CA 1:A:24:ASP:C 13 (1,220) 1:A:66:PHE:N 1:A:66:PHE:CA 1:A:66:PHE:C 1:A:67:GLY:N 6 (1,318) 1:A:127:ARG:C 1:A:128:ASN:N 1:A:128:ASN:CA 1:A:128:ASN:C 20 (1,242) 1:A:69:THR:N 1:A:69:THR:CA 1:A:93:THR:C 1:A:494:ALA:N 12 (1,209) 1:A:60:LYS:N 1:A:60:LYS:CA 1:A:60:LYS:C 1:A:61:GLU:N 7 (1,281) 1:A:107:ALA:C 1:A:108:LYS:CA 1:A:108:LYS:C 1:A:108:LYS:C 1:A:108:LYS:C 1 (1,277) 1:A:160:THR:N 1:A:166:THR:CA 1:A:165:THR:C 1:A:165	44.51 44.5 44.5 44.48 44.4 44.39 44.36 44.36 44.33 44.31 44.28 44.25 44.27
(1,364) 1:A:166:ASN:C 1:A:167:GLN:N 1:A:167:GLN:CA 1:A:167:GLN:C 8 (1,346) 1:A:160:GLN:C 1:A:161:HIS:N 1:A:161:HIS:CA 1:A:161:HIS:C 14 (1,184) 1:A:20:ALA:N 1:A:20:ALA:CA 1:A:20:ALA:C 1:A:21:GLY:N 6 (1,193) 1:A:23:ARG:C 1:A:24:ASP:N 1:A:24:ASP:CA 1:A:24:ASP:C 13 (1,220) 1:A:66:PHE:N 1:A:66:PHE:CA 1:A:66:PHE:C 1:A:67:GLY:N 6 (1,318) 1:A:127:ARG:C 1:A:128:ASN:N 1:A:128:ASN:CA 1:A:128:ASN:C 20 (1,242) 1:A:93:THR:N 1:A:493:THR:CA 1:A:93:THR:C 1:A:94:ALA:N 12 (1,209) 1:A:60:LYS:N 1:A:60:LYS:CA 1:A:60:LYS:C 1:A:61:GLU:N 7 (1,281) 1:A:107:ALA:C 1:A:108:LYS:N 1:A:108:LYS:CA 1:A:108:LYS:C 1 (1,277) 1:A:62:GLY:C 1:A:63:THR:N 1:A:63:THR:CA 1:A:107:ALA:N 18 (1,179) 1:A:18:THR:C 1:A:19:ASN:N 1:A:19:ASN:CA 1:A:165:CYS:C 1 </td <td>44.5 44.48 44.4 44.39 44.36 44.36 44.33 44.31 44.28 44.25 44.27 44.17</td>	44.5 44.48 44.4 44.39 44.36 44.36 44.33 44.31 44.28 44.25 44.27 44.17
(1,346) 1:A:160:GLN:C 1:A:161:HIS:N 1:A:161:HIS:CA 1:A:161:HIS:C 14 (1,184) 1:A:20:ALA:N 1:A:20:ALA:CA 1:A:20:ALA:C 1:A:21:GLY:N 6 (1,193) 1:A:23:ARG:C 1:A:24:ASP:N 1:A:24:ASP:CA 1:A:24:ASP:C 13 (1,220) 1:A:66:PHE:N 1:A:66:PHE:CA 1:A:66:PHE:C 1:A:67:GLY:N 6 (1,318) 1:A:127:ARG:C 1:A:128:ASN:N 1:A:128:ASN:CA 1:A:128:ASN:C 20 (1,242) 1:A:93:THR:N 1:A:93:THR:CA 1:A:93:THR:C 1:A:94:ALA:N 12 (1,209) 1:A:60:LYS:N 1:A:60:LYS:CA 1:A:60:LYS:C 1:A:61:GLU:N 7 (1,281) 1:A:107:ALA:C 1:A:108:LYS:N 1:A:108:LYS:CA 1:A:108:LYS:C 1 (1,215) 1:A:62:GLY:C 1:A:63:THR:N 1:A:63:THR:CA 1:A:107:ALA:N 18 (1,277) 1:A:106:THR:N 1:A:106:THR:CA 1:A:106:THR:C 1:A:107:ALA:N 18 (1,357) 1:A:164:LYS:C 1:A:165:CYS:N 1:A:165:CYS:CA 1:A:163:GLU:C 15	44.5 44.48 44.4 44.39 44.36 44.36 44.33 44.31 44.28 44.25 44.27 44.17
(1,184) 1:A:20:ALA:N 1:A:20:ALA:CA 1:A:20:ALA:C 1:A:21:GLY:N 6 (1,193) 1:A:23:ARG:C 1:A:24:ASP:N 1:A:24:ASP:CA 1:A:24:ASP:C 13 (1,220) 1:A:66:PHE:N 1:A:66:PHE:CA 1:A:66:PHE:C 1:A:67:GLY:N 6 (1,318) 1:A:127:ARG:C 1:A:128:ASN:N 1:A:128:ASN:CA 1:A:128:ASN:C 20 (1,242) 1:A:93:THR:N 1:A:93:THR:CA 1:A:93:THR:C 1:A:94:ALA:N 12 (1,209) 1:A:60:LYS:N 1:A:60:LYS:CA 1:A:60:LYS:C 1:A:61:GLU:N 7 (1,281) 1:A:107:ALA:C 1:A:108:LYS:N 1:A:108:LYS:CA 1:A:108:LYS:C 1 (1,215) 1:A:62:GLY:C 1:A:63:THR:N 1:A:63:THR:CA 1:A:63:THR:C 20 (1,277) 1:A:106:THR:N 1:A:106:THR:CA 1:A:106:THR:C 1:A:107:ALA:N 18 (1,179) 1:A:18:THR:C 1:A:165:CYS:N 1:A:165:CYS:CA 1:A:165:CYS:C 17 (1,352) 1:A:164:LYS:C 1:A:165:CYS:N 1:A:165:CYS:CA 1:A:166:PHE:C 10	44.48 44.39 44.36 44.36 44.33 44.31 44.28 44.25 44.27 44.17
(1,193) 1:A:23:ARG:C 1:A:24:ASP:N 1:A:24:ASP:CA 1:A:24:ASP:C 13 (1,220) 1:A:66:PHE:N 1:A:66:PHE:CA 1:A:66:PHE:C 1:A:67:GLY:N 6 (1,318) 1:A:127:ARG:C 1:A:128:ASN:N 1:A:128:ASN:CA 1:A:128:ASN:C 20 (1,242) 1:A:93:THR:N 1:A:93:THR:CA 1:A:93:THR:C 1:A:94:ALA:N 12 (1,209) 1:A:60:LYS:N 1:A:60:LYS:CA 1:A:60:LYS:C 1:A:61:GLU:N 7 (1,281) 1:A:107:ALA:C 1:A:108:LYS:N 1:A:108:LYS:CA 1:A:63:THR:C 1 (1,215) 1:A:62:GLY:C 1:A:63:THR:N 1:A:63:THR:CA 1:A:63:THR:C 20 (1,277) 1:A:106:THR:N 1:A:106:THR:CA 1:A:107:ALA:N 18 (1,179) 1:A:18:THR:C 1:A:19:ASN:N 1:A:19:ASN:CA 1:A:19:ASN:C 3 (1,357) 1:A:164:LYS:C 1:A:165:CYS:N 1:A:165:CYS:CA 1:A:165:CYS:C 17 (1,335) 1:A:165:LYS:C 1:A:66:PHE:N 1:A:66:PHE:CA 1:A:166:ASN:N 10 (1,359	44.4 44.39 44.36 44.36 44.33 44.31 44.28 44.25 44.25 44.17
(1,220) 1:A:66:PHE:N 1:A:66:PHE:CA 1:A:66:PHE:C 1:A:67:GLY:N 6 (1,318) 1:A:127:ARG:C 1:A:128:ASN:N 1:A:128:ASN:CA 1:A:128:ASN:C 20 (1,242) 1:A:93:THR:N 1:A:93:THR:CA 1:A:93:THR:C 1:A:94:ALA:N 12 (1,209) 1:A:60:LYS:N 1:A:60:LYS:CA 1:A:60:LYS:C 1:A:61:GLU:N 7 (1,281) 1:A:107:ALA:C 1:A:108:LYS:N 1:A:108:LYS:CA 1:A:108:LYS:C 1 (1,215) 1:A:62:GLY:C 1:A:63:THR:N 1:A:63:THR:CA 1:A:63:THR:C 20 (1,277) 1:A:106:THR:N 1:A:106:THR:CA 1:A:106:THR:C 1:A:107:ALA:N 18 (1,179) 1:A:18:THR:C 1:A:19:ASN:N 1:A:19:ASN:CA 1:A:19:ASN:C 3 (1,357) 1:A:164:LYS:C 1:A:165:CYS:N 1:A:163:GLU:CA 1:A:163:GLU:C 15 (1,219) 1:A:65:TRP:C 1:A:66:PHE:N 1:A:66:PHE:CA 1:A:166:ASN:N 10 (1,335) 1:A:165:CYS:N 1:A:165:CYS:CA 1:A:165:CYS:C 1:A:166:ASN:N 10	44.39 44.36 44.33 44.31 44.28 44.25 44.22 44.17
(1,318) 1:A:127:ARG:C 1:A:128:ASN:N 1:A:128:ASN:CA 1:A:128:ASN:C 20 (1,242) 1:A:93:THR:N 1:A:93:THR:CA 1:A:93:THR:C 1:A:94:ALA:N 12 (1,209) 1:A:60:LYS:N 1:A:60:LYS:CA 1:A:60:LYS:C 1:A:61:GLU:N 7 (1,281) 1:A:107:ALA:C 1:A:108:LYS:N 1:A:108:LYS:CA 1:A:108:LYS:C 1 (1,215) 1:A:62:GLY:C 1:A:63:THR:N 1:A:63:THR:CA 1:A:63:THR:C 20 (1,277) 1:A:106:THR:N 1:A:106:THR:CA 1:A:106:THR:C 1:A:107:ALA:N 18 (1,179) 1:A:18:THR:C 1:A:19:ASN:N 1:A:19:ASN:CA 1:A:19:ASN:C 3 (1,357) 1:A:164:LYS:C 1:A:165:CYS:N 1:A:165:CYS:CA 1:A:163:GLU:C 15 (1,352) 1:A:162:LYS:C 1:A:163:GLU:N 1:A:163:GLU:CA 1:A:163:GLU:C 15 (1,219) 1:A:65:TRP:C 1:A:66:PHE:N 1:A:166:PHE:CA 1:A:157:GLY:C 5 (1,335) 1:A:165:CYS:N 1:A:165:CYS:CA 1:A:165:CYS:C 1:A:166:ASN:N 10 <td>44.36 44.36 44.33 44.31 44.28 44.25 44.22 44.17</td>	44.36 44.36 44.33 44.31 44.28 44.25 44.22 44.17
(1,242) 1:A:93:THR:N 1:A:93:THR:CA 1:A:93:THR:C 1:A:94:ALA:N 12 (1,209) 1:A:60:LYS:N 1:A:60:LYS:CA 1:A:60:LYS:C 1:A:61:GLU:N 7 (1,281) 1:A:107:ALA:C 1:A:108:LYS:N 1:A:108:LYS:CA 1:A:108:LYS:C 1 (1,215) 1:A:62:GLY:C 1:A:63:THR:N 1:A:63:THR:CA 1:A:63:THR:C 20 (1,277) 1:A:106:THR:N 1:A:106:THR:CA 1:A:106:THR:C 1:A:107:ALA:N 18 (1,179) 1:A:18:THR:C 1:A:19:ASN:N 1:A:19:ASN:CA 1:A:19:ASN:C 3 (1,357) 1:A:164:LYS:C 1:A:165:CYS:N 1:A:163:GLU:CA 1:A:163:GLU:C 15 (1,352) 1:A:162:LYS:C 1:A:163:GLU:N 1:A:163:GLU:CA 1:A:163:GLU:C 15 (1,219) 1:A:65:TRP:C 1:A:66:PHE:N 1:A:66:PHE:CA 1:A:157:GLY:C 5 (1,335) 1:A:165:CYS:N 1:A:165:CYS:CA 1:A:165:CYS:C 1:A:166:ASN:N 10	44.36 44.33 44.31 44.28 44.25 44.22 44.17 44.17
(1,209) 1:A:60:LYS:N 1:A:60:LYS:CA 1:A:60:LYS:C 1:A:61:GLU:N 7 (1,281) 1:A:107:ALA:C 1:A:108:LYS:N 1:A:108:LYS:CA 1:A:108:LYS:C 1 (1,215) 1:A:62:GLY:C 1:A:63:THR:N 1:A:63:THR:CA 1:A:63:THR:C 20 (1,277) 1:A:106:THR:N 1:A:106:THR:CA 1:A:106:THR:C 1:A:107:ALA:N 18 (1,179) 1:A:18:THR:C 1:A:19:ASN:N 1:A:19:ASN:CA 1:A:19:ASN:C 3 (1,357) 1:A:164:LYS:C 1:A:165:CYS:N 1:A:165:CYS:CA 1:A:163:GLU:C 17 (1,352) 1:A:162:LYS:C 1:A:163:GLU:N 1:A:163:GLU:CA 1:A:163:GLU:C 15 (1,219) 1:A:65:TRP:C 1:A:66:PHE:N 1:A:66:PHE:CA 1:A:157:GLY:C 5 (1,335) 1:A:156:LYS:C 1:A:157:GLY:N 1:A:165:CYS:C 1:A:166:ASN:N 10	44.33 44.31 44.28 44.25 44.22 44.17 44.17
(1,281) 1:A:107:ALA:C 1:A:108:LYS:N 1:A:108:LYS:CA 1:A:108:LYS:C 1 (1,215) 1:A:62:GLY:C 1:A:63:THR:N 1:A:63:THR:CA 1:A:63:THR:C 20 (1,277) 1:A:106:THR:N 1:A:106:THR:CA 1:A:106:THR:C 1:A:107:ALA:N 18 (1,179) 1:A:18:THR:C 1:A:19:ASN:N 1:A:19:ASN:CA 1:A:19:ASN:C 3 (1,357) 1:A:164:LYS:C 1:A:165:CYS:N 1:A:165:CYS:CA 1:A:165:CYS:C 17 (1,352) 1:A:162:LYS:C 1:A:163:GLU:N 1:A:163:GLU:CA 1:A:163:GLU:C 15 (1,219) 1:A:65:TRP:C 1:A:66:PHE:N 1:A:66:PHE:CA 1:A:66:PHE:C 10 (1,335) 1:A:156:LYS:C 1:A:157:GLY:N 1:A:165:CYS:C 1:A:166:ASN:N 10	44.31 44.28 44.25 44.22 44.17 44.17
(1,215) 1:A:62:GLY:C 1:A:63:THR:N 1:A:63:THR:CA 1:A:63:THR:C 20 (1,277) 1:A:106:THR:N 1:A:106:THR:CA 1:A:106:THR:C 1:A:107:ALA:N 18 (1,179) 1:A:18:THR:C 1:A:19:ASN:N 1:A:19:ASN:CA 1:A:19:ASN:C 3 (1,357) 1:A:164:LYS:C 1:A:165:CYS:N 1:A:165:CYS:CA 1:A:165:CYS:C 17 (1,352) 1:A:162:LYS:C 1:A:163:GLU:N 1:A:163:GLU:CA 1:A:163:GLU:C 15 (1,219) 1:A:65:TRP:C 1:A:66:PHE:N 1:A:66:PHE:CA 1:A:66:PHE:C 10 (1,335) 1:A:156:LYS:C 1:A:157:GLY:N 1:A:165:CYS:C 1:A:166:ASN:N 10 (1,359) 1:A:165:CYS:N 1:A:165:CYS:CA 1:A:165:CYS:C 1:A:166:ASN:N 10	44.28 44.25 44.22 44.17 44.17
(1,277) 1:A:106:THR:N 1:A:106:THR:CA 1:A:106:THR:C 1:A:107:ALA:N 18 (1,179) 1:A:18:THR:C 1:A:19:ASN:N 1:A:19:ASN:CA 1:A:19:ASN:C 3 (1,357) 1:A:164:LYS:C 1:A:165:CYS:N 1:A:165:CYS:CA 1:A:165:CYS:C 17 (1,352) 1:A:162:LYS:C 1:A:163:GLU:N 1:A:163:GLU:CA 1:A:163:GLU:C 15 (1,219) 1:A:65:TRP:C 1:A:66:PHE:N 1:A:66:PHE:CA 1:A:66:PHE:C 10 (1,335) 1:A:156:LYS:C 1:A:157:GLY:N 1:A:157:GLY:CA 1:A:166:ASN:N 10 (1,359) 1:A:165:CYS:N 1:A:165:CYS:CA 1:A:165:CYS:C 1:A:166:ASN:N 10	44.25 44.22 44.17 44.17
(1,179) 1:A:18:THR:C 1:A:19:ASN:N 1:A:19:ASN:CA 1:A:19:ASN:C 3 (1,357) 1:A:164:LYS:C 1:A:165:CYS:N 1:A:165:CYS:CA 1:A:165:CYS:C 17 (1,352) 1:A:162:LYS:C 1:A:163:GLU:N 1:A:163:GLU:CA 1:A:163:GLU:C 15 (1,219) 1:A:65:TRP:C 1:A:66:PHE:N 1:A:66:PHE:CA 1:A:66:PHE:C 10 (1,335) 1:A:156:LYS:C 1:A:157:GLY:N 1:A:157:GLY:CA 1:A:157:GLY:C 5 (1,359) 1:A:165:CYS:N 1:A:165:CYS:CA 1:A:165:CYS:C 1:A:166:ASN:N 10	44.22 44.17 44.17
(1,357) 1:A:164:LYS:C 1:A:165:CYS:N 1:A:165:CYS:CA 1:A:165:CYS:C 17 (1,352) 1:A:162:LYS:C 1:A:163:GLU:N 1:A:163:GLU:CA 1:A:163:GLU:C 15 (1,219) 1:A:65:TRP:C 1:A:66:PHE:N 1:A:66:PHE:CA 1:A:66:PHE:C 10 (1,335) 1:A:156:LYS:C 1:A:157:GLY:N 1:A:157:GLY:CA 1:A:157:GLY:C 5 (1,359) 1:A:165:CYS:N 1:A:165:CYS:CA 1:A:165:CYS:C 1:A:166:ASN:N 10	44.17 44.17
(1,352) 1:A:162:LYS:C 1:A:163:GLU:N 1:A:163:GLU:CA 1:A:163:GLU:C 15 (1,219) 1:A:65:TRP:C 1:A:66:PHE:N 1:A:66:PHE:CA 1:A:66:PHE:C 10 (1,335) 1:A:156:LYS:C 1:A:157:GLY:N 1:A:157:GLY:CA 1:A:157:GLY:C 5 (1,359) 1:A:165:CYS:N 1:A:165:CYS:CA 1:A:165:CYS:C 1:A:166:ASN:N 10	44.17
(1,219) 1:A:65:TRP:C 1:A:66:PHE:N 1:A:66:PHE:CA 1:A:66:PHE:C 10 (1,335) 1:A:156:LYS:C 1:A:157:GLY:N 1:A:157:GLY:CA 1:A:157:GLY:C 5 (1,359) 1:A:165:CYS:N 1:A:165:CYS:CA 1:A:165:CYS:C 1:A:166:ASN:N 10	
(1,335) 1:A:156:LYS:C 1:A:157:GLY:N 1:A:157:GLY:CA 1:A:157:GLY:C 5 (1,359) 1:A:165:CYS:N 1:A:165:CYS:CA 1:A:165:CYS:C 1:A:166:ASN:N 10	43.00
(1,359) 1:A:165:CYS:N 1:A:165:CYS:CA 1:A:165:CYS:C 1:A:166:ASN:N 10	40. 33
	43.96
(1,176) 1:A:17:LYS:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:C 10	43.94
	43.92
(1,307) 1:A:117:LEU:N 1:A:117:LEU:CA 1:A:117:LEU:C 1:A:118:THR:N 16	43.9
(1,250) 1:A:96:GLU:C 1:A:97:ILE:N 1:A:97:ILE:CA 1:A:97:ILE:C 1	43.86
(1,176) 1:A:17:LYS:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:18:THR:C 5	43.86
(1,161) 1:A:2:ALA:C 1:A:3:ASP:N 1:A:3:ASP:CA 1:A:3:ASP:C 8	43.84
(1,284) 1:A:108:LYS:C 1:A:109:MET:N 1:A:109:MET:CA 1:A:109:MET:C 19	43.83
(1,236) 1:A:88:ILE:C 1:A:89:THR:N 1:A:89:THR:CA 1:A:89:THR:C 16	43.83
(1,270) 1:A:103:ASP:C 1:A:104:GLY:N 1:A:104:GLY:CA 1:A:104:GLY:C 16	43.8
(1,168) 1:A:14:PRO:N 1:A:14:PRO:CA 1:A:14:PRO:C 1:A:15:VAL:N 2	43.8
(1,204) 1:A:52:ASP:C 1:A:53:TRP:N 1:A:53:TRP:CA 1:A:53:TRP:C 6	43.79
(1,168) 1:A:14:PRO:N 1:A:14:PRO:CA 1:A:14:PRO:C 1:A:15:VAL:N 18	43.78
(1,337) 1:A:157:GLY:C 1:A:158:VAL:N 1:A:158:VAL:CA 1:A:158:VAL:C 12	43.71
(1,302) 1:A:115:ILE:C 1:A:116:CYS:N 1:A:116:CYS:CA 1:A:116:CYS:C 11	43.71
(1,112) 1:A:85:ASP:N 1:A:85:ASP:CA 1:A:85:ASP:C 1:A:86:ILE:N 9	43.71
(1,189) 1:A:21:GLY:N 1:A:21:GLY:CA 1:A:21:GLY:C 1:A:22:PRO:N 20	43.69
(1,277) 1:A:106:THR:N 1:A:106:THR:CA 1:A:106:THR:C 1:A:107:ALA:N 16	43.66
(1,326) 1:A:132:PHE:N 1:A:132:PHE:CA 1:A:132:PHE:C 1:A:133:GLY:N 10	43.64
(1,189) 1:A:21:GLY:N 1:A:21:GLY:CA 1:A:21:GLY:C 1:A:22:PRO:N 15	43.64
(1,185) 1:A:20:ALA:N 1:A:20:ALA:CA 1:A:20:ALA:C 1:A:21:GLY:N 2	43.62
(1,362) 1:A:166:ASN:N 1:A:166:ASN:CA 1:A:166:ASN:C 1:A:167:GLN:N 17	43.6
(1,297) 1:A:113:GLY:C 1:A:114:LYS:N 1:A:114:LYS:CA 1:A:114:LYS:C 7	43.56
(1,236) 1:A:88:ILE:C 1:A:89:THR:N 1:A:89:THR:CA 1:A:89:THR:C 10	43.52
(1,228) 1:A:75:LEU:C 1:A:76:LEU:N 1:A:76:LEU:CA 1:A:76:LEU:C 11	43.48
(1,199) 1:A:50:ASP:C 1:A:51:ASN:N 1:A:51:ASN:CA 1:A:51:ASN:C 8	43.48
(1,250) 1:A:96:GLU:C 1:A:97:ILE:N 1:A:97:ILE:CA 1:A:97:ILE:C 9	43.46
(1,215) 1:A:62:GLY:C 1:A:63:THR:N 1:A:63:THR:CA 1:A:63:THR:C 7	43.46
(1,349) 1:A:161:HIS:C 1:A:162:LYS:N 1:A:162:LYS:CA 1:A:162:LYS:C 20	43.44
(1,176) 1:A:17:LYS:C 1:A:18:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:18:THR:C 4	43.44
(1,264) 1:A:101:GLU:C 1:A:102:LEU:N 1:A:102:LEU:CA 1:A:102:LEU:C 10	43.42
(1,337) 1:A:157:GLY:C 1:A:158:VAL:N 1:A:158:VAL:CA 1:A:158:VAL:C 3	43.4
(1,340) 1:A:158:VAL:C 1:A:159:ILE:N 1:A:159:ILE:CA 1:A:159:ILE:C 13	43.39
(1,337) 1:A:157:GLY:C 1:A:158:VAL:N 1:A:158:VAL:CA 1:A:158:VAL:C 17	43.31



	ed from previous po					
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (\circ)
(1,246)	1:A:95:PRO:N	1:A:95:PRO:CA	1:A:95:PRO:C	1:A:96:GLU:N	8	43.21
(1,355)	1:A:163:GLU:C	1:A:164:LYS:N	1:A:164:LYS:CA	1:A:164:LYS:C	10	43.2
(1,331)	1:A:148:VAL:C	1:A:149:GLU:N	1:A:149:GLU:CA	1:A:149:GLU:C	18	43.19
(1,305)	1:A:116:CYS:C	1:A:117:LEU:N	1:A:117:LEU:CA	1:A:117:LEU:C	5	43.16
(1,277)	1:A:106:THR:N	1:A:106:THR:CA	1:A:106:THR:C	1:A:107:ALA:N	1	43.16
(1,309)	1:A:117:LEU:C	1:A:118:THR:N	1:A:118:THR:CA	1:A:118:THR:C	17	43.15
(1,318)	1:A:127:ARG:C	1:A:128:ASN:N	1:A:128:ASN:CA	1:A:128:ASN:C	18	43.14
(1,307)	1:A:117:LEU:N	1:A:117:LEU:CA	1:A:117:LEU:C	1:A:118:THR:N	18	43.14
(1,230)	1:A:76:LEU:N	1:A:76:LEU:CA	1:A:76:LEU:C	1:A:77:LYS:N	19	43.07
(1,363)	1:A:166:ASN:C	1:A:167:GLN:N	1:A:167:GLN:CA	1:A:167:GLN:C	12	43.06
(1,311)	1:A:118:THR:N	1:A:118:THR:CA	1:A:118:THR:C	1:A:119:ASP:N	1	43.03
(1,236)	1:A:88:ILE:C	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:C	3	43.02
(1,168)	1:A:14:PRO:N	1:A:14:PRO:CA	1:A:14:PRO:C	1:A:15:VAL:N	16	43.01
(1,294)	1:A:112:GLY:C	1:A:113:GLY:N	1:A:113:GLY:CA	1:A:113:GLY:C	3	42.94
(1,311)	1:A:118:THR:N	1:A:118:THR:CA	1:A:118:THR:C	1:A:119:ASP:N	9	42.91
(1,342)	1:A:159:ILE:N	1:A:159:ILE:CA	1:A:159:ILE:C	1:A:160:GLN:N	17	42.89
(1,275)	1:A:105:LYS:C	1:A:106:THR:N	1:A:106:THR:CA	1:A:106:THR:C	18	42.88
(1,335)	1:A:156:LYS:C	1:A:157:GLY:N	1:A:157:GLY:CA	1:A:157:GLY:C	19	42.83
(1,200)	1:A:51:ASN:N	1:A:51:ASN:CA	1:A:51:ASN:C	1:A:52:ASP:N	11	42.83
(1,173)	1:A:16:LEU:C	1:A:17:LYS:N	1:A:17:LYS:CA	1:A:17:LYS:C	20	42.81
(1,93)	1:A:72:ILE:C	1:A:73:HIS:N	1:A:73:HIS:CA	1:A:73:HIS:C	5	42.79
(1,326)	1:A:132:PHE:N	1:A:132:PHE:CA	1:A:132:PHE:C	1:A:133:GLY:N	3	42.78
(1,351)	1:A:162:LYS:N	1:A:162:LYS:CA	1:A:162:LYS:C	1:A:163:GLU:N	5	42.74
(1,301)	1:A:115:ILE:N	1:A:115:ILE:CA	1:A:115:ILE:C	1:A:116:CYS:N	7	42.64
(1,178)	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	1:A:19:ASN:N	6	42.64
(1,308)	1:A:117:LEU:C	1:A:118:THR:N	1:A:118:THR:CA	1:A:118:THR:C	3	42.62
(1,176)	1:A:17:LYS:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	18	42.59
(1,350)	1:A:161:HIS:C	1:A:162:LYS:N	1:A:162:LYS:CA	1:A:162:LYS:C	5	42.55
(1,176)	1:A:17:LYS:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	1	42.55
(1,337)	1:A:157:GLY:C	1:A:158:VAL:N	1:A:158:VAL:CA	1:A:158:VAL:C	1	42.54
(1,351)	1:A:162:LYS:N	1:A:162:LYS:CA	1:A:162:LYS:C	1:A:163:GLU:N	17	42.5
(1,284)	1:A:108:LYS:C	1:A:109:MET:N	1:A:109:MET:CA	1:A:109:MET:C	20	42.5
(1,347)	1:A:160:GLN:C	1:A:161:HIS:N	1:A:161:HIS:CA	1:A:161:HIS:C	16	42.43
(1,349)	1:A:161:HIS:C	1:A:162:LYS:N	1:A:162:LYS:CA	1:A:162:LYS:C	13	42.3
(1,289)	1:A:110:TYR:N	1:A:110:TYR:CA	1:A:110:TYR:C	1:A:111:ARG:N	3	42.29
(1,220)	1:A:66:PHE:N	1:A:66:PHE:CA	1:A:66:PHE:C	1:A:67:GLY:N	15	42.28
(1,173)	1:A:16:LEU:C	1:A:17:LYS:N	1:A:17:LYS:CA	1:A:17:LYS:C	19	42.2
(1,335)	1:A:156:LYS:C	1:A:157:GLY:N	1:A:157:GLY:CA	1:A:157:GLY:C	7	42.13
(1,326)	1:A:132:PHE:N	1:A:132:PHE:CA	1:A:132:PHE:C	1:A:133:GLY:N	20	42.1
(1,301)	1:A:115:ILE:N	1:A:115:ILE:CA	1:A:115:ILE:C	1:A:116:CYS:N	11	42.1
(1,314)	1:A:119:ASP:N	1:A:119:ASP:CA	1:A:119:ASP:C	1:A:120:HIS:N	8	42.07
(1,359)	1:A:165:CYS:N	1:A:165:CYS:CA	1:A:165:CYS:C	1:A:166:ASN:N	11	42.05
(1,270)	1:A:103:ASP:C	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	2	42.02
(1,314)	1:A:119:ASP:N	1:A:119:ASP:CA	1:A:119:ASP:C	1:A:120:HIS:N	17	42.0
(1,296)	1:A:113:GLY:C	1:A:114:LYS:N	1:A:114:LYS:CA	1:A:114:LYS:C	19	41.99
(1,281)	1:A:107:ALA:C	1:A:108:LYS:N	1:A:108:LYS:CA	1:A:108:LYS:C	16	41.96
(1,93)	1:A:72:ILE:C	1:A:73:HIS:N	1:A:73:HIS:CA	1:A:73:HIS:C	17	41.94
(1,353)	1:A:162:LYS:C	1:A:163:GLU:N	1:A:163:GLU:CA	1:A:163:GLU:C	1	41.94
(1,210)	1:A:60:LYS:N	1:A:60:LYS:CA	1:A:60:LYS:C	1:A:61:GLU:N	4	41.92
(1,342)	1:A:159:ILE:N	1:A:159:ILE:CA	1:A:159:ILE:C	1:A:160:GLN:N	15	41.89
(1,304)	1:A:116:CYS:N	1:A:116:CYS:CA	1:A:116:CYS:C	1:A:117:LEU:N	10	41.8



Key	$rac{ed\ from\ previous\ po}{\mathbf{Atom-1}}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,359)	1:A:165:CYS:N	1:A:165:CYS:CA	1:A:165:CYS:C	1:A:166:ASN:N	1	41.77
(1,264)	1:A:101:GLU:C	1:A:102:LEU:N	1:A:102:LEU:CA	1:A:102:LEU:C	1	41.76
(1,305)	1:A:116:CYS:C	1:A:117:LEU:N	1:A:117:LEU:CA	1:A:117:LEU:C	12	41.74
(1,294)	1:A:112:GLY:C	1:A:113:GLY:N	1:A:113:GLY:CA	1:A:113:GLY:C	18	41.74
(1,298)	1:A:114:LYS:N	1:A:114:LYS:CA	1:A:114:LYS:C	1:A:115:ILE:N	18	41.73
(1,264)	1:A:101:GLU:C	1:A:102:LEU:N	1:A:102:LEU:CA	1:A:102:LEU:C	19	41.72
(1,252)	1:A:97:ILE:N	1:A:97:ILE:CA	1:A:97:ILE:C	1:A:98:ALA:N	7	41.72
(1,305)	1:A:116:CYS:C	1:A:117:LEU:N	1:A:117:LEU:CA	1:A:117:LEU:C	16	41.71
(1,285)	1:A:108:LYS:C	1:A:109:MET:N	1:A:109:MET:CA	1:A:109:MET:C	10	41.71
(1,205)	1:A:52:ASP:C	1:A:53:TRP:N	1:A:53:TRP:CA	1:A:53:TRP:C	10	41.67
(1,281)	1:A:107:ALA:C	1:A:108:LYS:N	1:A:108:LYS:CA	1:A:108:LYS:C	6	41.66
(1,247)	1:A:95:PRO:C	1:A:96:GLU:N	1:A:96:GLU:CA	1:A:96:GLU:C	5	41.63
(1,219)	1:A:65:TRP:C	1:A:66:PHE:N	1:A:66:PHE:CA	1:A:66:PHE:C	20	41.61
(1,337)	1:A:157:GLY:C	1:A:158:VAL:N	1:A:158:VAL:CA	1:A:158:VAL:C	18	41.52
(1,311)	1:A:118:THR:N	1:A:118:THR:CA	1:A:118:THR:C	1:A:119:ASP:N	16	41.49
(1,364)	1:A:166:ASN:C	1:A:167:GLN:N	1:A:167:GLN:CA	1:A:167:GLN:C	6	41.47
(1,236)	1:A:88:ILE:C	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:C	12	41.43
(1,287)	1:A:109:MET:C	1:A:110:TYR:N	1:A:110:TYR:CA	1:A:110:TYR:C	6	41.37
(1,257)	1:A:97:ILE:N	1:A:97:ILE:CA	1:A:97:ILE:C	1:A:98:ALA:N	14	41.36
(1,269)	1:A:103:ASP:N	1:A:103:ASP:CA	1:A:103:ASP:C	1:A:104:GLY:N	8	41.35
(1,272)	1:A:104:GLY:C	1:A:105:LYS:N	1:A:105:LYS:CA	1:A:105:LYS:C	9	41.33
(1,212) $(1,215)$	1:A:62:GLY:C	1:A:63:THR:N	1:A:63:THR:CA	1:A:63:THR:C	13	41.33
(1,213) $(1,173)$	1:A:16:LEU:C	1:A:17:LYS:N	1:A:17:LYS:CA	1:A:17:LYS:C	9	41.32
(1,296)	1:A:113:GLY:C	1:A:114:LYS:N	1:A:114:LYS:CA	1:A:114:LYS:C	16	41.31
(1,201)	1:A:51:ASN:C	1:A:52:ASP:N	1:A:52:ASP:CA	1:A:52:ASP:C	16	41.27
(1,349)	1:A:161:HIS:C	1:A:162:LYS:N	1:A:162:LYS:CA	1:A:162:LYS:C	8	41.22
(1,275)	1:A:105:LYS:C	1:A:106:THR:N	1:A:106:THR:CA	1:A:106:THR:C	8	41.21
(1,301)	1:A:115:ILE:N	1:A:115:ILE:CA	1:A:115:ILE:C	1:A:116:CYS:N	18	41.14
(1,233)	1:A:87:PRO:N	1:A:87:PRO:CA	1:A:87:PRO:C	1:A:88:ILE:N	16	41.11
(1,215)	1:A:62:GLY:C	1:A:63:THR:N	1:A:63:THR:CA	1:A:63:THR:C	8	41.11
(1,290)	1:A:110:TYR:C	1:A:111:ARG:N	1:A:111:ARG:CA	1:A:111:ARG:C	7	41.1
(1,343)	1:A:159:ILE:C	1:A:160:GLN:N	1:A:160:GLN:CA	1:A:160:GLN:C	9	41.09
(1,246)	1:A:95:PRO:N	1:A:95:PRO:CA	1:A:95:PRO:C	1:A:96:GLU:N	19	41.09
(1,183)	1:A:19:ASN:C	1:A:20:ALA:N	1:A:20:ALA:CA	1:A:20:ALA:C	12	41.09
(1,348)	1:A:161:HIS:N	1:A:161:HIS:CA	1:A:161:HIS:C	1:A:162:LYS:N	9	41.07
(1,200)	1:A:51:ASN:N	1:A:51:ASN:CA	1:A:51:ASN:C	1:A:52:ASP:N	10	41.04
(1,161)	1:A:2:ALA:C	1:A:3:ASP:N	1:A:3:ASP:CA	1:A:3:ASP:C	9	41.02
(1,255)	1:A:98:ALA:N	1:A:98:ALA:CA	1:A:98:ALA:C	1:A:99:VAL:N	9	41.0
(1,264)	1:A:101:GLU:C	1:A:102:LEU:N	1:A:102:LEU:CA	1:A:102:LEU:C	17	40.99
(1,360)	1:A:165:CYS:C	1:A:166:ASN:N	1:A:166:ASN:CA	1:A:166:ASN:C	5	40.93
(1,201)	1:A:51:ASN:C	1:A:52:ASP:N	1:A:52:ASP:CA	1:A:52:ASP:C	17	40.9
(1,112)	1:A:85:ASP:N	1:A:85:ASP:CA	1:A:85:ASP:C	1:A:86:ILE:N	6	40.87
(1,215)	1:A:62:GLY:C	1:A:63:THR:N	1:A:63:THR:CA	1:A:63:THR:C	16	40.83
(1,307)	1:A:117:LEU:N	1:A:117:LEU:CA	1:A:117:LEU:C	1:A:118:THR:N	9	40.81
(1,335)	1:A:156:LYS:C	1:A:157:GLY:N	1:A:157:GLY:CA	1:A:157:GLY:C	18	40.8
(1,230)	1:A:76:LEU:N	1:A:76:LEU:CA	1:A:76:LEU:C	1:A:77:LYS:N	3	40.79
(1,270)	1:A:103:ASP:C	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	15	40.78
(1,330)	1:A:148:VAL:C	1:A:149:GLU:N	1:A:149:GLU:CA	1:A:149:GLU:C	3	40.71
(1,236)	1:A:88:ILE:C	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:C	8	40.71
(1,215)	1:A:62:GLY:C	1:A:63:THR:N	1:A:63:THR:CA	1:A:63:THR:C	4	40.71
(1,305)	1:A:116:CYS:C	1:A:117:LEU:N	1:A:117:LEU:CA	1:A:117:LEU:C	2	40.7
			1	I.		ed on nert nage



	ed from previous pe					
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	$\textbf{Violation} \ (\ \circ \)$
(1,304)	1:A:116:CYS:N	1:A:116:CYS:CA	1:A:116:CYS:C	1:A:117:LEU:N	15	40.69
(1,296)	1:A:113:GLY:C	1:A:114:LYS:N	1:A:114:LYS:CA	1:A:114:LYS:C	14	40.68
(1,93)	1:A:72:ILE:C	1:A:73:HIS:N	1:A:73:HIS:CA	1:A:73:HIS:C	10	40.64
(1,184)	1:A:20:ALA:N	1:A:20:ALA:CA	1:A:20:ALA:C	1:A:21:GLY:N	13	40.63
(1,311)	1:A:118:THR:N	1:A:118:THR:CA	1:A:118:THR:C	1:A:119:ASP:N	14	40.58
(1,161)	1:A:2:ALA:C	1:A:3:ASP:N	1:A:3:ASP:CA	1:A:3:ASP:C	2	40.57
(1,242)	1:A:93:THR:N	1:A:93:THR:CA	1:A:93:THR:C	1:A:94:ALA:N	3	40.47
(1,289)	1:A:110:TYR:N	1:A:110:TYR:CA	1:A:110:TYR:C	1:A:111:ARG:N	18	40.45
(1,188)	1:A:21:GLY:N	1:A:21:GLY:CA	1:A:21:GLY:C	1:A:22:PRO:N	8	40.45
(1,93)	1:A:72:ILE:C	1:A:73:HIS:N	1:A:73:HIS:CA	1:A:73:HIS:C	1	40.41
(1,246)	1:A:95:PRO:N	1:A:95:PRO:CA	1:A:95:PRO:C	1:A:96:GLU:N	11	40.38
(1,287)	1:A:109:MET:C	1:A:110:TYR:N	1:A:110:TYR:CA	1:A:110:TYR:C	15	40.36
(1,278)	1:A:106:THR:C	1:A:107:ALA:N	1:A:107:ALA:CA	1:A:107:ALA:C	15	40.36
(1,318)	1:A:127:ARG:C	1:A:128:ASN:N	1:A:128:ASN:CA	1:A:128:ASN:C	13	40.35
(1,236)	1:A:88:ILE:C	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:C	5	40.19
(1,308)	1:A:117:LEU:C	1:A:118:THR:N	1:A:118:THR:CA	1:A:118:THR:C	6	40.14
(1,363)	1:A:166:ASN:C	1:A:167:GLN:N	1:A:167:GLN:CA	1:A:167:GLN:C	20	40.13
(1,186)	1:A:20:ALA:C	1:A:21:GLY:N	1:A:21:GLY:CA	1:A:21:GLY:C	13	40.1
(1,277)	1:A:106:THR:N	1:A:106:THR:CA	1:A:106:THR:C	1:A:107:ALA:N	5	40.04
(1,176)	1:A:17:LYS:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	2	40.03
(1,293)	1:A:111:ARG:C	1:A:112:GLY:N	1:A:112:GLY:CA	1:A:112:GLY:C	19	40.0
(1,346)	1:A:160:GLN:C	1:A:161:HIS:N	1:A:161:HIS:CA	1:A:161:HIS:C	19	39.99
(1,343)	1:A:159:ILE:C	1:A:160:GLN:N	1:A:160:GLN:CA	1:A:160:GLN:C	6	39.98
(1,183)	1:A:19:ASN:C	1:A:20:ALA:N	1:A:20:ALA:CA	1:A:20:ALA:C	13	39.96
(1,219)	1:A:65:TRP:C	1:A:66:PHE:N	1:A:66:PHE:CA	1:A:66:PHE:C	14	39.92
(1,335)	1:A:156:LYS:C	1:A:157:GLY:N	1:A:157:GLY:CA	1:A:157:GLY:C	2	39.88
(1,301)	1:A:115:ILE:N	1:A:115:ILE:CA	1:A:115:ILE:C	1:A:116:CYS:N	8	39.85
(1,236)	1:A:88:ILE:C	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:C	18	39.83
(1,278)	1:A:106:THR:C	1:A:107:ALA:N	1:A:107:ALA:CA	1:A:107:ALA:C	14	39.82
(1,335)	1:A:156:LYS:C	1:A:157:GLY:N	1:A:157:GLY:CA	1:A:157:GLY:C	1	39.71
(1,355)	1:A:163:GLU:C	1:A:164:LYS:N	1:A:164:LYS:CA	1:A:164:LYS:C	13	39.69
(1,233)	1:A:87:PRO:N	1:A:87:PRO:CA	1:A:87:PRO:C	1:A:88:ILE:N	8	39.69
(1,307)	1:A:117:LEU:N	1:A:117:LEU:CA	1:A:117:LEU:C	1:A:118:THR:N	7	39.68
(1,252)	1:A:97:ILE:N	1:A:97:ILE:CA	1:A:97:ILE:C	1:A:98:ALA:N	15	39.6
(1,247)	1:A:95:PRO:C	1:A:96:GLU:N	1:A:96:GLU:CA	1:A:96:GLU:C	15	39.59
(1,330)	1:A:148:VAL:C	1:A:149:GLU:N	1:A:149:GLU:CA	1:A:149:GLU:C	11	39.57
(1,185)	1:A:20:ALA:N	1:A:20:ALA:CA	1:A:20:ALA:C	1:A:21:GLY:N	1	39.57
(1,342)	1:A:159:ILE:N	1:A:159:ILE:CA	1:A:159:ILE:C	1:A:160:GLN:N	18	39.53
(1,337)	1:A:157:GLY:C	1:A:158:VAL:N	1:A:158:VAL:CA	1:A:158:VAL:C	14	39.53
(1,261)	1:A:100:PRO:C	1:A:101:GLU:N	1:A:101:GLU:CA	1:A:101:GLU:C	13	39.53
(1,189)	1:A:21:GLY:N	1:A:21:GLY:CA	1:A:21:GLY:C	1:A:22:PRO:N	12	39.5
(1,311)	1:A:118:THR:N	1:A:118:THR:CA	1:A:118:THR:C	1:A:119:ASP:N	11	39.48
(1,246)	1:A:95:PRO:N	1:A:95:PRO:CA	1:A:95:PRO:C	1:A:96:GLU:N	9	39.47
(1,335)	1:A:156:LYS:C	1:A:157:GLY:N	1:A:157:GLY:CA	1:A:157:GLY:C	11	39.45
(1,277)	1:A:106:THR:N	1:A:106:THR:CA	1:A:106:THR:C	1:A:107:ALA:N	15	39.45
(1,186)	1:A:20:ALA:C	1:A:21:GLY:N	1:A:21:GLY:CA	1:A:21:GLY:C	17	39.45
(1,93)	1:A:72:ILE:C	1:A:73:HIS:N	1:A:73:HIS:CA	1:A:73:HIS:C	6	39.44
(1,277)	1:A:106:THR:N	1:A:106:THR:CA	1:A:106:THR:C	1:A:107:ALA:N	6	39.41
(1,308)	1:A:117:LEU:C	1:A:118:THR:N	1:A:118:THR:CA	1:A:118:THR:C	11	39.36
(1,193)	1:A:23:ARG:C	1:A:24:ASP:N	1:A:24:ASP:CA	1:A:24:ASP:C	8	39.33
(1,278)	1:A:106:THR:C	1:A:107:ALA:N	1:A:107:ALA:CA	1:A:107:ALA:C	16	39.32
	•	•				ed on nert nage



	ed from previous pe					
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (\circ)
(1,176)	1:A:17:LYS:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	3	39.32
(1,193)	1:A:23:ARG:C	1:A:24:ASP:N	1:A:24:ASP:CA	1:A:24:ASP:C	16	39.31
(1,180)	1:A:18:THR:C	1:A:19:ASN:N	1:A:19:ASN:CA	1:A:19:ASN:C	18	39.28
(1,340)	1:A:158:VAL:C	1:A:159:ILE:N	1:A:159:ILE:CA	1:A:159:ILE:C	4	39.25
(1,247)	1:A:95:PRO:C	1:A:96:GLU:N	1:A:96:GLU:CA	1:A:96:GLU:C	18	39.23
(1,236)	1:A:88:ILE:C	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:C	11	39.21
(1,326)	1:A:132:PHE:N	1:A:132:PHE:CA	1:A:132:PHE:C	1:A:133:GLY:N	11	39.18
(1,242)	1:A:93:THR:N	1:A:93:THR:CA	1:A:93:THR:C	1:A:94:ALA:N	8	39.18
(1,335)	1:A:156:LYS:C	1:A:157:GLY:N	1:A:157:GLY:CA	1:A:157:GLY:C	8	39.14
(1,340)	1:A:158:VAL:C	1:A:159:ILE:N	1:A:159:ILE:CA	1:A:159:ILE:C	6	39.07
(1,219)	1:A:65:TRP:C	1:A:66:PHE:N	1:A:66:PHE:CA	1:A:66:PHE:C	1	39.0
(1,163)	1:A:3:ASP:N	1:A:3:ASP:CA	1:A:3:ASP:C	1:A:4:GLU:N	1	38.98
(1,112)	1:A:85:ASP:N	1:A:85:ASP:CA	1:A:85:ASP:C	1:A:86:ILE:N	3	38.96
(1,293)	1:A:111:ARG:C	1:A:112:GLY:N	1:A:112:GLY:CA	1:A:112:GLY:C	7	38.89
(1,346)	1:A:160:GLN:C	1:A:161:HIS:N	1:A:161:HIS:CA	1:A:161:HIS:C	11	38.87
(1,344)	1:A:159:ILE:C	1:A:160:GLN:N	1:A:160:GLN:CA	1:A:160:GLN:C	5	38.85
(1,351)	1:A:162:LYS:N	1:A:162:LYS:CA	1:A:162:LYS:C	1:A:163:GLU:N	12	38.84
(1,189)	1:A:21:GLY:N	1:A:21:GLY:CA	1:A:21:GLY:C	1:A:22:PRO:N	9	38.84
(1,340)	1:A:158:VAL:C	1:A:159:ILE:N	1:A:159:ILE:CA	1:A:159:ILE:C	1	38.82
(1,330)	1:A:148:VAL:C	1:A:149:GLU:N	1:A:149:GLU:CA	1:A:149:GLU:C	4	38.8
(1,246)	1:A:95:PRO:N	1:A:95:PRO:CA	1:A:95:PRO:C	1:A:96:GLU:N	12	38.77
(1,215)	1:A:62:GLY:C	1:A:63:THR:N	1:A:63:THR:CA	1:A:63:THR:C	2	38.73
(1,311)	1:A:118:THR:N	1:A:118:THR:CA	1:A:118:THR:C	1:A:119:ASP:N	8	38.69
(1,230)	1:A:76:LEU:N	1:A:76:LEU:CA	1:A:76:LEU:C	1:A:77:LYS:N	4	38.69
(1,335)	1:A:156:LYS:C	1:A:157:GLY:N	1:A:157:GLY:CA	1:A:157:GLY:C	3	38.62
(1,219)	1:A:65:TRP:C	1:A:66:PHE:N	1:A:66:PHE:CA	1:A:66:PHE:C	8	38.55
(1,299)	1:A:114:LYS:N	1:A:114:LYS:CA	1:A:114:LYS:C	1:A:115:ILE:N	20	38.5
(1,264)	1:A:101:GLU:C	1:A:102:LEU:N	1:A:102:LEU:CA	1:A:102:LEU:C	18	38.5
(1,340)	1:A:158:VAL:C	1:A:159:ILE:N	1:A:159:ILE:CA	1:A:159:ILE:C	7	38.49
(1,311)	1:A:118:THR:N	1:A:118:THR:CA	1:A:118:THR:C	1:A:119:ASP:N	13	38.48
(1,318)	1:A:127:ARG:C	1:A:128:ASN:N	1:A:128:ASN:CA	1:A:128:ASN:C	10	38.47
(1,264)	1:A:101:GLU:C	1:A:102:LEU:N	1:A:102:LEU:CA	1:A:102:LEU:C	4	38.47
(1,314)	1:A:119:ASP:N	1:A:119:ASP:CA	1:A:119:ASP:C	1:A:120:HIS:N	4	38.44
(1,193)	1:A:23:ARG:C	1:A:24:ASP:N	1:A:24:ASP:CA	1:A:24:ASP:C	17	38.43
	1:A:109:MET:N	1:A:109:MET:CA	1:A:109:MET:C	1:A:110:TYR:N	5	38.38
(1,343)	1:A:159:ILE:C	1:A:160:GLN:N	1:A:160:GLN:CA	1:A:160:GLN:C	12	38.36
(1,357)	1:A:164:LYS:C	1:A:165:CYS:N	1:A:165:CYS:CA	1:A:165:CYS:C	3	38.35
(1,294)	1:A:112:GLY:C	1:A:113:GLY:N	1:A:113:GLY:CA	1:A:113:GLY:C	9	38.34
(1,247)	1:A:95:PRO:C	1:A:96:GLU:N	1:A:96:GLU:CA	1:A:96:GLU:C	13	38.31
(1,189)	1:A:21:GLY:N	1:A:21:GLY:CA	1:A:21:GLY:C	1:A:22:PRO:N	5	38.29
(1,177)	1:A:17:LYS:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	6	38.26
(1,311)	1:A:118:THR:N	1:A:118:THR:CA	1:A:118:THR:C	1:A:119:ASP:N	17	38.25
(1,215)	1:A:62:GLY:C	1:A:63:THR:N	1:A:63:THR:CA	1:A:63:THR:C	17	38.24
(1,204)	1:A:52:ASP:C	1:A:53:TRP:N	1:A:53:TRP:CA	1:A:53:TRP:C	17	38.22
(1,236)	1:A:88:ILE:C	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:C	2	38.19
(1,337)	1:A:157:GLY:C	1:A:158:VAL:N	1:A:158:VAL:CA	1:A:158:VAL:C	8	38.17
(1,331) $(1,230)$	1:A:76:LEU:N	1:A:76:LEU:CA	1:A:76:LEU:C	1:A:77:LYS:N	5	38.14
(1,281)	1:A:107:ALA:C	1:A:108:LYS:N	1:A:108:LYS:CA	1:A:108:LYS:C	4	38.11
(1,209)	1:A:60:LYS:N	1:A:60:LYS:CA	1:A:60:LYS:C	1:A:61:GLU:N	4	38.08
(1,173)	1:A:16:LEU:C	1:A:17:LYS:N	1:A:17:LYS:CA	1:A:17:LYS:C	18	38.07
(1,201)	1:A:51:ASN:C	1:A:52:ASP:N	1:A:52:ASP:CA	1:A:52:ASP:C	3	38.06
(,)		1	1			ed on next page



Key	$egin{array}{c} ed \ from \ previous \ poly \ egin{array}{c} \mathbf{Atom-1} \end{array}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,183)	1:A:19:ASN:C	1:A:20:ALA:N	1:A:20:ALA:CA	1:A:20:ALA:C	15	38.03
(1,176)	1:A:17:LYS:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	11	37.97
(1,278)	1:A:106:THR:C	1:A:107:ALA:N	1:A:107:ALA:CA	1:A:107:ALA:C	1	37.94
(1,270)	1:A:103:ASP:C	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	10	37.93
(1,297)	1:A:113:GLY:C	1:A:114:LYS:N	1:A:114:LYS:CA	1:A:114:LYS:C	18	37.9
(1,286)	1:A:109:MET:N	1:A:109:MET:CA	1:A:109:MET:C	1:A:110:TYR:N	11	37.9
(1,170)	1:A:15:VAL:N	1:A:15:VAL:CA	1:A:15:VAL:C	1:A:16:LEU:N	5	37.88
(1,189)	1:A:21:GLY:N	1:A:21:GLY:CA	1:A:21:GLY:C	1:A:22:PRO:N	17	37.81
(1,355)	1:A:163:GLU:C	1:A:164:LYS:N	1:A:164:LYS:CA	1:A:164:LYS:C	20	37.67
(1,261)	1:A:100:PRO:C	1:A:101:GLU:N	1:A:101:GLU:CA	1:A:101:GLU:C	7	37.65
(1,315)	1:A:119:ASP:C	1:A:120:HIS:N	1:A:120:HIS:CA	1:A:120:HIS:C	11	37.64
(1,311)	1:A:118:THR:N	1:A:118:THR:CA	1:A:118:THR:C	1:A:119:ASP:N	3	37.61
(1,293)	1:A:111:ARG:C	1:A:112:GLY:N	1:A:112:GLY:CA	1:A:112:GLY:C	9	37.61
(1,242)	1:A:93:THR:N	1:A:93:THR:CA	1:A:93:THR:C	1:A:94:ALA:N	13	37.58
(1,242)	1:A:93:THR:N	1:A:93:THR:CA	1:A:93:THR:C	1:A:94:ALA:N	10	37.52
(1,351)	1:A:162:LYS:N	1:A:162:LYS:CA	1:A:162:LYS:C	1:A:163:GLU:N	16	37.51
(1,189)	1:A:21:GLY:N	1:A:21:GLY:CA	1:A:21:GLY:C	1:A:22:PRO:N	13	37.51
(1,252)	1:A:97:ILE:N	1:A:97:ILE:CA	1:A:97:ILE:C	1:A:98:ALA:N	10	37.43
(1,301)	1:A:115:ILE:N	1:A:115:ILE:CA	1:A:115:ILE:C	1:A:116:CYS:N	14	37.39
(1,185)	1:A:20:ALA:N	1:A:20:ALA:CA	1:A:20:ALA:C	1:A:21:GLY:N	19	37.38
(1,264)	1:A:101:GLU:C	1:A:102:LEU:N	1:A:102:LEU:CA	1:A:102:LEU:C	6	37.36
(1,305)	1:A:116:CYS:C	1:A:117:LEU:N	1:A:117:LEU:CA	1:A:117:LEU:C	7	37.35
(1,289)	1:A:110:TYR:N	1:A:110:TYR:CA	1:A:110:TYR:C	1:A:111:ARG:N	10	37.33
(1,264)	1:A:101:GLU:C	1:A:102:LEU:N	1:A:102:LEU:CA	1:A:102:LEU:C	9	37.33
(1,170)	1:A:15:VAL:N	1:A:15:VAL:CA	1:A:15:VAL:C	1:A:16:LEU:N	19	37.3
(1,307)	1:A:117:LEU:N	1:A:117:LEU:CA	1:A:117:LEU:C	1:A:118:THR:N	13	37.26
(1,236)	1:A:88:ILE:C	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:C	4	37.23
(1,281)	1:A:107:ALA:C	1:A:108:LYS:N	1:A:108:LYS:CA	1:A:108:LYS:C	15	37.18
(1,170)	1:A:15:VAL:N	1:A:15:VAL:CA	1:A:15:VAL:C	1:A:16:LEU:N	18	37.17
(1,233)	1:A:87:PRO:N	1:A:87:PRO:CA	1:A:87:PRO:C	1:A:88:ILE:N	15	37.14
(1,365)	1:A:167:GLN:N	1:A:167:GLN:CA	1:A:167:GLN:C	1:A:168:LEU:N	8	37.13
(1,293)	1:A:111:ARG:C	1:A:112:GLY:N	1:A:112:GLY:CA	1:A:112:GLY:C	10	37.1
(1,173)	1:A:16:LEU:C	1:A:17:LYS:N	1:A:17:LYS:CA	1:A:17:LYS:C	2	37.07
(1,289)	1:A:110:TYR:N	1:A:110:TYR:CA	1:A:110:TYR:C	1:A:111:ARG:N	9	37.01
(1,279)	1:A:106:THR:C	1:A:107:ALA:N	1:A:107:ALA:CA	1:A:107:ALA:C	7	37.0
(1,301)	1:A:115:ILE:N	1:A:115:ILE:CA	1:A:115:ILE:C	1:A:116:CYS:N	16	36.99
(1,326)	1:A:132:PHE:N	1:A:132:PHE:CA	1:A:132:PHE:C	1:A:133:GLY:N	18	36.95
(1,305)	1:A:116:CYS:C	1:A:117:LEU:N	1:A:117:LEU:CA	1:A:117:LEU:C	14	36.9
(1,342)	1:A:159:ILE:N	1:A:159:ILE:CA	1:A:159:ILE:C	1:A:160:GLN:N	6	36.89
(1,299)	1:A:114:LYS:N	1:A:114:LYS:CA	1:A:114:LYS:C	1:A:115:ILE:N	15	36.86
(1,180)	1:A:18:THR:C	1:A:19:ASN:N	1:A:19:ASN:CA	1:A:19:ASN:C	11	36.84
(1,170)	1:A:15:VAL:N	1:A:15:VAL:CA	1:A:15:VAL:C	1:A:16:LEU:N	16	36.83
(1,324)	1:A:131:LYS:C	1:A:132:PHE:N	1:A:132:PHE:CA	1:A:132:PHE:C	13	36.8
(1,298)	1:A:114:LYS:N	1:A:114:LYS:CA	1:A:114:LYS:C	1:A:115:ILE:N	4	36.77
(1,185)	1:A:20:ALA:N	1:A:20:ALA:CA	1:A:20:ALA:C	1:A:21:GLY:N	3	36.77
(1,362)	1:A:166:ASN:N	1:A:166:ASN:CA	1:A:166:ASN:C	1:A:167:GLN:N	14	36.71
(1,330)	1:A:148:VAL:C	1:A:149:GLU:N	1:A:149:GLU:CA	1:A:149:GLU:C	19	36.68
(1,281)	1:A:107:ALA:C	1:A:108:LYS:N	1:A:108:LYS:CA	1:A:108:LYS:C	11	36.67
(1,201)	1:A:51:ASN:C	1:A:52:ASP:N	1:A:52:ASP:CA	1:A:52:ASP:C	15	36.67
(1,247)	1:A:95:PRO:C	1:A:96:GLU:N	1:A:96:GLU:CA	1:A:96:GLU:C	19	36.66
(1,168)	1:A:14:PRO:N	1:A:14:PRO:CA	1:A:14:PRO:C	1:A:15:VAL:N	12	36.66



Key (1,246) (1,182) (1,242) (1,311) (1,326) (1,170)	Atom-1 1:A:95:PRO:N 1:A:19:ASN:C	Atom-2 1:A:95:PRO:CA	Atom-3	Atom-4	Model	$\textbf{Violation} \ (\circ)$
(1,182) (1,242) (1,311) (1,326)	1:A:19:ASN:C	1:A:95:PRO:CA	1. A.OF.DDO.O			
(1,242) (1,311) (1,326)			1:A:95:PRO:C	1:A:96:GLU:N	13	36.65
(1,311) (1,326)		1:A:20:ALA:N	1:A:20:ALA:CA	1:A:20:ALA:C	16	36.59
(1,326)	1:A:93:THR:N	1:A:93:THR:CA	1:A:93:THR:C	1:A:94:ALA:N	5	36.57
	1:A:118:THR:N	1:A:118:THR:CA	1:A:118:THR:C	1:A:119:ASP:N	15	36.52
(1,170)	1:A:132:PHE:N	1:A:132:PHE:CA	1:A:132:PHE:C	1:A:133:GLY:N	16	36.49
· · /	1:A:15:VAL:N	1:A:15:VAL:CA	1:A:15:VAL:C	1:A:16:LEU:N	3	36.46
(1,272)	1:A:104:GLY:C	1:A:105:LYS:N	1:A:105:LYS:CA	1:A:105:LYS:C	3	36.45
(1,189)	1:A:21:GLY:N	1:A:21:GLY:CA	1:A:21:GLY:C	1:A:22:PRO:N	10	36.44
(1,243)	1:A:93:THR:C	1:A:94:ALA:N	1:A:94:ALA:CA	1:A:94:ALA:C	2	36.41
(1,236)	1:A:88:ILE:C	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:C	15	36.41
(1,252)	1:A:97:ILE:N	1:A:97:ILE:CA	1:A:97:ILE:C	1:A:98:ALA:N	18	36.4
(1,252)	1:A:97:ILE:N	1:A:97:ILE:CA	1:A:97:ILE:C	1:A:98:ALA:N	13	36.38
(1,242)	1:A:93:THR:N	1:A:93:THR:CA	1:A:93:THR:C	1:A:94:ALA:N	15	36.34
(1,112)	1:A:85:ASP:N	1:A:85:ASP:CA	1:A:85:ASP:C	1:A:86:ILE:N	12	36.34
(1,299)	1:A:114:LYS:N	1:A:114:LYS:CA	1:A:114:LYS:C	1:A:115:ILE:N	3	36.32
(1,290)	1:A:110:TYR:C	1:A:111:ARG:N	1:A:111:ARG:CA	1:A:111:ARG:C	17	36.23
(1,280)	1:A:107:ALA:N	1:A:107:ALA:CA	1:A:107:ALA:C	1:A:108:LYS:N	7	36.2
(1,335)	1:A:156:LYS:C	1:A:157:GLY:N	1:A:157:GLY:CA	1:A:157:GLY:C	4	36.19
(1,311)	1:A:118:THR:N	1:A:118:THR:CA	1:A:118:THR:C	1:A:119:ASP:N	6	36.19
(1,346)	1:A:160:GLN:C	1:A:161:HIS:N	1:A:161:HIS:CA	1:A:161:HIS:C	17	36.17
(1,363)	1:A:166:ASN:C	1:A:167:GLN:N	1:A:167:GLN:CA	1:A:167:GLN:C	4	36.14
(1,261)	1:A:100:PRO:C	1:A:101:GLU:N	1:A:101:GLU:CA	1:A:101:GLU:C	10	36.09
(1,220)	1:A:66:PHE:N	1:A:66:PHE:CA	1:A:66:PHE:C	1:A:67:GLY:N	13	36.08
(1,360)	1:A:165:CYS:C	1:A:166:ASN:N	1:A:166:ASN:CA	1:A:166:ASN:C	4	36.05
(1,270)	1:A:103:ASP:C	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	9	36.02
(1,359)	1:A:165:CYS:N	1:A:165:CYS:CA	1:A:165:CYS:C	1:A:166:ASN:N	12	36.0
(1,335)	1:A:156:LYS:C	1:A:157:GLY:N	1:A:157:GLY:CA	1:A:157:GLY:C	17	36.0
(1,233)	1:A:87:PRO:N	1:A:87:PRO:CA	1:A:87:PRO:C	1:A:88:ILE:N	6	35.98
(1,337)	1:A:157:GLY:C	1:A:158:VAL:N	1:A:158:VAL:CA	1:A:158:VAL:C	10	35.95
(1,246)	1:A:95:PRO:N	1:A:95:PRO:CA	1:A:95:PRO:C	1:A:96:GLU:N	3	35.93
(1,236)	1:A:88:ILE:C	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:C	19	35.91
(1,301)	1:A:115:ILE:N	1:A:115:ILE:CA	1:A:115:ILE:C	1:A:116:CYS:N	12	35.85
(1,188)	1:A:21:GLY:N	1:A:21:GLY:CA	1:A:21:GLY:C	1:A:22:PRO:N	18	35.81
(1,315)	1:A:119:ASP:C	1:A:120:HIS:N	1:A:120:HIS:CA	1:A:120:HIS:C	6	35.79
(1,252)	1:A:97:ILE:N	1:A:97:ILE:CA	1:A:97:ILE:C	1:A:98:ALA:N	17	35.75
(1,324)	1:A:131:LYS:C	1:A:132:PHE:N	1:A:132:PHE:CA	1:A:132:PHE:C	3	35.74
(1,272)	1:A:104:GLY:C	1:A:105:LYS:N	1:A:105:LYS:CA	1:A:105:LYS:C	14	35.67
(1,210)	1:A:60:LYS:N	1:A:60:LYS:CA	1:A:60:LYS:C	1:A:61:GLU:N	7	35.67
(1,363)	1:A:166:ASN:C	1:A:167:GLN:N	1:A:167:GLN:CA	1:A:167:GLN:C	13	35.66
(1,343)	1:A:159:ILE:C	1:A:160:GLN:N	1:A:160:GLN:CA	1:A:160:GLN:C	1	35.65
(1,275)	1:A:105:LYS:C	1:A:106:THR:N	1:A:106:THR:CA	1:A:106:THR:C	20	35.65
(1,215)	1:A:62:GLY:C	1:A:63:THR:N	1:A:63:THR:CA	1:A:63:THR:C	1	35.64
(1,285)	1:A:108:LYS:C	1:A:109:MET:N	1:A:109:MET:CA	1:A:109:MET:C	11	35.62
(1,314)	1:A:119:ASP:N	1:A:119:ASP:CA	1:A:119:ASP:C	1:A:120:HIS:N	7	35.58
(1,163)	1:A:3:ASP:N	1:A:3:ASP:CA	1:A:3:ASP:C	1:A:4:GLU:N	5	35.57
(1,363)	1:A:166:ASN:C	1:A:167:GLN:N	1:A:167:GLN:CA	1:A:167:GLN:C	10	35.56
(1,220)	1:A:66:PHE:N	1:A:66:PHE:CA	1:A:66:PHE:C	1:A:67:GLY:N	16	35.54
(1,330)	1:A:148:VAL:C	1:A:149:GLU:N	1:A:149:GLU:CA	1:A:149:GLU:C	8	35.49
(1,193)	1:A:23:ARG:C	1:A:24:ASP:N	1:A:24:ASP:CA	1:A:24:ASP:C	12	35.48
(1,289)	1:A:110:TYR:N	1:A:110:TYR:CA	1:A:110:TYR:C	1:A:111:ARG:N	15	35.43
(1,161)	1:A:2:ALA:C	1:A:3:ASP:N	1:A:3:ASP:CA	1:A:3:ASP:C	15	35.42



	ed from previous pe					
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (\circ)
(1,314)	1:A:119:ASP:N	1:A:119:ASP:CA	1:A:119:ASP:C	1:A:120:HIS:N	16	35.38
(1,163)	1:A:3:ASP:N	1:A:3:ASP:CA	1:A:3:ASP:C	1:A:4:GLU:N	2	35.31
(1,311)	1:A:118:THR:N	1:A:118:THR:CA	1:A:118:THR:C	1:A:119:ASP:N	18	35.26
(1,233)	1:A:87:PRO:N	1:A:87:PRO:CA	1:A:87:PRO:C	1:A:88:ILE:N	10	35.26
(1,183)	1:A:19:ASN:C	1:A:20:ALA:N	1:A:20:ALA:CA	1:A:20:ALA:C	9	35.24
(1,294)	1:A:112:GLY:C	1:A:113:GLY:N	1:A:113:GLY:CA	1:A:113:GLY:C	13	35.19
(1,193)	1:A:23:ARG:C	1:A:24:ASP:N	1:A:24:ASP:CA	1:A:24:ASP:C	4	35.16
(1,326)	1:A:132:PHE:N	1:A:132:PHE:CA	1:A:132:PHE:C	1:A:133:GLY:N	4	35.04
(1,315)	1:A:119:ASP:C	1:A:120:HIS:N	1:A:120:HIS:CA	1:A:120:HIS:C	20	35.03
(1,335)	1:A:156:LYS:C	1:A:157:GLY:N	1:A:157:GLY:CA	1:A:157:GLY:C	9	34.99
(1,228)	1:A:75:LEU:C	1:A:76:LEU:N	1:A:76:LEU:CA	1:A:76:LEU:C	12	34.98
(1,180)	1:A:18:THR:C	1:A:19:ASN:N	1:A:19:ASN:CA	1:A:19:ASN:C	10	34.98
(1,324)	1:A:131:LYS:C	1:A:132:PHE:N	1:A:132:PHE:CA	1:A:132:PHE:C	17	34.95
(1,236)	1:A:88:ILE:C	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:C	9	34.95
(1,247)	1:A:95:PRO:C	1:A:96:GLU:N	1:A:96:GLU:CA	1:A:96:GLU:C	17	34.94
(1,315)	1:A:119:ASP:C	1:A:120:HIS:N	1:A:120:HIS:CA	1:A:120:HIS:C	5	34.93
(1,276)	1:A:105:LYS:C	1:A:106:THR:N	1:A:106:THR:CA	1:A:106:THR:C	1	34.91
(1,109)	1:A:83:GLU:C	1:A:84:PHE:N	1:A:84:PHE:CA	1:A:84:PHE:C	6	34.89
(1,330)	1:A:148:VAL:C	1:A:149:GLU:N	1:A:149:GLU:CA	1:A:149:GLU:C	12	34.84
(1,189)	1:A:21:GLY:N	1:A:21:GLY:CA	1:A:21:GLY:C	1:A:22:PRO:N	11	34.84
(1,292)	1:A:111:ARG:N	1:A:111:ARG:CA	1:A:111:ARG:C	1:A:112:GLY:N	18	34.82
(1,318)	1:A:127:ARG:C	1:A:128:ASN:N	1:A:128:ASN:CA	1:A:128:ASN:C	4	34.76
(1,247)	1:A:95:PRO:C	1:A:96:GLU:N	1:A:96:GLU:CA	1:A:96:GLU:C	2	34.74
(1,220)	1:A:66:PHE:N	1:A:66:PHE:CA	1:A:66:PHE:C	1:A:67:GLY:N	14	34.74
(1,337)	1:A:157:GLY:C	1:A:158:VAL:N	1:A:158:VAL:CA	1:A:158:VAL:C	2	34.7
(1,106)	1:A:82:ILE:N	1:A:82:ILE:CA	1:A:82:ILE:C	1:A:83:GLU:N	1	34.68
(1,326)	1:A:132:PHE:N	1:A:132:PHE:CA	1:A:132:PHE:C	1:A:133:GLY:N	17	34.61
(1,340)	1:A:158:VAL:C	1:A:159:ILE:N	1:A:159:ILE:CA	1:A:159:ILE:C	19	34.53
(1,172)	1:A:16:LEU:N	1:A:16:LEU:CA	1:A:16:LEU:C	1:A:17:LYS:N	3	34.53
(1,170)	1:A:15:VAL:N	1:A:15:VAL:CA	1:A:15:VAL:C	1:A:16:LEU:N	13	34.53
(1,93)	1:A:72:ILE:C	1:A:73:HIS:N	1:A:73:HIS:CA	1:A:73:HIS:C	13	34.5
(1,355)	1:A:163:GLU:C	1:A:164:LYS:N	1:A:164:LYS:CA	1:A:164:LYS:C	17	34.45
(1,93)	1:A:72:ILE:C	1:A:73:HIS:N	1:A:73:HIS:CA	1:A:73:HIS:C	11	34.43
(1,186)	1:A:20:ALA:C	1:A:21:GLY:N	1:A:21:GLY:CA	1:A:21:GLY:C	6	34.38
	1:A:100:PRO:C	1:A:101:GLU:N	1:A:101:GLU:CA	1:A:101:GLU:C	18	34.36
(1,189)	1:A:21:GLY:N	1:A:21:GLY:CA	1:A:21:GLY:C	1:A:22:PRO:N	19	34.33
(1,185)	1:A:20:ALA:N	1:A:20:ALA:CA	1:A:20:ALA:C	1:A:21:GLY:N	17	34.3
(1,112)	1:A:85:ASP:N	1:A:85:ASP:CA	1:A:85:ASP:C	1:A:86:ILE:N	7	34.22
(1,170)	1:A:15:VAL:N	1:A:15:VAL:CA	1:A:15:VAL:C	1:A:16:LEU:N	4	34.2
(1,343)	1:A:159:ILE:C	1:A:160:GLN:N	1:A:160:GLN:CA	1:A:160:GLN:C	16	34.17
(1,305)	1:A:116:CYS:C	1:A:117:LEU:N	1:A:117:LEU:CA	1:A:117:LEU:C	4	34.17
(1,365)	1:A:167:GLN:N	1:A:167:GLN:CA	1:A:167:GLN:C	1:A:168:LEU:N	20	34.16
(1,280)	1:A:107:ALA:N	1:A:107:ALA:CA	1:A:107:ALA:C	1:A:108:LYS:N	10	34.11
(1,324)	1:A:131:LYS:C	1:A:132:PHE:N	1:A:132:PHE:CA	1:A:132:PHE:C	5	34.08
(1,233)	1:A:87:PRO:N	1:A:87:PRO:CA	1:A:87:PRO:C	1:A:88:ILE:N	18	34.05
(1,315)	1:A:119:ASP:C	1:A:120:HIS:N	1:A:120:HIS:CA	1:A:120:HIS:C	7	34.03
(1,220)	1:A:66:PHE:N	1:A:66:PHE:CA	1:A:66:PHE:C	1:A:67:GLY:N	4	34.01
(1,213)	1:A:61:GLU:C	1:A:62:GLY:N	1:A:62:GLY:CA	1:A:62:GLY:C	15	33.99
(1,362)	1:A:166:ASN:N	1:A:166:ASN:CA	1:A:166:ASN:C	1:A:167:GLN:N	7	33.96
(1,168)	1:A:14:PRO:N	1:A:14:PRO:CA	1:A:14:PRO:C	1:A:15:VAL:N	14	33.94
(1,183)	1:A:19:ASN:C	1:A:20:ALA:N	1:A:20:ALA:CA	1:A:20:ALA:C	4	33.93
(//			0			ed on next page



	ed from previous po					
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (\circ)
(1,246)	1:A:95:PRO:N	1:A:95:PRO:CA	1:A:95:PRO:C	1:A:96:GLU:N	7	33.92
(1,261)	1:A:100:PRO:C	1:A:101:GLU:N	1:A:101:GLU:CA	1:A:101:GLU:C	1	33.87
(1,93)	1:A:72:ILE:C	1:A:73:HIS:N	1:A:73:HIS:CA	1:A:73:HIS:C	2	33.85
(1,173)	1:A:16:LEU:C	1:A:17:LYS:N	1:A:17:LYS:CA	1:A:17:LYS:C	14	33.85
(1,355)	1:A:163:GLU:C	1:A:164:LYS:N	1:A:164:LYS:CA	1:A:164:LYS:C	16	33.82
(1,252)	1:A:97:ILE:N	1:A:97:ILE:CA	1:A:97:ILE:C	1:A:98:ALA:N	12	33.82
(1,200)	1:A:51:ASN:N	1:A:51:ASN:CA	1:A:51:ASN:C	1:A:52:ASP:N	12	33.79
(1,287)	1:A:109:MET:C	1:A:110:TYR:N	1:A:110:TYR:CA	1:A:110:TYR:C	13	33.77
(1,112)	1:A:85:ASP:N	1:A:85:ASP:CA	1:A:85:ASP:C	1:A:86:ILE:N	16	33.76
(1,277)	1:A:106:THR:N	1:A:106:THR:CA	1:A:106:THR:C	1:A:107:ALA:N	12	33.65
(1,213)	1:A:61:GLU:C	1:A:62:GLY:N	1:A:62:GLY:CA	1:A:62:GLY:C	12	33.63
(1,170)	1:A:15:VAL:N	1:A:15:VAL:CA	1:A:15:VAL:C	1:A:16:LEU:N	17	33.62
(1,315)	1:A:119:ASP:C	1:A:120:HIS:N	1:A:120:HIS:CA	1:A:120:HIS:C	1	33.56
(1,346)	1:A:160:GLN:C	1:A:161:HIS:N	1:A:161:HIS:CA	1:A:161:HIS:C	20	33.54
(1,351)	1:A:162:LYS:N	1:A:162:LYS:CA	1:A:162:LYS:C	1:A:163:GLU:N	7	33.48
(1,337)	1:A:157:GLY:C	1:A:158:VAL:N	1:A:158:VAL:CA	1:A:158:VAL:C	7	33.45
(1,345)	1:A:160:GLN:N	1:A:160:GLN:CA	1:A:160:GLN:C	1:A:161:HIS:N	11	33.42
(1,301)	1:A:115:ILE:N	1:A:115:ILE:CA	1:A:115:ILE:C	1:A:116:CYS:N	13	33.42
(1,106)	1:A:82:ILE:N	1:A:82:ILE:CA	1:A:82:ILE:C	1:A:83:GLU:N	13	33.38
(1,106)	1:A:82:ILE:N	1:A:82:ILE:CA	1:A:82:ILE:C	1:A:83:GLU:N	18	33.36
(1,352)	1:A:162:LYS:C	1:A:163:GLU:N	1:A:163:GLU:CA	1:A:163:GLU:C	12	33.25
(1,277)	1:A:106:THR:N	1:A:106:THR:CA	1:A:106:THR:C	1:A:107:ALA:N	3	33.21
(1,307)	1:A:117:LEU:N	1:A:117:LEU:CA	1:A:117:LEU:C	1:A:118:THR:N	5	33.16
(1,106)	1:A:82:ILE:N	1:A:82:ILE:CA	1:A:82:ILE:C	1:A:83:GLU:N	5	33.16
(1,304)	1:A:116:CYS:N	1:A:116:CYS:CA	1:A:116:CYS:C	1:A:117:LEU:N	13	33.07
(1,360)	1:A:165:CYS:C	1:A:166:ASN:N	1:A:166:ASN:CA	1:A:166:ASN:C	2	33.06
(1,93)	1:A:72:ILE:C	1:A:73:HIS:N	1:A:73:HIS:CA	1:A:73:HIS:C	7	33.03
(1,201)	1:A:51:ASN:C	1:A:52:ASP:N	1:A:52:ASP:CA	1:A:52:ASP:C	1	32.89
(1,301)	1:A:115:ILE:N	1:A:115:ILE:CA	1:A:115:ILE:C	1:A:116:CYS:N	6	32.82
(1,347)	1:A:160:GLN:C	1:A:161:HIS:N	1:A:161:HIS:CA	1:A:161:HIS:C	1	32.76
(1,343)	1:A:159:ILE:C	1:A:160:GLN:N	1:A:160:GLN:CA	1:A:160:GLN:C	13	32.76
(1,252)	1:A:97:ILE:N	1:A:97:ILE:CA	1:A:97:ILE:C	1:A:98:ALA:N	11	32.76
(1,270)	1:A:103:ASP:C	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	7	32.74
(1,275)	1:A:105:LYS:C	1:A:106:THR:N	1:A:106:THR:CA	1:A:106:THR:C	11	32.72
(1,112)	1:A:85:ASP:N	1:A:85:ASP:CA	1:A:85:ASP:C	1:A:86:ILE:N	14	32.71
(1,278)	1:A:106:THR:C	1:A:107:ALA:N	1:A:107:ALA:CA	1:A:107:ALA:C	9	32.7
(1,93)	1:A:72:ILE:C	1:A:73:HIS:N	1:A:73:HIS:CA	1:A:73:HIS:C	16	32.65
(1,305)	1:A:116:CYS:C	1:A:117:LEU:N	1:A:117:LEU:CA	1:A:117:LEU:C	17	32.65
(1,219)	1:A:65:TRP:C	1:A:66:PHE:N	1:A:66:PHE:CA	1:A:66:PHE:C	3	32.65
(1,219)	1:A:65:TRP:C	1:A:66:PHE:N	1:A:66:PHE:CA	1:A:66:PHE:C	7	32.64
(1,264)	1:A:101:GLU:C	1:A:102:LEU:N	1:A:102:LEU:CA	1:A:102:LEU:C	11	32.62
(1,243)	1:A:93:THR:C	1:A:94:ALA:N	1:A:94:ALA:CA	1:A:94:ALA:C	10	32.62
(1,242)	1:A:93:THR:N	1:A:93:THR:CA	1:A:93:THR:C	1:A:94:ALA:N	4	32.62
(1,243)	1:A:93:THR:C	1:A:94:ALA:N	1:A:94:ALA:CA	1:A:94:ALA:C	15	32.59
(1,170)	1:A:15:VAL:N	1:A:15:VAL:CA	1:A:15:VAL:C	1:A:16:LEU:N	7	32.58
(1,354)	1:A:163:GLU:N	1:A:163:GLU:CA	1:A:163:GLU:C	1:A:164:LYS:N	6	32.51
(1,230)	1:A:76:LEU:N	1:A:76:LEU:CA	1:A:76:LEU:C	1:A:77:LYS:N	12	32.49
(1,189)	1:A:21:GLY:N	1:A:21:GLY:CA	1:A:21:GLY:C	1:A:22:PRO:N	16	32.46
(1,342)	1:A:159:ILE:N	1:A:159:ILE:CA	1:A:159:ILE:C	1:A:160:GLN:N	5	32.45
(1,291)	1:A:110:TYR:C	1:A:111:ARG:N	1:A:111:ARG:CA	1:A:111:ARG:C	9	32.43
(1,213)	1:A:61:GLU:C	1:A:62:GLY:N	1:A:62:GLY:CA	1:A:62:GLY:C	7	32.43
					Continu	ed on next page



(1.233) I.A.SI-PRON	Key	$rac{ed\ from\ previous\ po}{\mathbf{Atom-1}}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,362)							· ,
(1.362) 1.A.166.ASNNN 1.A.166.ASNNCA 1.A.167.CIN.N 9 32.38 (1.215) 1.A.62.CILY.C 1.A.63.TIIR.CA 1.A.63.TIIR.CA 1.A.63.TIIR.C 6 32.37 (1.215) 1.A.163.CIU.C 1.A.62.CILY.C 1.A	· · /					17	
(1.215)	· · /						
(1,354) 1.A.461-G.U.C.	· · /						
(1.354) 1:A:163:GLUN	/						
(1.349) 1:A:161:HISC	/						
(1,321)	/						
(1,289) 1:A:130-PRO-C 1:A:131-LYS-CA 1:A:131-LYS-CA 1:A:131-LYS-C 3 32.21 (1,289) 1:A:150-VALEN 1:A:150-VALEC 1:A:161-LEUN 5 32.21 (1,106) 1:A:150-VALEN 1:A:150-VALEC 1:A:161-LEUN 8 32.21 (1,106) 1:A:150-VALEN 1:A:150-VALEC 1:A:161-LEUN 8 32.21 (1,106) 1:A:150-VALEN 1:A:150-VALEC 1:A:161-LEUN 9 32.15 (1,107) 1:A:150-VALEN 1:A:150-VALEC 1:A:161-LEUN 9 32.15 (1,102) 1:A:150-VALEN 1:A:150-VALEC 1:A:161-LEUN 9 32.15 (1,102) 1:A:150-VALEN 1:A:150-VALEC 1:A:161-LEUN 9 32.15 (1,102) 1:A:150-VALE 1:A:150-VALEC 1:A:161-LEUN 9 32.15 (1,102) 1:A:150-VALE 1:A:150-VALEC 1:A:150-VALEC 1:A:161-LEUN 9 32.11 (1,170) 1:A:150-VALE 1:A:161-LEUN 1:A:150-VALEC 1:A:161-LEUN 6 32.02 (1,324) 1:A:131-LYS:C 1:A:132-PHEN 1:A:132-PHE:C 1:A:132-PHE:C 16 32.01 (1,276) 1:A:105-LYS:C 1:A:106-THR:N 1:A:106-THR:C 1:A:106-THR:C 2 31.98 (1,324) 1:A:163-LEUN 1:A:163-LUCA 1:A:163-LEUN 20 31.85 (1,354) 1:A:163-LEUN 1:A:163-LUCA 1:A:163-LEUN 20 31.85 (1,354) 1:A:163-LEUN 1:A:163-LEUCA 1:A:163-LEUN 20 31.85 (1,354) 1:A:163-LEUN 1:A:163-LEUCA 1:A:163-LEUN 20 31.85 (1,354) 1:A:163-LEUN 1:A:163-LEUN 1:A:163-LEUN 20 31.85 (1,354) 1:A:163-LEUN 1:A:163-L	/	1:A:148:VAL:C	1:A:149:GLU:N	1:A:149:GLU:CA	1:A:149:GLU:C	9	32.21
(1,289) 1:A:110:TYR:N	/	1:A:130:PRO:C	1:A:131:LYS:N	1:A:131:LYS:CA	1:A:131:LYS:C	3	1
(1,170 1:A:15:VALEN	/	1:A:110:TYR:N	1:A:110:TYR:CA	1:A:110:TYR:C	1:A:111:ARG:N	5	
(1,106 1:A:82:ILE:N	/			1:A:15:VAL:C		8	
(1,170) 1:A:15:VALEN		1:A:82:ILE:N	1:A:82:ILE:CA	1:A:82:ILE:C	1:A:83:GLU:N		
(1,180		1:A:15:VAL:N	1:A:15:VAL:CA	1:A:15:VAL:C	1:A:16:LEU:N	9	32.15
(1,180	(/ /	1:A:85:ASP:N				8	
(1,170 1:A:15:VAL:N	· · /						
(1,324) 1.A:131:LYS:C 1:A:132:PHE:N 1:A:132:PHE:C 16 32.01 (1,276) 1:A:105:LYS:C 1:A:106:THR:C 2 31.98 (1,185) 1:A:105:LYS:C 1:A:106:THR:C 2 31.98 (1,185) 1:A:20:ALA:N 1:A:20:ALA:C 1:A:20:ALA:C 1:A:20:ALA:C 2 31.88 (1,354) 1:A:163:GLU:N 1:A:163:GLU:C 1:A:163:GLU:C 1:A:164:LYS:N 19 31.81 (1,326) 1:A:132:PHE:N 1:A:132:PHE:C 1:A:132:PHE:C 1:A:133:CLY:N 6 31.73 (1,296) 1:A:13:GLY:C 1:A:114:LYS:N 1:A:114:LYS:C 8 31.73 (1,296) 1:A:109:MET:N 1:A:109:MET:C 1:A:110:TYR:N 17 31.7 (1,219) 1:A:65:TRP:C 1:A:66:PHE:N 1:A:66:PHE:C 1:A:110:TYR:N 17 31.7 (1,219) 1:A:65:TRP:C 1:A:66:PHE:N 1:A:66:PHE:C 1:A:110:TYR:N 17 31.66 (1,347) 1:A:160:GLN:C 1:A:161:HIS:N 1:A:161:HIS:C 1:A:160:GLN:C 1:A:161:HIS:N 1:A:161:HIS:N 3 31.65 (1,341) 1:A:119:ASP:N 1:A:119:ASP:C 1:A:101:GLU:C 1:A:101:GLU:C 2 31.65 (1,345) 1:A:119:ASP:C 1:A:120:HIS:N 3 31.65 (1,345) 1:A:119:ASP:C 1:A:120:HIS:N 1:A:120:HIS:N 3 31.65 (1,345) 1:A:139:ASP:C 1:A:120:HIS:N 1:A:120:HIS:N 1:A:130:ASP:N 1:A:13	· · /	1:A:15:VAL:N				6	
(1,276) 1:A:105:LYS:C	· · /	1:A:131:LYS:C	1:A:132:PHE:N			16	
(1,185) 1:A:20:ALA:N	· · /						
(1,354) 1:A:163:GLU:N 1:A:163:GLU:CA 1:A:163:GLU:C 1:A:164:LYS:N 19 31.81 (1,356) 1:A:132:PHE:N 1:A:132:PHE:CA 1:A:132:PHE:C 1:A:133:GLY:N 6 31.73 (1,296) 1:A:113:GLY:C 1:A:114:LYS:N 1:A:114:LYS:CA 1:A:114:LYS:C 8 31.73 (1,286) 1:A:109:MET:N 1:A:109:MET:CA 1:A:109:MET:C 1:A:1101:TYR:N 17 31.7 (1,219) 1:A:65:TRP:C 1:A:66:PHE:N 1:A:66:PHE:CA 1:A:66:PHE:C 13 31.66 (1,341) 1:A:119:ASP:N 1:A:119:ASP:CA 1:A:161:HIS:CA 1:A:161:HIS:CA 9 31.65 (1,314) 1:A:119:ASP:N 1:A:119:ASP:CA 1:A:101:GLU:CA 1:A:100:HIS:N 3 31.65 (1,314) 1:A:119:ASP:C 1:A:101:GLU:N 1:A:101:GLU:N 1:A:101:GLU:CA 1:A:100:HIS:C 17 31.65 (1,314) 1:A:119:ASP:C 1:A:101:GLU:N 1:A:101:GLU:CA 1:A:100:HIS:C 17 31.65 (1,314) 1:A:113:GLY:CA 1:A:120:HIS:CA	· · /	1:A:20:ALA:N	1:A:20:ALA:CA	1:A:20:ALA:C		20	
(1,326) 1:A:13:CPHE:N 1:A:13:PHE:CA 1:A:13:PHE:C 1:A:13:GLY:N 6 31.73 (1,296) 1:A:113:GLY:C 1:A:114:LYS:N 1:A:114:LYS:CA 1:A:114:LYS:C 8 31.73 (1,286) 1:A:10:MET:N 1:A:10:MET:CA 1:A:10:MET:C 1:A:110:TYR:N 17 31.7 (1,219) 1:A:65:TRP:C 1:A:66:PHE:N 1:A:66:PHE:C 1:A:110:TYR:N 17 31.6 (1,347) 1:A:160:GLN:C 1:A:161:HIS:N 1:A:161:HIS:CA 1:A:161:HIS:C 9 31.65 (1,341) 1:A:119:ASP:N 1:A:119:ASP:CA 1:A:119:ASP:C 1:A:120:HIS:N 3 31.65 (1,341) 1:A:119:ASP:N 1:A:119:ASP:CA 1:A:119:ASP:C 1:A:120:HIS:N 3 31.65 (1,341) 1:A:119:ASP:C 1:A:120:HIS:N 1:A:101:GLU:CA 1:A:101:GLU:C 2 31.65 (1,341) 1:A:119:ASP:C 1:A:120:HIS:N 1:A:120:HIS:C 17 31.63 (1,343) 1:A:23:ARG:C 1:A:24:ASP:N 1:A:24:ASP:CA 1:A:24:ASP:C 10 31.6 (1,170) 1:A:15:VAL:N 1:A:15:VAL:CA 1:A:15:VAL:C 1:A:16:LEU:N 11 31.6 (1,233) 1:A:87:PRO:N 1:A:87:PRO:CA 1:A:15:VAL:C 1:A:16:LEU:N 11 31.6 (1,233) 1:A:87:PRO:N 1:A:35:ASP:N 1:A:25:ASP:CA 1:A:25:ASP:C 20 31.49 (1,201) 1:A:15:ASN:C 1:A:16:THR:CA 1:A:106:THR:CA 1:A:13:GLY:CA 1:A:13:GLY:CA 20 31.48 (1,204) 1:A:112:GLY:C 1:A:113:GLY:N 1:A:113:GLY:CA 1:A:113:GLY:C 20 31.48 (1,286) 1:A:109:MET:N 1:A:109:MET:CA 1:A:109:MET:CC 1:A:131:GLY:N 9 31.45 (1,112) 1:A:85:ASP:N 1:A:85:ASP:CA 1:A:85:ASP:C 1:A:86:ILE:N 15 31.4 (1,185) 1:A:20:ALA:N 1:A:20:ALA:CA 1:A:2	· · /						
(1,296) 1:A:113:GLY:C 1:A:114:LYS:N 1:A:114:LYS:C 1:A:114:LYS:C 8 31.73 (1,286) 1:A:109:MET:N 1:A:109:MET:CA 1:A:109:MET:C 1:A:110:TYR:N 17 31.7 (1,219) 1:A:65:TRP:C 1:A:66:PHE:N 1:A:66:PHE:CA 1:A:66:PHE:C 13 31.66 (1,347) 1:A:160:GLN:C 1:A:161:HIS:N 1:A:161:HIS:C 9 31.65 (1,341) 1:A:119:ASP:N 1:A:119:ASP:CA 1:A:119:ASP:C 1:A:120:HIS:N 3 31.65 (1,261) 1:A:100:PRO:C 1:A:101:GLU:N 1:A:101:GLU:CA 1:A:101:GLU:C 2 31.65 (1,315) 1:A:119:ASP:C 1:A:120:HIS:N 1:A:120:HIS:C 17 31.63 (1,193) 1:A:23:ARG:C 1:A:24:ASP:N 1:A:24:ASP:C 1:A:120:HIS:C 17 31.63 (1,193) 1:A:23:ARG:C 1:A:24:ASP:N 1:A:24:ASP:C 1:A:16:LEU:N 11 31.6 (1,170) 1:A:15:VAL:N 1:A:15:VAL:CA 1:A:15:VAL:C 1:A:16:LEU:N 11 31.6 (1,277) 1:A:106:THR:N 1:A:106:THR:CA 1:A:106:THR:C 1:A:107:ALA:N 2 31.53 (1,201) 1:A:112:GLY:C 1:A:113:GLY:N 1:A:113:GLY:CA 1:A:113:GLY:C 20 31.49 (1,294) 1:A:112:GLY:C 1:A:113:GLY:N 1:A:113:GLY:CA 1:A:113:GLY:C 20 31.48 (1,286) 1:A:109:MET:N 1:A:109:MET:CA 1:A:109:MET:C 1:A:6:LEU:N 15 31.4 (1,185) 1:A:20:ALA:N 1:A:20:ALA:CA 1:A:20:ALA:CA 1:A:20:ALA:C 1:A:31:LYS:C 20 31.49 (1,21) 1:A:13:GPRO:C 1:A:131:LYS:N 1:A:113:GLY:C 20 31.49 (1,231) 1:A:13:GPRO:C 1:A:131:LYS:N 1:A:131:LYS:C 2 31.25 (1,321) 1:A:130:PRO:C 1:A:131:LYS:N 1:A:131:LYS:C 2 31.25 (1,321) 1:A:130:PRO:C 1:A:131:LYS:N 1:A:131:LYS:C 2 31.25 (1,250) 1:A:96:GLU:C 1:A:97:ILE:CA 1:A:20:ALA:CA 1:A:20:ALA:C 1:A:20:ALA:C 1:A:21:GLY:N 9 31.35 (1,213) 1:A:61:GU:C 1:A:62:GLY:N 1:A:62:GLY:CA 1:A:62:GLY:C 17 31.21 (1,272) 1:A:104:GLY:C 1:A:105:LYS:N 1:A:105:LYS:N 1:A:105:LYS:N 1:A:105:LYS:C 1:A:10	· · /						
(1,286) 1:A:109:MET:N 1:A:109:MET:CA 1:A:109:MET:CA 1:A:109:MET:CA 1:A:110:TYR:N 17 31.7 (1,219) 1:A:65:TRP:C 1:A:66:PHE:N 1:A:66:PHE:CA 1:A:66:PHE:C 13 31.66 (1,347) 1:A:160:GLN:C 1:A:161:HIS:N 1:A:161:HIS:CA 1:A:161:HIS:C 9 31.65 (1,314) 1:A:119:ASP:N 1:A:110:ASP:CA 1:A:110:GLU:CA 1:A:120:HIS:N 3 31.65 (1,261) 1:A:119:ASP:C 1:A:120:HIS:N 1:A:120:HIS:CA 1:A:120:HIS:C 17 31.63 (1,315) 1:A:119:ASP:C 1:A:120:HIS:N 1:A:120:HIS:CA 1:A:120:HIS:C 17 31.63 (1,315) 1:A:310:ASP:C 1:A:120:HIS:N 1:A:120:HIS:CA 1:A:120:HIS:C 17 31.63 (1,315) 1:A:310:ASP:C 1:A:120:HIS:N 1:A:120:HIS:CA 1:A:120:HIS:C 17 31.63 (1,310) 1:A:320:ALA:N 1:A:43PPRO:C 1:A:43PPRO:C 1:A:43PPRO:C 1:A:43PPRO:C 1:A:43PPRO:C 1:A:41SPARPRO:C 1:A:41SPARPRO:C 1:A:41SPARPRO:C	· · /						
(1,219) 1:A:66:TRP:C 1:A:66:PHE:N 1:A:66:PHE:CA 1:A:66:PHE:C 13 31.66 (1,347) 1:A:160:GLN:C 1:A:161:HIS:N 1:A:161:HIS:CA 1:A:161:HIS:C 9 31.65 (1,347) 1:A:119:ASP:C 1:A:119:ASP:CA 1:A:161:HIS:CA 1:A:161:HIS:N 3 31.65 (1,261) 1:A:100:PRO:C 1:A:101:GLU:N 1:A:101:GLU:CA 1:A:120:HIS:N 3 31.65 (1,315) 1:A:119:ASP:C 1:A:120:HIS:N 1:A:120:HIS:CA 1:A:120:HIS:C 17 31.63 (1,1315) 1:A:13:ASP:C 1:A:120:HIS:CA 1:A:120:HIS:CA 1:A:120:HIS:CA 1:A:120:HIS:CA 1:A:16:LEU:N 17 31.63 (1,133) 1:A:23:ARG:C 1:A:43:ASP:N 1:A:24:ASP:CA 1:A:24:ASP:C 10 31.6 (1,170) 1:A:15:VAL:N 1:A:15:VAL:CA 1:A:16:LEU:N 11 31.6 (1,277) 1:A:16:HR:N 1:A:16:HR:CA 1:A:36:HR:CA 1:A:37:PRO:C 1:A:38:IE:N 13 31.54 (1,277) 1:A:16:HR:N 1:A:16:HR:CA	(' /						
(1,347) 1:A:160:GLN:C 1:A:161:HIS:N 1:A:161:HIS:CA 1:A:161:HIS:C 9 31.65 (1,344) 1:A:119:ASP:N 1:A:119:ASP:CA 1:A:119:ASP:C 1:A:100:HIS:N 3 31.65 (1,261) 1:A:100:PRO:C 1:A:101:GLU:N 1:A:101:GLU:CA 1:A:120:HIS:N 3 31.65 (1,315) 1:A:119:ASP:C 1:A:120:HIS:N 1:A:120:HIS:CA 1:A:120:HIS:C 17 31.63 (1,135) 1:A:123:ARG:C 1:A:24:ASP:N 1:A:24:ASP:CA 1:A:24:ASP:C 10 31.6 (1,170) 1:A:15:VAL:N 1:A:15:VAL:CA 1:A:15:VAL:C 1:A:16:LEU:N 11 31.6 (1,277) 1:A:106:THR:N 1:A:16:TPRO:CA 1:A:25:ASP:CD 1:A:310:TAL:N 2 31.53 (1,294) 1:A:113:GLY:C 1:A:13:GLY:CA 1:A:13:GLY:CA 1:A:45:2ASP:C 20 31.48 (1,286) 1:A:109:MET:N 1:A:13:GLY:CA 1:A:45:2ASP:C 20 31.48 (1,286) 1:A:20:ALA:N 1:A:31:3GLY:CA 1:A:110:TYR:N 19 31.45	/						
(1,314) 1:A:119:ASP:N 1:A:119:ASP:CA 1:A:119:ASP:C 1:A:100:HIS:N 3 31.65 (1,261) 1:A:100:PRO:C 1:A:101:GLU:N 1:A:101:GLU:CA 1:A:101:GLU:C 2 31.65 (1,315) 1:A:119:ASP:C 1:A:120:HIS:N 1:A:120:HIS:CA 1:A:120:HIS:C 17 31.63 (1,193) 1:A:23:ARG:C 1:A:24:ASP:N 1:A:24:ASP:CA 1:A:24:ASP:C 10 31.6 (1,170) 1:A:15:VAL:N 1:A:45:VAL:C 1:A:16:LEU:N 11 31.6 (1,270) 1:A:15:VAL:N 1:A:45:VAL:C 1:A:16:LEU:N 11 31.6 (1,277) 1:A:106:THR:N 1:A:106:THR:CA 1:A:106:THR:C 1:A:107:ALA:N 2 31.53 (1,201) 1:A:51:ASSN:C 1:A:52:ASP:N 1:A:52:ASP:CA 1:A:5107:ALA:N 2 31.49 (1,294) 1:A:110:GHY:N 1:A:109:MET:C 1:A:110:TYR:N 19 31.45 (1,294) 1:A:13:LY:C 1:A:13:AS:ASP:CA 1:A:85:ASP:C 1:A:410:TYR:N 19 31.45 (1,286)							
(1,261) 1:A:100:PRO:C 1:A:101:GLU:N 1:A:101:GLU:CA 1:A:101:GLU:C 2 31.65 (1,315) 1:A:119:ASP:C 1:A:120:HIS:N 1:A:120:HIS:CA 1:A:120:HIS:C 17 31.63 (1,133) 1:A:23:ARG:C 1:A:24:ASP:N 1:A:24:ASP:CA 1:A:24:ASP:C 10 31.6 (1,170) 1:A:15:VAL:N 1:A:15:VAL:CA 1:A:15:VAL:C 1:A:16:LEU:N 11 31.6 (1,273) 1:A:37:PRO:N 1:A:87:PRO:CA 1:A:75:VAL:C 1:A:16:LEU:N 11 31.6 (1,277) 1:A:106:THR:N 1:A:106:THR:CA 1:A:106:THR:C 1:A:107:ALA:N 2 31.53 (1,201) 1:A:51:ASN:C 1:A:52:ASP:N 1:A:52:ASP:CA 1:A:52:ASP:C 20 31.49 (1,294) 1:A:112:GLY:C 1:A:113:GLY:N 1:A:113:GLY:CA 1:A:113:GLY:C 20 31.48 (1,286) 1:A:109:MET:N 1:A:131:GLY:CA 1:A:113:GLY:C 20 31.48 (1,294) 1:A:131:LYS:N 1:A:131:GLY:CA 1:A:113:GLY:C 20 31.49 <tr< td=""><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td></tr<>							
(1,315) 1:A:119:ASP:C 1:A:120:HIS:N 1:A:120:HIS:CA 1:A:120:HIS:C 17 31.63 (1,193) 1:A:23:ARG:C 1:A:24:ASP:N 1:A:24:ASP:CA 1:A:42:ASP;C 10 31.6 (1,170) 1:A:15:VAL:N 1:A:15:VAL:CA 1:A:15:VAL:C 1:A:16:LEU:N 11 31.6 (1,270) 1:A:87:PRO:N 1:A:87:PRO:CA 1:A:87:PRO:C 1:A:88:ILE:N 13 31.54 (1,277) 1:A:106:THR:N 1:A:106:THR:CA 1:A:106:THR:C 1:A:4106:THR:C 231.53 (1,201) 1:A:51:ASN:C 1:A:52:ASP:N 1:A:52:ASP:CA 1:A:52:ASP:C 20 31.49 (1,294) 1:A:112:GLY:C 1:A:131:GLY:A 1:A:131:GLY:CA 1:A:131:GLY:CA 20 31.48 (1,286) 1:A:109:MET:N 1:A:109:MET:CA 1:A:130:MET:CA 1:A:410:TYR:N 19 31.45 (1,112) 1:A:85:ASP:N 1:A:85:ASP:CA 1:A:85:ASP:CA 1:A:85:ASP:CA 1:A:86:ILE:N 15 31.4 (1,185) 1:A:130:PRO:C 1:A:131:LYS:N 1:A:131:LYS:CA 1:A	/						
(1,193) 1:A:23:ARG:C 1:A:24:ASP:N 1:A:24:ASP:CA 1:A:24:ASP:C 10 31.6 (1,170) 1:A:15:VAL:N 1:A:15:VAL:CA 1:A:15:VAL:C 1:A:16:LEU:N 11 31.6 (1,233) 1:A:87:PRO:N 1:A:87:PRO:CA 1:A:487:PRO:C 1:A:488:ILE:N 13 31.54 (1,277) 1:A:106:THR:N 1:A:106:THR:CA 1:A:106:THR:C 1:A:107:ALA:N 2 31.53 (1,201) 1:A:51:ASN:C 1:A:52:ASP:N 1:A:52:ASP:CA 1:A:52:ASP:C 20 31.49 (1,294) 1:A:112:GLY:C 1:A:113:GLY:N 1:A:131:GLY:C 20 31.48 (1,286) 1:A:109:MET:N 1:A:109:MET:CA 1:A:109:MET:C 1:A:110:TYR:N 19 31.45 (1,112) 1:A:85:ASP:N 1:A:85:ASP:CA 1:A:85:ASP:CA 1:A:86:ILE:N 15 31.4 (1,112) 1:A:85:ASP:N 1:A:85:ASP:CA 1:A:85:ASP:CA 1:A:420:ALA:C 1:A:420:ALA:C 1:A:420:ALA:C 1:A:420:ALA:C 1:A:436:ILE:N 15 31.4 (1,321) 1:A:96:GLU:C	/						
(1,233) 1:A:87:PRO:N 1:A:87:PRO:CA 1:A:88:PRO:C 1:A:88:ILE:N 13 31.54 (1,277) 1:A:106:THR:N 1:A:106:THR:CA 1:A:106:THR:C 1:A:107:ALA:N 2 31.53 (1,201) 1:A:51:ASN:C 1:A:52:ASP:N 1:A:52:ASP:CA 1:A:52:ASP:C 20 31.49 (1,294) 1:A:112:GLY:C 1:A:113:GLY:N 1:A:113:GLY:CA 1:A:113:GLY:C 20 31.48 (1,286) 1:A:109:MET:N 1:A:109:MET:CA 1:A:110:TYR:N 19 31.45 (1,112) 1:A:85:ASP:N 1:A:85:ASP:CA 1:A:86:ILE:N 15 31.4 (1,185) 1:A:20:ALA:N 1:A:20:ALA:CA 1:A:20:ALA:C 1:A:21:GLY:N 9 31.35 (1,321) 1:A:130:PRO:C 1:A:131:LYS:N 1:A:131:LYS:CA 1:A:131:LYS:C 2 31.28 (1,183) 1:A:19:ASN:C 1:A:20:ALA:N 1:A:20:ALA:C 1:A:97:ILE:C 1 31.25 (1,250) 1:A:96:GLU:C 1:A:97:ILE:N 1:A:97:ILE:CA 1:A:97:ILE:C 10 31.24	(, ,						
(1,277) 1:A:106:THR:N 1:A:106:THR:CA 1:A:106:THR:C 1:A:107:ALA:N 2 31.53 (1,201) 1:A:51:ASN:C 1:A:52:ASP:N 1:A:52:ASP:CA 1:A:52:ASP:C 20 31.49 (1,294) 1:A:112:GLY:C 1:A:113:GLY:N 1:A:113:GLY:CA 1:A:113:GLY:C 20 31.48 (1,286) 1:A:109:MET:N 1:A:109:MET:CA 1:A:109:MET:C 1:A:110:TYR:N 19 31.45 (1,112) 1:A:85:ASP:N 1:A:85:ASP:CA 1:A:85:ASP:C 1:A:86:ILE:N 15 31.4 (1,185) 1:A:20:ALA:N 1:A:20:ALA:CA 1:A:20:ALA:C 1:A:31:LYS:C 2 31.35 (1,321) 1:A:130:PRO:C 1:A:131:LYS:N 1:A:131:LYS:CA 1:A:131:LYS:C 2 31.28 (1,183) 1:A:19:ASN:C 1:A:20:ALA:N 1:A:20:ALA:CA 1:A:20:ALA:CA 1:A:497:ILE:CA 1:A:497:ILE:C 1 31.25 (1,250) 1:A:96:GLU:C 1:A:97:ILE:CA 1:A:497:ILE:C 1:A:497:ILE:C 10 31.24 (1,252) 1:A:97:ILE:N 1:A:69:GLY:N	(1,170)	1:A:15:VAL:N	1:A:15:VAL:CA	1:A:15:VAL:C	1:A:16:LEU:N	11	31.6
(1,201) 1:A:51:ASN:C 1:A:52:ASP:N 1:A:52:ASP:CA 1:A:52:ASP:C 20 31.49 (1,294) 1:A:112:GLY:C 1:A:113:GLY:N 1:A:113:GLY:CA 1:A:113:GLY:C 20 31.48 (1,286) 1:A:109:MET:N 1:A:109:MET:CA 1:A:109:MET:C 1:A:110:TYR:N 19 31.45 (1,112) 1:A:85:ASP:N 1:A:85:ASP:CA 1:A:85:ASP:C 1:A:86:ILE:N 15 31.4 (1,185) 1:A:20:ALA:N 1:A:20:ALA:CA 1:A:20:ALA:C 1:A:21:GLY:N 9 31.35 (1,321) 1:A:130:PRO:C 1:A:131:LYS:N 1:A:131:LYS:CA 1:A:131:LYS:C 2 31.28 (1,183) 1:A:19:ASN:C 1:A:20:ALA:N 1:A:20:ALA:CA 1:A:40:ALA:CA 1:A:40:ALA:CA <th< td=""><td>(1,233)</td><td>1:A:87:PRO:N</td><td>1:A:87:PRO:CA</td><td>1:A:87:PRO:C</td><td>1:A:88:ILE:N</td><td>13</td><td>31.54</td></th<>	(1,233)	1:A:87:PRO:N	1:A:87:PRO:CA	1:A:87:PRO:C	1:A:88:ILE:N	13	31.54
(1,294) 1:A:112:GLY:C 1:A:113:GLY:N 1:A:113:GLY:CA 1:A:113:GLY:C 20 31.48 (1,286) 1:A:109:MET:N 1:A:109:MET:CA 1:A:109:MET:C 1:A:110:TYR:N 19 31.45 (1,112) 1:A:85:ASP:N 1:A:85:ASP:CA 1:A:85:ASP:C 1:A:86:ILE:N 15 31.4 (1,185) 1:A:20:ALA:N 1:A:20:ALA:CA 1:A:20:ALA:C 1:A:21:GLY:N 9 31.35 (1,321) 1:A:130:PRO:C 1:A:131:LYS:N 1:A:131:LYS:CA 1:A:131:LYS:C 2 31.28 (1,183) 1:A:19:ASN:C 1:A:20:ALA:N 1:A:20:ALA:CA 1:A:20:ALA:C 1:A:30:BLC 17 31.25 (1,250) 1:A:96:GLU:C 1:A:97:ILE:N 1:A:97:ILE:CA 1:A:97:ILE:C 10 31.24 (1,252) 1:A:97:ILE:N 1:A:62:GLY:N 1:A:62:GLY:CA 1:A:62:GLY:C 17 31.21 (1,272) 1:A:104:GLY:C 1:A:105:LYS:N 1:A:105:LYS:CA 1:A:105:LYS:C 8 31.16 (1,186) 1:A:20:ALA:C 1:A:21:GLY:C 1:A:21:GLY:C	(1,277)	1:A:106:THR:N	1:A:106:THR:CA	1:A:106:THR:C	1:A:107:ALA:N	2	31.53
(1,286) 1:A:109:MET:N 1:A:109:MET:CA 1:A:109:MET:C 1:A:110:TYR:N 19 31.45 (1,112) 1:A:85:ASP:N 1:A:85:ASP:CA 1:A:85:ASP:C 1:A:86:ILE:N 15 31.4 (1,185) 1:A:20:ALA:N 1:A:20:ALA:CA 1:A:20:ALA:C 1:A:21:GLY:N 9 31.35 (1,321) 1:A:130:PRO:C 1:A:131:LYS:N 1:A:131:LYS:CA 1:A:21:GLY:N 9 31.28 (1,321) 1:A:130:PRO:C 1:A:131:LYS:N 1:A:20:ALA:C 17 31.28 (1,183) 1:A:19:ASN:C 1:A:20:ALA:N 1:A:20:ALA:CA 1:A:20:ALA:C 17 31.28 (1,183) 1:A:19:ASN:C 1:A:20:ALA:N 1:A:20:ALA:CA 1:A:20:ALA:C 17 31.28 (1,183) 1:A:49:ASN:C 1:A:497:ILE:N 1:A:497:ILE:CA 1:A:497:ILE:C 10 31.24 (1,250) 1:A:97:ILE:N 1:A:497:ILE:CA 1:A:497:ILE:C 10 31.22 (1,213) 1:A:61:GLU:C 1:A:62:GLY:N 1:A:62:GLY:CA 1:A:62:GLY:C 17 31.21	(1,201)	1:A:51:ASN:C	1:A:52:ASP:N	1:A:52:ASP:CA	1:A:52:ASP:C	20	31.49
(1,112) 1:A:85:ASP:N 1:A:85:ASP:CA 1:A:85:ASP:C 1:A:86:ILE:N 15 31.4 (1,185) 1:A:20:ALA:N 1:A:20:ALA:CA 1:A:20:ALA:C 1:A:21:GLY:N 9 31.35 (1,321) 1:A:130:PRO:C 1:A:131:LYS:N 1:A:131:LYS:CA 1:A:131:LYS:C 2 31.28 (1,183) 1:A:19:ASN:C 1:A:20:ALA:N 1:A:20:ALA:CA 1:A:20:ALA:C 17 31.25 (1,250) 1:A:96:GLU:C 1:A:97:ILE:N 1:A:97:ILE:CA 1:A:97:ILE:C 10 31.24 (1,252) 1:A:97:ILE:N 1:A:97:ILE:C 1:A:98:ALA:N 1 31.22 (1,213) 1:A:61:GLU:C 1:A:62:GLY:N 1:A:62:GLY:CA 1:A:62:GLY:C 17 31.21 (1,272) 1:A:104:GLY:C 1:A:60:GLYS:N 1:A:105:LYS:CA 1:A:105:LYS:C 8 31.16 (1,186) 1:A:20:ALA:C 1:A:21:GLY:N 1:A:21:GLY:CA 1:A:21:GLY:C 12 31.15 (1,230) 1:A:76:LEU:N 1:A:60:LYS:CA 1:A:60:LYS:C 19 31.12 ((1,294)	1:A:112:GLY:C	1:A:113:GLY:N	1:A:113:GLY:CA	1:A:113:GLY:C	20	31.48
(1,112) 1:A:85:ASP:N 1:A:85:ASP:CA 1:A:85:ASP:C 1:A:86:ILE:N 15 31.4 (1,185) 1:A:20:ALA:N 1:A:20:ALA:CA 1:A:20:ALA:C 1:A:21:GLY:N 9 31.35 (1,321) 1:A:130:PRO:C 1:A:131:LYS:N 1:A:131:LYS:CA 1:A:131:LYS:C 2 31.28 (1,183) 1:A:19:ASN:C 1:A:20:ALA:N 1:A:20:ALA:CA 1:A:20:ALA:C 17 31.25 (1,250) 1:A:96:GLU:C 1:A:97:ILE:N 1:A:97:ILE:CA 1:A:97:ILE:C 10 31.24 (1,252) 1:A:97:ILE:N 1:A:97:ILE:C 1:A:98:ALA:N 1 31.22 (1,213) 1:A:61:GLU:C 1:A:62:GLY:N 1:A:62:GLY:CA 1:A:62:GLY:C 17 31.21 (1,272) 1:A:104:GLY:C 1:A:60:GLYS:N 1:A:105:LYS:CA 1:A:105:LYS:C 8 31.16 (1,186) 1:A:20:ALA:C 1:A:21:GLY:N 1:A:21:GLY:CA 1:A:21:GLY:C 12 31.15 (1,230) 1:A:76:LEU:N 1:A:60:LYS:CA 1:A:60:LYS:C 19 31.12 ((1,286)	1:A:109:MET:N	1:A:109:MET:CA	1:A:109:MET:C	1:A:110:TYR:N	19	31.45
(1,321) 1:A:130:PRO:C 1:A:131:LYS:N 1:A:131:LYS:CA 1:A:131:LYS:C 2 31.28 (1,183) 1:A:19:ASN:C 1:A:20:ALA:N 1:A:20:ALA:CA 1:A:20:ALA:C 17 31.25 (1,250) 1:A:96:GLU:C 1:A:97:ILE:N 1:A:97:ILE:CA 1:A:97:ILE:C 10 31.24 (1,252) 1:A:97:ILE:N 1:A:97:ILE:CA 1:A:98:ALA:N 1 31.22 (1,213) 1:A:61:GLU:C 1:A:62:GLY:N 1:A:62:GLY:CA 1:A:62:GLY:C 17 31.21 (1,272) 1:A:104:GLY:C 1:A:105:LYS:N 1:A:105:LYS:CA 1:A:105:LYS:C 8 31.16 (1,186) 1:A:20:ALA:C 1:A:21:GLY:N 1:A:21:GLY:CA 1:A:21:GLY:C 12 31.15 (1,230) 1:A:76:LEU:N 1:A:76:LEU:CA 1:A:76:LEU:C 1:A:77:LYS:N 11 31.12 (1,207) 1:A:59:ASN:C 1:A:60:LYS:N 1:A:60:LYS:CA 1:A:60:LYS:C 19 31.12 (1,278) 1:A:106:THR:C 1:A:33:ASP:N 1:A:33:ASP:CA 1:A:3107:ALA:C 5 31.09 <td></td> <td></td> <td></td> <td>1:A:85:ASP:C</td> <td>1:A:86:ILE:N</td> <td>15</td> <td>31.4</td>				1:A:85:ASP:C	1:A:86:ILE:N	15	31.4
(1,183) 1:A:19:ASN:C 1:A:20:ALA:N 1:A:20:ALA:CA 1:A:20:ALA:C 17 31.25 (1,250) 1:A:96:GLU:C 1:A:97:ILE:N 1:A:97:ILE:CA 1:A:97:ILE:C 10 31.24 (1,252) 1:A:97:ILE:N 1:A:97:ILE:CA 1:A:97:ILE:C 1:A:98:ALA:N 1 31.22 (1,213) 1:A:61:GLU:C 1:A:62:GLY:N 1:A:62:GLY:CA 1:A:62:GLY:C 17 31.21 (1,272) 1:A:104:GLY:C 1:A:105:LYS:N 1:A:105:LYS:CA 1:A:105:LYS:C 8 31.16 (1,186) 1:A:20:ALA:C 1:A:21:GLY:N 1:A:21:GLY:CA 1:A:21:GLY:C 12 31.15 (1,230) 1:A:76:LEU:N 1:A:76:LEU:CA 1:A:76:LEU:C 1:A:77:LYS:N 11 31.12 (1,207) 1:A:59:ASN:C 1:A:60:LYS:N 1:A:60:LYS:CA 1:A:60:LYS:C 19 31.12 (1,161) 1:A:2:ALA:C 1:A:3:3ASP:N 1:A:3:3ASP:CA 1:A:3:3ASP:C 7 31.12 (1,278) 1:A:10:TYR:N 1:A:110:TYR:CA 1:A:110:TYR:C 1:A:111:ARG:N 1<	· · /	1:A:20:ALA:N	1:A:20:ALA:CA	1:A:20:ALA:C	1:A:21:GLY:N	9	31.35
(1,183) 1:A:19:ASN:C 1:A:20:ALA:N 1:A:20:ALA:CA 1:A:20:ALA:C 17 31.25 (1,250) 1:A:96:GLU:C 1:A:97:ILE:N 1:A:97:ILE:CA 1:A:97:ILE:C 10 31.24 (1,252) 1:A:97:ILE:N 1:A:97:ILE:CA 1:A:97:ILE:C 1:A:98:ALA:N 1 31.22 (1,213) 1:A:61:GLU:C 1:A:62:GLY:N 1:A:62:GLY:CA 1:A:62:GLY:C 17 31.21 (1,272) 1:A:104:GLY:C 1:A:105:LYS:N 1:A:105:LYS:CA 1:A:105:LYS:C 8 31.16 (1,186) 1:A:20:ALA:C 1:A:21:GLY:N 1:A:21:GLY:C 12 31.15 (1,230) 1:A:76:LEU:N 1:A:76:LEU:CA 1:A:77:LYS:N 11 31.12 (1,207) 1:A:59:ASN:C 1:A:60:LYS:N 1:A:60:LYS:CA 1:A:60:LYS:C 19 31.12 (1,161) 1:A:2:ALA:C 1:A:3:ASP:N 1:A:3:ASP:CA 1:A:3:ASP:C 7 31.12 (1,278) 1:A:106:THR:C 1:A:107:ALA:N 1:A:107:ALA:CA 1:A:111:ARG:N 1 31.07 (1,3	· · /	1:A:130:PRO:C	1:A:131:LYS:N	1:A:131:LYS:CA	1:A:131:LYS:C	2	31.28
(1,250) 1:A:96:GLU:C 1:A:97:ILE:N 1:A:97:ILE:CA 1:A:97:ILE:C 10 31.24 (1,252) 1:A:97:ILE:N 1:A:97:ILE:CA 1:A:97:ILE:C 1:A:98:ALA:N 1 31.22 (1,213) 1:A:61:GLU:C 1:A:62:GLY:N 1:A:62:GLY:CA 1:A:62:GLY:C 17 31.21 (1,272) 1:A:104:GLY:C 1:A:105:LYS:N 1:A:105:LYS:CA 1:A:105:LYS:C 8 31.16 (1,186) 1:A:20:ALA:C 1:A:21:GLY:N 1:A:21:GLY:CA 1:A:21:GLY:C 12 31.15 (1,230) 1:A:76:LEU:N 1:A:76:LEU:CA 1:A:76:LEU:C 1:A:77:LYS:N 11 31.12 (1,207) 1:A:59:ASN:C 1:A:60:LYS:N 1:A:60:LYS:CA 1:A:60:LYS:C 19 31.12 (1,161) 1:A:2:ALA:C 1:A:3:ASP:N 1:A:3:ASP:CA 1:A:3:ASP:C 7 31.12 (1,278) 1:A:106:THR:C 1:A:107:ALA:N 1:A:107:ALA:CA 1:A:107:ALA:C 5 31.09 (1,326) 1:A:132:PHE:N 1:A:132:PHE:CA 1:A:132:PHE:C 1:A:133:GLY:N 1		1:A:19:ASN:C	1:A:20:ALA:N	1:A:20:ALA:CA	1:A:20:ALA:C	17	31.25
(1,252) 1:A:97:ILE:N 1:A:97:ILE:CA 1:A:97:ILE:C 1:A:98:ALA:N 1 31.22 (1,213) 1:A:61:GLU:C 1:A:62:GLY:N 1:A:62:GLY:CA 1:A:62:GLY:C 17 31.21 (1,272) 1:A:104:GLY:C 1:A:105:LYS:N 1:A:105:LYS:CA 1:A:105:LYS:C 8 31.16 (1,186) 1:A:20:ALA:C 1:A:21:GLY:N 1:A:21:GLY:CA 1:A:21:GLY:C 12 31.15 (1,230) 1:A:76:LEU:N 1:A:76:LEU:CA 1:A:76:LEU:C 1:A:77:LYS:N 11 31.12 (1,207) 1:A:59:ASN:C 1:A:60:LYS:N 1:A:60:LYS:CA 1:A:60:LYS:C 19 31.12 (1,161) 1:A:2:ALA:C 1:A:3:ASP:N 1:A:3:ASP:CA 1:A:3:ASP:C 7 31.12 (1,278) 1:A:106:THR:C 1:A:107:ALA:N 1:A:107:ALA:CA 1:A:107:ALA:C 5 31.09 (1,289) 1:A:132:PHE:N 1:A:132:PHE:CA 1:A:132:PHE:C 1:A:133:GLY:N 12 31.05	/		1:A:97:ILE:N				
(1,213) 1:A:61:GLU:C 1:A:62:GLY:N 1:A:62:GLY:CA 1:A:62:GLY:C 17 31.21 (1,272) 1:A:104:GLY:C 1:A:105:LYS:N 1:A:105:LYS:CA 1:A:105:LYS:C 8 31.16 (1,186) 1:A:20:ALA:C 1:A:21:GLY:N 1:A:21:GLY:CA 1:A:21:GLY:C 12 31.15 (1,230) 1:A:76:LEU:N 1:A:76:LEU:CA 1:A:77:LYS:N 11 31.12 (1,207) 1:A:59:ASN:C 1:A:60:LYS:N 1:A:60:LYS:CA 1:A:60:LYS:C 19 31.12 (1,161) 1:A:2:ALA:C 1:A:3:ASP:N 1:A:3:ASP:CA 1:A:3:ASP:C 7 31.12 (1,278) 1:A:106:THR:C 1:A:107:ALA:N 1:A:107:ALA:CA 1:A:107:ALA:C 5 31.09 (1,289) 1:A:110:TYR:N 1:A:110:TYR:CA 1:A:110:TYR:C 1:A:111:ARG:N 1 31.05 (1,326) 1:A:132:PHE:N 1:A:132:PHE:CA 1:A:133:GLY:N 12 31.05	(1,252)	1:A:97:ILE:N	1:A:97:ILE:CA	l .	1:A:98:ALA:N	1	31.22
(1,272) 1:A:104:GLY:C 1:A:105:LYS:N 1:A:105:LYS:CA 1:A:105:LYS:C 8 31.16 (1,186) 1:A:20:ALA:C 1:A:21:GLY:N 1:A:21:GLY:CA 1:A:21:GLY:C 12 31.15 (1,230) 1:A:76:LEU:N 1:A:76:LEU:CA 1:A:77:LYS:N 11 31.12 (1,207) 1:A:59:ASN:C 1:A:60:LYS:N 1:A:60:LYS:CA 1:A:60:LYS:C 19 31.12 (1,161) 1:A:2:ALA:C 1:A:3:ASP:N 1:A:3:ASP:CA 1:A:3:ASP:C 7 31.12 (1,278) 1:A:106:THR:C 1:A:107:ALA:N 1:A:107:ALA:CA 1:A:107:ALA:C 5 31.09 (1,289) 1:A:110:TYR:N 1:A:110:TYR:CA 1:A:110:TYR:C 1:A:111:ARG:N 1 31.07 (1,326) 1:A:132:PHE:N 1:A:132:PHE:CA 1:A:133:GLY:N 12 31.05		1:A:61:GLU:C	1:A:62:GLY:N	1:A:62:GLY:CA	1:A:62:GLY:C	17	31.21
(1,186) 1:A:20:ALA:C 1:A:21:GLY:N 1:A:21:GLY:CA 1:A:21:GLY:C 12 31.15 (1,230) 1:A:76:LEU:N 1:A:76:LEU:CA 1:A:76:LEU:C 1:A:77:LYS:N 11 31.12 (1,207) 1:A:59:ASN:C 1:A:60:LYS:N 1:A:60:LYS:CA 1:A:60:LYS:C 19 31.12 (1,161) 1:A:2:ALA:C 1:A:3:ASP:N 1:A:3:ASP:CA 1:A:3:ASP:C 7 31.12 (1,278) 1:A:106:THR:C 1:A:107:ALA:N 1:A:107:ALA:CA 1:A:107:ALA:C 5 31.09 (1,289) 1:A:110:TYR:N 1:A:110:TYR:CA 1:A:110:TYR:C 1:A:111:ARG:N 1 31.07 (1,326) 1:A:132:PHE:N 1:A:132:PHE:CA 1:A:133:GLY:N 12 31.05			1:A:105:LYS:N	1:A:105:LYS:CA	1:A:105:LYS:C	8	31.16
(1,230) 1:A:76:LEU:N 1:A:76:LEU:CA 1:A:76:LEU:C 1:A:77:LYS:N 11 31.12 (1,207) 1:A:59:ASN:C 1:A:60:LYS:N 1:A:60:LYS:CA 1:A:60:LYS:C 19 31.12 (1,161) 1:A:2:ALA:C 1:A:3:ASP:N 1:A:3:ASP:CA 1:A:3:ASP:C 7 31.12 (1,278) 1:A:106:THR:C 1:A:107:ALA:N 1:A:107:ALA:CA 1:A:107:ALA:C 5 31.09 (1,289) 1:A:110:TYR:N 1:A:110:TYR:CA 1:A:110:TYR:C 1:A:111:ARG:N 1 31.07 (1,326) 1:A:132:PHE:N 1:A:132:PHE:CA 1:A:132:PHE:C 1:A:133:GLY:N 12 31.05	/	1:A:20:ALA:C	1:A:21:GLY:N		1:A:21:GLY:C	12	
(1,207) 1:A:59:ASN:C 1:A:60:LYS:N 1:A:60:LYS:CA 1:A:60:LYS:C 19 31.12 (1,161) 1:A:2:ALA:C 1:A:3:ASP:N 1:A:3:ASP:CA 1:A:3:ASP:C 7 31.12 (1,278) 1:A:106:THR:C 1:A:107:ALA:N 1:A:107:ALA:CA 1:A:107:ALA:C 5 31.09 (1,289) 1:A:110:TYR:N 1:A:110:TYR:CA 1:A:110:TYR:C 1:A:111:ARG:N 1 31.07 (1,326) 1:A:132:PHE:N 1:A:132:PHE:CA 1:A:132:PHE:C 1:A:133:GLY:N 12 31.05	(/ /	1:A:76:LEU:N					
(1,161) 1:A:2:ALA:C 1:A:3:ASP:N 1:A:3:ASP:CA 1:A:3:ASP:C 7 31.12 (1,278) 1:A:106:THR:C 1:A:107:ALA:N 1:A:107:ALA:CA 1:A:107:ALA:C 5 31.09 (1,289) 1:A:110:TYR:N 1:A:110:TYR:CA 1:A:110:TYR:C 1:A:111:ARG:N 1 31.07 (1,326) 1:A:132:PHE:N 1:A:132:PHE:CA 1:A:132:PHE:C 1:A:133:GLY:N 12 31.05		1:A:59:ASN:C	1:A:60:LYS:N	1:A:60:LYS:CA	1:A:60:LYS:C	19	31.12
(1,278) 1:A:106:THR:C 1:A:107:ALA:N 1:A:107:ALA:CA 1:A:107:ALA:C 5 31.09 (1,289) 1:A:110:TYR:N 1:A:110:TYR:CA 1:A:110:TYR:C 1:A:111:ARG:N 1 31.07 (1,326) 1:A:132:PHE:N 1:A:132:PHE:CA 1:A:132:PHE:C 1:A:133:GLY:N 12 31.05		1:A:2:ALA:C	1:A:3:ASP:N	1:A:3:ASP:CA	1:A:3:ASP:C	7	31.12
(1,326) 1:A:132:PHE:N 1:A:132:PHE:CA 1:A:132:PHE:C 1:A:133:GLY:N 12 31.05	(1,278)	1:A:106:THR:C	1:A:107:ALA:N	1:A:107:ALA:CA	1:A:107:ALA:C	5	31.09
	(1,289)	1:A:110:TYR:N	1:A:110:TYR:CA	1:A:110:TYR:C	1:A:111:ARG:N	1	31.07
(1,170) 1:A:15:VAL:N 1:A:15:VAL:CA 1:A:15:VAL:C 1:A:16:LEU:N 15 31.03	(1,326)	1:A:132:PHE:N	1:A:132:PHE:CA	1:A:132:PHE:C	1:A:133:GLY:N	12	31.05
	(1,170)	1:A:15:VAL:N	1:A:15:VAL:CA	1:A:15:VAL:C	1:A:16:LEU:N	15	31.03



	ed from previous po	•				
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (\circ)
(1,321)	1:A:130:PRO:C	1:A:131:LYS:N	1:A:131:LYS:CA	1:A:131:LYS:C	13	31.02
(1,178)	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	1:A:19:ASN:N	1	31.02
(1,250)	1:A:96:GLU:C	1:A:97:ILE:N	1:A:97:ILE:CA	1:A:97:ILE:C	12	31.01
(1,228)	1:A:75:LEU:C	1:A:76:LEU:N	1:A:76:LEU:CA	1:A:76:LEU:C	7	31.0
(1,186)	1:A:20:ALA:C	1:A:21:GLY:N	1:A:21:GLY:CA	1:A:21:GLY:C	20	31.0
(1,233)	1:A:87:PRO:N	1:A:87:PRO:CA	1:A:87:PRO:C	1:A:88:ILE:N	5	30.99
(1,321)	1:A:130:PRO:C	1:A:131:LYS:N	1:A:131:LYS:CA	1:A:131:LYS:C	15	30.98
(1,287)	1:A:109:MET:C	1:A:110:TYR:N	1:A:110:TYR:CA	1:A:110:TYR:C	5	30.98
(1,242)	1:A:93:THR:N	1:A:93:THR:CA	1:A:93:THR:C	1:A:94:ALA:N	17	30.98
(1,233)	1:A:87:PRO:N	1:A:87:PRO:CA	1:A:87:PRO:C	1:A:88:ILE:N	9	30.96
(1,247)	1:A:95:PRO:C	1:A:96:GLU:N	1:A:96:GLU:CA	1:A:96:GLU:C	14	30.94
(1,355)	1:A:163:GLU:C	1:A:164:LYS:N	1:A:164:LYS:CA	1:A:164:LYS:C	8	30.91
(1,233)	1:A:87:PRO:N	1:A:87:PRO:CA	1:A:87:PRO:C	1:A:88:ILE:N	19	30.89
(1,219)	1:A:65:TRP:C	1:A:66:PHE:N	1:A:66:PHE:CA	1:A:66:PHE:C	6	30.88
(1,352)	1:A:162:LYS:C	1:A:163:GLU:N	1:A:163:GLU:CA	1:A:163:GLU:C	17	30.86
(1,360)	1:A:165:CYS:C	1:A:166:ASN:N	1:A:166:ASN:CA	1:A:166:ASN:C	19	30.85
(1,301)	1:A:115:ILE:N	1:A:115:ILE:CA	1:A:115:ILE:C	1:A:116:CYS:N	4	30.83
(1,213)	1:A:61:GLU:C	1:A:62:GLY:N	1:A:62:GLY:CA	1:A:62:GLY:C	4	30.82
(1,213)	1:A:61:GLU:C	1:A:62:GLY:N	1:A:62:GLY:CA	1:A:62:GLY:C	18	30.8
(1,177)	1:A:17:LYS:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	12	30.79
(1,321)	1:A:130:PRO:C	1:A:131:LYS:N	1:A:131:LYS:CA	1:A:131:LYS:C	12	30.77
(1,236)	1:A:88:ILE:C	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:C	20	30.69
(1,176)	1:A:17:LYS:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	14	30.68
(1,250)	1:A:96:GLU:C	1:A:97:ILE:N	1:A:97:ILE:CA	1:A:97:ILE:C	4	30.64
(1,106)	1:A:82:ILE:N	1:A:82:ILE:CA	1:A:82:ILE:C	1:A:83:GLU:N	11	30.62
(1,108)	1:A:83:GLU:N	1:A:83:GLU:CA	1:A:83:GLU:C	1:A:84:PHE:N	5	30.6
(1,112)	1:A:85:ASP:N	1:A:85:ASP:CA	1:A:85:ASP:C	1:A:86:ILE:N	18	30.58
(1,280)	1:A:107:ALA:N	1:A:107:ALA:CA	1:A:107:ALA:C	1:A:108:LYS:N	14	30.55
(1,250)	1:A:96:GLU:C	1:A:97:ILE:N	1:A:97:ILE:CA	1:A:97:ILE:C	16	30.55
(1,321)	1:A:130:PRO:C	1:A:131:LYS:N	1:A:131:LYS:CA	1:A:131:LYS:C	9	30.54
(1,289)	1:A:110:TYR:N	1:A:110:TYR:CA	1:A:110:TYR:C	1:A:111:ARG:N	19	30.54
(1,321)	1:A:130:PRO:C	1:A:131:LYS:N	1:A:131:LYS:CA	1:A:131:LYS:C	17	30.53
(1,299)	1:A:114:LYS:N	1:A:114:LYS:CA	1:A:114:LYS:C	1:A:115:ILE:N	9	30.53
(1,233)	1:A:87:PRO:N	1:A:87:PRO:CA	1:A:87:PRO:C	1:A:88:ILE:N	20	30.53
(1,204)	1:A:52:ASP:C	1:A:53:TRP:N	1:A:53:TRP:CA	1:A:53:TRP:C	13	30.53
(1,346)	1:A:160:GLN:C	1:A:161:HIS:N	1:A:161:HIS:CA	1:A:161:HIS:C	6	30.52
(1,321)	1:A:130:PRO:C	1:A:131:LYS:N	1:A:131:LYS:CA	1:A:131:LYS:C	5	30.51
(1,243)	1:A:93:THR:C	1:A:94:ALA:N	1:A:94:ALA:CA	1:A:94:ALA:C	8	30.49
(1,252)	1:A:97:ILE:N	1:A:97:ILE:CA	1:A:97:ILE:C	1:A:98:ALA:N	5	30.42
(1,225)	1:A:74:ASP:C	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	12	30.4
(1,225)	1:A:74:ASP:C	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	3	30.36
(1,233)	1:A:87:PRO:N	1:A:87:PRO:CA	1:A:87:PRO:C	1:A:88:ILE:N	4	30.34
(1,106)	1:A:82:ILE:N	1:A:82:ILE:CA	1:A:82:ILE:C	1:A:83:GLU:N	3	30.34
(1,108)	1:A:83:GLU:N	1:A:83:GLU:CA	1:A:83:GLU:C	1:A:84:PHE:N	16	30.33
(1,343)	1:A:159:ILE:C	1:A:160:GLN:N	1:A:160:GLN:CA	1:A:160:GLN:C	17	30.32
(1,312)	1:A:118:THR:C	1:A:119:ASP:N	1:A:119:ASP:CA	1:A:119:ASP:C	6	30.32
(1,286)	1:A:109:MET:N	1:A:109:MET:CA	1:A:109:MET:C	1:A:110:TYR:N	2	30.32
(1,185)	1:A:20:ALA:N	1:A:20:ALA:CA	1:A:20:ALA:C	1:A:21:GLY:N	7	30.32
(1,281)	1:A:107:ALA:C	1:A:108:LYS:N	1:A:108:LYS:CA	1:A:108:LYS:C	3	30.31
(1,242)	1:A:93:THR:N	1:A:93:THR:CA	1:A:93:THR:C	1:A:94:ALA:N	14	30.31
(1,355)	1:A:163:GLU:C	1:A:164:LYS:N	1:A:164:LYS:CA	1:A:164:LYS:C	2	30.27
					Continu	ed on next page



Violation (o) 30.24 30.21 30.18 30.17 30.16 30.12 30.1 30.09 30.07 30.05 30.03 30.03 30.0 29.94 29.9 29.9 29.87 29.83 29.83 29.81 29.73 29.67 29.66
30.21 30.18 30.17 30.16 30.12 30.1 30.09 30.07 30.05 30.03 30.03 30.0 29.94 29.9 29.9 29.87 29.83 29.83 29.83 29.81 29.67 29.66
30.18 30.17 30.16 30.12 30.1 30.09 30.07 30.05 30.03 30.0 29.94 29.9 29.9 29.87 29.83 29.83 29.81 29.67 29.66
30.17 30.16 30.12 30.1 30.09 30.07 30.05 30.03 30.0 29.94 29.9 29.9 29.9 29.87 29.83 29.83 29.83 29.81 29.73 29.66
30.16 30.12 30.1 30.09 30.07 30.05 30.03 30.03 30.0 29.94 29.9 29.9 29.87 29.83 29.83 29.83 29.81 29.73 29.66
30.12 30.1 30.09 30.07 30.05 30.03 30.03 30.0 29.94 29.9 29.9 29.87 29.83 29.83 29.83 29.81 29.73 29.67 29.66
30.1 30.09 30.07 30.05 30.03 30.03 30.0 29.94 29.9 29.9 29.87 29.83 29.83 29.83 29.81 29.73 29.67 29.66
30.09 30.07 30.05 30.03 30.03 30.0 29.94 29.9 29.9 29.87 29.83 29.83 29.81 29.73 29.67 29.66
30.07 30.05 30.03 30.03 30.0 29.94 29.9 29.9 29.87 29.83 29.83 29.83 29.81 29.73 29.67 29.66
30.05 30.03 30.03 30.0 29.94 29.9 29.9 29.87 29.83 29.83 29.81 29.73 29.67 29.66
30.03 30.03 30.0 29.94 29.9 29.9 29.87 29.83 29.83 29.81 29.73 29.67 29.66
30.03 30.0 29.94 29.9 29.9 29.87 29.83 29.83 29.81 29.73 29.67 29.66
30.0 29.94 29.9 29.9 29.87 29.83 29.83 29.81 29.73 29.67 29.66
29.94 29.9 29.9 29.87 29.83 29.83 29.81 29.73 29.67 29.66
29.9 29.9 29.87 29.83 29.83 29.81 29.73 29.67 29.66
29.9 29.87 29.83 29.83 29.81 29.73 29.67 29.66
29.87 29.83 29.83 29.81 29.73 29.67 29.66
29.83 29.83 29.81 29.73 29.67 29.66
29.83 29.81 29.73 29.67 29.66
29.81 29.73 29.67 29.66
29.73 29.67 29.66
29.67 29.66
29.66
00.01
29.61
29.6
29.55
29.54
29.46
29.44
29.4
29.4
29.38
29.38
29.35
29.29
29.29
29.28
29.17
29.12
29.1
29.05
29.03
29.03
28.99
28.95
28.95
28.9
28.89
28.87
28.87 28.85



	ed from previous pe					
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (\circ)
(1,108)	1:A:83:GLU:N	1:A:83:GLU:CA	1:A:83:GLU:C	1:A:84:PHE:N	9	28.82
(1,180)	1:A:18:THR:C	1:A:19:ASN:N	1:A:19:ASN:CA	1:A:19:ASN:C	1	28.75
(1,109)	1:A:83:GLU:C	1:A:84:PHE:N	1:A:84:PHE:CA	1:A:84:PHE:C	14	28.75
(1,183)	1:A:19:ASN:C	1:A:20:ALA:N	1:A:20:ALA:CA	1:A:20:ALA:C	10	28.72
(1,290)	1:A:110:TYR:C	1:A:111:ARG:N	1:A:111:ARG:CA	1:A:111:ARG:C	10	28.71
(1,261)	1:A:100:PRO:C	1:A:101:GLU:N	1:A:101:GLU:CA	1:A:101:GLU:C	6	28.68
(1,321)	1:A:130:PRO:C	1:A:131:LYS:N	1:A:131:LYS:CA	1:A:131:LYS:C	10	28.66
(1,292)	1:A:111:ARG:N	1:A:111:ARG:CA	1:A:111:ARG:C	1:A:112:GLY:N	9	28.66
(1,307)	1:A:117:LEU:N	1:A:117:LEU:CA	1:A:117:LEU:C	1:A:118:THR:N	12	28.65
(1,252)	1:A:97:ILE:N	1:A:97:ILE:CA	1:A:97:ILE:C	1:A:98:ALA:N	3	28.64
(1,236)	1:A:88:ILE:C	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:C	7	28.63
(1,350)	1:A:161:HIS:C	1:A:162:LYS:N	1:A:162:LYS:CA	1:A:162:LYS:C	19	28.62
(1,109)	1:A:83:GLU:C	1:A:84:PHE:N	1:A:84:PHE:CA	1:A:84:PHE:C	9	28.62
(1,172)	1:A:16:LEU:N	1:A:16:LEU:CA	1:A:16:LEU:C	1:A:17:LYS:N	10	28.59
(1,312)	1:A:118:THR:C	1:A:119:ASP:N	1:A:119:ASP:CA	1:A:119:ASP:C	11	28.53
(1,291)	1:A:110:TYR:C	1:A:111:ARG:N	1:A:111:ARG:CA	1:A:111:ARG:C	4	28.51
(1,337)	1:A:157:GLY:C	1:A:158:VAL:N	1:A:158:VAL:CA	1:A:158:VAL:C	13	28.45
(1,284)	1:A:108:LYS:C	1:A:109:MET:N	1:A:109:MET:CA	1:A:109:MET:C	3	28.45
(1,106)	1:A:82:ILE:N	1:A:82:ILE:CA	1:A:82:ILE:C	1:A:83:GLU:N	10	28.42
(1,315)	1:A:119:ASP:C	1:A:120:HIS:N	1:A:120:HIS:CA	1:A:120:HIS:C	14	28.4
(1,188)	1:A:21:GLY:N	1:A:21:GLY:CA	1:A:21:GLY:C	1:A:22:PRO:N	2	28.39
(1,108)	1:A:83:GLU:N	1:A:83:GLU:CA	1:A:83:GLU:C	1:A:84:PHE:N	1	28.39
(1,243)	1:A:93:THR:C	1:A:94:ALA:N	1:A:94:ALA:CA	1:A:94:ALA:C	4	28.38
(1,207)	1:A:59:ASN:C	1:A:60:LYS:N	1:A:60:LYS:CA	1:A:60:LYS:C	15	28.38
(1,233)	1:A:87:PRO:N	1:A:87:PRO:CA	1:A:87:PRO:C	1:A:88:ILE:N	12	28.37
(1,225)	1:A:74:ASP:C	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	19	28.34
(1,213)	1:A:61:GLU:C	1:A:62:GLY:N	1:A:62:GLY:CA	1:A:62:GLY:C	3	28.25
(1,189)	1:A:21:GLY:N	1:A:21:GLY:CA	1:A:21:GLY:C	1:A:22:PRO:N	6	28.22
(1,287)	1:A:109:MET:C	1:A:110:TYR:N	1:A:110:TYR:CA	1:A:110:TYR:C	10	28.15
(1,108)	1:A:83:GLU:N	1:A:83:GLU:CA	1:A:83:GLU:C	1:A:84:PHE:N	8	28.06
(1,108)	1:A:83:GLU:N	1:A:83:GLU:CA	1:A:83:GLU:C	1:A:84:PHE:N	17	28.04
(1,108)	1:A:83:GLU:N	1:A:83:GLU:CA	1:A:83:GLU:C	1:A:84:PHE:N	4	28.01
(1,220)	1:A:66:PHE:N	1:A:66:PHE:CA	1:A:66:PHE:C	1:A:67:GLY:N	2	27.95
(1,188)	1:A:21:GLY:N	1:A:21:GLY:CA	1:A:21:GLY:C	1:A:22:PRO:N	4	27.95
(1,307)	1:A:117:LEU:N	1:A:117:LEU:CA	1:A:117:LEU:C	1:A:118:THR:N	4	27.93
(1,360)	1:A:165:CYS:C	1:A:166:ASN:N	1:A:166:ASN:CA	1:A:166:ASN:C	10	27.91
(1,207)	1:A:59:ASN:C	1:A:60:LYS:N	1:A:60:LYS:CA	1:A:60:LYS:C	20	27.91
(1,201)	1:A:51:ASN:C	1:A:52:ASP:N	1:A:52:ASP:CA	1:A:52:ASP:C	13	27.91
(1,321)	1:A:130:PRO:C	1:A:131:LYS:N	1:A:131:LYS:CA	1:A:131:LYS:C	18	27.89
(1,183)	1:A:19:ASN:C	1:A:20:ALA:N	1:A:20:ALA:CA	1:A:20:ALA:C	20	27.87
(1,250)	1:A:96:GLU:C	1:A:97:ILE:N	1:A:97:ILE:CA	1:A:97:ILE:C	15	27.86
(1,321)	1:A:130:PRO:C	1:A:131:LYS:N	1:A:131:LYS:CA	1:A:131:LYS:C	16	27.81
(1,188)	1:A:21:GLY:N	1:A:21:GLY:CA	1:A:21:GLY:C	1:A:22:PRO:N	14	27.81
(1,236)	1:A:88:ILE:C	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:C	13	27.79
(1,351)	1:A:162:LYS:N	1:A:162:LYS:CA	1:A:162:LYS:C	1:A:163:GLU:N	10	27.77
(1,335)	1:A:156:LYS:C	1:A:157:GLY:N	1:A:157:GLY:CA	1:A:157:GLY:C	16	27.74
(1,350) $(1,250)$	1:A:96:GLU:C	1:A:97:ILE:N	1:A:97:ILE:CA	1:A:97:ILE:C	18	27.7
(1,225)	1:A:74:ASP:C	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	2	27.65
(1,225)	1:A:74:ASP:C	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	15	27.65
(1,362)	1:A:166:ASN:N	1:A:166:ASN:CA	1:A:166:ASN:C	1:A:167:GLN:N	20	27.59
(1,324)	1:A:131:LYS:C	1:A:132:PHE:N	1:A:132:PHE:CA	1:A:132:PHE:C	12	27.53
\ \ \ \ \ \ \ \ \ \ \ \ \ \ \ \ \ \ \						ed on next page



	ed from previous po					
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	$oxed{Violation} (\circ)$
(1,363)	1:A:166:ASN:C	1:A:167:GLN:N	1:A:167:GLN:CA	1:A:167:GLN:C	1	27.49
(1,301)	1:A:115:ILE:N	1:A:115:ILE:CA	1:A:115:ILE:C	1:A:116:CYS:N	2	27.45
(1,108)	1:A:83:GLU:N	1:A:83:GLU:CA	1:A:83:GLU:C	1:A:84:PHE:N	15	27.42
(1,213)	1:A:61:GLU:C	1:A:62:GLY:N	1:A:62:GLY:CA	1:A:62:GLY:C	2	27.39
(1,290)	1:A:110:TYR:C	1:A:111:ARG:N	1:A:111:ARG:CA	1:A:111:ARG:C	18	27.38
(1,250)	1:A:96:GLU:C	1:A:97:ILE:N	1:A:97:ILE:CA	1:A:97:ILE:C	7	27.38
(1,308)	1:A:117:LEU:C	1:A:118:THR:N	1:A:118:THR:CA	1:A:118:THR:C	1	27.37
(1,170)	1:A:15:VAL:N	1:A:15:VAL:CA	1:A:15:VAL:C	1:A:16:LEU:N	1	27.36
(1,108)	1:A:83:GLU:N	1:A:83:GLU:CA	1:A:83:GLU:C	1:A:84:PHE:N	11	27.36
(1,106)	1:A:82:ILE:N	1:A:82:ILE:CA	1:A:82:ILE:C	1:A:83:GLU:N	19	27.34
(1,82)	1:A:65:TRP:N	1:A:65:TRP:CA	1:A:65:TRP:C	1:A:66:PHE:N	6	27.33
(1,360)	1:A:165:CYS:C	1:A:166:ASN:N	1:A:166:ASN:CA	1:A:166:ASN:C	7	27.28
(1,228)	1:A:75:LEU:C	1:A:76:LEU:N	1:A:76:LEU:CA	1:A:76:LEU:C	19	27.22
(1,308)	1:A:117:LEU:C	1:A:118:THR:N	1:A:118:THR:CA	1:A:118:THR:C	9	27.14
(1,189)	1:A:21:GLY:N	1:A:21:GLY:CA	1:A:21:GLY:C	1:A:22:PRO:N	3	27.11
(1,335)	1:A:156:LYS:C	1:A:157:GLY:N	1:A:157:GLY:CA	1:A:157:GLY:C	14	27.05
(1,189)	1:A:21:GLY:N	1:A:21:GLY:CA	1:A:21:GLY:C	1:A:22:PRO:N	1	27.03
(1,321)	1:A:130:PRO:C	1:A:131:LYS:N	1:A:131:LYS:CA	1:A:131:LYS:C	7	26.99
(1,308)	1:A:117:LEU:C	1:A:118:THR:N	1:A:118:THR:CA	1:A:118:THR:C	20	26.98
(1,250)	1:A:96:GLU:C	1:A:97:ILE:N	1:A:97:ILE:CA	1:A:97:ILE:C	8	26.97
(1,207)	1:A:59:ASN:C	1:A:60:LYS:N	1:A:60:LYS:CA	1:A:60:LYS:C	10	26.93
(1,225)	1:A:74:ASP:C	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	6	26.92
(1,223)	1:A:73:HIS:C	1:A:74:ASP:N	1:A:74:ASP:CA	1:A:74:ASP:C	15	26.92
(1,185)	1:A:20:ALA:N	1:A:20:ALA:CA	1:A:20:ALA:C	1:A:21:GLY:N	11	26.92
(1,161)	1:A:2:ALA:C	1:A:3:ASP:N	1:A:3:ASP:CA	1:A:3:ASP:C	20	26.92
(1,202)	1:A:51:ASN:C	1:A:52:ASP:N	1:A:52:ASP:CA	1:A:52:ASP:C	9	26.91
(1,109)	1:A:83:GLU:C	1:A:84:PHE:N	1:A:84:PHE:CA	1:A:84:PHE:C	7	26.86
(1,225)	1:A:74:ASP:C	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	13	26.84
(1,108)	1:A:83:GLU:N	1:A:83:GLU:CA	1:A:83:GLU:C	1:A:84:PHE:N	20	26.84
(1,93)	1:A:72:ILE:C	1:A:73:HIS:N	1:A:73:HIS:CA	1:A:73:HIS:C	9	26.82
(1,357)	1:A:164:LYS:C	1:A:165:CYS:N	1:A:165:CYS:CA	1:A:165:CYS:C	2	26.82
(1,335)	1:A:156:LYS:C	1:A:157:GLY:N	1:A:157:GLY:CA	1:A:157:GLY:C	20	26.8
(1,261)	1:A:100:PRO:C	1:A:101:GLU:N	1:A:101:GLU:CA	1:A:101:GLU:C	12	26.79
(1,315)	1:A:119:ASP:C	1:A:120:HIS:N	1:A:120:HIS:CA	1:A:120:HIS:C	12	26.75
(1,261)	1:A:100:PRO:C	1:A:101:GLU:N	1:A:101:GLU:CA	1:A:101:GLU:C	3	26.75
(1,82)	1:A:65:TRP:N	1:A:65:TRP:CA	1:A:65:TRP:C	1:A:66:PHE:N	15	26.73
(1,109)	1:A:83:GLU:C	1:A:84:PHE:N	1:A:84:PHE:CA	1:A:84:PHE:C	8	26.73
(1,278)	1:A:106:THR:C	1:A:107:ALA:N	1:A:107:ALA:CA	1:A:107:ALA:C	11	26.7
(1,213)	1:A:61:GLU:C	1:A:62:GLY:N	1:A:62:GLY:CA	1:A:62:GLY:C	13	26.69
(1,252)	1:A:97:ILE:N	1:A:97:ILE:CA	1:A:97:ILE:C	1:A:98:ALA:N	8	26.67
(1,213)	1:A:61:GLU:C	1:A:62:GLY:N	1:A:62:GLY:CA	1:A:62:GLY:C	9	26.67
(1,315)	1:A:119:ASP:C	1:A:120:HIS:N	1:A:120:HIS:CA	1:A:120:HIS:C	3	26.59
(1,308)	1:A:117:LEU:C	1:A:118:THR:N	1:A:118:THR:CA	1:A:118:THR:C	12	26.59
(1,305)	1:A:116:CYS:C	1:A:117:LEU:N	1:A:117:LEU:CA	1:A:117:LEU:C	18	26.58
(1,243)	1:A:93:THR:C	1:A:94:ALA:N	1:A:94:ALA:CA	1:A:94:ALA:C	6	26.58
(1,82)	1:A:65:TRP:N	1:A:65:TRP:CA	1:A:65:TRP:C	1:A:66:PHE:N	19	26.57
(1,350)	1:A:161:HIS:C	1:A:162:LYS:N	1:A:162:LYS:CA	1:A:162:LYS:C	11	26.54
(1,342)	1:A:159:ILE:N	1:A:159:ILE:CA	1:A:159:ILE:C	1:A:160:GLN:N	16	26.48
(1,340)	1:A:158:VAL:C	1:A:159:ILE:N	1:A:159:ILE:CA	1:A:159:ILE:C	20	26.48
(1,213)	1:A:61:GLU:C	1:A:62:GLY:N	1:A:62:GLY:CA	1:A:62:GLY:C	1	26.48
(1,281)	1:A:107:ALA:C	1:A:108:LYS:N	1:A:108:LYS:CA	1:A:108:LYS:C	12	26.46
				•	0	ed on nert nage



	ed from previous po		.		36 11	T70 1 10 ()
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,173)	1:A:16:LEU:C	1:A:17:LYS:N	1:A:17:LYS:CA	1:A:17:LYS:C	6	26.45
(1,106)	1:A:82:ILE:N	1:A:82:ILE:CA	1:A:82:ILE:C	1:A:83:GLU:N	16	26.37
(1,321)	1:A:130:PRO:C	1:A:131:LYS:N	1:A:131:LYS:CA	1:A:131:LYS:C	6	26.36
(1,363)	1:A:166:ASN:C	1:A:167:GLN:N	1:A:167:GLN:CA	1:A:167:GLN:C	5	26.28
(1,275)	1:A:105:LYS:C	1:A:106:THR:N	1:A:106:THR:CA	1:A:106:THR:C	10	26.19
(1,352)	1:A:162:LYS:C	1:A:163:GLU:N	1:A:163:GLU:CA	1:A:163:GLU:C	3	26.18
(1,267)	1:A:102:LEU:C	1:A:103:ASP:N	1:A:103:ASP:CA	1:A:103:ASP:C	17	26.17
(1,343)	1:A:159:ILE:C	1:A:160:GLN:N	1:A:160:GLN:CA	1:A:160:GLN:C	2	26.15
(1,308)	1:A:117:LEU:C	1:A:118:THR:N	1:A:118:THR:CA	1:A:118:THR:C	8	26.1
(1,106)	1:A:82:ILE:N	1:A:82:ILE:CA	1:A:82:ILE:C	1:A:83:GLU:N	9	26.04
(1,357)	1:A:164:LYS:C	1:A:165:CYS:N	1:A:165:CYS:CA	1:A:165:CYS:C	16	26.0
(1,297)	1:A:113:GLY:C	1:A:114:LYS:N	1:A:114:LYS:CA	1:A:114:LYS:C	10	25.97
(1,109)	1:A:83:GLU:C	1:A:84:PHE:N	1:A:84:PHE:CA	1:A:84:PHE:C	16	25.95
(1,183)	1:A:19:ASN:C	1:A:20:ALA:N	1:A:20:ALA:CA	1:A:20:ALA:C	18	25.93
(1,242)	1:A:93:THR:N	1:A:93:THR:CA	1:A:93:THR:C	1:A:94:ALA:N	11	25.92
(1,351)	1:A:162:LYS:N	1:A:162:LYS:CA	1:A:162:LYS:C	1:A:163:GLU:N	13	25.9
(1,109)	1:A:83:GLU:C	1:A:84:PHE:N	1:A:84:PHE:CA	1:A:84:PHE:C	4	25.86
(1,243)	1:A:93:THR:C	1:A:94:ALA:N	1:A:94:ALA:CA	1:A:94:ALA:C	5	25.73
(1,243)	1:A:93:THR:C	1:A:94:ALA:N	1:A:94:ALA:CA	1:A:94:ALA:C	16	25.71
(1,161)	1:A:2:ALA:C	1:A:3:ASP:N	1:A:3:ASP:CA	1:A:3:ASP:C	16	25.71
(1,207)	1:A:59:ASN:C	1:A:60:LYS:N	1:A:60:LYS:CA	1:A:60:LYS:C	13	25.63
(1,225)	1:A:74:ASP:C	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	17	25.62
(1,109)	1:A:83:GLU:C	1:A:84:PHE:N	1:A:84:PHE:CA	1:A:84:PHE:C	11	25.61
(1,287)	1:A:109:MET:C	1:A:110:TYR:N	1:A:110:TYR:CA	1:A:110:TYR:C	19	25.5
(1,112)	1:A:85:ASP:N	1:A:85:ASP:CA	1:A:85:ASP:C	1:A:86:ILE:N	5	25.48
(1,243)	1:A:93:THR:C	1:A:94:ALA:N	1:A:94:ALA:CA	1:A:94:ALA:C	1	25.44
(1,225)	1:A:74:ASP:C	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	11	25.44
(1,315)	1:A:119:ASP:C	1:A:120:HIS:N	1:A:120:HIS:CA	1:A:120:HIS:C	9	25.43
(1,351)	1:A:162:LYS:N	1:A:162:LYS:CA	1:A:162:LYS:C	1:A:163:GLU:N	15	25.39
(1,321)	1:A:130:PRO:C	1:A:131:LYS:N	1:A:131:LYS:CA	1:A:131:LYS:C	11	25.34
(1,281)	1:A:107:ALA:C	1:A:108:LYS:N	1:A:108:LYS:CA	1:A:108:LYS:C	20	25.34
(1,161)	1:A:2:ALA:C	1:A:3:ASP:N	1:A:3:ASP:CA	1:A:3:ASP:C	17	25.34
(1,188)	1:A:21:GLY:N	1:A:21:GLY:CA	1:A:21:GLY:C	1:A:22:PRO:N	7	25.31
(1,108)	1:A:83:GLU:N	1:A:83:GLU:CA	1:A:83:GLU:C	1:A:84:PHE:N	19	25.29
(1,342)	1:A:159:ILE:N	1:A:159:ILE:CA	1:A:159:ILE:C	1:A:160:GLN:N	10	25.25
(1,243)	1:A:93:THR:C	1:A:94:ALA:N	1:A:94:ALA:CA	1:A:94:ALA:C	12	25.24
(1,207)	1:A:59:ASN:C	1:A:60:LYS:N	1:A:60:LYS:CA	1:A:60:LYS:C	18	25.24
(1,326)	1:A:132:PHE:N	1:A:132:PHE:CA	1:A:132:PHE:C	1:A:133:GLY:N	5	25.23
(1,173)	1:A:16:LEU:C	1:A:17:LYS:N	1:A:17:LYS:CA	1:A:17:LYS:C	7	25.18
(1,108)	1:A:83:GLU:N	1:A:83:GLU:CA	1:A:83:GLU:C	1:A:84:PHE:N	18	25.17
(1,357)	1:A:164:LYS:C	1:A:165:CYS:N	1:A:165:CYS:CA	1:A:165:CYS:C	18	25.13
(1,337) $(1,225)$	1:A:74:ASP:C	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	4	25.11
(1,106)	1:A:82:ILE:N	1:A:82:ILE:CA	1:A:82:ILE:C	1:A:83:GLU:N	15	25.07
(1,346)	1:A:160:GLN:C	1:A:161:HIS:N	1:A:161:HIS:CA	1:A:161:HIS:C	3	25.05
(1,340) $(1,287)$	1:A:109:MET:C	1:A:110:TYR:N	1:A:110:TYR:CA	1:A:110:TYR:C	11	25.04
(1,237) $(1,213)$	1:A:61:GLU:C	1:A:62:GLY:N	1:A:62:GLY:CA	1:A:62:GLY:C	11	25.04
(1,213) $(1,296)$	1:A:113:GLY:C	1:A:114:LYS:N	1:A:114:LYS:CA	1:A:114:LYS:C	4	25.03
(1,250) $(1,365)$	1:A:167:GLN:N	1:A:167:GLN:CA	1:A:167:GLN:C	1:A:168:LEU:N	1	25.02
(1,300) $(1,250)$	1:A:96:GLU:C	1:A:97:ILE:N	1:A:97:ILE:CA	1:A:97:ILE:C	14	25.01
(1,230) $(1,112)$	1:A:85:ASP:N	1:A:85:ASP:CA	1:A:85:ASP:C	1:A:86:ILE:N	2	25.0
(1,112) $(1,286)$	1:A:109:MET:N	1:A:109:MET:CA	1:A:109:MET:C	1:A:110:TYR:N	8	24.98
(1,200)	1.11.100.1011.10	1.11.103.ME1.OA	1.11.103.ME1.0	1.71.110.1 110.11		24.90



	ed from previous po		.		3.5	T7. 1
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (\circ)
(1,308)	1:A:117:LEU:C	1:A:118:THR:N	1:A:118:THR:CA	1:A:118:THR:C	16	24.95
(1,109)	1:A:83:GLU:C	1:A:84:PHE:N	1:A:84:PHE:CA	1:A:84:PHE:C	19	24.91
(1,252)	1:A:97:ILE:N	1:A:97:ILE:CA	1:A:97:ILE:C	1:A:98:ALA:N	19	24.84
(1,363)	1:A:166:ASN:C	1:A:167:GLN:N	1:A:167:GLN:CA	1:A:167:GLN:C	11	24.83
(1,349)	1:A:161:HIS:C	1:A:162:LYS:N	1:A:162:LYS:CA	1:A:162:LYS:C	16	24.76
(1,213)	1:A:61:GLU:C	1:A:62:GLY:N	1:A:62:GLY:CA	1:A:62:GLY:C	8	24.69
(1,189)	1:A:21:GLY:N	1:A:21:GLY:CA	1:A:21:GLY:C	1:A:22:PRO:N	7	24.69
(1,291)	1:A:110:TYR:C	1:A:111:ARG:N	1:A:111:ARG:CA	1:A:111:ARG:C	14	24.68
(1,242)	1:A:93:THR:N	1:A:93:THR:CA	1:A:93:THR:C	1:A:94:ALA:N	2	24.66
(1,106)	1:A:82:ILE:N	1:A:82:ILE:CA	1:A:82:ILE:C	1:A:83:GLU:N	17	24.66
(1,182)	1:A:19:ASN:C	1:A:20:ALA:N	1:A:20:ALA:CA	1:A:20:ALA:C	6	24.63
(1,288)	1:A:109:MET:C	1:A:110:TYR:N	1:A:110:TYR:CA	1:A:110:TYR:C	14	24.6
(1,365)	1:A:167:GLN:N	1:A:167:GLN:CA	1:A:167:GLN:C	1:A:168:LEU:N	6	24.59
(1,361)	1:A:165:CYS:C	1:A:166:ASN:N	1:A:166:ASN:CA	1:A:166:ASN:C	20	24.59
(1,106)	1:A:82:ILE:N	1:A:82:ILE:CA	1:A:82:ILE:C	1:A:83:GLU:N	6	24.58
(1,239)	1:A:91:PRO:C	1:A:92:THR:N	1:A:92:THR:CA	1:A:92:THR:C	7	24.57
(1,279)	1:A:106:THR:C	1:A:107:ALA:N	1:A:107:ALA:CA	1:A:107:ALA:C	12	24.53
(1,243)	1:A:93:THR:C	1:A:94:ALA:N	1:A:94:ALA:CA	1:A:94:ALA:C	19	24.52
(1,284)	1:A:108:LYS:C	1:A:109:MET:N	1:A:109:MET:CA	1:A:109:MET:C	9	24.51
(1,225)	1:A:74:ASP:C	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	8	24.46
(1,349)	1:A:161:HIS:C	1:A:162:LYS:N	1:A:162:LYS:CA	1:A:162:LYS:C	1	24.45
(1,108)	1:A:83:GLU:N	1:A:83:GLU:CA	1:A:83:GLU:C	1:A:84:PHE:N	7	24.4
(1,242)	1:A:93:THR:N	1:A:93:THR:CA	1:A:93:THR:C	1:A:94:ALA:N	16	24.39
(1,281)	1:A:107:ALA:C	1:A:108:LYS:N	1:A:108:LYS:CA	1:A:108:LYS:C	19	24.35
(1,267)	1:A:102:LEU:C	1:A:103:ASP:N	1:A:103:ASP:CA	1:A:103:ASP:C	13	24.29
(1,201)	1:A:51:ASN:C	1:A:52:ASP:N	1:A:52:ASP:CA	1:A:52:ASP:C	6	24.27
(1,301)	1:A:115:ILE:N	1:A:115:ILE:CA	1:A:115:ILE:C	1:A:116:CYS:N	1	24.25
(1,354)	1:A:163:GLU:N	1:A:163:GLU:CA	1:A:163:GLU:C	1:A:164:LYS:N	18	24.17
(1,236)	1:A:88:ILE:C	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:C	1	24.16
(1,201)	1:A:51:ASN:C	1:A:52:ASP:N	1:A:52:ASP:CA	1:A:52:ASP:C	14	24.16
(1,207)	1:A:59:ASN:C	1:A:60:LYS:N	1:A:60:LYS:CA	1:A:60:LYS:C	2	24.14
(1,109)	1:A:83:GLU:C	1:A:84:PHE:N	1:A:84:PHE:CA	1:A:84:PHE:C	2	24.09
(1,170)	1:A:15:VAL:N	1:A:15:VAL:CA	1:A:15:VAL:C	1:A:16:LEU:N	12	24.02
(1,243)	1:A:93:THR:C	1:A:94:ALA:N	1:A:94:ALA:CA	1:A:94:ALA:C	9	24.0
(1,108)	1:A:83:GLU:N	1:A:83:GLU:CA	1:A:83:GLU:C	1:A:84:PHE:N	3	24.0
(1,185)	1:A:20:ALA:N	1:A:20:ALA:CA	1:A:20:ALA:C	1:A:21:GLY:N	10	23.99
(1,207)	1:A:59:ASN:C	1:A:60:LYS:N	1:A:60:LYS:CA	1:A:60:LYS:C	12	23.83
(1,243)	1:A:93:THR:C	1:A:94:ALA:N	1:A:94:ALA:CA	1:A:94:ALA:C	18	23.81
(1,183)	1:A:19:ASN:C	1:A:20:ALA:N	1:A:20:ALA:CA	1:A:20:ALA:C	8	23.8
(1,294)	1:A:112:GLY:C	1:A:113:GLY:N	1:A:113:GLY:CA	1:A:113:GLY:C	7	23.77
(1,357)	1:A:164:LYS:C	1:A:165:CYS:N	1:A:165:CYS:CA	1:A:165:CYS:C	15	23.75
(1,326)	1:A:132:PHE:N	1:A:132:PHE:CA	1:A:132:PHE:C	1:A:133:GLY:N	2	23.75
(1,357)	1:A:164:LYS:C	1:A:165:CYS:N	1:A:165:CYS:CA	1:A:165:CYS:C	20	23.72
(1,267)	1:A:102:LEU:C	1:A:103:ASP:N	1:A:103:ASP:CA	1:A:103:ASP:C	7	23.68
(1,312)	1:A:118:THR:C	1:A:119:ASP:N	1:A:119:ASP:CA	1:A:119:ASP:C	17	23.67
(1,267)	1:A:102:LEU:C	1:A:103:ASP:N	1:A:103:ASP:CA	1:A:103:ASP:C	11	23.67
(1,315)	1:A:119:ASP:C	1:A:120:HIS:N	1:A:120:HIS:CA	1:A:120:HIS:C	16	23.61
(1,360)	1:A:165:CYS:C	1:A:166:ASN:N	1:A:166:ASN:CA	1:A:166:ASN:C	12	23.58
(1,261)	1:A:100:PRO:C	1:A:101:GLU:N	1:A:101:GLU:CA	1:A:101:GLU:C	16	23.58
(1,225)	1:A:74:ASP:C	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	16	23.57
(1,270)	1:A:103:ASP:C	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	8	23.56
	<u> </u>	I	I.	<u> </u>	Continu	ed on next page



	ed from previous po		.		36 11	T70 1 .0 ()
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,108)	1:A:83:GLU:N	1:A:83:GLU:CA	1:A:83:GLU:C	1:A:84:PHE:N	6	23.56
(1,357)	1:A:164:LYS:C	1:A:165:CYS:N	1:A:165:CYS:CA	1:A:165:CYS:C	11	23.47
(1,270)	1:A:103:ASP:C	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	12	23.44
(1,209)	1:A:60:LYS:N	1:A:60:LYS:CA	1:A:60:LYS:C	1:A:61:GLU:N	1	23.43
(1,312)	1:A:118:THR:C	1:A:119:ASP:N	1:A:119:ASP:CA	1:A:119:ASP:C	9	23.41
(1,185)	1:A:20:ALA:N	1:A:20:ALA:CA	1:A:20:ALA:C	1:A:21:GLY:N	12	23.37
(1,236)	1:A:88:ILE:C	1:A:89:THR:N	1:A:89:THR:CA	1:A:89:THR:C	17	23.36
(1,307)	1:A:117:LEU:N	1:A:117:LEU:CA	1:A:117:LEU:C	1:A:118:THR:N	6	23.33
(1,176)	1:A:17:LYS:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	15	23.32
(1,257)	1:A:98:ALA:C	1:A:99:VAL:N	1:A:99:VAL:CA	1:A:99:VAL:C	11	23.31
(1,222)	1:A:73:HIS:C	1:A:74:ASP:N	1:A:74:ASP:CA	1:A:74:ASP:C	1	23.3
(1,209)	1:A:60:LYS:N	1:A:60:LYS:CA	1:A:60:LYS:C	1:A:61:GLU:N	17	23.3
(1,109)	1:A:83:GLU:C	1:A:84:PHE:N	1:A:84:PHE:CA	1:A:84:PHE:C	17	23.3
(1,78)	1:A:59:ASN:N	1:A:59:ASN:CA	1:A:59:ASN:C	1:A:60:LYS:N	6	23.29
(1,84)	1:A:68:LYS:N	1:A:68:LYS:CA	1:A:68:LYS:C	1:A:69:CYS:N	20	23.28
(1,267)	1:A:102:LEU:C	1:A:103:ASP:N	1:A:103:ASP:CA	1:A:103:ASP:C	19	23.18
(1,246)	1:A:95:PRO:N	1:A:95:PRO:CA	1:A:95:PRO:C	1:A:96:GLU:N	20	23.12
(1,291)	1:A:110:TYR:C	1:A:111:ARG:N	1:A:111:ARG:CA	1:A:111:ARG:C	19	23.07
(1,188)	1:A:21:GLY:N	1:A:21:GLY:CA	1:A:21:GLY:C	1:A:22:PRO:N	1	22.97
(1,252)	1:A:97:ILE:N	1:A:97:ILE:CA	1:A:97:ILE:C	1:A:98:ALA:N	9	22.95
(1,162)	1:A:2:ALA:C	1:A:3:ASP:N	1:A:3:ASP:CA	1:A:3:ASP:C	13	22.91
(1,106)	1:A:82:ILE:N	1:A:82:ILE:CA	1:A:82:ILE:C	1:A:83:GLU:N	14	22.9
(1,188)	1:A:21:GLY:N	1:A:21:GLY:CA	1:A:21:GLY:C	1:A:22:PRO:N	3	22.89
(1,308)	1:A:117:LEU:C	1:A:118:THR:N	1:A:118:THR:CA	1:A:118:THR:C	18	22.88
(1,161)	1:A:2:ALA:C	1:A:3:ASP:N	1:A:3:ASP:CA	1:A:3:ASP:C	14	22.88
(1,261)	1:A:100:PRO:C	1:A:101:GLU:N	1:A:101:GLU:CA	1:A:101:GLU:C	17	22.79
(1,223)	1:A:73:HIS:C	1:A:74:ASP:N	1:A:74:ASP:CA	1:A:74:ASP:C	19	22.78
(1,243)	1:A:93:THR:C	1:A:94:ALA:N	1:A:94:ALA:CA	1:A:94:ALA:C	14	22.76
(1,172)	1:A:16:LEU:N	1:A:16:LEU:CA	1:A:16:LEU:C	1:A:17:LYS:N	12	22.71
(1,340)	1:A:158:VAL:C	1:A:159:ILE:N	1:A:159:ILE:CA	1:A:159:ILE:C	15	22.68
(1,222)	1:A:73:HIS:C	1:A:74:ASP:N	1:A:74:ASP:CA	1:A:74:ASP:C	14	22.65
(1,352)	1:A:162:LYS:C	1:A:163:GLU:N	1:A:163:GLU:CA	1:A:163:GLU:C	9	22.62
(1,112)	1:A:85:ASP:N	1:A:85:ASP:CA	1:A:85:ASP:C	1:A:86:ILE:N	20	22.6
(1,82)	1:A:65:TRP:N	1:A:65:TRP:CA	1:A:65:TRP:C	1:A:66:PHE:N	13	22.59
(1,183)	1:A:19:ASN:C	1:A:20:ALA:N	1:A:20:ALA:CA	1:A:20:ALA:C	2	22.58
(1,330)	1:A:148:VAL:C	1:A:149:GLU:N	1:A:149:GLU:CA	1:A:149:GLU:C	17	22.53
(1,321)	1:A:130:PRO:C	1:A:131:LYS:N	1:A:131:LYS:CA	1:A:131:LYS:C	4	22.5
(1,201)	1:A:51:ASN:C	1:A:52:ASP:N	1:A:52:ASP:CA	1:A:52:ASP:C	7	22.5
(1,106)	1:A:82:ILE:N	1:A:82:ILE:CA	1:A:82:ILE:C	1:A:83:GLU:N	20	22.47
(1,163)	1:A:3:ASP:N	1:A:3:ASP:CA	1:A:3:ASP:C	1:A:4:GLU:N	8	22.46
(1,346)	1:A:160:GLN:C	1:A:161:HIS:N	1:A:161:HIS:CA	1:A:161:HIS:C	2	22.44
(1,321)	1:A:130:PRO:C	1:A:131:LYS:N	1:A:131:LYS:CA	1:A:131:LYS:C	1	22.42
(1,112)	1:A:85:ASP:N	1:A:85:ASP:CA	1:A:85:ASP:C	1:A:86:ILE:N	4	22.4
(1,352)	1:A:162:LYS:C	1:A:163:GLU:N	1:A:163:GLU:CA	1:A:163:GLU:C	2	22.39
(1,250)	1:A:96:GLU:C	1:A:97:ILE:N	1:A:97:ILE:CA	1:A:97:ILE:C	17	22.38
(1,109)	1:A:83:GLU:C	1:A:84:PHE:N	1:A:84:PHE:CA	1:A:84:PHE:C	18	22.36
(1,228)	1:A:75:LEU:C	1:A:76:LEU:N	1:A:76:LEU:CA	1:A:76:LEU:C	2	22.35
(1,255)	1:A:98:ALA:N	1:A:98:ALA:CA	1:A:98:ALA:C	1:A:99:VAL:N	12	22.28
(1,246)	1:A:95:PRO:N	1:A:95:PRO:CA	1:A:95:PRO:C	1:A:96:GLU:N	16	22.27
(1,225)	1:A:74:ASP:C	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	5	22.26
(1,207)	1:A:59:ASN:C	1:A:60:LYS:N	1:A:60:LYS:CA	1:A:60:LYS:C	6	22.19
(-,-0.)						ad an nant nasa



	ed from previous po	-				
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	$\textbf{Violation} \ (\ \circ \)$
(1,189)	1:A:21:GLY:N	1:A:21:GLY:CA	1:A:21:GLY:C	1:A:22:PRO:N	14	22.19
(1,82)	1:A:65:TRP:N	1:A:65:TRP:CA	1:A:65:TRP:C	1:A:66:PHE:N	7	22.15
(1,277)	1:A:106:THR:N	1:A:106:THR:CA	1:A:106:THR:C	1:A:107:ALA:N	20	22.15
(1,225)	1:A:74:ASP:C	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	10	22.12
(1,340)	1:A:158:VAL:C	1:A:159:ILE:N	1:A:159:ILE:CA	1:A:159:ILE:C	12	22.09
(1,362)	1:A:166:ASN:N	1:A:166:ASN:CA	1:A:166:ASN:C	1:A:167:GLN:N	8	22.07
(1,337)	1:A:157:GLY:C	1:A:158:VAL:N	1:A:158:VAL:CA	1:A:158:VAL:C	15	22.06
(1,315)	1:A:119:ASP:C	1:A:120:HIS:N	1:A:120:HIS:CA	1:A:120:HIS:C	13	22.06
(1,312)	1:A:118:THR:C	1:A:119:ASP:N	1:A:119:ASP:CA	1:A:119:ASP:C	1	22.06
(1,189)	1:A:21:GLY:N	1:A:21:GLY:CA	1:A:21:GLY:C	1:A:22:PRO:N	4	22.05
(1,204)	1:A:52:ASP:C	1:A:53:TRP:N	1:A:53:TRP:CA	1:A:53:TRP:C	4	22.04
(1,106)	1:A:82:ILE:N	1:A:82:ILE:CA	1:A:82:ILE:C	1:A:83:GLU:N	8	22.04
(1,209)	1:A:60:LYS:N	1:A:60:LYS:CA	1:A:60:LYS:C	1:A:61:GLU:N	20	22.01
(1,278)	1:A:106:THR:C	1:A:107:ALA:N	1:A:107:ALA:CA	1:A:107:ALA:C	8	21.99
(1,275)	1:A:105:LYS:C	1:A:106:THR:N	1:A:106:THR:CA	1:A:106:THR:C	12	21.94
(1,84)	1:A:68:LYS:N	1:A:68:LYS:CA	1:A:68:LYS:C	1:A:69:CYS:N	17	21.93
(1,112)	1:A:85:ASP:N	1:A:85:ASP:CA	1:A:85:ASP:C	1:A:86:ILE:N	13	21.89
(1,281)	1:A:107:ALA:C	1:A:108:LYS:N	1:A:108:LYS:CA	1:A:108:LYS:C	14	21.87
(1,222)	1:A:73:HIS:C	1:A:74:ASP:N	1:A:74:ASP:CA	1:A:74:ASP:C	16	21.83
(1,318)	1:A:127:ARG:C	1:A:128:ASN:N	1:A:128:ASN:CA	1:A:128:ASN:C	11	21.78
(1,287)	1:A:109:MET:C	1:A:110:TYR:N	1:A:110:TYR:CA	1:A:110:TYR:C	3	21.78
(1,188)	1:A:21:GLY:N	1:A:21:GLY:CA	1:A:21:GLY:C	1:A:22:PRO:N	6	21.78
(1,261)	1:A:100:PRO:C	1:A:101:GLU:N	1:A:101:GLU:CA	1:A:101:GLU:C	14	21.73
(1,291)	1:A:110:TYR:C	1:A:111:ARG:N	1:A:111:ARG:CA	1:A:111:ARG:C	1	21.7
(1,309)	1:A:117:LEU:C	1:A:118:THR:N	1:A:118:THR:CA	1:A:118:THR:C	14	21.61
(1,189)	1:A:21:GLY:N	1:A:21:GLY:CA	1:A:21:GLY:C	1:A:22:PRO:N	2	21.61
(1,290)	1:A:110:TYR:C	1:A:111:ARG:N	1:A:111:ARG:CA	1:A:111:ARG:C	5	21.6
(1,250)	1:A:96:GLU:C	1:A:97:ILE:N	1:A:97:ILE:CA	1:A:97:ILE:C	11	21.6
(1,315)	1:A:119:ASP:C	1:A:120:HIS:N	1:A:120:HIS:CA	1:A:120:HIS:C	19	21.54
(1,207)	1:A:59:ASN:C	1:A:60:LYS:N	1:A:60:LYS:CA	1:A:60:LYS:C	16	21.53
(1,349)	1:A:161:HIS:C	1:A:162:LYS:N	1:A:162:LYS:CA	1:A:162:LYS:C	9	21.52
(1,93)	1:A:72:ILE:C	1:A:73:HIS:N	1:A:73:HIS:CA	1:A:73:HIS:C	8	21.5
(1,312)	1:A:118:THR:C	1:A:119:ASP:N	1:A:119:ASP:CA	1:A:119:ASP:C	8	21.48
(1,363)	1:A:166:ASN:C	1:A:167:GLN:N	1:A:167:GLN:CA	1:A:167:GLN:C	3	21.46
(1,225)	1:A:74:ASP:C	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	9	21.42
(1,284)	1:A:108:LYS:C	1:A:109:MET:N	1:A:109:MET:CA	1:A:109:MET:C	12	21.32
(1,207)	1:A:59:ASN:C	1:A:60:LYS:N	1:A:60:LYS:CA	1:A:60:LYS:C	5	21.27
(1,252)	1:A:97:ILE:N	1:A:97:ILE:CA	1:A:97:ILE:C	1:A:98:ALA:N	2	21.24
(1,106)	1:A:82:ILE:N	1:A:82:ILE:CA	1:A:82:ILE:C	1:A:83:GLU:N	2	21.24
(1,162)	1:A:2:ALA:C	1:A:3:ASP:N	1:A:3:ASP:CA	1:A:3:ASP:C	18	21.22
(1,228)	1:A:75:LEU:C	1:A:76:LEU:N	1:A:76:LEU:CA	1:A:76:LEU:C	3	21.2
(1,176)	1:A:17:LYS:C	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	16	21.13
(1,172)	1:A:16:LEU:N	1:A:16:LEU:CA	1:A:16:LEU:C	1:A:17:LYS:N	6	21.09
(1,112)	1:A:85:ASP:N	1:A:85:ASP:CA	1:A:85:ASP:C	1:A:86:ILE:N	19	21.09
(1,250)	1:A:96:GLU:C	1:A:97:ILE:N	1:A:97:ILE:CA	1:A:97:ILE:C	6	21.05
(1,209)	1:A:60:LYS:N	1:A:60:LYS:CA	1:A:60:LYS:C	1:A:61:GLU:N	8	21.04
(1,246)	1:A:95:PRO:N	1:A:95:PRO:CA	1:A:95:PRO:C	1:A:96:GLU:N	10	21.02
(1,239)	1:A:91:PRO:C	1:A:92:THR:N	1:A:92:THR:CA	1:A:92:THR:C	12	20.81
(1,252)	1:A:97:ILE:N	1:A:97:ILE:CA	1:A:97:ILE:C	1:A:98:ALA:N	6	20.76
(1,168)	1:A:14:PRO:N	1:A:14:PRO:CA	1:A:14:PRO:C	1:A:15:VAL:N	19	20.75
(1,293)	1:A:111:ARG:C	1:A:112:GLY:N	1:A:112:GLY:CA	1:A:112:GLY:C	16	20.73



(1,281) 1:A-107-ALA-C 1:A-108:LYS:N 1:A-108-LYS:C 1:A-108-LYS:C 7 20.71	Key	$rac{ed\ from\ previous\ po}{\mathbf{Atom-1}}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,207)							· ,
1,244	· · /					9	
(1.84)	· · /			1:A:109:MET:CA		13	
(1,108 1:A:83:GIU:N	· · /		1:A:68:LYS:CA				
1,239 1:A:91-PRO:C	(' /	1:A:83:GLU:N	1:A:83:GLU:CA	1:A:83:GLU:C		12	
(1,243) 1:A:93:THR:C 1:A:94:ALA:N 1:A:94:ALA:CA 1:A:94:ALA:C 3 20.56	· · /						
(1,161) 1:A:2:ALA;C	/					1	
(1,312) 1:A:118:THR:C	/						
(1,307) 1:A:117:LEU:N 1:A:117:LEU:CA 1:A:117:LEU:C 1:A:118:THR:N 11 20.49 (1,312) 1:A:118:THR:C 1:A:119:ASP:N 1:A:119:ASP:CA 1:A:119:ASP:C 5 20.42 (1,297) 1:A:113:GU:C 1:A:114:LYS:N 1:A:114:LYS:CA 1:A:114:LYS:CC 9 20.39 (1,358) 1:A:164:LYS:C 1:A:165:CYS:N 1:A:165:CYS:CA 1:A:165:CYS:C 19 20.36 (1,343) 1:A:159:ILEC 1:A:166:GLN:N 1:A:166:GLN:C 1:A:166:GLN:C 4 20.32 (1,355) 1:A:163:GU:C 1:A:166:GLN:N 1:A:164:LYS:CA 1:A:166:GLN:C 4 20.32 (1,355) 1:A:19:PRO:C 1:A:103:ASP:N 1:A:103:ASP:CA 1:A:163:GLN:C 1 20.28 (1,267) 1:A:19:PRO:C 1:A:103:ASP:N 1:A:103:ASP:CA 1:A:103:ASP:C 14 20.24 (1,239) 1:A:9:PRO:C 1:A:02:THR:N 1:A:92:THR:CA 1:A:92:THR:C 1 20.28 (1,352) 1:A:162:LYS:C 1:A:163:GLU:N 1:A:163:GLU:CA 1:A:163:GLU:C 7 20.18 (1,352) 1:A:162:LYS:C 1:A:163:GLU:N 1:A:163:GLU:CA 1:A:163:GLU:C 7 20.18 (1,307) 1:A:117:LEU:N 1:A:117:LEU:CA 1:A:117:LEU:C 1:A:118:THR:N 2 20.14 (1,243) 1:A:93:THR:C 1:A:94:ALA:N 1:A:94:ALA:N 1:A:94:ALA:A 7 20.12 (1,228) 1:A:100:PRO:C 1:A:101:GLU:N 1:A:101:GLU:CA 1:A:101:GLU:C 15 20.11 (1,281) 1:A:100:PRO:C 1:A:101:GLU:N 1:A:101:GLU:CA 1:A:101:GLU:C 15 20.11 (1,281) 1:A:103:ACC 1:A:108:LYS:N 1:A:108:LYS:C 1:A:108:LYS:N 1:A:108:LYS:N 1:A:108:LYS:N 1:A:108:LYS:N 1:A:108:LYS:N 1:A:108:LYS:C 1:A:108:LYS:N 1:A:108:LYS:C 1:A:108:LYS:N 1:A:108:LYS:C 1:A:108:LYS:N 1:A:108:LYS:C 1:A:108:LYS:N 1:A:108:LYS:C 1:A:108:LYS:N 1:A:1	/	1:A:118:THR:C		1:A:119:ASP:CA		20	
(1,312)	/		1:A:117:LEU:CA				
(1,297) 1:A:113:GLY:C 1:A:114:LYS:N 1:A:14:LYS:C 1:A:164:LYS:C 19 20.39 (1,358) 1:A:164:LYS:C 1:A:165:CYS:N 1:A:165:CYS:C 1:A:165:CYS:C 19 20.36 (1,343) 1:A:159:LLE:C 1:A:166:GLN:N 1:A:169:GLN:C 1:A:160:CYS:C 19 20.36 (1,355) 1:A:163:GLU:C 1:A:164:LYS:N 1:A:164:LYS:C 1:A:164:LYS:C 11 20.28 (1,267) 1:A:102:LEU:C 1:A:103:ASP:N 1:A:103:ASP:C 1:A:103:ASP:C 14 20.24 (1,239) 1:A:192:LEU:C 1:A:103:ASP:N 1:A:103:ASP:C 1:A:103:ASP:C 14 20.24 (1,239) 1:A:162:LU:C 1:A:62:GLV:N 1:A:62:GLV:C 1:A:103:ASP:C 10 20.22 (1,352) 1:A:162:LVS:C 1:A:163:GLU:C 1:A:62:GLV:C 10 20.22 (1,352) 1:A:162:LVS:C 1:A:163:GLU:N 1:A:63:GLU:C 1:A:163:GLU:C 7 20.18 (1,307) 1:A:117:LEU:N 1:A:117:LEU:C 1:A:163:GLU:C 1:A:163:GLU:C 7 20.18 (1,307) 1:A:117:LEU:C 1:A:163:GLU:N 1:A:163:GLU:C 1:A:18:THR:N 2 20.14 (1,243) 1:A:93:THR:C 1:A:94:ALA:N 1:A:94:ALA:C 7 20.12 (1,228) 1:A:75:LEU:C 1:A:76:LEU:N 1:A:76:LEU:C 1:A:161:GLU:C 13 20.12 (1,228) 1:A:163:GLU:C 1:A:101:GLU:N 1:A:101:GLU:C 1:A:101:GLU:C 15 20.11 (1,281) 1:A:107:ALA:C 1:A:101:GLU:N 1:A:101:GLU:C 1:A:108:LYS:C 13 20.1 (1,78) 1:A:163:GLU:N 1:A:163:GLU:C 1:A:163:GLU:	/			1:A:119:ASP:CA			
(1,358) 1:A:164:LYS:C 1:A:165:CYS:N 1:A:165:CYS:C 19 20.36 (1,343) 1:A:159:ILE:C 1:A:160:GLN:N 1:A:160:GLN:C 4 20.32 (1,355) 1:A:163:GU:C 1:A:164:LYS:N 1:A:164:LYS:C 11 20.28 (1,267) 1:A:102:LEU:C 1:A:103:ASP:N 1:A:103:ASP:CA 1:A:103:ASP:C 14 20.24 (1,239) 1:A:91:PRO:C 1:A:92:THR:N 1:A:92:THR:CA 1:A:92:THR:C 1 20.24 (1,321) 1:A:162:LYS:C 1:A:163:GLU:N 1:A:163:GLU:CA 1:A:162:GLY:C 10 20.22 (1,352) 1:A:162:LYS:C 1:A:163:GLU:N 1:A:17:LEU:CA 1:A:17:LEU:C 1:A:18:THR:N 2 20.14 (1,307) 1:A:117:LEU:N 1:A:117:LEU:CA 1:A:117:LEU:C 1:A:18:THR:N 2 20.14 (1,243) 1:A:39:THR:C 1:A:163:GU:CA 1:A:164:AA:A 1:A:94:AA:A 7 20.12 (1,251) 1:A:163:GU:C 1:A:163:GU:C 1:A:163:GU:C 1:A:163:GU:C 1:A:163:GU:C 1:A:163:GU:C	(' /						
(1,343) 1:A:159:ILE:C 1:A:160:GLN:N 1:A:160:GLN:CA 1:A:160:GLN:C 4 20.32 (1,345) 1:A:163:GLU:C 1:A:164:LYS:N 1:A:164:LYS:CA 1:A:164:LYS:C 11 20.28 (1,267) 1:A:102:LEU:C 1:A:103:ASP:N 1:A:103:ASP:CA 1:A:103:ASP:C 14 20.24 (1,239) 1:A:91:PRO:C 1:A:92:THR:N 1:A:92:THR:CA 1:A:92:THR:C 1 20.24 (1,239) 1:A:162:LYS:C 1:A:62:GLY:N 1:A:62:GLY:CA 1:A:62:GLY:C 10 20.22 (1,352) 1:A:162:LYS:C 1:A:163:GLU:N 1:A:62:GLY:CA 1:A:62:GLY:C 10 20.22 (1,352) 1:A:162:LYS:C 1:A:163:GLU:N 1:A:163:GLU:CA 1:A:163:GLU:C 7 20.18 (1,307) 1:A:171:LEU:N 1:A:171:LEU:CA 1:A:117:LEU:C 1:A:118:THR:N 2 20.14 (1,243) 1:A:93:THR:C 1:A:94:ALA:N 1:A:94:ALA:CA 7 20.12 (1,228) 1:A:162:LYS:C 1:A:101:GLU:N 1:A:101:GLU:CA 1:A:163:GLU:C 13 20.12 (1,228) 1:A:163:GLU:C 1:A:101:GLU:N 1:A:101:GLU:CA 1:A:101:GLU:C 15 20.11 (1,281) 1:A:100:PRO:C 1:A:101:GLU:N 1:A:101:GLU:CA 1:A:101:GLU:C 15 20.11 (1,281) 1:A:100:PRO:C 1:A:101:GLU:N 1:A:101:GLU:CA 1:A:101:GLU:C 15 20.11 (1,281) 1:A:103:PRO:C 1:A:103:LYS:N 1:A:103:LYS:C 1:A:103:LYS:C 1:A:103:GU:N 1:A:163:GLU:N 1:A:163:GLU:CA 1:A:163:GLU:N 1:A:163:GLU:N 1:A:163:GLU:CA 1:A:103:LYS:N 13 20.07 (1,354) 1:A:163:GLU:N 1:A:163:GLU:CA 1:A:163:GLU:C 1:A:163:GLU:N 1:A:163:GLU:C 1:A:163:GLU:C 1:A:163:GLU:C 1:A:103:LYS:N 1 20.05 (1,239) 1:A:91:PRO:C 1:A:92:THR:N 1:A:92:THR:C 19 20.04 (1,161) 1:A:2:ALA:C 1:A:3:ASP:N 1:A:132:PHE:C 19 20.04 (1,308) 1:A:117:LEU:C 1:A:132:PHE:N 1:A:132:PHE:C 1 1:A:131:PHE:C 19 20.0 (1,324) 1:A:131:LYS:C 1:A:132:PHE:N 1:A:132:PHE:CA 1:A:3:ASP-C 1 1 20.01 (1,324) 1:A:133:LYS:C 1:A:132:PHE:N 1:A:132:PHE:CA 1:A:132:PHE:C 18 19.97 (1,109) 1:A:83:GLU:C 1:A:460:LYS:N 1:A:165:CYS:C 1:A:160:GLU:N 19 19.98 (1,170) 1:A:15:VAL:N 1:A:165:CYS:C 1:A:160:GLU:N 19 19.99 (1,209) 1:A:95:THR:C 1:A:166:GLN:N 1:A:165:CYS:C 1:A:160:GLU:N 19 19.99 (1,209) 1:A:83:GLU:C 1:A:84:PHE:N 1:A:18:THR:C 1:A:18:THR:C 5 19.88 (1,171) 1:A:15:VAL:N 1:A:165:CYS:C 1:A:160:GLN:N 19 19.99 (1,209) 1:A:49:1-THR:N 1:A:160:GLN:N 1:A:160:GLN:N 19 19.99 (1,209) 1:A:49:1-THR:N 1:A:160:GLN:N 1:A:160:GLN:C 11 19.77 (1,201) 1:A:160:GLN:N 1:A:160:GLN:	· · /					19	
(1,355) 1:A:163:GLU:C	· · /						
(1,267) 1:A:102:LEU:C	· · /						
(1,239) 1:A:91:PRO:C 1:A:92:THR:N 1:A:92:THR:CA 1:A:92:THR:C 1 20.24 (1,213) 1:A:61:GLU:C 1:A:62:GLY:N 1:A:62:GLY:CA 1:A:62:GLY:C 10 20.22 (1,332) 1:A:162:LYSC 1:A:163:GLU:N 1:A:163:GLU:CA 1:A:163:GLU:C 7 20.18 (1,307) 1:A:117:LEU:N 1:A:117:LEU:CA 1:A:117:LEU:C 1:A:118:THR:N 2 20.14 (1,233) 1:A:93:THR:C 1:A:76:LEU:N 1:A:76:LEU:CA 1:A:76:LEU:C 13 20.12 (1,228) 1:A:75:LEU:C 1:A:101:GLU:N 1:A:101:GLU:CA 1:A:101:GLU:C 13 20.12 (1,261) 1:A:100:PRO:C 1:A:108:LYS:N 1:A:108:LYS:C 13 20.11 (1,281) 1:A:107:ALA:C 1:A:108:LYS:N 1:A:108:LYS:C 13 20.11 (1,78) 1:A:59:ASN:N 1:A:308:LYS:C 1:A:108:LYS:N 1 20.01 (1,78) 1:A:163:GLU:N 1:A:163:GLU:CA 1:A:163:GLU:CA 1:A:163:GLU:CA 1:A:163:GLU:CA 1:A:163:GLU:CA 1:A:163:GLU:CA </td <td>· · /</td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td>	· · /						
(1,213) 1:A:61:GLU:C 1:A:62:GLY:N 1:A:62:GLY:CA 1:A:62:GLY:C 10 20.22 (1,352) 1:A:162:LYS:C 1:A:163:GLU:N 1:A:163:GLU:CA 1:A:163:GLU:C 7 20.18 (1,307) 1:A:117:LEU:N 1:A:117:LEU:CA 1:A:163:GLU:C 7 20.18 (1,243) 1:A:39:THR:C 1:A:494:ALA:N 1:A:494:ALA:CA 1:A:44:ALA:C 7 20.12 (1,243) 1:A:39:THR:C 1:A:494:ALA:N 1:A:494:ALA:CA 1:A:44:ALA:C 7 20.12 (1,243) 1:A:40:PRO:C 1:A:101:GLU:N 1:A:40:LEU:CA 1:A:476:LEU:C 13 20.12 (1,261) 1:A:107:ALA:C 1:A:101:GLU:N 1:A:101:GLU:CA 1:A:101:GLU:C 15 20.11 (1,281) 1:A:163:GLU:N 1:A:103:LYS:N 1:A:108:LYS:CA 1:A:108:LYS:N 13 20.01 (1,78) 1:A:25:ASN:N 1:A:163:GLU:C 1:A:408:LYS:N 13 20.01 (1,342) 1:A:163:GLU:N 1:A:163:GU:CA 1:A:163:GU:CA 1:A:163:GU:CA 1:A:163:GU:CA 1:A:163:GU:CA<	· · /						
1.352	· · /						
(1,307) 1:A:117:LEU:N 1:A:117:LEU:CA 1:A:117:LEU:C 1:A:118:THR:N 2 20.14 (1,243) 1:A:93:THR:C 1:A:94:ALA:N 1:A:94:ALA:CA 1:A:94:ALA:C 7 20.12 (1,243) 1:A:99:THR:C 1:A:49:ALA:N 1:A:49:ALA:CA 1:A:94:ALA:C 7 20.12 (1,261) 1:A:100:PRO:C 1:A:101:GLU:N 1:A:101:GLU:CA 1:A:108:LYS:C 13 20.11 (1,281) 1:A:100:PRO:C 1:A:108:LYS:N 1:A:108:LYS:CA 1:A:108:LYS:C 13 20.11 (1,78) 1:A:59:ASN:N 1:A:59:ASN:CA 1:A:59:ASN:C 1:A:60:LYS:N 13 20.07 (1,354) 1:A:163:GLU:N 1:A:163:GLU:CA 1:A:163:GLU:C 1:A:164:LYS:N 1 20.05 (1,239) 1:A:191:PRO:C 1:A:29:THR:N 1:A:163:GLU:C 1:A:164:LYS:N 1 20.05 (1,239) 1:A:157:LEU:C 1:A:133:PHE:N 1:A:143:SPHE:CA 1:A:135:THR:C 19 20.04 (1,308) 1:A:1451:LEU:C 1:A:143:PHE:N 1:A:143:PHE:CA 1:A:185:THR:C<	· · /						
(1,243) 1:A:93:THR:C 1:A:94:ALA:N 1:A:94:ALA:CA 1:A:94:ALA:C 7 20.12 (1,228) 1:A:75:LEU:C 1:A:76:LEU:N 1:A:76:LEU:CA 1:A:76:LEU:C 13 20.12 (1,261) 1:A:100:PRO:C 1:A:101:GLU:N 1:A:101:GLU:CA 1:A:101:GLU:C 15 20.11 (1,281) 1:A:107:ALA:C 1:A:108:LYS:N 1:A:108:LYS:CA 1:A:101:GLU:C 13 20.1 (1,78) 1:A:59:ASN:N 1:A:59:ASN:CA 1:A:108:LYS:CA 1:A:460:LYS:N 13 20.07 (1,354) 1:A:163:GLU:N 1:A:163:GLU:CA 1:A:163:GLU:C 1:A:164:LYS:N 1 20.05 (1,239) 1:A:91:PRO:C 1:A:292:THR:N 1:A:36:GLU:C 1:A:13:ASP:N 1:A:3:3ASP:CA 1:A:3:3ASP:C 11 20.05 (1,239) 1:A:117:EBU:C 1:A:118:THR:N 1:A:118:THR:CA 1:A:3:3SPIC 19 20.0 (1,308) 1:A:117:EBU:C 1:A:138:PHE:N 1:A:13:2PHE:CA 1:A:13:PHE:C 19 20.0 (1,308) 1:A:313:LYS:C 1:A:44:PHE:N	· · /						
(1,228) 1:A:75:LEU:C 1:A:76:LEU:N 1:A:76:LEU:CA 1:A:76:LEU:C 13 20.12 (1,261) 1:A:100:PRO:C 1:A:101:GLU:N 1:A:101:GLU:CA 1:A:101:GLU:C 15 20.11 (1,281) 1:A:107:ALA:C 1:A:108:LYS:N 1:A:108:LYS:CA 1:A:108:LYS:C 13 20.1 (1,78) 1:A:59:ASN:N 1:A:59:ASN:CA 1:A:59:ASN:C 1:A:60:LYS:N 13 20.07 (1,354) 1:A:163:GLU:N 1:A:163:GLU:CA 1:A:163:GLU:C 1:A:164:LYS:N 1 20.05 (1,239) 1:A:49:PRO:C 1:A:29:THR:N 1:A:29:THR:CA 1:A:36-BY:N 1 20.05 (1,341) 1:A:41:A:17:LEU:C 1:A:31.ASP:N 1:A:3:ASP:CA 1:A:3:ASP:C 11 20.01 (1,308) 1:A:131:LYS:C 1:A:132:PHE:N 1:A:313:PHE:CA 1:A:132:PHE:CA 1:A:418:THR:C 19 20.0 (1,324) 1:A:33:HS:C 1:A:44:ASP:N 1:A:43:2PHE:CA 1:A:44:ASP:C 18 19.97 (1,109) 1:A:83:GLU:C 1:A:44:ASP:N 1:A:44:ASP:CA	· · /					1	
(1,261) 1:A:100:PRO:C 1:A:101:GLU:N 1:A:101:GLU:CA 1:A:101:GLU:C 15 20.11 (1,281) 1:A:107:ALA:C 1:A:108:LYS:N 1:A:108:LYS:CA 1:A:108:LYS:C 13 20.1 (1,78) 1:A:59:ASN:N 1:A:59:ASN:CA 1:A:59:ASN:C 1:A:60:LYS:N 13 20.07 (1,354) 1:A:163:GLU:N 1:A:163:GLU:CA 1:A:163:GLU:C 1:A:164:LYS:N 1 20.05 (1,323) 1:A:91:PRO:C 1:A:29:THR:N 1:A:29:THR:CA 1:A:34-BY:CA 1:A:44-BY:CA 1:A:44-BY:CA 1:A:44-BY:CA 1:A:44-BY:CA 1:A:44-BY:CA 1:A:44-BY:CA 1:A:44-BY:CA 1:A:44-BY:CA 1:A:45-BY:CA 1:A:45-BY:CA 1:A:45-BY:CA 1:A:45-BY:CA 1:A:45-BY:CA 1:A:45-BY:CA <td> /</td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td>	/						
(1,281) 1:A:107:ALA:C 1:A:108:LYS:N 1:A:108:LYS:CA 1:A:108:LYS:C 13 20.1 (1,78) 1:A:59:ASN:N 1:A:59:ASN:CA 1:A:59:ASN:C 1:A:60:LYS:N 13 20.07 (1,354) 1:A:163:GLU:N 1:A:163:GLU:CA 1:A:163:GLU:C 1:A:164:LYS:N 1 20.05 (1,239) 1:A:91:PRO:C 1:A:92:THR:N 1:A:292:THR:CA 1:A:32:ASP:C 19 20.04 (1,161) 1:A:2:ALA:C 1:A:3:ASP:N 1:A:3:ASP:CA 1:A:3:ASP:C 11 20.01 (1,308) 1:A:117:LEU:C 1:A:118:THR:N 1:A:118:THR:CA 1:A:13:2PHE:C 19 20.0 (1,324) 1:A:131:LYS:C 1:A:132:PHE:N 1:A:132:PHE:CA 1:A:132:PHE:C 18 19.97 (1,109) 1:A:83:GLU:C 1:A:44:PHE:N 1:A:44:PHE:CA 1:A:132:PHE:C 18 19.97 (1,109) 1:A:60:LYS:C 1:A:74:ASP:N 1:A:74:ASP:C 10 19.93 (1,170) 1:A:15:VAL:N 1:A:15:VAL:CA 1:A:15:VAL:C 1:A:60:LEU:N 10 19.99<	· · /						
(1,78) 1:A:59:ASN:N 1:A:59:ASN:CA 1:A:59:ASN:C 1:A:60:LYS:N 13 20.07 (1,354) 1:A:163:GLU:N 1:A:163:GLU:CA 1:A:163:GLU:C 1:A:164:LYS:N 1 20.05 (1,239) 1:A:91:PRO:C 1:A:92:THR:N 1:A:92:THR:CA 1:A:92:THR:C 19 20.04 (1,161) 1:A:2:ALA:C 1:A:3:ASP:N 1:A:3:ASP:CA 1:A:3:ASP:C 11 20.01 (1,308) 1:A:117:LEU:C 1:A:118:THR:N 1:A:118:THR:CA 1:A:118:THR:C 19 20.0 (1,324) 1:A:131:LYS:C 1:A:132:PHE:N 1:A:432:PHE:CA 1:A:432:PHE:C 18 19.97 (1,109) 1:A:83:GLU:C 1:A:44:ASP:HE:N 1:A:44-ASP:HE:CA 1:A:44-ASP:C 3 19.94 (1,223) 1:A:73:HIS:C 1:A:74:ASP:N 1:A:74-ASP:C 10 19.93 (1,170) 1:A:15:VAL:N 1:A:15:VAL:CA 1:A:60:LYS:C 1:A:61:GLU:N 10 19.9 (1,209) 1:A:60:LYS:N 1:A:60:LYS:CA 1:A:65:CYS:CA 1:A:65:CYS:C 5 19.87 </td <td>· · /</td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td>	· · /						
(1,354) 1:A:163:GLU:N 1:A:163:GLU:CA 1:A:163:GLU:C 1:A:164:LYS:N 1 20.05 (1,239) 1:A:91:PRO:C 1:A:92:THR:N 1:A:92:THR:CA 1:A:92:THR:C 19 20.04 (1,161) 1:A:2:ALA:C 1:A:3:ASP:N 1:A:3:ASP:CA 1:A:3:ASP;C 11 20.01 (1,308) 1:A:117:LEU:C 1:A:118:THR:N 1:A:118:THR:CA 1:A:132:PHE:C 19 20.0 (1,324) 1:A:131:LYS:C 1:A:132:PHE:N 1:A:132:PHE:CA 1:A:432:PHE:C 18 19.97 (1,109) 1:A:83:GLU:C 1:A:84:PHE:N 1:A:44:ASP:CA 1:A:44:ASP:C 3 19.94 (1,223) 1:A:73:HIS:C 1:A:74:ASP:N 1:A:74:ASP:CA 1:A:16:LEU:N 10 19.93 (1,170) 1:A:15:VAL:N 1:A:15:VAL:CA 1:A:16:LEU:N 10 19.99 (1,239) 1:A:60:LYS:N 1:A:60:LYS:CA 1:A:60:LYS:C 1:A:61:GLU:N 9 19.89 (1,358) 1:A:16:LEU:SN 1:A:165:CYS:CA 1:A:165:CYS:CA 1:A:165:CYS:C 5 19.87 </td <td>(' /</td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td>	(' /						
(1,239) 1:A:91:PRO:C 1:A:92:THR:N 1:A:92:THR:CA 1:A:92:THR:C 19 20.04 (1,161) 1:A:2:ALA:C 1:A:3:ASP:N 1:A:3:ASP:CA 1:A:3:ASP:C 11 20.01 (1,308) 1:A:117:LEU:C 1:A:118:THR:N 1:A:118:THR:CA 1:A:118:THR:C 19 20.0 (1,324) 1:A:131:LYS:C 1:A:132:PHE:N 1:A:132:PHE:CA 1:A:132:PHE:C 18 19.97 (1,109) 1:A:83:GLU:C 1:A:84:PHE:N 1:A:44:ASP:CA 1:A:143:PHE:C 3 19.94 (1,223) 1:A:73:HIS:C 1:A:74:ASP:N 1:A:74:ASP:CA 1:A:16:LEU:N 10 19.93 (1,170) 1:A:15:VAL:N 1:A:15:VAL:CA 1:A:15:VAL:C 1:A:16:LEU:N 10 19.93 (1,209) 1:A:60:LYS:N 1:A:60:LYS:CA 1:A:61:GLEU:N 9 19.89 (1,358) 1:A:164:LYS:C 1:A:165:CYS:N 1:A:165:CYS:CA 1:A:165:CYS:CA 1:A:165:CYS:C 5 19.87 (1,309) 1:A:83:GLU:C 1:A:84:PHE:N 1:A:18:HR:CA 1:A:18:HR:CC <t< td=""><td>· · /</td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td></t<>	· · /						
(1,161) 1:A:2:ALA:C 1:A:3:ASP:N 1:A:3:ASP:CA 1:A:3:ASP:C 11 20.01 (1,308) 1:A:117:LEU:C 1:A:118:THR:N 1:A:118:THR:CA 1:A:118:THR:C 19 20.0 (1,324) 1:A:131:LYS:C 1:A:132:PHE:N 1:A:132:PHE:CA 1:A:132:PHE:C 18 19.97 (1,109) 1:A:83:GLU:C 1:A:484:PHE:N 1:A:484:PHE:CA 1:A:484:PHE:C 3 19.94 (1,223) 1:A:73:HIS:C 1:A:74:ASP:N 1:A:74:ASP:CA 1:A:74:ASP:C 10 19.93 (1,170) 1:A:15:VAL:N 1:A:15:VAL:CA 1:A:15:VAL:C 1:A:16:LEU:N 10 19.93 (1,209) 1:A:60:LYS:N 1:A:60:LYS:CA 1:A:60:LYS:C 1:A:60:LYS:C 1:A:61:GLU:N 9 19.89 (1,358) 1:A:164:LYS:C 1:A:165:CYS:N 1:A:165:CYS:CA 1:A:165:CYS:C 5 19.87 (1,109) 1:A:83:GLU:C 1:A:484:PHE:N 1:A:18*THR:CA 1:A:18*THR:C 5 19.83 (1,172) 1:A:16:LEU:N 1:A:16:LEU:CA 1:A:16:LEU:C <t< td=""><td>· · /</td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td></t<>	· · /						
(1,308) 1:A:117:LEU:C 1:A:118:THR:N 1:A:118:THR:CA 1:A:118:THR:C 19 20.0 (1,324) 1:A:131:LYS:C 1:A:132:PHE:N 1:A:132:PHE:CA 1:A:132:PHE:C 18 19.97 (1,109) 1:A:83:GLU:C 1:A:84:PHE:N 1:A:484:PHE:CA 1:A:484:PHE:C 3 19.94 (1,223) 1:A:73:HIS:C 1:A:74:ASP:N 1:A:74:ASP:CA 1:A:74:ASP:C 10 19.93 (1,170) 1:A:15:VAL:N 1:A:15:VAL:CA 1:A:15:VAL:C 1:A:16:LEU:N 10 19.93 (1,209) 1:A:60:LYS:N 1:A:60:LYS:CA 1:A:60:LYS:C 1:A:61:GLU:N 9 19.89 (1,358) 1:A:164:LYS:C 1:A:165:CYS:N 1:A:165:CYS:CA 1:A:165:CYS:C 5 19.87 (1,109) 1:A:83:GLU:C 1:A:84:PHE:N 1:A:84:PHE:CA 1:A:18:THR:C 5 19.83 (1,172) 1:A:16:LEU:N 1:A:16:LEU:CA 1:A:16:LEU:C 1:A:17:LYS:N 11 19.8 (1,343) 1:A:15:9iLE:C 1:A:160:GLN:N 1:A:160:GLN:CA 1:A:160:GLN:C	\ · /						
(1,324) 1:A:131:LYS:C 1:A:132:PHE:N 1:A:132:PHE:CA 1:A:132:PHE:C 18 19.97 (1,109) 1:A:83:GLU:C 1:A:84:PHE:N 1:A:84:PHE:CA 1:A:84:PHE:C 3 19.94 (1,223) 1:A:73:HIS:C 1:A:74:ASP:N 1:A:74:ASP:CA 1:A:74:ASP:C 10 19.93 (1,170) 1:A:15:VAL:N 1:A:15:VAL:CA 1:A:15:VAL:C 1:A:16:LEU:N 10 19.93 (1,209) 1:A:60:LYS:N 1:A:60:LYS:CA 1:A:60:LYS:C 1:A:61:GLU:N 9 19.89 (1,358) 1:A:164:LYS:C 1:A:165:CYS:N 1:A:165:CYS:CA 1:A:165:CYS:C 5 19.87 (1,109) 1:A:83:GLU:C 1:A:84:PHE:N 1:A:84:PHE:CA 1:A:118:THR:C 15 19.83 (1,172) 1:A:16:LEU:N 1:A:16:LEU:CA 1:A:16:LEU:C 1:A:17:LYS:N 11 19.8 (1,343) 1:A:15:PiLE:C 1:A:160:GLN:N 1:A:160:GLN:CA 1:A:160:GLN:C 14 19.79 (1,343) 1:A:15:PiLE:C 1:A:160:GLN:N 1:A:160:GLN:CA 1:A:160:GLN:C	\ ' /			I .		1	
(1,109) 1:A:83:GLU:C 1:A:84:PHE:N 1:A:84:PHE:CA 1:A:84:PHE:C 3 19.94 (1,223) 1:A:73:HIS:C 1:A:74:ASP:N 1:A:74:ASP:CA 1:A:74:ASP:C 10 19.93 (1,170) 1:A:15:VAL:N 1:A:15:VAL:CA 1:A:15:VAL:C 1:A:16:LEU:N 10 19.99 (1,209) 1:A:60:LYS:N 1:A:60:LYS:CA 1:A:60:LYS:C 1:A:61:GLU:N 9 19.89 (1,358) 1:A:164:LYS:C 1:A:165:CYS:N 1:A:165:CYS:CA 1:A:165:CYS:C 5 19.87 (1,109) 1:A:83:GLU:C 1:A:84:PHE:N 1:A:18:THR:CA 1:A:18:THR:C 15 19.87 (1,308) 1:A:117:LEU:C 1:A:118:THR:N 1:A:16:LEU:C 1:A:118:THR:C 5 19.83 (1,172) 1:A:16:LEU:N 1:A:16:LEU:CA 1:A:16:LEU:C 1:A:17:LYS:N 11 19.8 (1,343) 1:A:159:ILE:C 1:A:160:GLN:N 1:A:160:GLN:CA 1:A:184:PHE:C 10 19.79 (1,343) 1:A:159:ILE:C 1:A:160:GLN:N 1:A:160:GLN:CA 1:A:160:GLN:C	(' /						
(1,223) 1:A:73:HIS:C 1:A:74:ASP:N 1:A:74:ASP:CA 1:A:74:ASP:C 10 19.93 (1,170) 1:A:15:VAL:N 1:A:15:VAL:CA 1:A:15:VAL:C 1:A:16:LEU:N 10 19.99 (1,209) 1:A:60:LYS:N 1:A:60:LYS:CA 1:A:60:LYS:C 1:A:61:GLU:N 9 19.89 (1,358) 1:A:164:LYS:C 1:A:165:CYS:N 1:A:165:CYS:CA 1:A:165:CYS:C 5 19.87 (1,109) 1:A:83:GLU:C 1:A:484:PHE:N 1:A:484:PHE:CA 1:A:484:PHE:C 15 19.87 (1,308) 1:A:117:LEU:C 1:A:118:THR:N 1:A:118:THR:CA 1:A:118:THR:C 5 19.83 (1,172) 1:A:16:LEU:N 1:A:16:LEU:CA 1:A:16:LEU:C 1:A:17:LYS:N 11 19.8 (1,343) 1:A:159:ILE:C 1:A:160:GLN:N 1:A:160:GLN:CA 1:A:484:PHE:C 10 19.79 (1,343) 1:A:159:ILE:C 1:A:160:GLN:N 1:A:160:GLN:CA 1:A:160:GLN:C 11 19.77 (1,201) 1:A:51:ASN:C 1:A:52:ASP:N 1:A:52:ASP:CA 1:A:52:ASP:C	· · /						
(1,170) 1:A:15:VAL:N 1:A:15:VAL:CA 1:A:15:VAL:C 1:A:16:LEU:N 10 19.9 (1,209) 1:A:60:LYS:N 1:A:60:LYS:CA 1:A:60:LYS:C 1:A:61:GLU:N 9 19.89 (1,358) 1:A:164:LYS:C 1:A:165:CYS:N 1:A:165:CYS:CA 1:A:165:CYS:C 5 19.87 (1,109) 1:A:83:GLU:C 1:A:84:PHE:N 1:A:418:THR:CA 1:A:118:THR:C 5 19.87 (1,308) 1:A:17:LEU:C 1:A:118:THR:N 1:A:118:THR:CA 1:A:118:THR:C 5 19.83 (1,172) 1:A:16:LEU:N 1:A:16:LEU:CA 1:A:16:LEU:C 1:A:17:LYS:N 11 19.8 (1,343) 1:A:15:9:ILE:C 1:A:160:GLN:N 1:A:160:GLN:CA 1:A:160:GLN:C 14 19.79 (1,343) 1:A:83:GLU:C 1:A:84:PHE:N 1:A:84:PHE:CA 1:A:84:PHE:C 10 19.79 (1,343) 1:A:159:ILE:C 1:A:160:GLN:N 1:A:160:GLN:CA 1:A:160:GLN:C 14 19.79 (1,343) 1:A:159:ILE:C 1:A:160:GLN:N 1:A:160:GLN:CA 1:A:160:GLN:C	(' /		1:A:74:ASP:N	1:A:74:ASP:CA	1:A:74:ASP:C	10	
(1,209) 1:A:60:LYS:N 1:A:60:LYS:CA 1:A:60:LYS:C 1:A:61:GLU:N 9 19.89 (1,358) 1:A:164:LYS:C 1:A:165:CYS:N 1:A:165:CYS:CA 1:A:165:CYS:C 5 19.87 (1,109) 1:A:83:GLU:C 1:A:84:PHE:N 1:A:484:PHE:CA 1:A:484:PHE:C 15 19.87 (1,308) 1:A:117:LEU:C 1:A:118:THR:N 1:A:118:THR:CA 1:A:118:THR:C 5 19.83 (1,172) 1:A:16:LEU:N 1:A:16:LEU:CA 1:A:16:LEU:C 1:A:17:LYS:N 11 19.8 (1,343) 1:A:159:ILE:C 1:A:160:GLN:N 1:A:160:GLN:CA 1:A:160:GLN:C 14 19.79 (1,343) 1:A:159:ILE:C 1:A:160:GLN:N 1:A:160:GLN:CA 1:A:84:PHE:C 10 19.79 (1,343) 1:A:159:ILE:C 1:A:160:GLN:N 1:A:160:GLN:CA 1:A:160:GLN:C 11 19.77 (1,243) 1:A:51:ASN:C 1:A:52:ASP:N 1:A:52:ASP:CA 1:A:52:ASP:C 4 19.68 (1,267) 1:A:102:LEU:C 1:A:103:ASP:N 1:A:103:ASP:CA 1:A:103:ASP:C <td>· · /</td> <td></td> <td></td> <td>1:A:15:VAL:C</td> <td></td> <td>10</td> <td></td>	· · /			1:A:15:VAL:C		10	
(1,358) 1:A:164:LYS:C 1:A:165:CYS:N 1:A:165:CYS:CA 1:A:165:CYS:C 5 19.87 (1,109) 1:A:83:GLU:C 1:A:84:PHE:N 1:A:84:PHE:CA 1:A:84:PHE:C 15 19.87 (1,308) 1:A:117:LEU:C 1:A:118:THR:N 1:A:118:THR:CA 1:A:118:THR:C 5 19.83 (1,172) 1:A:16:LEU:N 1:A:16:LEU:CA 1:A:16:LEU:C 1:A:17:LYS:N 11 19.8 (1,343) 1:A:159:ILE:C 1:A:160:GLN:N 1:A:160:GLN:CA 1:A:160:GLN:C 14 19.79 (1,109) 1:A:83:GLU:C 1:A:160:GLN:N 1:A:484:PHE:CA 1:A:84:PHE:C 10 19.79 (1,343) 1:A:159:ILE:C 1:A:160:GLN:N 1:A:160:GLN:CA 1:A:160:GLN:C 11 19.79 (1,343) 1:A:159:ILE:C 1:A:160:GLN:N 1:A:160:GLN:CA 1:A:160:GLN:C 11 19.79 (1,243) 1:A:159:ILE:C 1:A:160:GLN:N 1:A:252:ASP:CA 1:A:52:ASP:C 4 19.77 (1,243) 1:A:93:THR:C 1:A:103:ASP:N 1:A:103:ASP:CA 1:A:103:ASP:	· · /	1:A:60:LYS:N					
(1,109) 1:A:83:GLU:C 1:A:84:PHE:N 1:A:84:PHE:CA 1:A:84:PHE:C 15 19.87 (1,308) 1:A:117:LEU:C 1:A:118:THR:N 1:A:118:THR:CA 1:A:118:THR:C 5 19.83 (1,172) 1:A:16:LEU:N 1:A:16:LEU:CA 1:A:16:LEU:C 1:A:17:LYS:N 11 19.8 (1,343) 1:A:159:ILE:C 1:A:160:GLN:N 1:A:160:GLN:CA 1:A:160:GLN:C 14 19.79 (1,109) 1:A:83:GLU:C 1:A:48:PHE:N 1:A:84:PHE:CA 1:A:84:PHE:C 10 19.79 (1,343) 1:A:159:ILE:C 1:A:160:GLN:N 1:A:160:GLN:CA 1:A:160:GLN:C 11 19.79 (1,343) 1:A:159:ILE:C 1:A:160:GLN:N 1:A:160:GLN:CA 1:A:160:GLN:C 11 19.77 (1,201) 1:A:51:ASN:C 1:A:52:ASP:N 1:A:52:ASP:CA 1:A:52:ASP:C 4 19.77 (1,243) 1:A:93:THR:C 1:A:103:ASP:N 1:A:103:ASP:CA 1:A:103:ASP:C 4 19.6 (1,239) 1:A:91:PRO:C 1:A:92:THR:N 1:A:92:THR:CA 1:A:92:THR:C	· · /	1:A:164:LYS:C	1:A:165:CYS:N	1:A:165:CYS:CA	1:A:165:CYS:C	5	19.87
(1,308) 1:A:117:LEU:C 1:A:118:THR:N 1:A:118:THR:CA 1:A:118:THR:C 5 19.83 (1,172) 1:A:16:LEU:N 1:A:16:LEU:CA 1:A:16:LEU:C 1:A:17:LYS:N 11 19.8 (1,343) 1:A:159:ILE:C 1:A:160:GLN:N 1:A:160:GLN:CA 1:A:160:GLN:C 14 19.79 (1,109) 1:A:83:GLU:C 1:A:484:PHE:N 1:A:84:PHE:CA 1:A:84:PHE:C 10 19.79 (1,343) 1:A:159:ILE:C 1:A:160:GLN:N 1:A:160:GLN:CA 1:A:160:GLN:C 11 19.77 (1,201) 1:A:51:ASN:C 1:A:52:ASP:N 1:A:52:ASP:CA 1:A:52:ASP:C 4 19.77 (1,243) 1:A:93:THR:C 1:A:94:ALA:N 1:A:94:ALA:CA 1:A:94:ALA:C 17 19.68 (1,267) 1:A:102:LEU:C 1:A:103:ASP:N 1:A:103:ASP:CA 1:A:103:ASP:C 4 19.6 (1,239) 1:A:91:PRO:C 1:A:92:THR:N 1:A:92:THR:CA 1:A:92:THR:C 15 19.6						15	
(1,172) 1:A:16:LEU:N 1:A:16:LEU:CA 1:A:16:LEU:C 1:A:17:LYS:N 11 19.8 (1,343) 1:A:159:ILE:C 1:A:160:GLN:N 1:A:160:GLN:CA 1:A:160:GLN:C 14 19.79 (1,109) 1:A:83:GLU:C 1:A:84:PHE:N 1:A:84:PHE:CA 1:A:84:PHE:C 10 19.79 (1,343) 1:A:159:ILE:C 1:A:160:GLN:N 1:A:160:GLN:CA 1:A:160:GLN:C 11 19.77 (1,201) 1:A:51:ASN:C 1:A:52:ASP:N 1:A:52:ASP:CA 1:A:52:ASP:C 4 19.77 (1,243) 1:A:93:THR:C 1:A:94:ALA:N 1:A:94:ALA:CA 1:A:94:ALA:C 17 19.68 (1,267) 1:A:102:LEU:C 1:A:103:ASP:N 1:A:103:ASP:CA 1:A:103:ASP:C 4 19.6 (1,239) 1:A:91:PRO:C 1:A:92:THR:N 1:A:92:THR:CA 1:A:92:THR:C 15 19.6	(1,308)	1:A:117:LEU:C	1:A:118:THR:N	1:A:118:THR:CA	1:A:118:THR:C	5	19.83
(1,343) 1:A:159:ILE:C 1:A:160:GLN:N 1:A:160:GLN:CA 1:A:160:GLN:C 14 19.79 (1,109) 1:A:83:GLU:C 1:A:84:PHE:N 1:A:84:PHE:CA 1:A:84:PHE:C 10 19.79 (1,343) 1:A:159:ILE:C 1:A:160:GLN:N 1:A:160:GLN:CA 1:A:160:GLN:C 11 19.77 (1,201) 1:A:51:ASN:C 1:A:52:ASP:N 1:A:52:ASP:CA 1:A:52:ASP:C 4 19.77 (1,243) 1:A:93:THR:C 1:A:94:ALA:N 1:A:94:ALA:CA 1:A:94:ALA:C 17 19.68 (1,267) 1:A:102:LEU:C 1:A:103:ASP:N 1:A:103:ASP:CA 1:A:103:ASP:C 4 19.6 (1,239) 1:A:91:PRO:C 1:A:92:THR:N 1:A:92:THR:CA 1:A:92:THR:C 15 19.6	/						
(1,109) 1:A:83:GLU:C 1:A:84:PHE:N 1:A:84:PHE:CA 1:A:84:PHE:C 10 19.79 (1,343) 1:A:159:ILE:C 1:A:160:GLN:N 1:A:160:GLN:CA 1:A:160:GLN:C 11 19.77 (1,201) 1:A:51:ASN:C 1:A:52:ASP:N 1:A:52:ASP:CA 1:A:52:ASP:C 4 19.77 (1,243) 1:A:93:THR:C 1:A:94:ALA:N 1:A:94:ALA:CA 1:A:94:ALA:C 17 19.68 (1,267) 1:A:102:LEU:C 1:A:103:ASP:N 1:A:103:ASP:CA 1:A:103:ASP:C 4 19.6 (1,239) 1:A:91:PRO:C 1:A:92:THR:N 1:A:92:THR:CA 1:A:92:THR:C 15 19.6	\ · /						
(1,343) 1:A:159:ILE:C 1:A:160:GLN:N 1:A:160:GLN:CA 1:A:160:GLN:C 11 19.77 (1,201) 1:A:51:ASN:C 1:A:52:ASP:N 1:A:52:ASP:CA 1:A:52:ASP:C 4 19.77 (1,243) 1:A:93:THR:C 1:A:94:ALA:N 1:A:94:ALA:CA 1:A:94:ALA:C 17 19.68 (1,267) 1:A:102:LEU:C 1:A:103:ASP:N 1:A:103:ASP:CA 1:A:103:ASP:C 4 19.6 (1,239) 1:A:91:PRO:C 1:A:92:THR:N 1:A:92:THR:CA 1:A:92:THR:C 15 19.6							
(1,201) 1:A:51:ASN:C 1:A:52:ASP:N 1:A:52:ASP:CA 1:A:52:ASP:C 4 19.77 (1,243) 1:A:93:THR:C 1:A:94:ALA:N 1:A:94:ALA:CA 1:A:94:ALA:C 17 19.68 (1,267) 1:A:102:LEU:C 1:A:103:ASP:N 1:A:103:ASP:CA 1:A:103:ASP:C 4 19.6 (1,239) 1:A:91:PRO:C 1:A:92:THR:N 1:A:92:THR:CA 1:A:92:THR:C 15 19.6	· · /						
(1,243) 1:A:93:THR:C 1:A:94:ALA:N 1:A:94:ALA:CA 1:A:94:ALA:C 17 19.68 (1,267) 1:A:102:LEU:C 1:A:103:ASP:N 1:A:103:ASP:CA 1:A:103:ASP:C 4 19.6 (1,239) 1:A:91:PRO:C 1:A:92:THR:N 1:A:92:THR:CA 1:A:92:THR:C 15 19.6							
(1,267) 1:A:102:LEU:C 1:A:103:ASP:N 1:A:103:ASP:CA 1:A:103:ASP:C 4 19.6 (1,239) 1:A:91:PRO:C 1:A:92:THR:N 1:A:92:THR:CA 1:A:92:THR:C 15 19.6							
(1,239) 1:A:91:PRO:C 1:A:92:THR:N 1:A:92:THR:CA 1:A:92:THR:C 15 19.6	· · /						
\ T O = O T T T T T T T T T	(1,326)	1:A:132:PHE:N	1:A:132:PHE:CA	1:A:132:PHE:C	1:A:133:GLY:N	8	19.53
(1,222) 1:A:73:HIS:C 1:A:74:ASP:N 1:A:74:ASP:CA 1:A:74:ASP:C 20 19.53	· · /			1		1	
(1,312) 1:A:118:THR:C 1:A:119:ASP:N 1:A:119:ASP:CA 1:A:119:ASP:C 12 19.5	· · /						
(1,185) 1:A:20:ALA:N 1:A:20:ALA:CA 1:A:20:ALA:C 1:A:21:GLY:N 5 19.5	· · /						
(1,78) 1:A:59:ASN:N 1:A:59:ASN:CA 1:A:59:ASN:C 1:A:60:LYS:N 5 19.45	· · /						
(1,222) 1:A:73:HIS:C 1:A:74:ASP:N 1:A:74:ASP:CA 1:A:74:ASP:C 18 19.44	· · /						



Key	$rac{ed\ from\ previous\ po}{\mathbf{Atom-1}}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,161)	1:A:2:ALA:C	1:A:3:ASP:N	1:A:3:ASP:CA	1:A:3:ASP:C	6	19.38
(1,290)	1:A:110:TYR:C	1:A:111:ARG:N	1:A:111:ARG:CA	1:A:111:ARG:C	2	19.37
(1,183)	1:A:19:ASN:C	1:A:20:ALA:N	1:A:20:ALA:CA	1:A:20:ALA:C	19	19.37
(1,207)	1:A:59:ASN:C	1:A:60:LYS:N	1:A:60:LYS:CA	1:A:60:LYS:C	8	19.31
(1,350)	1:A:161:HIS:C	1:A:162:LYS:N	1:A:162:LYS:CA	1:A:162:LYS:C	7	19.28
(1,287)	1:A:109:MET:C	1:A:110:TYR:N	1:A:110:TYR:CA	1:A:110:TYR:C	7	19.17
(1,267)	1:A:102:LEU:C	1:A:103:ASP:N	1:A:103:ASP:CA	1:A:103:ASP:C	15	19.15
(1,213)	1:A:61:GLU:C	1:A:62:GLY:N	1:A:62:GLY:CA	1:A:62:GLY:C	16	19.13
(1,78)	1:A:59:ASN:N	1:A:59:ASN:CA	1:A:59:ASN:C	1:A:60:LYS:N	15	19.11
(1,233)	1:A:87:PRO:N	1:A:87:PRO:CA	1:A:87:PRO:C	1:A:88:ILE:N	7	19.1
(1,82)	1:A:65:TRP:N	1:A:65:TRP:CA	1:A:65:TRP:C	1:A:66:PHE:N	4	19.09
(1,172)	1:A:16:LEU:N	1:A:16:LEU:CA	1:A:16:LEU:C	1:A:17:LYS:N	14	19.08
(1,161)	1:A:2:ALA:C	1:A:3:ASP:N	1:A:3:ASP:CA	1:A:3:ASP:C	19	19.06
(1,343)	1:A:159:ILE:C	1:A:160:GLN:N	1:A:160:GLN:CA	1:A:160:GLN:C	20	19.04
(1,239)	1:A:91:PRO:C	1:A:92:THR:N	1:A:92:THR:CA	1:A:92:THR:C	6	19.04
(1,209)	1:A:60:LYS:N	1:A:60:LYS:CA	1:A:60:LYS:C	1:A:61:GLU:N	3	19.04
(1,348)	1:A:161:HIS:N	1:A:161:HIS:CA	1:A:161:HIS:C	1:A:162:LYS:N	10	18.99
(1,172)	1:A:16:LEU:N	1:A:16:LEU:CA	1:A:16:LEU:C	1:A:17:LYS:N	13	18.95
(1,264)	1:A:101:GLU:C	1:A:102:LEU:N	1:A:102:LEU:CA	1:A:102:LEU:C	8	18.88
(1,282)	1:A:107:ALA:C	1:A:108:LYS:N	1:A:108:LYS:CA	1:A:108:LYS:C	9	18.85
(1,112)	1:A:85:ASP:N	1:A:85:ASP:CA	1:A:85:ASP:C	1:A:86:ILE:N	10	18.85
(1,222)	1:A:73:HIS:C	1:A:74:ASP:N	1:A:74:ASP:CA	1:A:74:ASP:C	13	18.84
(1,109)	1:A:83:GLU:C	1:A:84:PHE:N	1:A:84:PHE:CA	1:A:84:PHE:C	12	18.82
(1,213)	1:A:61:GLU:C	1:A:62:GLY:N	1:A:62:GLY:CA	1:A:62:GLY:C	20	18.74
(1,308)	1:A:117:LEU:C	1:A:118:THR:N	1:A:118:THR:CA	1:A:118:THR:C	4	18.65
(1,261)	1:A:100:PRO:C	1:A:101:GLU:N	1:A:101:GLU:CA	1:A:101:GLU:C	11	18.61
(1,261)	1:A:100:PRO:C	1:A:101:GLU:N	1:A:101:GLU:CA	1:A:101:GLU:C	5	18.58
(1,312)	1:A:118:THR:C	1:A:119:ASP:N	1:A:119:ASP:CA	1:A:119:ASP:C	2	18.57
(1,204)	1:A:52:ASP:C	1:A:53:TRP:N	1:A:53:TRP:CA	1:A:53:TRP:C	20	18.56
(1,256)	1:A:98:ALA:C	1:A:99:VAL:N	1:A:99:VAL:CA	1:A:99:VAL:C	9	18.52
(1,106)	1:A:82:ILE:N	1:A:82:ILE:CA	1:A:82:ILE:C	1:A:83:GLU:N	12	18.52
(1,293)	1:A:111:ARG:C	1:A:112:GLY:N	1:A:112:GLY:CA	1:A:112:GLY:C	4	18.45
(1,209)	1:A:60:LYS:N	1:A:60:LYS:CA	1:A:60:LYS:C	1:A:61:GLU:N	14	18.45
(1,280)	1:A:107:ALA:N	1:A:107:ALA:CA	1:A:107:ALA:C	1:A:108:LYS:N	3	18.44
(1,301)	1:A:115:ILE:N	1:A:115:ILE:CA	1:A:115:ILE:C	1:A:116:CYS:N	15	18.43
(1,185)	1:A:20:ALA:N	1:A:20:ALA:CA	1:A:20:ALA:C	1:A:21:GLY:N	14	18.38
(1,207)	1:A:59:ASN:C	1:A:60:LYS:N	1:A:60:LYS:CA	1:A:60:LYS:C	3	18.31
(1,243)	1:A:93:THR:C	1:A:94:ALA:N	1:A:94:ALA:CA	1:A:94:ALA:C	13	18.3
(1,223)	1:A:73:HIS:C	1:A:74:ASP:N	1:A:74:ASP:CA	1:A:74:ASP:C	5	18.21
(1,349)	1:A:161:HIS:C	1:A:162:LYS:N	1:A:162:LYS:CA	1:A:162:LYS:C	3	18.19
(1,294)	1:A:112:GLY:C	1:A:113:GLY:N	1:A:113:GLY:CA	1:A:113:GLY:C	19	18.14
(1,342)	1:A:159:ILE:N	1:A:159:ILE:CA	1:A:159:ILE:C	1:A:160:GLN:N	19	18.06
(1,267)	1:A:102:LEU:C	1:A:103:ASP:N	1:A:103:ASP:CA	1:A:103:ASP:C	5	18.01
(1,312)	1:A:118:THR:C	1:A:119:ASP:N	1:A:119:ASP:CA	1:A:119:ASP:C	15	17.93
(1,363)	1:A:166:ASN:C	1:A:167:GLN:N	1:A:167:GLN:CA	1:A:167:GLN:C	16	17.86
(1,223)	1:A:73:HIS:C	1:A:74:ASP:N	1:A:74:ASP:CA	1:A:74:ASP:C	2	17.76
(1,239)	1:A:91:PRO:C	1:A:92:THR:N	1:A:92:THR:CA	1:A:92:THR:C	8	17.75
(1,223)	1:A:73:HIS:C	1:A:74:ASP:N	1:A:74:ASP:CA	1:A:74:ASP:C	8	17.74
(1,223)	1:A:73:HIS:C	1:A:74:ASP:N	1:A:74:ASP:CA	1:A:74:ASP:C	4	17.73
(1,222)	1:A:73:HIS:C	1:A:74:ASP:N	1:A:74:ASP:CA	1:A:74:ASP:C	9	17.73
(1,84)	1:A:68:LYS:N	1:A:68:LYS:CA	1:A:68:LYS:C	1:A:69:CYS:N	18	17.69



	ed from previous pe	•	A		3.5	T7. 1
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (°)
(1,243)	1:A:93:THR:C	1:A:94:ALA:N	1:A:94:ALA:CA	1:A:94:ALA:C	11	17.61
(1,326)	1:A:132:PHE:N	1:A:132:PHE:CA	1:A:132:PHE:C	1:A:133:GLY:N	7	17.56
(1,312)	1:A:118:THR:C	1:A:119:ASP:N	1:A:119:ASP:CA	1:A:119:ASP:C	14	17.54
(1,188)	1:A:21:GLY:N	1:A:21:GLY:CA	1:A:21:GLY:C	1:A:22:PRO:N	16	17.54
(1,293)	1:A:111:ARG:C	1:A:112:GLY:N	1:A:112:GLY:CA	1:A:112:GLY:C	8	17.43
(1,222)	1:A:73:HIS:C	1:A:74:ASP:N	1:A:74:ASP:CA	1:A:74:ASP:C	3	17.3
(1,201)	1:A:51:ASN:C	1:A:52:ASP:N	1:A:52:ASP:CA	1:A:52:ASP:C	11	17.3
(1,239)	1:A:91:PRO:C	1:A:92:THR:N	1:A:92:THR:CA	1:A:92:THR:C	2	17.28
(1,267)	1:A:102:LEU:C	1:A:103:ASP:N	1:A:103:ASP:CA	1:A:103:ASP:C	2	17.26
(1,315)	1:A:119:ASP:C	1:A:120:HIS:N	1:A:120:HIS:CA	1:A:120:HIS:C	8	17.25
(1,247)	1:A:95:PRO:C	1:A:96:GLU:N	1:A:96:GLU:CA	1:A:96:GLU:C	4	17.24
(1,290)	1:A:110:TYR:C	1:A:111:ARG:N	1:A:111:ARG:CA	1:A:111:ARG:C	12	17.21
(1,82)	1:A:65:TRP:N	1:A:65:TRP:CA	1:A:65:TRP:C	1:A:66:PHE:N	3	17.18
(1,239)	1:A:91:PRO:C	1:A:92:THR:N	1:A:92:THR:CA	1:A:92:THR:C	3	17.13
(1,222)	1:A:73:HIS:C	1:A:74:ASP:N	1:A:74:ASP:CA	1:A:74:ASP:C	11	17.1
(1,109)	1:A:83:GLU:C	1:A:84:PHE:N	1:A:84:PHE:CA	1:A:84:PHE:C	13	17.07
(1,109)	1:A:83:GLU:C	1:A:84:PHE:N	1:A:84:PHE:CA	1:A:84:PHE:C	20	17.07
(1,207)	1:A:59:ASN:C	1:A:60:LYS:N	1:A:60:LYS:CA	1:A:60:LYS:C	14	17.06
(1,355)	1:A:163:GLU:C	1:A:164:LYS:N	1:A:164:LYS:CA	1:A:164:LYS:C	14	17.03
(1,239)	1:A:91:PRO:C	1:A:92:THR:N	1:A:92:THR:CA	1:A:92:THR:C	16	17.02
(1,207)	1:A:59:ASN:C	1:A:60:LYS:N	1:A:60:LYS:CA	1:A:60:LYS:C	17	17.0
(1,289)	1:A:110:TYR:N	1:A:110:TYR:CA	1:A:110:TYR:C	1:A:111:ARG:N	17	16.98
(1,261)	1:A:100:PRO:C	1:A:101:GLU:N	1:A:101:GLU:CA	1:A:101:GLU:C	9	16.92
(1,352)	1:A:162:LYS:C	1:A:163:GLU:N	1:A:163:GLU:CA	1:A:163:GLU:C	8	16.88
(1,286)	1:A:109:MET:N	1:A:109:MET:CA	1:A:109:MET:C	1:A:110:TYR:N	20	16.86
(1,357)	1:A:164:LYS:C	1:A:165:CYS:N	1:A:165:CYS:CA	1:A:165:CYS:C	13	16.85
(1,267)	1:A:102:LEU:C	1:A:103:ASP:N	1:A:103:ASP:CA	1:A:103:ASP:C	9	16.84
(1,108)	1:A:83:GLU:N	1:A:83:GLU:CA	1:A:83:GLU:C	1:A:84:PHE:N	13	16.84
(1,267)	1:A:102:LEU:C	1:A:103:ASP:N	1:A:103:ASP:CA	1:A:103:ASP:C	18	16.81
(1,162)	1:A:2:ALA:C	1:A:3:ASP:N	1:A:3:ASP:CA	1:A:3:ASP:C	3	16.6
(1,108)	1:A:83:GLU:N	1:A:83:GLU:CA	1:A:83:GLU:C	1:A:84:PHE:N	14	16.6
(1,290)	1:A:110:TYR:C	1:A:111:ARG:N	1:A:111:ARG:CA	1:A:111:ARG:C	3	16.55
(1,287)	1:A:109:MET:C	1:A:110:TYR:N	1:A:110:TYR:CA	1:A:110:TYR:C	1	16.53
(1,312)	1:A:118:THR:C	1:A:119:ASP:N	1:A:119:ASP:CA	1:A:119:ASP:C	18	16.51
(1,270)	1:A:103:ASP:C	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	20	16.5
(1,256)	1:A:98:ALA:C	1:A:99:VAL:N	1:A:99:VAL:CA	1:A:99:VAL:C	18	16.49
(1,163)	1:A:3:ASP:N	1:A:3:ASP:CA	1:A:3:ASP:C	1:A:4:GLU:N	16	16.47
(1,78)	1:A:59:ASN:N	1:A:59:ASN:CA	1:A:59:ASN:C	1:A:60:LYS:N	19	16.43
(1,307)	1:A:117:LEU:N	1:A:117:LEU:CA	1:A:117:LEU:C	1:A:118:THR:N	10	16.39
(1,209)	1:A:60:LYS:N	1:A:60:LYS:CA	1:A:60:LYS:C	1:A:61:GLU:N	5	16.39
(1,307)	1:A:117:LEU:N	1:A:117:LEU:CA	1:A:117:LEU:C	1:A:118:THR:N	15	16.14
(1,308)	1:A:117:LEU:C	1:A:118:THR:N	1:A:118:THR:CA	1:A:118:THR:C	10	16.1
(1,209)	1:A:60:LYS:N	1:A:60:LYS:CA	1:A:60:LYS:C	1:A:61:GLU:N	12	16.05
(1,82)	1:A:65:TRP:N	1:A:65:TRP:CA	1:A:65:TRP:C	1:A:66:PHE:N	1	16.03
(1,239)	1:A:91:PRO:C	1:A:92:THR:N	1:A:92:THR:CA	1:A:92:THR:C	20	16.03
(1,223)	1:A:73:HIS:C	1:A:74:ASP:N	1:A:74:ASP:CA	1:A:74:ASP:C	12	15.89
(1,352)	1:A:162:LYS:C	1:A:163:GLU:N	1:A:163:GLU:CA	1:A:163:GLU:C	14	15.82
(1,239)	1:A:91:PRO:C	1:A:92:THR:N	1:A:92:THR:CA	1:A:92:THR:C	17	15.77
(1,112)	1:A:85:ASP:N	1:A:85:ASP:CA	1:A:85:ASP:C	1:A:86:ILE:N	17	15.71
(1,222)	1:A:73:HIS:C	1:A:74:ASP:N	1:A:74:ASP:CA	1:A:74:ASP:C	6	15.69
(1,168)	1:A:14:PRO:N	1:A:14:PRO:CA	1:A:14:PRO:C	1:A:15:VAL:N	6	15.68
		1		1	Continu	ed on next page



	ed from previous po				36 11	T70 1 .0 ()
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (\circ)
(1,188)	1:A:21:GLY:N	1:A:21:GLY:CA	1:A:21:GLY:C	1:A:22:PRO:N	19	15.67
(1,207)	1:A:59:ASN:C	1:A:60:LYS:N	1:A:60:LYS:CA	1:A:60:LYS:C	1	15.66
(1,352)	1:A:162:LYS:C	1:A:163:GLU:N	1:A:163:GLU:CA	1:A:163:GLU:C	20	15.61
(1,289)	1:A:110:TYR:N	1:A:110:TYR:CA	1:A:110:TYR:C	1:A:111:ARG:N	2	15.6
(1,239)	1:A:91:PRO:C	1:A:92:THR:N	1:A:92:THR:CA	1:A:92:THR:C	13	15.6
(1,270)	1:A:103:ASP:C	1:A:104:GLY:N	1:A:104:GLY:CA	1:A:104:GLY:C	13	15.49
(1,352)	1:A:162:LYS:C	1:A:163:GLU:N	1:A:163:GLU:CA	1:A:163:GLU:C	13	15.42
(1,279)	1:A:106:THR:C	1:A:107:ALA:N	1:A:107:ALA:CA	1:A:107:ALA:C	4	15.42
(1,358)	1:A:164:LYS:C	1:A:165:CYS:N	1:A:165:CYS:CA	1:A:165:CYS:C	8	15.39
(1,256)	1:A:98:ALA:C	1:A:99:VAL:N	1:A:99:VAL:CA	1:A:99:VAL:C	12	15.39
(1,222)	1:A:73:HIS:C	1:A:74:ASP:N	1:A:74:ASP:CA	1:A:74:ASP:C	17	15.34
(1,361)	1:A:165:CYS:C	1:A:166:ASN:N	1:A:166:ASN:CA	1:A:166:ASN:C	1	15.32
(1,352)	1:A:162:LYS:C	1:A:163:GLU:N	1:A:163:GLU:CA	1:A:163:GLU:C	4	15.32
(1,289)	1:A:110:TYR:N	1:A:110:TYR:CA	1:A:110:TYR:C	1:A:111:ARG:N	20	15.29
(1,173)	1:A:16:LEU:C	1:A:17:LYS:N	1:A:17:LYS:CA	1:A:17:LYS:C	17	15.25
(1,170)	1:A:15:VAL:N	1:A:15:VAL:CA	1:A:15:VAL:C	1:A:16:LEU:N	14	15.19
(1,353)	1:A:162:LYS:C	1:A:163:GLU:N	1:A:163:GLU:CA	1:A:163:GLU:C	11	15.18
(1,188)	1:A:21:GLY:N	1:A:21:GLY:CA	1:A:21:GLY:C	1:A:22:PRO:N	11	15.16
(1,352)	1:A:162:LYS:C	1:A:163:GLU:N	1:A:163:GLU:CA	1:A:163:GLU:C	19	15.13
(1,290)	1:A:110:TYR:C	1:A:111:ARG:N	1:A:111:ARG:CA	1:A:111:ARG:C	8	15.13
(1,78)	1:A:59:ASN:N	1:A:59:ASN:CA	1:A:59:ASN:C	1:A:60:LYS:N	18	15.06
(1,223)	1:A:73:HIS:C	1:A:74:ASP:N	1:A:74:ASP:CA	1:A:74:ASP:C	7	15.05
(1,82)	1:A:65:TRP:N	1:A:65:TRP:CA	1:A:65:TRP:C	1:A:66:PHE:N	12	15.03
(1,267)	1:A:102:LEU:C	1:A:103:ASP:N	1:A:103:ASP:CA	1:A:103:ASP:C	1	15.0
(1,222)	1:A:73:HIS:C	1:A:74:ASP:N	1:A:74:ASP:CA	1:A:74:ASP:C	7	14.95
(1,209)	1:A:60:LYS:N	1:A:60:LYS:CA	1:A:60:LYS:C	1:A:61:GLU:N	16	14.94
(1,267)	1:A:102:LEU:C	1:A:103:ASP:N	1:A:103:ASP:CA	1:A:103:ASP:C	12	14.89
(1,343)	1:A:159:ILE:C	1:A:160:GLN:N	1:A:160:GLN:CA	1:A:160:GLN:C	8	14.88
(1,290)	1:A:110:TYR:C	1:A:111:ARG:N	1:A:111:ARG:CA	1:A:111:ARG:C	15	14.88
(1,290)	1:A:110:TYR:C	1:A:111:ARG:N	1:A:111:ARG:CA	1:A:111:ARG:C	6	14.87
(1,308)	1:A:117:LEU:C	1:A:118:THR:N	1:A:118:THR:CA	1:A:118:THR:C	2	14.86
(1,352)	1:A:162:LYS:C	1:A:163:GLU:N	1:A:163:GLU:CA	1:A:163:GLU:C	11	14.82
(1,343)	1:A:159:ILE:C	1:A:160:GLN:N	1:A:160:GLN:CA	1:A:160:GLN:C	7	14.72
(1,360)	1:A:165:CYS:C	1:A:166:ASN:N	1:A:166:ASN:CA	1:A:166:ASN:C	1	14.68
(1,223)	1:A:73:HIS:C	1:A:74:ASP:N	1:A:74:ASP:CA	1:A:74:ASP:C	17	14.66
(1,82)	1:A:65:TRP:N	1:A:65:TRP:CA	1:A:65:TRP:C	1:A:66:PHE:N	14	14.65
(1,357)	1:A:164:LYS:C	1:A:165:CYS:N	1:A:165:CYS:CA	1:A:165:CYS:C	8	14.61
(1,257)	1:A:98:ALA:C	1:A:99:VAL:N	1:A:99:VAL:CA	1:A:99:VAL:C	12	14.61
(1,353)	1:A:162:LYS:C	1:A:163:GLU:N	1:A:163:GLU:CA	1:A:163:GLU:C	13	14.58
(1,278)	1:A:106:THR:C	1:A:107:ALA:N	1:A:107:ALA:CA	1:A:107:ALA:C	4	14.58
(1,239)	1:A:91:PRO:C	1:A:92:THR:N	1:A:92:THR:CA	1:A:92:THR:C	18	14.56
(1,78)	1:A:59:ASN:N	1:A:59:ASN:CA	1:A:59:ASN:C	1:A:60:LYS:N	7	14.44
(1,363)	1:A:166:ASN:C	1:A:167:GLN:N	1:A:167:GLN:CA	1:A:167:GLN:C	9	14.4
(1,339)	1:A:91:PRO:C	1:A:92:THR:N	1:A:92:THR:CA	1:A:92:THR:C	10	14.38
(1,223)	1:A:73:HIS:C	1:A:74:ASP:N	1:A:74:ASP:CA	1:A:74:ASP:C	6	14.31
(1,279)	1:A:106:THR:C	1:A:107:ALA:N	1:A:107:ALA:CA	1:A:107:ALA:C	13	14.3
(1,326)	1:A:132:PHE:N	1:A:132:PHE:CA	1:A:132:PHE:C	1:A:133:GLY:N	13	14.28
(1,320) $(1,78)$	1:A:59:ASN:N	1:A:59:ASN:CA	1:A:59:ASN:C	1:A:60:LYS:N	11	14.27
(1,359)	1:A:165:CYS:N	1:A:165:CYS:CA	1:A:165:CYS:C	1:A:166:ASN:N	17	14.22
(1,389) $(1,189)$	1:A:21:GLY:N	1:A:21:GLY:CA	1:A:21:GLY:C	1:A:22:PRO:N	18	14.19
(1,353)	1:A:162:LYS:C	1:A:163:GLU:N	1:A:163:GLU:CA	1:A:163:GLU:C	14	14.18
(1,000)	11.102.1110.0	1.71.100.010.11	1.11.100.GEO.OA	1.71.100.GE0.0		14.10



Atom=4 Atom=2 Atom=3 Atom=4 Model Violation (c)		ed from previous po					
(1,202)							\ /
(1,22)	· · /						
(1,84)	(1,209)	1:A:60:LYS:N					14.15
1.4.68.1 1.4.68.1	(1,222)	1:A:73:HIS:C			1:A:74:ASP:C	12	14.11
(1,172)		1:A:68:LYS:N	1:A:68:LYS:CA	1:A:68:LYS:C	1:A:69:CYS:N	4	14.07
(1,326	(1,84)	1:A:68:LYS:N	1:A:68:LYS:CA	1:A:68:LYS:C	1:A:69:CYS:N	15	14.0
	(1,172)	1:A:16:LEU:N		1:A:16:LEU:C	1:A:17:LYS:N	4	13.99
(1,84)	(1,82)	1:A:65:TRP:N	1:A:65:TRP:CA	1:A:65:TRP:C	1:A:66:PHE:N	10	13.97
(1,367) 1:A:68:LYS:N	(1,326)	1:A:132:PHE:N	1:A:132:PHE:CA		1:A:133:GLY:N	1	13.95
(1,267) 1:A-102-LEU-C	(1,267)		1:A:103:ASP:N	1:A:103:ASP:CA	1:A:103:ASP:C	20	13.89
Color	(1,84)	1:A:68:LYS:N	1:A:68:LYS:CA	1:A:68:LYS:C			13.83
(1,237) 1:A:98.ALA:C	(1,267)		1:A:103:ASP:N	1:A:103:ASP:CA	1:A:103:ASP:C		13.75
(1,239)	(1,188)	1:A:21:GLY:N	1:A:21:GLY:CA	1:A:21:GLY:C	1:A:22:PRO:N		13.56
(1,283) 1:A:108:LYS:N	(1,257)	1:A:98:ALA:C	1:A:99:VAL:N	1:A:99:VAL:CA	1:A:99:VAL:C	18	13.51
(1,351)	(1,239)	1:A:91:PRO:C	1:A:92:THR:N	1:A:92:THR:CA	1:A:92:THR:C	9	13.5
(1,312) 1:A:118:THR:C 1:A:119:ASP:N 1:A:119:ASP:CA 1:A:119:ASP:C 10 13.41 (1,611) 1:A:2:ALA:C 1:A:3:ASP:N 1:A:3:ASP:CA 1:A:3:ASP:C 3 13.4 (1,347) 1:A:160:GUNC 1:A:161:HIS:N 1:A:161:HIS:CA 1:A:161:HIS:C 1:A:161:HIS:C 1:A:161:HIS:C 1:A:162:CYS:C 13.2 (1,358) 1:A:164:LYS:C 1:A:165:CYS:N 1:A:165:CYS:CA 1:A:119:ASP:C 13 13.15 (1,351) 1:A:167:ALA:N 1:A:107:ALA:CA 1:A:107:ALA:C 1:A:163:GU:CA 1:A	(1,283)	1:A:108:LYS:N	1:A:108:LYS:CA	1:A:108:LYS:C	1:A:109:MET:N	9	13.49
(1,161)	(1,351)	1:A:162:LYS:N	1:A:162:LYS:CA	1:A:162:LYS:C	1:A:163:GLU:N	6	13.44
(1,347)	(1,312)	1:A:118:THR:C	1:A:119:ASP:N	1:A:119:ASP:CA	1:A:119:ASP:C	10	13.41
(1,358) 1:A:164:LYS:C 1:A:165:CYS:N 1:A:165:CYS:CA 1:A:165:CYS:C 13 13.15 (1,312) 1:A:118:THR:C 1:A:119:ASP:N 1:A:119:ASP:CA 1:A:119:ASP:C 16 13.13 (1,280) 1:A:107:ALA:N 1:A:107:ALA:CA 1:A:108:LYS:N 13 13.13 (1,280) 1:A:162:LYS:C 1:A:163:GLU:N 1:A:163:GLU:CA 1:A:163:LYS:C 1 (1,343) 1:A:162:LYS:C 1:A:162:LYS:N 1:A:162:LYS:CA 1:A:162:LYS:C 12 13.05 (1,78) 1:A:59:ASN:N 1:A:59:ASN:CA 1:A:462:LYS:CA 1:A:162:LYS:C 12 13.05 (1,78) 1:A:59:ASN:N 1:A:59:ASN:CA 1:A:462:LYS:CA 1:A:60:LYS:CA 1:A:60:LY	(1,161)	1:A:2:ALA:C	1:A:3:ASP:N	1:A:3:ASP:CA	1:A:3:ASP:C	3	13.4
(1,312) 1:A:118:THR:C 1:A:107:ALA:OA 1:A:107:ALA:CA 1:A:107:ALA:CA 1:A:107:ALA:CA 1:A:107:ALA:CA 1:A:107:ALA:CA 1:A:108:LYS:N 13 13.13 (1,353) 1:A:162:LYS:C 1:A:163:GLU:N 1:A:163:GLU:CA 1:A:163:GLU:CS 8 13.12 (1,349) 1:A:161:HIS:C 1:A:162:LYS:N 1:A:162:LYS:CA 1:A:163:GLU:NS:C 12 13.05 (1,78) 1:A:59:ASN:N 1:A:59:ASN:CA 1:A:59:ASN:C 1:A:60:LYS:N 3 13.03 (1,299) 1:A:60:LYS:N 1:A:60:LYS:CA 1:A:60:LYS:C 11 13.02 (1,209) 1:A:60:LYS:N 1:A:60:LYS:CA 1:A:60:LYS:C 1:A:61:GLU:N 6 12.94 (1,223) 1:A:73:HIS:C 1:A:74:ASP:N 1:A:74:ASP:C 1:A:60:LYS:C 11 12.9 (1,112) 1:A:60:LYS:CA 1:A:60:LYS:C 1:A:60:LYS:C 1:A:61:GLE:N 1 12.9 (1,122) 1:A:60:LYS:CA 1:A:60:LYS:C 1:A:60:LYS:C 1:A:60:LYS:C 1:1:A:60:LYS:C 1:1:A:60:LYS:C 1:1:A:60:LYS:C 1:1:A:60:L	(1,347)	1:A:160:GLN:C	1:A:161:HIS:N	1:A:161:HIS:CA	1:A:161:HIS:C	12	13.2
	(1,358)	1:A:164:LYS:C	1:A:165:CYS:N	1:A:165:CYS:CA	1:A:165:CYS:C	13	13.15
(1,353) 1:A:162:LYS:C 1:A:163:GLU:N 1:A:163:GLU:CA 1:A:163:GLU:C 8 13.12 (1,349) 1:A:161:HIS:C 1:A:162:LYS:N 1:A:162:LYS:CA 1:A:162:LYS:C 12 13.05 (1,78) 1:A:59:ASN:N 1:A:59:ASN:CA 1:A:60:LYS:CA 1:A:60:LYS:N 3 13.03 (1,239) 1:A:91:PRO:C 1:A:60:LYS:CA 1:A:60:LYS:C 1:A:61:GLU:N 6 12.94 (1,223) 1:A:73:HIS:C 1:A:74:ASP:N 1:A:74:ASP:CA 1:A:74:ASP:C 11 13.02 (1,223) 1:A:73:HIS:C 1:A:74:ASP:N 1:A:74:ASP:CA 1:A:74:ASP:C 11 12.9 (1,211) 1:A:85:ASP:N 1:A:A:10:GU:N 1:A:10:GU:N 1 12.9 (1,211) 1:A:110:PRO:C 1:A:10:GU:N 1:A:10:GU:C 1 1 12.9 (1,211) 1:A:111:ARG:N 1:A:118:THR:CA 1:A:118:THR:C 1 1 12.9 (1,201) 1:A:15:ASN:C 1:A:118:THR:N 1:A:118:THR:CA 1:A:111:ARG:C 1 12.79	(1,312)	1:A:118:THR:C	1:A:119:ASP:N	1:A:119:ASP:CA	1:A:119:ASP:C	16	13.13
(1,349) 1:A:161:HIS:C 1:A:162:LYS:N 1:A:162:LYS:CA 1:A:162:LYS:C 12 13.05 (1,78) 1:A:59:ASN:N 1:A:59:ASN:CA 1:A:59:ASN:C 1:A:60:LYS:N 3 13.03 (1,239) 1:A:91:PRO:C 1:A:92:THR:CA 1:A:60:LYS:C 1:A:10:GU:C 1:A:10:GU:C 11 12.9 (1,121) 1:A:38:AS:ASP:N 1:A:48:AS:ASP:C 1:A:48:H:RTR:C 11 12.9 (1,261) 1:A:110:TYR:C 1:A:111:ARG:N 1:A:111:ARG:C 1:A:111:ARG:C 12 12.7 (1,291) 1:A:3:1A:SN:C 1:A:52:ASP:N 1:A:52:ASP:C 1:A:411:ASP:C 13 12.8 (1,201) 1:A:3:ASP:C	(1,280)	1:A:107:ALA:N	1:A:107:ALA:CA	1:A:107:ALA:C	1:A:108:LYS:N	13	13.13
(1,78) 1:A:59:ASN:N 1:A:59:ASN:CA 1:A:59:ASN:C 1:A:60:LYS:N 3 13.03 (1,239) 1:A:91:PRO:C 1:A:92:THR:N 1:A:60:LYS:CA 1:A:60:LYS:C 1:A:492:THR:C 11 13.02 (1,239) 1:A:60:LYS:N 1:A:60:LYS:CA 1:A:60:LYS:C 1:A:61:GLU:N 6 12.94 (1,223) 1:A:73:HIS:C 1:A:74:ASP:N 1:A:74:ASP:CA 1:A:74:ASP:CA 1:A:74:ASP:C 11 12.9 (1,112) 1:A:35:ASP:N 1:A:85:ASP:CA 1:A:85:ASP:C 1:A:74:ASP:C 1 12.9 (1,261) 1:A:100:PRO:C 1:A:101:GLU:N 1:A:101:GLU:CA 1:A:101:GLU:C 19 12.88 (1,308) 1:A:117:LEU:C 1:A:118:THR:N 1:A:118:THR:CA 1:A:118:THR:C 13 12.81 (1,201) 1:A:15:1ASN:C 1:A:111:ARG:N 1:A:111:ARG:CA 1:A:111:ARG:C 12 12.79 (1,223) 1:A:3*HS:C 1:A:3*HIS:C 1:A:4*SP:N 1:A:74*ASP:CA 1:A:4*CASP:C 10 12.75 (1,223) 1:A:3*GLU:N 1:A:	(1,353)	1:A:162:LYS:C	1:A:163:GLU:N	1:A:163:GLU:CA	1:A:163:GLU:C	8	13.12
(1,239) 1:A:91:PRO:C 1:A:92:THR:N 1:A:92:THR:CA 1:A:92:THR:C 11 13.02 (1,209) 1:A:60:LYS:N 1:A:60:LYS:CA 1:A:60:LYS:C 1:A:61:GLU:N 6 12.94 (1,223) 1:A:60:LYS:C 1:A:74:ASP:N 1:A:74:ASP:CA 1:A:74:ASP:CA 1:A:74:ASP:C 11 12.9 (1,112) 1:A:85:ASP:N 1:A:85:ASP:CA 1:A:85:ASP:C 1:A:80:LU:CA 1:A:80:LU:CA 1 12.9 (1,261) 1:A:10:OPRO:C 1:A:10:GU:N 1:A:101:GU:CA 1:A:810:GU:C 19 12.88 (1,308) 1:A:17:LEU:C 1:A:118:THR:N 1:A:18:THR:CA 1:A:118:THR:C 13 12.81 (1,291) 1:A:110:TYR:C 1:A:111:ARG:N 1:A:111:ARG:CA 1:A:111:ARG:C 12 12.79 (1,201) 1:A:310:TYR:C 1:A:474:ASP:N 1:A:452:ASP:CA 1:A:452:ASP:C 10 12.75 (1,223) 1:A:310:EU:D 1:A:16:LEU:C 1:A:17:LYS:N 18 12.63 (1,271) 1:A:16:LEU:C 1:A:10:TYR:N 1:A:10:TYR:CA <th< td=""><td>(1,349)</td><td>1:A:161:HIS:C</td><td>1:A:162:LYS:N</td><td>1:A:162:LYS:CA</td><td>1:A:162:LYS:C</td><td>12</td><td>13.05</td></th<>	(1,349)	1:A:161:HIS:C	1:A:162:LYS:N	1:A:162:LYS:CA	1:A:162:LYS:C	12	13.05
(1,209) 1:A:60:LYS:N 1:A:60:LYS:CA 1:A:60:LYS:C 1:A:61:GLU:N 6 12.94 (1,223) 1:A:73:HIS:C 1:A:74:ASP:N 1:A:74:ASP:CA 1:A:74:ASP:C 11 12.9 (1,112) 1:A:85:ASP:N 1:A:74:ASP:CA 1:A:485:ASP:C 11 12.9 (1,261) 1:A:10:GDU:CA 1:A:10:GLU:CA 1:A:10:GLU:C 19 12.88 (1,308) 1:A:117:LEU:C 1:A:118:THR:N 1:A:118:THR:CA 1:A:118:THR:C 13 12.81 (1,291) 1:A:110:TYR:C 1:A:111:ARG:N 1:A:111:ARG:CA 1:A:111:ARG:C 12 12.79 (1,201) 1:A:51:ASN:C 1:A:52:ASP:N 1:A:52:ASP:CA 1:A:452:ASP:C 10 12.75 (1,223) 1:A:73:HIS:C 1:A:74:ASP:N 1:A:44-ASP:CA 1:A:474:ASP:C 3 12.7 (1,223) 1:A:16:EU:N 1:A:16:EU:CA 1:A:410:TYR:C 3 12.7 (1,271) 1:A:16:EU:N 1:A:10:TYR:N 1:A:10:TYR:C 3 12.7 (1,342) 1:A:35:ASP:N 1:A:45:1	(1,78)	1:A:59:ASN:N	1:A:59:ASN:CA	1:A:59:ASN:C	1:A:60:LYS:N	3	13.03
(1,223) 1:A:73:HIS:C 1:A:74:ASP:N 1:A:74:ASP:CA 1:A:74:ASP:C 11 12.9 (1,112) 1:A:85:ASP:N 1:A:85:ASP:CA 1:A:85:ASP:C 1:A:86:ILE:N 1 12.9 (1,261) 1:A:100:PRO:C 1:A:101:GLU:N 1:A:101:GLU:C 19 12.88 (1,308) 1:A:117:LEU:C 1:A:118:THR:N 1:A:118:THR:CA 1:A:111:ARG:C 12 12.81 (1,291) 1:A:110:TYR:C 1:A:111:ARG:N 1:A:111:ARG:CA 1:A:111:ARG:C 12 12.79 (1,201) 1:A:51:ASN:C 1:A:4:111:ARG:N 1:A:452:ASP:CA 1:A:452:ASP:C 10 12.75 (1,223) 1:A:73:HIS:C 1:A:74:ASP:N 1:A:74:ASP:CA 1:A:74:ASP:C 3 12.7 (1,172) 1:A:16:LEU:N 1:A:16:LEU:CA 1:A:16:IEU:C 1:A:17:IYS:N 18 12.63 (1,287) 1:A:16:J9:ILE:N 1:A:10:TYR:C 1 12.62 (1,342) 1:A:159:ILE:N 1:A:16:LEU:CA 1:A:16:LEU:C 1:A:16:GLU:N 9 12.56 (1,207) <	(1,239)	1:A:91:PRO:C	1:A:92:THR:N	1:A:92:THR:CA	1:A:92:THR:C	11	13.02
(1,112) 1:A:85:ASP:N 1:A:85:ASP:CA 1:A:85:ASP:C 1:A:86:ILE:N 1 12.9 (1,261) 1:A:100:PRO:C 1:A:101:GLU:N 1:A:101:GLU:CA 1:A:101:GLU:C 19 12.88 (1,308) 1:A:117:LEU:C 1:A:118:THR:N 1:A:118:THR:CA 1:A:118:THR:C 13 12.81 (1,201) 1:A:110:TYR:C 1:A:111:ARG:N 1:A:111:ARG:CA 1:A:111:ARG:C 12 12.79 (1,201) 1:A:51:ASN:C 1:A:52:ASP:N 1:A:52:ASP:CA 1:A:52:ASP:C 10 12.75 (1,223) 1:A:73:HIS:C 1:A:74:ASP:N 1:A:74:ASP:CA 1:A:74:ASP:C 3 12.7 (1,172) 1:A:16:LEU:N 1:A:16:LEU:CA 1:A:10:TYR:CA 1:A:17:LYS:N 18 12.63 (1,287) 1:A:109:MET:C 1:A:110:TYR:N 1:A:110:TYR:CA 1:A:110:TYR:C 9 12.62 (1,342) 1:A:159:ILE:N 1:A:159:ILE:CA 1:A:159:ILE:C 1:A:160:GLN:N 9 12.56 (1,207) 1:A:59:ASN:C 1:A:60:LYS:N 1:A:160:LYS:CA 1:A:140:CLYS:C	(1,209)	1:A:60:LYS:N	1:A:60:LYS:CA	1:A:60:LYS:C	1:A:61:GLU:N	6	12.94
(1,261) 1:A:100:PRO:C 1:A:101:GLU:N 1:A:101:GLU:CA 1:A:101:GLU:C 19 12.88 (1,308) 1:A:117:LEU:C 1:A:118:THR:N 1:A:118:THR:CA 1:A:118:THR:C 13 12.81 (1,291) 1:A:110:TYR:C 1:A:111:ARG:N 1:A:111:ARG:CA 1:A:111:ARG:C 12 12.79 (1,201) 1:A:51:ASN:C 1:A:52:ASP:N 1:A:52:ASP:CA 1:A:52:ASP:C 10 12.75 (1,223) 1:A:73:HIS:C 1:A:74:ASP:N 1:A:74:ASP:CA 1:A:74:ASP:C 3 12.7 (1,172) 1:A:16:LEU:N 1:A:16:LEU:CA 1:A:16:LEU:C 1:A:17:LYS:N 18 12.63 (1,287) 1:A:199:MET:C 1:A:110:TYR:N 1:A:110:TYR:CA 1:A:16:CEU:C 9 12.62 (1,342) 1:A:159:ILE:N 1:A:159:ILE:CA 1:A:159:ILE:CA 1:A:159:ILE:CA 1:A:160:LYS:CA 1:A:160:GLN:N 9 12.56 (1,342) 1:A:33:ASP:N 1:A:33:ASP:CA 1:A:33:ASP:CA 1:A:460:LYS:CA 1:A:460:LYS:CA 1:A:460:LYS:CA 1:A:460:LYS:CA 1:A:460:LYS:CA 1:	(1,223)	1:A:73:HIS:C	1:A:74:ASP:N	1:A:74:ASP:CA	1:A:74:ASP:C	11	12.9
(1,308) 1:A:117:LEU:C 1:A:118:THR:N 1:A:118:THR:CA 1:A:118:THR:C 13 12.81 (1,291) 1:A:110:TYR:C 1:A:111:ARG:N 1:A:111:ARG:CA 1:A:111:ARG:C 12 12.79 (1,201) 1:A:51:ASN:C 1:A:52:ASP:N 1:A:52:ASP:CA 1:A:52:ASP:C 10 12.75 (1,223) 1:A:73:HIS:C 1:A:74:ASP:N 1:A:74:ASP:CA 1:A:74:ASP:C 3 12.7 (1,172) 1:A:16:LEU:N 1:A:16:LEU:CA 1:A:16:LEU:C 1:A:17:LYS:N 18 12.63 (1,287) 1:A:109:MET:C 1:A:110:TYR:N 1:A:110:TYR:CA 1:A:110:TYR:C 9 12.62 (1,342) 1:A:159:ILE:N 1:A:159:ILE:CA 1:A:110:TYR:CA 1:A:100:GN:N 9 12.56 (1,207) 1:A:459:ASN:C 1:A:60:LYS:N 1:A:60:LYS:CA 1:A:460:LYS:C 4 12.56 (1,267) 1:A:102:LEU:C 1:A:103:ASP:N 1:A:103:ASP:CA 1:A:103:ASP:CA 1:A:163:GLU:N 10 12.54 (1,351) 1:A:162:LYS:N 1:A:162:LYS:CA 1:A:162:LYS:C<	(1,112)	1:A:85:ASP:N	1:A:85:ASP:CA	1:A:85:ASP:C	1:A:86:ILE:N	1	12.9
(1,291) 1:A:110:TYR:C 1:A:111:ARG:N 1:A:111:ARG:CA 1:A:111:ARG:C 12 12.79 (1,201) 1:A:51:ASN:C 1:A:52:ASP:N 1:A:52:ASP:CA 1:A:52:ASP:C 10 12.75 (1,223) 1:A:73:HIS:C 1:A:74:ASP:N 1:A:74:ASP:CA 1:A:74:ASP:C 3 12.7 (1,172) 1:A:16:LEU:N 1:A:16:LEU:CA 1:A:16:LEU:C 1:A:17:LYS:N 18 12.63 (1,287) 1:A:109:MET:C 1:A:110:TYR:N 1:A:110:TYR:CA 1:A:110:TYR:C 9 12.62 (1,342) 1:A:159:ILE:N 1:A:159:ILE:CA 1:A:159:ILE:C 1:A:160:GLN:N 9 12.56 (1,207) 1:A:59:ASN:C 1:A:60:LYS:N 1:A:60:LYS:CA 1:A:460:LYS:C 4 12.56 (1,163) 1:A:3:3ASP:N 1:A:3:3ASP:CA 1:A:40:GLU:N 10 12.55 (1,267) 1:A:10:2LEU:C 1:A:103:ASP:N 1:A:103:ASP:CA 1:A:103:ASP:C 10 12.54 (1,351) 1:A:162:LYS:N 1:A:162:LYS:CA 1:A:162:LYS:C 1:A:163:GLU:N 2	(1,261)	1:A:100:PRO:C	1:A:101:GLU:N	1:A:101:GLU:CA	1:A:101:GLU:C	19	12.88
(1,291) 1:A:110:TYR:C 1:A:111:ARG:N 1:A:111:ARG:CA 1:A:111:ARG:C 12 12.79 (1,201) 1:A:51:ASN:C 1:A:52:ASP:N 1:A:52:ASP:CA 1:A:52:ASP:C 10 12.75 (1,223) 1:A:73:HIS:C 1:A:74:ASP:N 1:A:74:ASP:CA 1:A:74:ASP:C 3 12.7 (1,172) 1:A:16:LEU:N 1:A:16:LEU:CA 1:A:16:LEU:C 1:A:17:LYS:N 18 12.63 (1,287) 1:A:109:MET:C 1:A:110:TYR:N 1:A:110:TYR:CA 1:A:110:TYR:C 9 12.62 (1,342) 1:A:159:ILE:N 1:A:159:ILE:CA 1:A:159:ILE:C 1:A:160:GUN:N 9 12.56 (1,207) 1:A:59:ASN:C 1:A:60:LYS:N 1:A:60:LYS:CA 1:A:460:LYS:C 4 12.56 (1,163) 1:A:3:ASP:N 1:A:3:ASP:CA 1:A:4:33:ASP:C 10 12.55 (1,267) 1:A:10:LEU:C 1:A:103:ASP:N 1:A:103:ASP:C 10 12.54 (1,345) 1:A:162:LYS:N 1:A:162:LYS:CA 1:A:163:GLU:N 2 12.52 (1,188) <	(1,308)	1:A:117:LEU:C	1:A:118:THR:N	1:A:118:THR:CA	1:A:118:THR:C	13	12.81
(1,223) 1:A:73:HIS:C 1:A:74:ASP:N 1:A:74:ASP:CA 1:A:74:ASP:C 3 12.7 (1,172) 1:A:16:LEU:N 1:A:16:LEU:CA 1:A:16:LEU:C 1:A:17:LYS:N 18 12.63 (1,287) 1:A:109:MET:C 1:A:110:TYR:N 1:A:110:TYR:CA 1:A:110:TYR:C 9 12.62 (1,342) 1:A:159:ILE:N 1:A:159:ILE:CA 1:A:159:ILE:C 1:A:160:GLN:N 9 12.56 (1,207) 1:A:59:ASN:C 1:A:60:LYS:N 1:A:60:LYS:CA 1:A:460:LYS:C 4 12.56 (1,163) 1:A:3:ASP:N 1:A:3:ASP:CA 1:A:4:GLU:N 10 12.55 (1,267) 1:A:102:LEU:C 1:A:103:ASP:N 1:A:162:LYS:CA 1:A:162:LYS:C 1:A	, , ,	1:A:110:TYR:C	1:A:111:ARG:N	1:A:111:ARG:CA	1:A:111:ARG:C	12	12.79
(1,223) 1:A:73:HIS:C 1:A:74:ASP:N 1:A:74:ASP:CA 1:A:74:ASP:C 3 12.7 (1,172) 1:A:16:LEU:N 1:A:16:LEU:CA 1:A:16:LEU:C 1:A:17:LYS:N 18 12.63 (1,287) 1:A:109:MET:C 1:A:110:TYR:N 1:A:110:TYR:CA 1:A:110:TYR:C 9 12.62 (1,342) 1:A:159:ILE:N 1:A:159:ILE:CA 1:A:159:ILE:C 1:A:160:GLN:N 9 12.56 (1,207) 1:A:59:ASN:C 1:A:60:LYS:N 1:A:60:LYS:CA 1:A:60:LYS:C 4 12.56 (1,163) 1:A:3:ASP:N 1:A:3:ASP:CA 1:A:3:ASP:C 1:A:4:GLU:N 10 12.55 (1,267) 1:A:102:LEU:C 1:A:103:ASP:N 1:A:162:LYS:CA 1:A:162:LYS:C 1:A:163:GLU:N 2 12.54 (1,351) 1:A:162:LYS:N 1:A:162:LYS:CA 1:A:162:LYS:C 1:A:163:GLU:N 2 12.52 (1,188) 1:A:21:GLY:N 1:A:21:GLY:CA 1:A:21:GLY:C 1:A:22:PRO:N 13 12.49 (1,29) 1:A:83:GLU:C 1:A:484:PHE:N 1:A:484:PHE:CA <t< td=""><td>· · /</td><td>1:A:51:ASN:C</td><td>1:A:52:ASP:N</td><td>1:A:52:ASP:CA</td><td>1:A:52:ASP:C</td><td>10</td><td>12.75</td></t<>	· · /	1:A:51:ASN:C	1:A:52:ASP:N	1:A:52:ASP:CA	1:A:52:ASP:C	10	12.75
(1,287) 1:A:109:MET:C 1:A:110:TYR:N 1:A:110:TYR:CA 1:A:110:TYR:C 9 12.62 (1,342) 1:A:159:ILE:N 1:A:159:ILE:CA 1:A:159:ILE:C 1:A:160:GLN:N 9 12.56 (1,207) 1:A:59:ASN:C 1:A:60:LYS:N 1:A:60:LYS:CA 1:A:60:LYS:C 4 12.56 (1,163) 1:A:3:ASP:N 1:A:3:ASP:CA 1:A:4:GLU:N 10 12.55 (1,267) 1:A:102:LEU:C 1:A:103:ASP:N 1:A:103:ASP:CA 1:A:103:ASP:C 10 12.54 (1,267) 1:A:162:LYS:N 1:A:162:LYS:CA 1:A:162:LYS:C 1:A:163:GLU:N 2 12.54 (1,351) 1:A:162:LYS:N 1:A:162:LYS:CA 1:A:162:LYS:C 1:A:163:GLU:N 2 12.52 (1,188) 1:A:21:GLY:N 1:A:21:GLY:CA 1:A:162:LYS:C 1:A:163:GLU:N 2 12.52 (1,188) 1:A:21:GLY:N 1:A:21:GLY:CA 1:A:484:PHE:CA 1:A:22:PRO:N 13 12.49 (1,109) 1:A:83:GLU:C 1:A:484:PHE:N 1:A:84:PHE:CA 1:A:161:HIS:C 1 <th< td=""><td>(1,223)</td><td>1:A:73:HIS:C</td><td>1:A:74:ASP:N</td><td>1:A:74:ASP:CA</td><td>1:A:74:ASP:C</td><td>3</td><td>12.7</td></th<>	(1,223)	1:A:73:HIS:C	1:A:74:ASP:N	1:A:74:ASP:CA	1:A:74:ASP:C	3	12.7
(1,342) 1:A:159:ILE:N 1:A:159:ILE:CA 1:A:159:ILE:C 1:A:160:GLN:N 9 12.56 (1,207) 1:A:59:ASN:C 1:A:60:LYS:N 1:A:60:LYS:CA 1:A:60:LYS:C 4 12.56 (1,163) 1:A:3:ASP:N 1:A:3:ASP:CA 1:A:3:ASP:C 1:A:4:GLU:N 10 12.55 (1,267) 1:A:102:LEU:C 1:A:103:ASP:N 1:A:103:ASP:CA 1:A:103:ASP:C 10 12.54 (1,351) 1:A:162:LYS:N 1:A:162:LYS:CA 1:A:162:LYS:C 1:A:163:GLU:N 2 12.52 (1,188) 1:A:162:LYS:N 1:A:162:LYS:CA 1:A:162:LYS:C 1:A:163:GLU:N 2 12.52 (1,188) 1:A:162:LYS:N 1:A:162:LYS:C 1:A:163:GLU:N 2 12.52 (1,199) 1:A:83:GLU:C 1:A:84:PHE:N 1:A:84:PHE:CA 1:A:84:PHE:C 1 12.45 (1,346) 1:A:160:GLN:C 1:A:161:HIS:N 1:A:161:HIS:CA 1:A:161:HIS:C 13 12.31 (1,343) 1:A:159:ILE:C 1:A:160:GLN:N 1:A:160:GLN:CA 1:A:160:GLN:C 3	(1,172)	1:A:16:LEU:N	1:A:16:LEU:CA	1:A:16:LEU:C	1:A:17:LYS:N	18	12.63
(1,207) 1:A:59:ASN:C 1:A:60:LYS:N 1:A:60:LYS:CA 1:A:60:LYS:C 4 12.56 (1,163) 1:A:3:ASP:N 1:A:3:ASP:CA 1:A:3:ASP:C 1:A:4:GLU:N 10 12.55 (1,267) 1:A:102:LEU:C 1:A:103:ASP:N 1:A:103:ASP:CA 1:A:103:ASP:C 10 12.54 (1,351) 1:A:162:LYS:N 1:A:162:LYS:CA 1:A:162:LYS:C 1:A:163:GLU:N 2 12.52 (1,188) 1:A:21:GLY:N 1:A:21:GLY:CA 1:A:21:GLY:C 1:A:22:PRO:N 13 12.49 (1,109) 1:A:83:GLU:C 1:A:84:PHE:N 1:A:84:PHE:CA 1:A:84:PHE:C 1 12.45 (1,346) 1:A:160:GLN:C 1:A:161:HIS:N 1:A:161:HIS:CA 1:A:161:HIS:C 13 12.31 (1,343) 1:A:159:ILE:C 1:A:160:GLN:N 1:A:160:GLN:CA 1:A:160:GLN:C 3 12.29 (1,312) 1:A:118:THR:C 1:A:119:ASP:N 1:A:119:ASP:CA 1:A:119:ASP:C 3 12.28 (1,78) 1:A:73:HIS:C 1:A:74:ASP:N 1:A:74:ASP:CA 1:A:74:ASP:C	(1,287)	1:A:109:MET:C	1:A:110:TYR:N	1:A:110:TYR:CA	1:A:110:TYR:C	9	12.62
(1,163) 1:A:3:ASP:N 1:A:3:ASP:CA 1:A:3:ASP:C 1:A:4:GLU:N 10 12.55 (1,267) 1:A:102:LEU:C 1:A:103:ASP:N 1:A:103:ASP:CA 1:A:103:ASP:C 10 12.54 (1,351) 1:A:162:LYS:N 1:A:162:LYS:CA 1:A:162:LYS:C 1:A:163:GLU:N 2 12.52 (1,188) 1:A:21:GLY:N 1:A:21:GLY:CA 1:A:21:GLY:C 1:A:22:PRO:N 13 12.49 (1,109) 1:A:83:GLU:C 1:A:84:PHE:N 1:A:84:PHE:CA 1:A:84:PHE:C 1 12.45 (1,346) 1:A:160:GLN:C 1:A:161:HIS:N 1:A:161:HIS:CA 1:A:161:HIS:C 13 12.31 (1,343) 1:A:159:ILE:C 1:A:160:GLN:N 1:A:160:GLN:CA 1:A:160:GLN:C 3 12.29 (1,312) 1:A:118:THR:C 1:A:119:ASP:N 1:A:119:ASP:CA 1:A:119:ASP:C 3 12.28 (1,78) 1:A:59:ASN:N 1:A:59:ASN:CA 1:A:59:ASN:C 1:A:60:LYS:N 9 12.27 (1,223) 1:A:73:HIS:C 1:A:74:ASP:N 1:A:74:ASP:CA 1:A:74:ASP:C	(1,342)	1:A:159:ILE:N	1:A:159:ILE:CA	1:A:159:ILE:C	1:A:160:GLN:N	9	12.56
(1,267) 1:A:102:LEU:C 1:A:103:ASP:N 1:A:103:ASP:CA 1:A:103:ASP:C 10 12.54 (1,351) 1:A:162:LYS:N 1:A:162:LYS:CA 1:A:162:LYS:C 1:A:163:GLU:N 2 12.52 (1,188) 1:A:21:GLY:N 1:A:21:GLY:CA 1:A:21:GLY:C 1:A:22:PRO:N 13 12.49 (1,109) 1:A:83:GLU:C 1:A:84:PHE:N 1:A:84:PHE:CA 1:A:84:PHE:C 1 12.45 (1,346) 1:A:160:GLN:C 1:A:161:HIS:N 1:A:161:HIS:CA 1:A:161:HIS:C 13 12.31 (1,343) 1:A:159:ILE:C 1:A:160:GLN:N 1:A:160:GLN:CA 1:A:160:GLN:C 3 12.29 (1,312) 1:A:118:THR:C 1:A:119:ASP:N 1:A:119:ASP:CA 1:A:119:ASP:C 3 12.28 (1,78) 1:A:59:ASN:N 1:A:59:ASN:CA 1:A:59:ASN:C 1:A:60:LYS:N 9 12.27 (1,223) 1:A:73:HIS:C 1:A:74:ASP:N 1:A:74:ASP:CA 1:A:74:ASP:C 4 12.27 (1,222) 1:A:73:HIS:C 1:A:74:ASP:N 1:A:68:LYS:CA 1:A:68:LYS:N	(1,207)	1:A:59:ASN:C	1:A:60:LYS:N	1:A:60:LYS:CA	1:A:60:LYS:C	4	12.56
(1,351) 1:A:162:LYS:N 1:A:162:LYS:CA 1:A:162:LYS:C 1:A:163:GLU:N 2 12.52 (1,188) 1:A:21:GLY:N 1:A:21:GLY:CA 1:A:21:GLY:C 1:A:22:PRO:N 13 12.49 (1,109) 1:A:83:GLU:C 1:A:84:PHE:N 1:A:84:PHE:CA 1:A:84:PHE:C 1 12.45 (1,346) 1:A:160:GLN:C 1:A:161:HIS:N 1:A:161:HIS:CA 1:A:161:HIS:C 13 12.31 (1,343) 1:A:159:ILE:C 1:A:160:GLN:N 1:A:160:GLN:CA 1:A:160:GLN:C 3 12.29 (1,312) 1:A:118:THR:C 1:A:119:ASP:N 1:A:119:ASP:CA 1:A:119:ASP:C 3 12.28 (1,78) 1:A:59:ASN:N 1:A:59:ASN:CA 1:A:59:ASN:C 1:A:60:LYS:N 9 12.27 (1,223) 1:A:73:HIS:C 1:A:74:ASP:N 1:A:74:ASP:CA 1:A:74:ASP:C 4 12.27 (1,222) 1:A:73:HIS:C 1:A:74:ASP:N 1:A:74:ASP:CA 1:A:74:ASP:C 8 12.26 (1,84) 1:A:68:LYS:N 1:A:68:LYS:CA 1:A:68:LYS:C 1:A:69:CYS:N <t< td=""><td>(1,163)</td><td>1:A:3:ASP:N</td><td>1:A:3:ASP:CA</td><td>1:A:3:ASP:C</td><td>1:A:4:GLU:N</td><td>10</td><td>12.55</td></t<>	(1,163)	1:A:3:ASP:N	1:A:3:ASP:CA	1:A:3:ASP:C	1:A:4:GLU:N	10	12.55
(1,188) 1:A:21:GLY:N 1:A:21:GLY:CA 1:A:21:GLY:C 1:A:22:PRO:N 13 12.49 (1,109) 1:A:83:GLU:C 1:A:84:PHE:N 1:A:84:PHE:CA 1:A:84:PHE:C 1 12.45 (1,346) 1:A:160:GLN:C 1:A:161:HIS:N 1:A:161:HIS:CA 1:A:161:HIS:C 13 12.31 (1,343) 1:A:159:ILE:C 1:A:160:GLN:N 1:A:160:GLN:CA 1:A:160:GLN:C 3 12.29 (1,312) 1:A:118:THR:C 1:A:119:ASP:N 1:A:119:ASP:CA 1:A:119:ASP:C 3 12.28 (1,78) 1:A:59:ASN:N 1:A:59:ASN:CA 1:A:59:ASN:C 1:A:60:LYS:N 9 12.27 (1,223) 1:A:73:HIS:C 1:A:74:ASP:N 1:A:74:ASP:CA 1:A:74:ASP:C 9 12.27 (1,222) 1:A:73:HIS:C 1:A:74:ASP:N 1:A:74:ASP:CA 1:A:74:ASP:C 8 12.26 (1,84) 1:A:68:LYS:N 1:A:68:LYS:CA 1:A:68:LYS:C 1:A:68:LYS:CA 1:A:69:CYS:N 19 12.25	(1,267)	1:A:102:LEU:C	1:A:103:ASP:N	1:A:103:ASP:CA	1:A:103:ASP:C	10	12.54
(1,109) 1:A:83:GLU:C 1:A:84:PHE:N 1:A:84:PHE:CA 1:A:84:PHE:C 1 12.45 (1,346) 1:A:160:GLN:C 1:A:161:HIS:N 1:A:161:HIS:CA 1:A:161:HIS:C 13 12.31 (1,343) 1:A:159:ILE:C 1:A:160:GLN:N 1:A:160:GLN:CA 1:A:160:GLN:C 3 12.29 (1,312) 1:A:118:THR:C 1:A:119:ASP:N 1:A:119:ASP:CA 1:A:119:ASP:C 3 12.28 (1,78) 1:A:59:ASN:N 1:A:59:ASN:CA 1:A:59:ASN:C 1:A:60:LYS:N 9 12.27 (1,223) 1:A:73:HIS:C 1:A:74:ASP:N 1:A:74:ASP:CA 1:A:74:ASP:C 9 12.27 (1,222) 1:A:73:HIS:C 1:A:74:ASP:N 1:A:74:ASP:CA 1:A:74:ASP:C 8 12.26 (1,84) 1:A:68:LYS:N 1:A:68:LYS:CA 1:A:68:LYS:C 1:A:69:CYS:N 19 12.25	(1,351)	1:A:162:LYS:N	1:A:162:LYS:CA	1:A:162:LYS:C	1:A:163:GLU:N	2	12.52
(1,346) 1:A:160:GLN:C 1:A:161:HIS:N 1:A:161:HIS:CA 1:A:161:HIS:C 13 12.31 (1,343) 1:A:159:ILE:C 1:A:160:GLN:N 1:A:160:GLN:CA 1:A:160:GLN:C 3 12.29 (1,312) 1:A:118:THR:C 1:A:119:ASP:N 1:A:119:ASP:CA 1:A:119:ASP:C 3 12.28 (1,78) 1:A:59:ASN:N 1:A:59:ASN:CA 1:A:59:ASN:C 1:A:60:LYS:N 9 12.27 (1,223) 1:A:73:HIS:C 1:A:74:ASP:N 1:A:74:ASP:CA 1:A:74:ASP:C 9 12.27 (1,222) 1:A:73:HIS:C 1:A:74:ASP:N 1:A:74:ASP:CA 1:A:74:ASP:C 4 12.27 (1,222) 1:A:73:HIS:C 1:A:74:ASP:N 1:A:74:ASP:CA 1:A:74:ASP:C 8 12.26 (1,84) 1:A:68:LYS:N 1:A:68:LYS:CA 1:A:68:LYS:C 1:A:69:CYS:N 19 12.25	(1,188)	1:A:21:GLY:N	1:A:21:GLY:CA	1:A:21:GLY:C	1:A:22:PRO:N	13	12.49
(1,343) 1:A:159:ILE:C 1:A:160:GLN:N 1:A:160:GLN:CA 1:A:160:GLN:C 3 12.29 (1,312) 1:A:118:THR:C 1:A:119:ASP:N 1:A:119:ASP:CA 1:A:119:ASP:C 3 12.28 (1,78) 1:A:59:ASN:N 1:A:59:ASN:CA 1:A:59:ASN:C 1:A:60:LYS:N 9 12.27 (1,223) 1:A:73:HIS:C 1:A:74:ASP:N 1:A:74:ASP:CA 1:A:74:ASP:C 9 12.27 (1,222) 1:A:73:HIS:C 1:A:74:ASP:N 1:A:74:ASP:CA 1:A:74:ASP:C 4 12.27 (1,222) 1:A:73:HIS:C 1:A:74:ASP:N 1:A:74:ASP:CA 1:A:74:ASP:C 8 12.26 (1,84) 1:A:68:LYS:N 1:A:68:LYS:CA 1:A:68:LYS:C 1:A:69:CYS:N 19 12.25	(1,109)	1:A:83:GLU:C	1:A:84:PHE:N	1:A:84:PHE:CA	1:A:84:PHE:C	1	12.45
(1,312) 1:A:118:THR:C 1:A:119:ASP:N 1:A:119:ASP:CA 1:A:119:ASP:C 3 12.28 (1,78) 1:A:59:ASN:N 1:A:59:ASN:CA 1:A:59:ASN:C 1:A:60:LYS:N 9 12.27 (1,223) 1:A:73:HIS:C 1:A:74:ASP:N 1:A:74:ASP:CA 1:A:74:ASP:C 9 12.27 (1,222) 1:A:73:HIS:C 1:A:74:ASP:N 1:A:74:ASP:CA 1:A:74:ASP:C 4 12.27 (1,222) 1:A:73:HIS:C 1:A:74:ASP:N 1:A:74:ASP:CA 1:A:74:ASP:C 8 12.26 (1,84) 1:A:68:LYS:N 1:A:68:LYS:CA 1:A:68:LYS:C 1:A:69:CYS:N 19 12.25	(1,346)	1:A:160:GLN:C	1:A:161:HIS:N	1:A:161:HIS:CA	1:A:161:HIS:C	13	12.31
(1,78) 1:A:59:ASN:N 1:A:59:ASN:CA 1:A:59:ASN:C 1:A:60:LYS:N 9 12.27 (1,223) 1:A:73:HIS:C 1:A:74:ASP:N 1:A:74:ASP:CA 1:A:74:ASP:C 9 12.27 (1,222) 1:A:73:HIS:C 1:A:74:ASP:N 1:A:74:ASP:CA 1:A:74:ASP:C 4 12.27 (1,222) 1:A:73:HIS:C 1:A:74:ASP:N 1:A:74:ASP:CA 1:A:74:ASP:C 8 12.26 (1,84) 1:A:68:LYS:N 1:A:68:LYS:CA 1:A:68:LYS:C 1:A:69:CYS:N 19 12.25	(1,343)	1:A:159:ILE:C	1:A:160:GLN:N	1:A:160:GLN:CA	1:A:160:GLN:C		12.29
(1,223) 1:A:73:HIS:C 1:A:74:ASP:N 1:A:74:ASP:CA 1:A:74:ASP:C 9 12.27 (1,222) 1:A:73:HIS:C 1:A:74:ASP:N 1:A:74:ASP:CA 1:A:74:ASP:C 4 12.27 (1,222) 1:A:73:HIS:C 1:A:74:ASP:N 1:A:74:ASP:CA 1:A:74:ASP:C 8 12.26 (1,84) 1:A:68:LYS:N 1:A:68:LYS:CA 1:A:68:LYS:C 1:A:69:CYS:N 19 12.25	,					3	
(1,222) 1:A:73:HIS:C 1:A:74:ASP:N 1:A:74:ASP:CA 1:A:74:ASP:C 4 12.27 (1,222) 1:A:73:HIS:C 1:A:74:ASP:N 1:A:74:ASP:CA 1:A:74:ASP:C 8 12.26 (1,84) 1:A:68:LYS:N 1:A:68:LYS:CA 1:A:68:LYS:C 1:A:69:CYS:N 19 12.25	(1,78)	1:A:59:ASN:N	1:A:59:ASN:CA	1:A:59:ASN:C	1:A:60:LYS:N	9	12.27
(1,222) 1:A:73:HIS:C 1:A:74:ASP:N 1:A:74:ASP:CA 1:A:74:ASP:C 8 12.26 (1,84) 1:A:68:LYS:N 1:A:68:LYS:CA 1:A:68:LYS:C 1:A:69:CYS:N 19 12.25		1:A:73:HIS:C	1:A:74:ASP:N	1:A:74:ASP:CA	1:A:74:ASP:C	9	12.27
(1,84) 1:A:68:LYS:N 1:A:68:LYS:CA 1:A:68:LYS:C 1:A:69:CYS:N 19 12.25	(1,222)	1:A:73:HIS:C			1:A:74:ASP:C		12.27
	(1,222)						
	(1,84)	1:A:68:LYS:N	1:A:68:LYS:CA	1:A:68:LYS:C	1:A:69:CYS:N	19	12.25



	ed from previous po					
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	$\textbf{Violation} \ (\ \circ \)$
(1,222)	1:A:73:HIS:C	1:A:74:ASP:N	1:A:74:ASP:CA	1:A:74:ASP:C	2	12.24
(1,188)	1:A:21:GLY:N	1:A:21:GLY:CA	1:A:21:GLY:C	1:A:22:PRO:N	17	12.19
(1,207)	1:A:59:ASN:C	1:A:60:LYS:N	1:A:60:LYS:CA	1:A:60:LYS:C	7	12.1
(1,289)	1:A:110:TYR:N	1:A:110:TYR:CA	1:A:110:TYR:C	1:A:111:ARG:N	16	12.01
(1,312)	1:A:118:THR:C	1:A:119:ASP:N	1:A:119:ASP:CA	1:A:119:ASP:C	7	11.91
(1,222)	1:A:73:HIS:C	1:A:74:ASP:N	1:A:74:ASP:CA	1:A:74:ASP:C	5	11.79
(1,188)	1:A:21:GLY:N	1:A:21:GLY:CA	1:A:21:GLY:C	1:A:22:PRO:N	5	11.71
(1,239)	1:A:91:PRO:C	1:A:92:THR:N	1:A:92:THR:CA	1:A:92:THR:C	4	11.51
(1,257)	1:A:98:ALA:C	1:A:99:VAL:N	1:A:99:VAL:CA	1:A:99:VAL:C	9	11.48
(1,239)	1:A:91:PRO:C	1:A:92:THR:N	1:A:92:THR:CA	1:A:92:THR:C	14	11.38
(1,355)	1:A:163:GLU:C	1:A:164:LYS:N	1:A:164:LYS:CA	1:A:164:LYS:C	5	11.32
(1,78)	1:A:59:ASN:N	1:A:59:ASN:CA	1:A:59:ASN:C	1:A:60:LYS:N	17	11.26
(1,223)	1:A:73:HIS:C	1:A:74:ASP:N	1:A:74:ASP:CA	1:A:74:ASP:C	13	11.16
(1,188)	1:A:21:GLY:N	1:A:21:GLY:CA	1:A:21:GLY:C	1:A:22:PRO:N	9	11.16
(1,172)	1:A:16:LEU:N	1:A:16:LEU:CA	1:A:16:LEU:C	1:A:17:LYS:N	8	11.15
(1,250)	1:A:96:GLU:C	1:A:97:ILE:N	1:A:97:ILE:CA	1:A:97:ILE:C	2	10.95
(1,82)	1:A:65:TRP:N	1:A:65:TRP:CA	1:A:65:TRP:C	1:A:66:PHE:N	9	10.93
(1,288)	1:A:109:MET:C	1:A:110:TYR:N	1:A:110:TYR:CA	1:A:110:TYR:C	7	10.83
(1,84)	1:A:68:LYS:N	1:A:68:LYS:CA	1:A:68:LYS:C	1:A:69:CYS:N	1	10.81
(1,354)	1:A:163:GLU:N	1:A:163:GLU:CA	1:A:163:GLU:C	1:A:164:LYS:N	17	10.75
(1,78)	1:A:59:ASN:N	1:A:59:ASN:CA	1:A:59:ASN:C	1:A:60:LYS:N	14	10.67
(1,78)	1:A:59:ASN:N	1:A:59:ASN:CA	1:A:59:ASN:C	1:A:60:LYS:N	8	10.63
(1,162)	1:A:2:ALA:C	1:A:3:ASP:N	1:A:3:ASP:CA	1:A:3:ASP:C	6	10.62
(1,223)	1:A:73:HIS:C	1:A:74:ASP:N	1:A:74:ASP:CA	1:A:74:ASP:C	18	10.56
(1,188)	1:A:21:GLY:N	1:A:21:GLY:CA	1:A:21:GLY:C	1:A:22:PRO:N	12	10.5
(1,223)	1:A:73:HIS:C	1:A:74:ASP:N	1:A:74:ASP:CA	1:A:74:ASP:C	20	10.47
(1,278)	1:A:106:THR:C	1:A:107:ALA:N	1:A:107:ALA:CA	1:A:107:ALA:C	19	10.43
(1,178)	1:A:18:THR:N	1:A:18:THR:CA	1:A:18:THR:C	1:A:19:ASN:N	16	10.2
(1,255)	1:A:98:ALA:N	1:A:98:ALA:CA	1:A:98:ALA:C	1:A:99:VAL:N	18	10.19
(1,84)	1:A:68:LYS:N	1:A:68:LYS:CA	1:A:68:LYS:C	1:A:69:CYS:N	8	10.16
(1,357)	1:A:164:LYS:C	1:A:165:CYS:N	1:A:165:CYS:CA	1:A:165:CYS:C	5	10.13
(1,78)	1:A:59:ASN:N	1:A:59:ASN:CA	1:A:59:ASN:C	1:A:60:LYS:N	10	10.12
(1,308)	1:A:117:LEU:C	1:A:118:THR:N	1:A:118:THR:CA	1:A:118:THR:C	7	10.1
(1,222)	1:A:73:HIS:C	1:A:74:ASP:N	1:A:74:ASP:CA	1:A:74:ASP:C	10	10.07
(1,267)	1:A:102:LEU:C	1:A:103:ASP:N	1:A:103:ASP:CA	1:A:103:ASP:C	8	10.06
(1,281)	1:A:107:ALA:C	1:A:108:LYS:N	1:A:108:LYS:CA	1:A:108:LYS:C	8	9.99
(1,268)	1:A:102:LEU:C	1:A:103:ASP:N	1:A:103:ASP:CA	1:A:103:ASP:C	8	9.94
(1,82)	1:A:65:TRP:N	1:A:65:TRP:CA	1:A:65:TRP:C	1:A:66:PHE:N	20	9.91
(1,360)	1:A:165:CYS:C	1:A:166:ASN:N	1:A:166:ASN:CA	1:A:166:ASN:C	11	9.85
(1,209)	1:A:60:LYS:N	1:A:60:LYS:CA	1:A:60:LYS:C	1:A:61:GLU:N	10	9.85
(1,353)	1:A:162:LYS:C	1:A:163:GLU:N	1:A:163:GLU:CA	1:A:163:GLU:C	7	9.82
(1,78)	1:A:59:ASN:N	1:A:59:ASN:CA	1:A:59:ASN:C	1:A:60:LYS:N	2	9.8
(1,315)	1:A:119:ASP:C	1:A:120:HIS:N	1:A:120:HIS:CA	1:A:120:HIS:C	10	9.77
(1,357)	1:A:164:LYS:C	1:A:165:CYS:N	1:A:165:CYS:CA	1:A:165:CYS:C	19	9.64
(1,189)	1:A:21:GLY:N	1:A:21:GLY:CA	1:A:21:GLY:C	1:A:22:PRO:N	8	9.55
(1,162)	1:A:2:ALA:C	1:A:3:ASP:N	1:A:3:ASP:CA	1:A:3:ASP:C	1	9.48
(1,102) $(1,285)$	1:A:108:LYS:C	1:A:109:MET:N	1:A:109:MET:CA	1:A:109:MET:C	13	9.37
(1,84)	1:A:68:LYS:N	1:A:68:LYS:CA	1:A:68:LYS:C	1:A:69:CYS:N	6	9.3
(1,78)	1:A:59:ASN:N	1:A:59:ASN:CA	1:A:59:ASN:C	1:A:60:LYS:N	20	9.29
(1,18) $(1,282)$	1:A:107:ALA:C	1:A:108:LYS:N	1:A:108:LYS:CA	1:A:108:LYS:C	7	9.29
(1,351)	1:A:162:LYS:N	1:A:162:LYS:CA	1:A:162:LYS:C	1:A:163:GLU:N	20	9.21
(1,001)	1.11.102.1110.11	1.11.102.110.011	1.11.102.110.0	1.11.100.010.11		ed on nert nage



	ed from previous po				35	T70 1 . 0
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,259)	1:A:99:VAL:N	1:A:99:VAL:CA	1:A:99:VAL:C	1:A:100:PRO:N	11	9.21
(1,280)	1:A:107:ALA:N	1:A:107:ALA:CA	1:A:107:ALA:C	1:A:108:LYS:N	12	9.08
(1,161)	1:A:2:ALA:C	1:A:3:ASP:N	1:A:3:ASP:CA	1:A:3:ASP:C	18	8.78
(1,267)	1:A:102:LEU:C	1:A:103:ASP:N	1:A:103:ASP:CA	1:A:103:ASP:C	6	8.66
(1,364)	1:A:166:ASN:C	1:A:167:GLN:N	1:A:167:GLN:CA	1:A:167:GLN:C	3	8.54
(1,223)	1:A:73:HIS:C	1:A:74:ASP:N	1:A:74:ASP:CA	1:A:74:ASP:C	16	8.17
(1,282)	1:A:107:ALA:C	1:A:108:LYS:N	1:A:108:LYS:CA	1:A:108:LYS:C	14	8.13
(1,84)	1:A:68:LYS:N	1:A:68:LYS:CA	1:A:68:LYS:C	1:A:69:CYS:N	13	7.95
(1,259)	1:A:99:VAL:N	1:A:99:VAL:CA	1:A:99:VAL:C	1:A:100:PRO:N	19	7.73
(1,209)	1:A:60:LYS:N	1:A:60:LYS:CA	1:A:60:LYS:C	1:A:61:GLU:N	2	7.73
(1,353)	1:A:162:LYS:C	1:A:163:GLU:N	1:A:163:GLU:CA	1:A:163:GLU:C	2	7.61
(1,322)	1:A:130:PRO:C	1:A:131:LYS:N	1:A:131:LYS:CA	1:A:131:LYS:C	1	7.58
(1,322)	1:A:130:PRO:C	1:A:131:LYS:N	1:A:131:LYS:CA	1:A:131:LYS:C	4	7.5
(1,353)	1:A:162:LYS:C	1:A:163:GLU:N	1:A:163:GLU:CA	1:A:163:GLU:C	9	7.38
(1,223)	1:A:73:HIS:C	1:A:74:ASP:N	1:A:74:ASP:CA	1:A:74:ASP:C	14	7.35
(1,222)	1:A:73:HIS:C	1:A:74:ASP:N	1:A:74:ASP:CA	1:A:74:ASP:C	19	7.22
(1,161)	1:A:2:ALA:C	1:A:3:ASP:N	1:A:3:ASP:CA	1:A:3:ASP:C	13	7.09
(1,82)	1:A:65:TRP:N	1:A:65:TRP:CA	1:A:65:TRP:C	1:A:66:PHE:N	8	7.06
(1,255)	1:A:98:ALA:N	1:A:98:ALA:CA	1:A:98:ALA:C	1:A:99:VAL:N	11	7.0
(1,232)	1:A:86:ILE:N	1:A:86:ILE:CA	1:A:86:ILE:C	1:A:87:PRO:N	2	6.98
(1,299)	1:A:114:LYS:N	1:A:114:LYS:CA	1:A:114:LYS:C	1:A:115:ILE:N	7	6.9
(1,246)	1:A:95:PRO:N	1:A:95:PRO:CA	1:A:95:PRO:C	1:A:96:GLU:N	1	6.9
(1,286)	1:A:109:MET:N	1:A:109:MET:CA	1:A:109:MET:C	1:A:110:TYR:N	6	6.86
(1,290)	1:A:110:TYR:C	1:A:111:ARG:N	1:A:111:ARG:CA	1:A:111:ARG:C	20	6.85
(1,84)	1:A:68:LYS:N	1:A:68:LYS:CA	1:A:68:LYS:C	1:A:69:CYS:N	16	6.74
(1,232)	1:A:86:ILE:N	1:A:86:ILE:CA	1:A:86:ILE:C	1:A:87:PRO:N	6	6.7
(1,223)	1:A:73:HIS:C	1:A:74:ASP:N	1:A:74:ASP:CA	1:A:74:ASP:C	1	6.7
(1,256)	1:A:98:ALA:C	1:A:99:VAL:N	1:A:99:VAL:CA	1:A:99:VAL:C	11	6.69
(1,78)	1:A:59:ASN:N	1:A:59:ASN:CA	1:A:59:ASN:C	1:A:60:LYS:N	4	6.68
(1,232)	1:A:86:ILE:N	1:A:86:ILE:CA	1:A:86:ILE:C	1:A:87:PRO:N	5	6.49
(1,201)	1:A:51:ASN:C	1:A:52:ASP:N	1:A:52:ASP:CA	1:A:52:ASP:C	12	6.44
(1,188)	1:A:21:GLY:N	1:A:21:GLY:CA	1:A:21:GLY:C	1:A:22:PRO:N	15	6.36
(1,188)	1:A:21:GLY:N	1:A:21:GLY:CA	1:A:21:GLY:C	1:A:22:PRO:N	20	6.31
(1,78)	1:A:59:ASN:N	1:A:59:ASN:CA	1:A:59:ASN:C	1:A:60:LYS:N	16	6.27
(1,358)	1:A:164:LYS:C	1:A:165:CYS:N	1:A:165:CYS:CA	1:A:165:CYS:C	15	6.25
(1,84)	1:A:68:LYS:N	1:A:68:LYS:CA	1:A:68:LYS:C	1:A:69:CYS:N	12	6.21
(1,232)	1:A:86:ILE:N	1:A:86:ILE:CA	1:A:86:ILE:C	1:A:87:PRO:N	16	6.12
(1,364)	1:A:166:ASN:C	1:A:167:GLN:N	1:A:167:GLN:CA	1:A:167:GLN:C	7	6.1
(1,312)	1:A:118:THR:C	1:A:119:ASP:N	1:A:119:ASP:CA	1:A:119:ASP:C	4	6.09
(1,232)	1:A:86:ILE:N	1:A:86:ILE:CA	1:A:86:ILE:C	1:A:87:PRO:N	10	5.89
(1,232)	1:A:86:ILE:N	1:A:86:ILE:CA	1:A:86:ILE:C	1:A:87:PRO:N	14	5.87
(1,289)	1:A:110:TYR:N	1:A:110:TYR:CA	1:A:110:TYR:C	1:A:111:ARG:N	8	5.86
(1,267)	1:A:102:LEU:C	1:A:103:ASP:N	1:A:103:ASP:CA	1:A:103:ASP:C	3	5.86
(1,343)	1:A:159:ILE:C	1:A:160:GLN:N	1:A:160:GLN:CA	1:A:160:GLN:C	15	5.84
(1,232)	1:A:86:ILE:N	1:A:86:ILE:CA	1:A:86:ILE:C	1:A:87:PRO:N	12	5.82
(1,312)	1:A:118:THR:C	1:A:119:ASP:N	1:A:119:ASP:CA	1:A:119:ASP:C	13	5.8
(1,84)	1:A:68:LYS:N	1:A:68:LYS:CA	1:A:68:LYS:C	1:A:69:CYS:N	3	5.61
(1,352)	1:A:162:LYS:C	1:A:163:GLU:N	1:A:163:GLU:CA	1:A:163:GLU:C	10	5.5
(1,285)	1:A:108:LYS:C	1:A:109:MET:N	1:A:109:MET:CA	1:A:109:MET:C	9	5.49
(1,232)	1:A:86:ILE:N	1:A:86:ILE:CA	1:A:86:ILE:C	1:A:87:PRO:N	7	5.46
(1,298)	1:A:114:LYS:N	1:A:114:LYS:CA	1:A:114:LYS:C	1:A:115:ILE:N	10	5.45
` ' /	1	1	1	1.		ed on next page



	ed from previous po					
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (\circ)
(1,232)	1:A:86:ILE:N	1:A:86:ILE:CA	1:A:86:ILE:C	1:A:87:PRO:N	8	5.43
(1,287)	1:A:109:MET:C	1:A:110:TYR:N	1:A:110:TYR:CA	1:A:110:TYR:C	14	5.4
(1,232)	1:A:86:ILE:N	1:A:86:ILE:CA	1:A:86:ILE:C	1:A:87:PRO:N	18	5.4
(1,290)	1:A:110:TYR:C	1:A:111:ARG:N	1:A:111:ARG:CA	1:A:111:ARG:C	14	5.32
(1,232)	1:A:86:ILE:N	1:A:86:ILE:CA	1:A:86:ILE:C	1:A:87:PRO:N	11	5.32
(1,232)	1:A:86:ILE:N	1:A:86:ILE:CA	1:A:86:ILE:C	1:A:87:PRO:N	15	5.32
(1,106)	1:A:82:ILE:N	1:A:82:ILE:CA	1:A:82:ILE:C	1:A:83:GLU:N	7	5.31
(1,232)	1:A:86:ILE:N	1:A:86:ILE:CA	1:A:86:ILE:C	1:A:87:PRO:N	20	5.23
(1,82)	1:A:65:TRP:N	1:A:65:TRP:CA	1:A:65:TRP:C	1:A:66:PHE:N	5	5.21
(1,167)	1:A:13:ILE:N	1:A:13:ILE:CA	1:A:13:ILE:C	1:A:14:PRO:N	15	5.21
(1,82)	1:A:65:TRP:N	1:A:65:TRP:CA	1:A:65:TRP:C	1:A:66:PHE:N	16	5.19
(1,38)	1:A:35:GLU:N	1:A:35:GLU:CA	1:A:35:GLU:C	1:A:36:TYR:N	9	4.98
(1,232)	1:A:86:ILE:N	1:A:86:ILE:CA	1:A:86:ILE:C	1:A:87:PRO:N	9	4.97
(1,167)	1:A:13:ILE:N	1:A:13:ILE:CA	1:A:13:ILE:C	1:A:14:PRO:N	12	4.91
(1,209)	1:A:60:LYS:N	1:A:60:LYS:CA	1:A:60:LYS:C	1:A:61:GLU:N	15	4.89
(1,358)	1:A:164:LYS:C	1:A:165:CYS:N	1:A:165:CYS:CA	1:A:165:CYS:C	18	4.87
(1,167)	1:A:13:ILE:N	1:A:13:ILE:CA	1:A:13:ILE:C	1:A:14:PRO:N	2	4.76
(1,232)	1:A:86:ILE:N	1:A:86:ILE:CA	1:A:86:ILE:C	1:A:87:PRO:N	4	4.68
(1,322)	1:A:130:PRO:C	1:A:131:LYS:N	1:A:131:LYS:CA	1:A:131:LYS:C	11	4.66
(1,162)	1:A:2:ALA:C	1:A:3:ASP:N	1:A:3:ASP:CA	1:A:3:ASP:C	17	4.66
(1,307)	1:A:117:LEU:N	1:A:117:LEU:CA	1:A:117:LEU:C	1:A:118:THR:N	17	4.6
(1,167)	1:A:13:ILE:N	1:A:13:ILE:CA	1:A:13:ILE:C	1:A:14:PRO:N	9	4.56
(1,167)	1:A:13:ILE:N	1:A:13:ILE:CA	1:A:13:ILE:C	1:A:14:PRO:N	14	4.53
(1,232)	1:A:86:ILE:N	1:A:86:ILE:CA	1:A:86:ILE:C	1:A:87:PRO:N	19	4.5
(1,350)	1:A:161:HIS:C	1:A:162:LYS:N	1:A:162:LYS:CA	1:A:162:LYS:C	17	4.47
(1,232)	1:A:86:ILE:N	1:A:86:ILE:CA	1:A:86:ILE:C	1:A:87:PRO:N	13	4.46
(1,232)	1:A:86:ILE:N	1:A:86:ILE:CA	1:A:86:ILE:C	1:A:87:PRO:N	3	4.38
(1,162)	1:A:2:ALA:C	1:A:3:ASP:N	1:A:3:ASP:CA	1:A:3:ASP:C	16	4.29
(1,232)	1:A:86:ILE:N	1:A:86:ILE:CA	1:A:86:ILE:C	1:A:87:PRO:N	17	4.22
(1,167)	1:A:13:ILE:N	1:A:13:ILE:CA	1:A:13:ILE:C	1:A:14:PRO:N	7	4.19
(1,167)	1:A:13:ILE:N	1:A:13:ILE:CA	1:A:13:ILE:C	1:A:14:PRO:N	3	4.07
(1,167)	1:A:13:ILE:N	1:A:13:ILE:CA	1:A:13:ILE:C	1:A:14:PRO:N	18	4.07
(1,232)	1:A:86:ILE:N	1:A:86:ILE:CA	1:A:86:ILE:C	1:A:87:PRO:N	1	4.05
(1,296)	1:A:113:GLY:C	1:A:114:LYS:N	1:A:114:LYS:CA	1:A:114:LYS:C	10	4.03
(1,293)	1:A:111:ARG:C	1:A:112:GLY:N	1:A:112:GLY:CA	1:A:112:GLY:C	1	3.95
(1,38)	1:A:35:GLU:N	1:A:35:GLU:CA	1:A:35:GLU:C	1:A:36:TYR:N	14	3.92
(1,94)	1:A:73:HIS:N	1:A:73:HIS:CA	1:A:73:HIS:C	1:A:74:ASP:N	15	3.77
(1,167)	1:A:13:ILE:N	1:A:13:ILE:CA	1:A:13:ILE:C	1:A:14:PRO:N	6	3.67
(1,82)	1:A:65:TRP:N	1:A:65:TRP:CA	1:A:65:TRP:C	1:A:66:PHE:N	18	3.65
(1,322)	1:A:130:PRO:C	1:A:131:LYS:N	1:A:131:LYS:CA	1:A:131:LYS:C	6	3.64
(1,167)	1:A:13:ILE:N	1:A:13:ILE:CA	1:A:13:ILE:C	1:A:14:PRO:N	20	3.57
(1,82)	1:A:65:TRP:N	1:A:65:TRP:CA	1:A:65:TRP:C	1:A:66:PHE:N	11	3.56
(1,38)	1:A:35:GLU:N	1:A:35:GLU:CA	1:A:35:GLU:C	1:A:36:TYR:N	17	3.54
(1,292)	1:A:111:ARG:N	1:A:111:ARG:CA	1:A:111:ARG:C	1:A:112:GLY:N	13	3.5
(1,349)	1:A:161:HIS:C	1:A:162:LYS:N	1:A:162:LYS:CA	1:A:162:LYS:C	11	3.46
(1,167)	1:A:13:ILE:N	1:A:13:ILE:CA	1:A:13:ILE:C	1:A:14:PRO:N	1	3.46
(1,82)	1:A:65:TRP:N	1:A:65:TRP:CA	1:A:65:TRP:C	1:A:66:PHE:N	2	3.43
(1,279)	1:A:106:THR:C	1:A:107:ALA:N	1:A:107:ALA:CA	1:A:107:ALA:C	11	3.3
(1,82)	1:A:65:TRP:N	1:A:65:TRP:CA	1:A:65:TRP:C	1:A:66:PHE:N	17	3.29
(1,355)	1:A:163:GLU:C	1:A:164:LYS:N	1:A:164:LYS:CA	1:A:164:LYS:C	19	3.25
(1,70)	1:A:55:ARG:N	1:A:55:ARG:CA	1:A:55:ARG:C	1:A:56:LEU:N	20	3.22
(1,10)	1.11.00.AIG.N	1.71.00.711G.OA	1.11.00.AIG.C	1.71.00.1110.11		od on nort nace



	ed from previous po					
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (\circ)
(1,167)	1:A:13:ILE:N	1:A:13:ILE:CA	1:A:13:ILE:C	1:A:14:PRO:N	4	3.2
(1,70)	1:A:55:ARG:N	1:A:55:ARG:CA	1:A:55:ARG:C	1:A:56:LEU:N	1	3.16
(1,222)	1:A:73:HIS:C	1:A:74:ASP:N	1:A:74:ASP:CA	1:A:74:ASP:C	15	3.08
(1,351)	1:A:162:LYS:N	1:A:162:LYS:CA	1:A:162:LYS:C	1:A:163:GLU:N	4	3.05
(1,322)	1:A:130:PRO:C	1:A:131:LYS:N	1:A:131:LYS:CA	1:A:131:LYS:C	7	3.01
(1,167)	1:A:13:ILE:N	1:A:13:ILE:CA	1:A:13:ILE:C	1:A:14:PRO:N	5	3.0
(1,167)	1:A:13:ILE:N	1:A:13:ILE:CA	1:A:13:ILE:C	1:A:14:PRO:N	11	2.96
(1,307)	1:A:117:LEU:N	1:A:117:LEU:CA	1:A:117:LEU:C	1:A:118:THR:N	14	2.8
(1,291)	1:A:110:TYR:C	1:A:111:ARG:N	1:A:111:ARG:CA	1:A:111:ARG:C	18	2.62
(1,259)	1:A:99:VAL:N	1:A:99:VAL:CA	1:A:99:VAL:C	1:A:100:PRO:N	18	2.62
(1,351)	1:A:162:LYS:N	1:A:162:LYS:CA	1:A:162:LYS:C	1:A:163:GLU:N	18	2.59
(1,167)	1:A:13:ILE:N	1:A:13:ILE:CA	1:A:13:ILE:C	1:A:14:PRO:N	13	2.56
(1,364)	1:A:166:ASN:C	1:A:167:GLN:N	1:A:167:GLN:CA	1:A:167:GLN:C	1	2.51
(1,94)	1:A:73:HIS:N	1:A:73:HIS:CA	1:A:73:HIS:C	1:A:74:ASP:N	19	2.4
(1,90)	1:A:71:TYR:N	1:A:71:TYR:CA	1:A:71:TYR:C	1:A:72:ILE:N	14	2.34
(1,72)	1:A:56:LEU:N	1:A:56:LEU:CA	1:A:56:LEU:C	1:A:57:GLU:N	4	2.32
(1,249)	1:A:96:GLU:N	1:A:96:GLU:CA	1:A:96:GLU:C	1:A:97:ILE:N	2	2.32
(1,322)	1:A:130:PRO:C	1:A:131:LYS:N	1:A:131:LYS:CA	1:A:131:LYS:C	16	2.19
(1,142)	1:A:143:GLY:N	1:A:143:GLY:CA	1:A:143:GLY:C	1:A:144:PRO:N	7	2.15
(1,78)	1:A:59:ASN:N	1:A:59:ASN:CA	1:A:59:ASN:C	1:A:60:LYS:N	12	2.14
(1,322)	1:A:130:PRO:C	1:A:131:LYS:N	1:A:131:LYS:CA	1:A:131:LYS:C	18	2.11
(1,100)	1:A:79:GLU:N	1:A:79:GLU:CA	1:A:79:GLU:C	1:A:80:PHE:N	17	2.08
(1,167)	1:A:13:ILE:N	1:A:13:ILE:CA	1:A:13:ILE:C	1:A:14:PRO:N	17	2.06
(1,278)	1:A:106:THR:C	1:A:107:ALA:N	1:A:107:ALA:CA	1:A:107:ALA:C	10	2.03
(1,114)	1:A:121:PHE:N	1:A:121:PHE:CA	1:A:121:PHE:C	1:A:122:LYS:N	10	1.96
(1,167)	1:A:13:ILE:N	1:A:13:ILE:CA	1:A:13:ILE:C	1:A:14:PRO:N	8	1.93
(1,90)	1:A:71:TYR:N	1:A:71:TYR:CA	1:A:71:TYR:C	1:A:72:ILE:N	9	1.89
(1,142)	1:A:143:GLY:N	1:A:143:GLY:CA	1:A:143:GLY:C	1:A:144:PRO:N	17	1.87
(1,259)	1:A:99:VAL:N	1:A:99:VAL:CA	1:A:99:VAL:C	1:A:100:PRO:N	12	1.85
(1,18)	1:A:25:ARG:N	1:A:25:ARG:CA	1:A:25:ARG:C	1:A:26:GLU:N	7	1.84
(1,67)	1:A:53:TRP:C	1:A:54:PHE:N	1:A:54:PHE:CA	1:A:54:PHE:C	16	1.83
(1,38)	1:A:35:GLU:N	1:A:35:GLU:CA	1:A:35:GLU:C	1:A:36:TYR:N	20	1.81
(1,151)	1:A:149:GLU:C	1:A:150:ILE:N	1:A:150:ILE:CA	1:A:150:ILE:C	4	1.79
(1,130)	1:A:136:HIS:N	1:A:136:HIS:CA	1:A:136:HIS:C	1:A:137:LEU:N	12	1.77
(1,167)	1:A:13:ILE:N	1:A:13:ILE:CA	1:A:13:ILE:C	1:A:14:PRO:N	16	1.75
(1,130)	1:A:136:HIS:N	1:A:136:HIS:CA	1:A:136:HIS:C	1:A:137:LEU:N	19	1.74
(1,84)	1:A:68:LYS:N	1:A:68:LYS:CA	1:A:68:LYS:C	1:A:69:CYS:N	2	1.73
(1,38)	1:A:35:GLU:N	1:A:35:GLU:CA	1:A:35:GLU:C	1:A:36:TYR:N	6	1.71
(1,245)	1:A:94:ALA:N	1:A:94:ALA:CA	1:A:94:ALA:C	1:A:95:PRO:N	15	1.71
(1,129)	1:A:135:ALA:C	1:A:136:HIS:N	1:A:136:HIS:CA	1:A:136:HIS:C	10	1.7
(1,105)	1:A:81:ASP:C	1:A:82:ILE:N	1:A:82:ILE:CA	1:A:82:ILE:C	8	1.69
(1,100) $(1,94)$	1:A:73:HIS:N	1:A:73:HIS:CA	1:A:73:HIS:C	1:A:74:ASP:N	10	1.68
(1,70)	1:A:55:ARG:N	1:A:55:ARG:CA	1:A:55:ARG:C	1:A:56:LEU:N	2	1.68
(1,150)	1:A:148:VAL:N	1:A:148:VAL:CA	1:A:148:VAL:C	1:A:149:GLU:N	5	1.68
(1,110)	1:A:84:PHE:N	1:A:84:PHE:CA	1:A:84:PHE:C	1:A:85:ASP:N	3	1.68
(1,110) $(1,89)$	1:A:70:TRP:C	1:A:71:TYR:N	1:A:71:TYR:CA	1:A:71:TYR:C	6	1.63
(1,100)	1:A:79:GLU:N	1:A:79:GLU:CA	1:A:79:GLU:C	1:A:80:PHE:N	4	1.59
(1,700)	1:A:55:ARG:N	1:A:55:ARG:CA	1:A:55:ARG:C	1:A:56:LEU:N	4	1.58
(1,10) $(1,245)$	1:A:94:ALA:N	1:A:94:ALA:CA	1:A:94:ALA:C	1:A:95:PRO:N	4	1.56
(1,249) $(1,130)$	1:A:136:HIS:N	1:A:136:HIS:CA	1:A:136:HIS:C	1:A:137:LEU:N	4	1.54
(1,130) $(1,88)$	1:A:70:TRP:N	1:A:70:TRP:CA	1:A:70:TRP:C	1:A:71:TYR:N	5	1.53
(1,00)	1.71.10.1101.11	1.11.10.11t1 .OA	1.71.70.1101.0	1.71.11.11.11		1.00



	ed from previous pe		A		3.6 1.1	T 7* 1 4* ()
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (°)
(1,72)	1:A:56:LEU:N	1:A:56:LEU:CA	1:A:56:LEU:C	1:A:57:GLU:N	13	1.52
(1,209)	1:A:60:LYS:N	1:A:60:LYS:CA	1:A:60:LYS:C	1:A:61:GLU:N	11	1.5
(1,90)	1:A:71:TYR:N	1:A:71:TYR:CA	1:A:71:TYR:C	1:A:72:ILE:N	10	1.49
(1,67)	1:A:53:TRP:C	1:A:54:PHE:N	1:A:54:PHE:CA	1:A:54:PHE:C	13	1.48
(1,34)	1:A:33:LYS:N	1:A:33:LYS:CA	1:A:33:LYS:C	1:A:34:GLU:N	9	1.47
(1,89)	1:A:70:TRP:C	1:A:71:TYR:N	1:A:71:TYR:CA	1:A:71:TYR:C	7	1.46
(1,356)	1:A:164:LYS:N	1:A:164:LYS:CA	1:A:164:LYS:C	1:A:165:CYS:N	20	1.46
(1,88)	1:A:70:TRP:N	1:A:70:TRP:CA	1:A:70:TRP:C	1:A:71:TYR:N	11	1.44
(1,114)	1:A:121:PHE:N	1:A:121:PHE:CA	1:A:121:PHE:C	1:A:122:LYS:N	2	1.43
(1,30)	1:A:31:ARG:N	1:A:31:ARG:CA	1:A:31:ARG:C	1:A:32:LEU:N	10	1.42
(1,114)	1:A:121:PHE:N	1:A:121:PHE:CA	1:A:121:PHE:C	1:A:122:LYS:N	9	1.38
(1,167)	1:A:13:ILE:N	1:A:13:ILE:CA	1:A:13:ILE:C	1:A:14:PRO:N	10	1.36
(1,68)	1:A:54:PHE:N	1:A:54:PHE:CA	1:A:54:PHE:C	1:A:55:ARG:N	13	1.34
(1,322)	1:A:130:PRO:C	1:A:131:LYS:N	1:A:131:LYS:CA	1:A:131:LYS:C	10	1.34
(1,1)	1:A:3:ASP:C	1:A:4:GLU:N	1:A:4:GLU:CA	1:A:4:GLU:C	4	1.34
(1,88)	1:A:70:TRP:N	1:A:70:TRP:CA	1:A:70:TRP:C	1:A:71:TYR:N	15	1.31
(1,114)	1:A:121:PHE:N	1:A:121:PHE:CA	1:A:121:PHE:C	1:A:122:LYS:N	7	1.31
(1,89)	1:A:70:TRP:C	1:A:71:TYR:N	1:A:71:TYR:CA	1:A:71:TYR:C	8	1.29
(1,67)	1:A:53:TRP:C	1:A:54:PHE:N	1:A:54:PHE:CA	1:A:54:PHE:C	7	1.29
(1,70)	1:A:55:ARG:N	1:A:55:ARG:CA	1:A:55:ARG:C	1:A:56:LEU:N	3	1.28
(1,142)	1:A:143:GLY:N	1:A:143:GLY:CA	1:A:143:GLY:C	1:A:144:PRO:N	20	1.28
(1,58)	1:A:45:ASN:N	1:A:45:ASN:CA	1:A:45:ASN:C	1:A:46:ASN:N	14	1.26
(1,179)	1:A:18:THR:C	1:A:19:ASN:N	1:A:19:ASN:CA	1:A:19:ASN:C	1	1.25
(1,100)	1:A:79:GLU:N	1:A:79:GLU:CA	1:A:79:GLU:C	1:A:80:PHE:N	1	1.24
(1,70)	1:A:55:ARG:N	1:A:55:ARG:CA	1:A:55:ARG:C	1:A:56:LEU:N	14	1.23
(1,142)	1:A:143:GLY:N	1:A:143:GLY:CA	1:A:143:GLY:C	1:A:144:PRO:N	11	1.22
(1,92)	1:A:72:ILE:N	1:A:72:ILE:CA	1:A:72:ILE:C	1:A:73:HIS:N	5	1.21
(1,76)	1:A:58:SER:N	1:A:58:SER:CA	1:A:58:SER:C	1:A:59:ASN:N	1	1.2
(1,260)	1:A:100:PRO:N	1:A:100:PRO:CA	1:A:100:PRO:C	1:A:101:GLU:N	4	1.2
(1,89)	1:A:70:TRP:C	1:A:71:TYR:N	1:A:71:TYR:CA	1:A:71:TYR:C	5	1.18
(1,28)	1:A:30:GLN:N	1:A:30:GLN:CA	1:A:30:GLN:C	1:A:31:ARG:N	20	1.18
(1,18)	1:A:25:ARG:N	1:A:25:ARG:CA	1:A:25:ARG:C	1:A:26:GLU:N	15	1.18
(1,142)	1:A:143:GLY:N	1:A:143:GLY:CA	1:A:143:GLY:C	1:A:144:PRO:N	10	1.18
(1,18)	1:A:25:ARG:N	1:A:25:ARG:CA	1:A:25:ARG:C	1:A:26:GLU:N	10	1.17
(1,100)	1:A:79:GLU:N	1:A:79:GLU:CA	1:A:79:GLU:C	1:A:80:PHE:N	7	1.17
(1,172)	1:A:16:LEU:N	1:A:16:LEU:CA	1:A:16:LEU:C	1:A:17:LYS:N	5	1.15
(1,150)	1:A:148:VAL:N	1:A:148:VAL:CA	1:A:148:VAL:C	1:A:149:GLU:N	8	1.14
(1,197)	1:A:50:ASP:N	1:A:50:ASP:CA	1:A:50:ASP:C	1:A:51:ASN:N	6	1.13
(1,150)	1:A:148:VAL:N	1:A:148:VAL:CA	1:A:148:VAL:C	1:A:149:GLU:N	20	1.12
(1,89)	1:A:70:TRP:C	1:A:71:TYR:N	1:A:71:TYR:CA	1:A:71:TYR:C	1	1.11
(1,130)	1:A:136:HIS:N	1:A:136:HIS:CA	1:A:136:HIS:C	1:A:137:LEU:N	5	1.1
(1,92)	1:A:72:ILE:N	1:A:72:ILE:CA	1:A:72:ILE:C	1:A:73:HIS:N	9	1.08
(1,114)	1:A:121:PHE:N	1:A:121:PHE:CA	1:A:121:PHE:C	1:A:122:LYS:N	8	1.08
(1,356)	1:A:164:LYS:N	1:A:164:LYS:CA	1:A:164:LYS:C	1:A:165:CYS:N	12	1.07
(1,345)	1:A:94:ALA:N	1:A:94:ALA:CA	1:A:94:ALA:C	1:A:95:PRO:N	9	1.07
(1,160)	1:A:155:GLN:N	1:A:155:GLN:CA	1:A:155:GLN:C	1:A:156:LYS:N	17	1.07
(1,245)	1:A:94:ALA:N	1:A:94:ALA:CA	1:A:94:ALA:C	1:A:95:PRO:N	20	1.05
(1,210) $(1,89)$	1:A:70:TRP:C	1:A:71:TYR:N	1:A:71:TYR:CA	1:A:71:TYR:C	16	1.04
(1,150)	1:A:148:VAL:N	1:A:148:VAL:CA	1:A:148:VAL:C	1:A:149:GLU:N	13	1.04
(1,130) $(1,114)$	1:A:121:PHE:N	1:A:121:PHE:CA	1:A:121:PHE:C	1:A:122:LYS:N	3	1.04
(1,111) $(1,17)$	1:A:24:ASP:C	1:A:25:ARG:N	1:A:25:ARG:CA	1:A:25:ARG:C	17	1.02
(+,+1)	1.11.24.1101.0	1.11.20.1110.11	1.71.20.7110.071	1.11.20.1110.0		1.02



	ed from previous pe		A		3.6.1.1	T 71 1
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (\circ)
(1,72)	1:A:56:LEU:N	1:A:56:LEU:CA	1:A:56:LEU:C	1:A:57:GLU:N	7	1.01
(1,245)	1:A:94:ALA:N	1:A:94:ALA:CA	1:A:94:ALA:C	1:A:95:PRO:N	17	1.0
(1,142)	1:A:143:GLY:N	1:A:143:GLY:CA	1:A:143:GLY:C	1:A:144:PRO:N	19	1.0
(1,88)	1:A:70:TRP:N	1:A:70:TRP:CA	1:A:70:TRP:C	1:A:71:TYR:N	3	0.98
(1,78)	1:A:59:ASN:N	1:A:59:ASN:CA	1:A:59:ASN:C	1:A:60:LYS:N	1	0.98
(1,151)	1:A:149:GLU:C	1:A:150:ILE:N	1:A:150:ILE:CA	1:A:150:ILE:C	2	0.98
(1,150)	1:A:148:VAL:N	1:A:148:VAL:CA	1:A:148:VAL:C	1:A:149:GLU:N	18	0.98
(1,142)	1:A:143:GLY:N	1:A:143:GLY:CA	1:A:143:GLY:C	1:A:144:PRO:N	8	0.98
(1,128)	1:A:135:ALA:N	1:A:135:ALA:CA	1:A:135:ALA:C	1:A:136:HIS:N	12	0.98
(1,90)	1:A:71:TYR:N	1:A:71:TYR:CA	1:A:71:TYR:C	1:A:72:ILE:N	17	0.97
(1,70)	1:A:55:ARG:N	1:A:55:ARG:CA	1:A:55:ARG:C	1:A:56:LEU:N	6	0.95
(1,21)	1:A:26:GLU:C	1:A:27:LEU:N	1:A:27:LEU:CA	1:A:27:LEU:C	12	0.94
(1,142)	1:A:143:GLY:N	1:A:143:GLY:CA	1:A:143:GLY:C	1:A:144:PRO:N	1	0.94
(1,113)	1:A:120:HIS:C	1:A:121:PHE:N	1:A:121:PHE:CA	1:A:121:PHE:C	18	0.94
(1,88)	1:A:70:TRP:N	1:A:70:TRP:CA	1:A:70:TRP:C	1:A:71:TYR:N	14	0.93
(1,46)	1:A:39:LEU:N	1:A:39:LEU:CA	1:A:39:LEU:C	1:A:40:ILE:N	13	0.92
(1,28)	1:A:30:GLN:N	1:A:30:GLN:CA	1:A:30:GLN:C	1:A:31:ARG:N	8	0.92
(1,90)	1:A:71:TYR:N	1:A:71:TYR:CA	1:A:71:TYR:C	1:A:72:ILE:N	20	0.91
(1,76)	1:A:58:SER:N	1:A:58:SER:CA	1:A:58:SER:C	1:A:59:ASN:N	15	0.9
(1,142)	1:A:143:GLY:N	1:A:143:GLY:CA	1:A:143:GLY:C	1:A:144:PRO:N	15	0.9
(1,100)	1:A:79:GLU:N	1:A:79:GLU:CA	1:A:79:GLU:C	1:A:80:PHE:N	16	0.9
(1,72)	1:A:56:LEU:N	1:A:56:LEU:CA	1:A:56:LEU:C	1:A:57:GLU:N	3	0.88
(1,56)	1:A:44:GLU:N	1:A:44:GLU:CA	1:A:44:GLU:C	1:A:45:ASN:N	9	0.87
(1,142)	1:A:143:GLY:N	1:A:143:GLY:CA	1:A:143:GLY:C	1:A:144:PRO:N	4	0.87
(1,129)	1:A:135:ALA:C	1:A:136:HIS:N	1:A:136:HIS:CA	1:A:136:HIS:C	1	0.87
(1,92)	1:A:72:ILE:N	1:A:72:ILE:CA	1:A:72:ILE:C	1:A:73:HIS:N	15	0.86
(1,150)	1:A:148:VAL:N	1:A:148:VAL:CA	1:A:148:VAL:C	1:A:149:GLU:N	11	0.86
(1,142)	1:A:143:GLY:N	1:A:143:GLY:CA	1:A:143:GLY:C	1:A:144:PRO:N	14	0.85
(1,114)	1:A:121:PHE:N	1:A:121:PHE:CA	1:A:121:PHE:C	1:A:122:LYS:N	20	0.85
(1,129)	1:A:135:ALA:C	1:A:136:HIS:N	1:A:136:HIS:CA	1:A:136:HIS:C	7	0.84
(1,179)	1:A:18:THR:C	1:A:19:ASN:N	1:A:19:ASN:CA	1:A:19:ASN:C	16	0.83
(1,83)	1:A:67:GLY:C	1:A:68:LYS:N	1:A:68:LYS:CA	1:A:68:LYS:C	7	0.82
(1,158)	1:A:154:ILE:N	1:A:154:ILE:CA	1:A:154:ILE:C	1:A:155:GLN:N	19	0.82
(1,231)	1:A:85:ASP:C	1:A:86:ILE:N	1:A:86:ILE:CA	1:A:86:ILE:C	7	0.81
(1,18)	1:A:25:ARG:N	1:A:25:ARG:CA	1:A:25:ARG:C	1:A:26:GLU:N	16	0.8
(1,151)	1:A:149:GLU:C	1:A:150:ILE:N	1:A:150:ILE:CA	1:A:150:ILE:C	8	0.79
(1,142)	1:A:143:GLY:N	1:A:143:GLY:CA	1:A:143:GLY:C	1:A:144:PRO:N	6	0.79
(1,89)	1:A:70:TRP:C	1:A:71:TYR:N	1:A:71:TYR:CA	1:A:71:TYR:C	10	0.78
(1,83)	1:A:67:GLY:C	1:A:68:LYS:N	1:A:68:LYS:CA	1:A:68:LYS:C	18	0.77
(1,70)	1:A:55:ARG:N	1:A:55:ARG:CA	1:A:55:ARG:C	1:A:56:LEU:N	5	0.77
(1,17)	1:A:24:ASP:C	1:A:25:ARG:N	1:A:25:ARG:CA	1:A:25:ARG:C	12	0.77
(1,71) $(1,71)$	1:A:55:ARG:C	1:A:56:LEU:N	1:A:56:LEU:CA	1:A:56:LEU:C	7	0.76
(1,190)	1:A:22:PRO:N	1:A:22:PRO:CA	1:A:22:PRO:C	1:A:23:ARG:N	1	0.76
(1,130) $(1,130)$	1:A:136:HIS:N	1:A:136:HIS:CA	1:A:136:HIS:C	1:A:137:LEU:N	8	0.75
(1,130) $(1,129)$	1:A:135:ALA:C	1:A:136:HIS:N	1:A:136:HIS:CA	1:A:136:HIS:C	17	0.75
(1,129) $(1,100)$	1:A:79:GLU:N	1:A:79:GLU:CA	1:A:79:GLU:C	1:A:80:PHE:N	5	0.73
(1,100) $(1,64)$	1:A:48:ASN:N	1:A:48:ASN:CA	1:A:48:ASN:C	1:A:49:ALA:N	9	0.73
(1,89)	1:A:70:TRP:C	1:A:71:TYR:N	1:A:71:TYR:CA	1:A:71:TYR:C	19	0.72
(1,89) $(1,113)$	1:A:120:HIS:C	1:A:71:1 FK:N 1:A:121:PHE:N	1:A:71:1 TR:CA 1:A:121:PHE:CA	1:A:121:PHE:C	5	0.71
· · /	1:A:120:H15:C 1:A:94:ALA:N	1:A:121:PHE:N 1:A:94:ALA:CA	1:A:121:PHE:CA 1:A:94:ALA:C	1:A:121:PHE:C 1:A:95:PRO:N	7	0.71
(1,245)						
(1,94)	1:A:73:HIS:N	1:A:73:HIS:CA	1:A:73:HIS:C	1:A:74:ASP:N	4	0.69



	ed from previous pe					
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	$\textbf{Violation} \ (\ \circ \)$
(1,70)	1:A:55:ARG:N	1:A:55:ARG:CA	1:A:55:ARG:C	1:A:56:LEU:N	19	0.69
(1,190)	1:A:22:PRO:N	1:A:22:PRO:CA	1:A:22:PRO:C	1:A:23:ARG:N	8	0.69
(1,158)	1:A:154:ILE:N	1:A:154:ILE:CA	1:A:154:ILE:C	1:A:155:GLN:N	10	0.69
(1,146)	1:A:146:LEU:N	1:A:146:LEU:CA	1:A:146:LEU:C	1:A:147:ALA:N	8	0.69
(1,142)	1:A:143:GLY:N	1:A:143:GLY:CA	1:A:143:GLY:C	1:A:144:PRO:N	2	0.69
(1,90)	1:A:71:TYR:N	1:A:71:TYR:CA	1:A:71:TYR:C	1:A:72:ILE:N	6	0.68
(1,190)	1:A:22:PRO:N	1:A:22:PRO:CA	1:A:22:PRO:C	1:A:23:ARG:N	4	0.68
(1,128)	1:A:135:ALA:N	1:A:135:ALA:CA	1:A:135:ALA:C	1:A:136:HIS:N	19	0.68
(1,81)	1:A:64:ARG:C	1:A:65:TRP:N	1:A:65:TRP:CA	1:A:65:TRP:C	16	0.67
(1,70)	1:A:55:ARG:N	1:A:55:ARG:CA	1:A:55:ARG:C	1:A:56:LEU:N	7	0.67
(1,129)	1:A:135:ALA:C	1:A:136:HIS:N	1:A:136:HIS:CA	1:A:136:HIS:C	13	0.67
(1,85)	1:A:68:LYS:C	1:A:69:CYS:N	1:A:69:CYS:CA	1:A:69:CYS:C	14	0.66
(1,94)	1:A:73:HIS:N	1:A:73:HIS:CA	1:A:73:HIS:C	1:A:74:ASP:N	20	0.65
(1,85)	1:A:68:LYS:C	1:A:69:CYS:N	1:A:69:CYS:CA	1:A:69:CYS:C	17	0.65
(1,64)	1:A:48:ASN:N	1:A:48:ASN:CA	1:A:48:ASN:C	1:A:49:ALA:N	10	0.65
(1,142)	1:A:143:GLY:N	1:A:143:GLY:CA	1:A:143:GLY:C	1:A:144:PRO:N	18	0.64
(1,14)	1:A:10:VAL:N	1:A:10:VAL:CA	1:A:10:VAL:C	1:A:11:SER:N	19	0.64
(1,70)	1:A:55:ARG:N	1:A:55:ARG:CA	1:A:55:ARG:C	1:A:56:LEU:N	12	0.63
(1,231)	1:A:85:ASP:C	1:A:86:ILE:N	1:A:86:ILE:CA	1:A:86:ILE:C	12	0.63
(1,68)	1:A:54:PHE:N	1:A:54:PHE:CA	1:A:54:PHE:C	1:A:55:ARG:N	17	0.61
(1,46)	1:A:39:LEU:N	1:A:39:LEU:CA	1:A:39:LEU:C	1:A:40:ILE:N	20	0.61
(1,92)	1:A:72:ILE:N	1:A:72:ILE:CA	1:A:72:ILE:C	1:A:73:HIS:N	3	0.6
(1,70)	1:A:55:ARG:N	1:A:55:ARG:CA	1:A:55:ARG:C	1:A:56:LEU:N	16	0.6
(1,124)	1:A:127:ARG:N	1:A:127:ARG:CA	1:A:127:ARG:C	1:A:128:ASN:N	7	0.6
(1,120)	1:A:125:TRP:N	1:A:125:TRP:CA	1:A:125:TRP:C	1:A:126:ALA:N	5	0.6
(1,18)	1:A:25:ARG:N	1:A:25:ARG:CA	1:A:25:ARG:C	1:A:26:GLU:N	6	0.59
(1,150)	1:A:148:VAL:N	1:A:148:VAL:CA	1:A:148:VAL:C	1:A:149:GLU:N	12	0.59
(1,142)	1:A:143:GLY:N	1:A:143:GLY:CA	1:A:143:GLY:C	1:A:144:PRO:N	9	0.59
(1,94)	1:A:73:HIS:N	1:A:73:HIS:CA	1:A:73:HIS:C	1:A:74:ASP:N	18	0.58
(1,39)	1:A:35:GLU:C	1:A:36:TYR:N	1:A:36:TYR:CA	1:A:36:TYR:C	9	0.58
(1,18)	1:A:25:ARG:N	1:A:25:ARG:CA	1:A:25:ARG:C	1:A:26:GLU:N	13	0.58
(1,37)	1:A:34:GLU:C	1:A:35:GLU:N	1:A:35:GLU:CA	1:A:35:GLU:C	14	0.57
(1,245)	1:A:94:ALA:N	1:A:94:ALA:CA	1:A:94:ALA:C	1:A:95:PRO:N	6	0.57
(1,219) $(1,209)$	1:A:60:LYS:N	1:A:60:LYS:CA	1:A:60:LYS:C	1:A:61:GLU:N	19	0.57
(1,160)		1:A:155:GLN:CA	1:A:155:GLN:C	1:A:156:LYS:N	13	0.57
(1,114)	1:A:121:PHE:N	1:A:121:PHE:CA	1:A:121:PHE:C	1:A:122:LYS:N	1	0.57
(1,114) $(1,113)$	1:A:120:HIS:C	1:A:121:PHE:N	1:A:121:PHE:CA	1:A:121:PHE:C	15	0.57
(1,110) $(1,100)$	1:A:79:GLU:N	1:A:79:GLU:CA	1:A:79:GLU:C	1:A:80:PHE:N	19	0.57
(1,100) $(1,100)$	1:A:79:GLU:N	1:A:79:GLU:CA	1:A:79:GLU:C	1:A:80:PHE:N	2	0.56
(1,100) $(1,90)$	1:A:71:TYR:N	1:A:71:TYR:CA	1:A:71:TYR:C	1:A:72:ILE:N	7	0.55
(1,30) $(1,130)$	1:A:136:HIS:N	1:A:136:HIS:CA	1:A:136:HIS:C	1:A:137:LEU:N	13	0.55
(1,130) $(1,129)$	1:A:135:ALA:C	1:A:136:HIS:N	1:A:136:HIS:CA	1:A:136:HIS:C	15	0.55
(1,129) $(1,105)$	1:A:81:ASP:C	1:A:82:ILE:N	1:A:82:ILE:CA	1:A:82:ILE:C	7	0.54
(1,103) $(1,70)$	1:A:55:ARG:N	1:A:55:ARG:CA	1:A:55:ARG:C	1:A:56:LEU:N	17	0.54
(1,10) $(1,245)$	1:A:94:ALA:N	1:A:94:ALA:CA	1:A:94:ALA:C	1:A:95:PRO:N	1	0.52
(1,245) $(1,245)$	1:A:94:ALA:N	1:A:94:ALA:CA 1:A:94:ALA:CA	1:A:94:ALA:C	1:A:95:PRO:N	16	0.52
(1,249) $(1,130)$	1:A:136:HIS:N	1:A:136:HIS:CA	1:A:136:HIS:C	1:A:137:LEU:N	6	0.52
(1,130) $(1,130)$	1:A:136:HIS:N	1:A:136:HIS:CA	1:A:136:HIS:C	1:A:137:LEU:N	10	0.52
(1,130) $(1,85)$	1:A:68:LYS:C	1:A:69:CYS:N	1:A:69:CYS:CA	1:A:69:CYS:C	16	0.52
(1,67)	1:A:53:TRP:C	1:A:54:PHE:N	1:A:54:PHE:CA	1:A:54:PHE:C	3	0.51
(1,07) $(1,28)$	1:A:30:GLN:N	1:A:30:GLN:CA	1:A:30:GLN:C	1:A:31:ARG:N	7	0.51
(1,20)	I.A.JU.GLIV.IV	I.A.JU.GLIV.OA	1.A.50.GLIV.C	I.A.JI.AIIG.N		ed on nert nage



	ed from previous po					
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	$\textbf{Violation} \ (\ \circ \)$
(1,185)	1:A:20:ALA:N	1:A:20:ALA:CA	1:A:20:ALA:C	1:A:21:GLY:N	16	0.51
(1,26)	1:A:29:VAL:N	1:A:29:VAL:CA	1:A:29:VAL:C	1:A:30:GLN:N	1	0.5
(1,153)	1:A:151:PRO:C	1:A:152:ASP:N	1:A:152:ASP:CA	1:A:152:ASP:C	4	0.5
(1,113)	1:A:120:HIS:C	1:A:121:PHE:N	1:A:121:PHE:CA	1:A:121:PHE:C	2	0.5
(1,29)	1:A:30:GLN:C	1:A:31:ARG:N	1:A:31:ARG:CA	1:A:31:ARG:C	13	0.48
(1,18)	1:A:25:ARG:N	1:A:25:ARG:CA	1:A:25:ARG:C	1:A:26:GLU:N	9	0.48
(1,142)	1:A:143:GLY:N	1:A:143:GLY:CA	1:A:143:GLY:C	1:A:144:PRO:N	13	0.48
(1,124)	1:A:127:ARG:N	1:A:127:ARG:CA	1:A:127:ARG:C	1:A:128:ASN:N	15	0.48
(1,120)	1:A:125:TRP:N	1:A:125:TRP:CA	1:A:125:TRP:C	1:A:126:ALA:N	14	0.48
(1,89)	1:A:70:TRP:C	1:A:71:TYR:N	1:A:71:TYR:CA	1:A:71:TYR:C	18	0.47
(1,136)	1:A:139:ALA:N	1:A:139:ALA:CA	1:A:139:ALA:C	1:A:140:LEU:N	11	0.47
(1,129)	1:A:135:ALA:C	1:A:136:HIS:N	1:A:136:HIS:CA	1:A:136:HIS:C	6	0.47
(1,72)	1:A:56:LEU:N	1:A:56:LEU:CA	1:A:56:LEU:C	1:A:57:GLU:N	16	0.46
(1,64)	1:A:48:ASN:N	1:A:48:ASN:CA	1:A:48:ASN:C	1:A:49:ALA:N	4	0.46
(1,38)	1:A:35:GLU:N	1:A:35:GLU:CA	1:A:35:GLU:C	1:A:36:TYR:N	18	0.46
(1,30)	1:A:31:ARG:N	1:A:31:ARG:CA	1:A:31:ARG:C	1:A:32:LEU:N	6	0.46
(1,152)	1:A:150:ILE:N	1:A:150:ILE:CA	1:A:150:ILE:C	1:A:151:PRO:N	8	0.46
(1,152)	1:A:150:ILE:N	1:A:150:ILE:CA	1:A:150:ILE:C	1:A:151:PRO:N	11	0.46
(1,129)	1:A:135:ALA:C	1:A:136:HIS:N	1:A:136:HIS:CA	1:A:136:HIS:C	8	0.46
(1,120)	1:A:125:TRP:N	1:A:125:TRP:CA	1:A:125:TRP:C	1:A:126:ALA:N	8	0.46
(1,100)	1:A:79:GLU:N	1:A:79:GLU:CA	1:A:79:GLU:C	1:A:80:PHE:N	18	0.46
(1,46)	1:A:39:LEU:N	1:A:39:LEU:CA	1:A:39:LEU:C	1:A:40:ILE:N	9	0.45
(1,142)	1:A:143:GLY:N	1:A:143:GLY:CA	1:A:143:GLY:C	1:A:144:PRO:N	3	0.45
(1,90)	1:A:71:TYR:N	1:A:71:TYR:CA	1:A:71:TYR:C	1:A:72:ILE:N	16	0.44
(1,6)	1:A:6:THR:N	1:A:6:THR:CA	1:A:6:THR:C	1:A:7:ARG:N	8	0.44
(1,142)	1:A:143:GLY:N	1:A:143:GLY:CA	1:A:143:GLY:C	1:A:144:PRO:N	16	0.44
(1,120)	1:A:125:TRP:N	1:A:125:TRP:CA	1:A:125:TRP:C	1:A:126:ALA:N	16	0.44
(1,113)	1:A:120:HIS:C	1:A:121:PHE:N	1:A:121:PHE:CA	1:A:121:PHE:C	1	0.44
(1,100)	1:A:79:GLU:N	1:A:79:GLU:CA	1:A:79:GLU:C	1:A:80:PHE:N	14	0.44
(1,67)	1:A:53:TRP:C	1:A:54:PHE:N	1:A:54:PHE:CA	1:A:54:PHE:C	19	0.43
(1,46)	1:A:39:LEU:N	1:A:39:LEU:CA	1:A:39:LEU:C	1:A:40:ILE:N	3	0.43
(1,102)	1:A:80:PHE:N	1:A:80:PHE:CA	1:A:80:PHE:C	1:A:81:ASP:N	2	0.43
(1,151)	1:A:149:GLU:C	1:A:150:ILE:N	1:A:150:ILE:CA	1:A:150:ILE:C	6	0.42
(1,88)	1:A:70:TRP:N	1:A:70:TRP:CA	1:A:70:TRP:C	1:A:71:TYR:N	17	0.41
(1,37)	1:A:34:GLU:C	1:A:35:GLU:N	1:A:35:GLU:CA	1:A:35:GLU:C	6	0.41
(1,90)	1:A:71:TYR:N	1:A:71:TYR:CA	1:A:71:TYR:C	1:A:72:ILE:N	4	0.4
(1,88)	1:A:70:TRP:N	1:A:70:TRP:CA	1:A:70:TRP:C	1:A:71:TYR:N	13	0.4
(1,85)	1:A:68:LYS:C	1:A:69:CYS:N	1:A:69:CYS:CA	1:A:69:CYS:C	10	0.4
(1,72)	1:A:56:LEU:N	1:A:56:LEU:CA	1:A:56:LEU:C	1:A:57:GLU:N	2	0.4
(1,54)	1:A:43:VAL:N	1:A:43:VAL:CA	1:A:43:VAL:C	1:A:44:GLU:N	17	0.4
(1,226)	1:A:74:ASP:C	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	12	0.4
(1,53)	1:A:42:TYR:C	1:A:43:VAL:N	1:A:43:VAL:CA	1:A:43:VAL:C	19	0.39
(1,150)	1:A:148:VAL:N	1:A:148:VAL:CA	1:A:148:VAL:C	1:A:149:GLU:N	15	0.39
(1,114)	1:A:121:PHE:N	1:A:121:PHE:CA	1:A:121:PHE:C	1:A:122:LYS:N	17	0.39
(1,72)	1:A:56:LEU:N	1:A:56:LEU:CA	1:A:56:LEU:C	1:A:57:GLU:N	14	0.38
(1,113)	1:A:120:HIS:C	1:A:121:PHE:N	1:A:121:PHE:CA	1:A:121:PHE:C	4	0.38
(1,105)	1:A:81:ASP:C	1:A:82:ILE:N	1:A:82:ILE:CA	1:A:82:ILE:C	2	0.38
(1,113)	1:A:120:HIS:C	1:A:121:PHE:N	1:A:121:PHE:CA	1:A:121:PHE:C	7	0.37
(1,356)	1:A:164:LYS:N	1:A:164:LYS:CA	1:A:164:LYS:C	1:A:165:CYS:N	13	0.36
(1,336) $(1,226)$	1:A:74:ASP:C	1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CA	1:A:75:LEU:C	3	0.36
(1,220) $(1,20)$	1:A:26:GLU:N	1:A:26:GLU:CA	1:A:26:GLU:C	1:A:27:LEU:N	19	0.36
(1,20)	1.11.20.010.11	1.11.20.010.011	1.11.20.010.0	1.11.21.110.11		ed on nert nage



Key	$egin{array}{c} ed \ from \ previous \ po \ & \mathbf{Atom-1} \end{array}$	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation (o)
(1,46)	1:A:39:LEU:N	1:A:39:LEU:CA	1:A:39:LEU:C	1:A:40:ILE:N	16	0.35
(1,152)	1:A:150:ILE:N	1:A:150:ILE:CA	1:A:150:ILE:C	1:A:151:PRO:N	17	0.35
(1,86)	1:A:69:CYS:N	1:A:69:CYS:CA	1:A:69:CYS:C	1:A:70:TRP:N	2	0.34
(1,46)	1:A:39:LEU:N	1:A:39:LEU:CA	1:A:39:LEU:C	1:A:40:ILE:N	18	0.34
(1,160)	1:A:155:GLN:N	1:A:155:GLN:CA	1:A:155:GLN:C	1:A:156:LYS:N	5	0.34
(1,322)	1:A:130:PRO:C	1:A:131:LYS:N	1:A:131:LYS:CA	1:A:131:LYS:C	8	0.33
(1,245)	1:A:94:ALA:N	1:A:94:ALA:CA	1:A:94:ALA:C	1:A:95:PRO:N	10	0.33
(1,31)	1:A:31:ARG:C	1:A:32:LEU:N	1:A:32:LEU:CA	1:A:32:LEU:C	9	0.32
(1,245)	1:A:94:ALA:N	1:A:94:ALA:CA	1:A:94:ALA:C	1:A:95:PRO:N	12	0.32
(1,152)	1:A:150:ILE:N	1:A:150:ILE:CA	1:A:150:ILE:C	1:A:151:PRO:N	19	0.32
(1,129)	1:A:135:ALA:C	1:A:136:HIS:N	1:A:136:HIS:CA	1:A:136:HIS:C	16	0.32
(1,114)	1:A:121:PHE:N	1:A:121:PHE:CA	1:A:121:PHE:C	1:A:122:LYS:N	12	0.31
(1,158)	1:A:154:ILE:N	1:A:154:ILE:CA	1:A:154:ILE:C	1:A:155:GLN:N	1	0.3
(1,114)	1:A:121:PHE:N	1:A:121:PHE:CA	1:A:121:PHE:C	1:A:122:LYS:N	19	0.3
(1,92)	1:A:72:ILE:N	1:A:72:ILE:CA	1:A:72:ILE:C	1:A:73:HIS:N	16	0.29
(1,77)	1:A:58:SER:C	1:A:59:ASN:N	1:A:59:ASN:CA	1:A:59:ASN:C	6	0.29
(1,64)	1:A:48:ASN:N	1:A:48:ASN:CA	1:A:48:ASN:C	1:A:49:ALA:N	11	0.29
(1,58)	1:A:45:ASN:N	1:A:45:ASN:CA	1:A:45:ASN:C	1:A:46:ASN:N	8	0.29
(1,21)	1:A:26:GLU:C	1:A:27:LEU:N	1:A:27:LEU:CA	1:A:27:LEU:C	4	0.29
(1,129)	1:A:135:ALA:C	1:A:136:HIS:N	1:A:136:HIS:CA	1:A:136:HIS:C	14	0.29
(1,31)	1:A:31:ARG:C	1:A:32:LEU:N	1:A:32:LEU:CA	1:A:32:LEU:C	14	0.28
(1,18)	1:A:25:ARG:N	1:A:25:ARG:CA	1:A:25:ARG:C	1:A:26:GLU:N	5	0.28
(1,158)	1:A:154:ILE:N	1:A:154:ILE:CA	1:A:154:ILE:C	1:A:155:GLN:N	13	0.28
(1,150)	1:A:148:VAL:N	1:A:148:VAL:CA	1:A:148:VAL:C	1:A:149:GLU:N	6	0.28
(1,166)	1:A:12:GLU:C	1:A:13:ILE:N	1:A:13:ILE:CA	1:A:13:ILE:C	13	0.27
(1,130)	1:A:136:HIS:N	1:A:136:HIS:CA	1:A:136:HIS:C	1:A:137:LEU:N	11	0.27
(1,89)	1:A:70:TRP:C	1:A:71:TYR:N	1:A:71:TYR:CA	1:A:71:TYR:C	14	0.26
(1,88)	1:A:70:TRP:N	1:A:70:TRP:CA	1:A:70:TRP:C	1:A:71:TYR:N	9	0.26
(1,245)	1:A:94:ALA:N	1:A:94:ALA:CA	1:A:94:ALA:C	1:A:95:PRO:N	13	0.26
(1,166)	1:A:12:GLU:C	1:A:13:ILE:N	1:A:13:ILE:CA	1:A:13:ILE:C	4	0.26
(1,153)	1:A:151:PRO:C	1:A:152:ASP:N	1:A:152:ASP:CA	1:A:152:ASP:C	16	0.26
(1,120)	1:A:125:TRP:N	1:A:125:TRP:CA	1:A:125:TRP:C	1:A:126:ALA:N	20	0.26
(1,68)	1:A:54:PHE:N	1:A:54:PHE:CA	1:A:54:PHE:C	1:A:55:ARG:N	6	0.25
(1,30)	1:A:31:ARG:N	1:A:31:ARG:CA	1:A:31:ARG:C	1:A:32:LEU:N	8	0.25
(1,245)	1:A:94:ALA:N	1:A:94:ALA:CA	1:A:94:ALA:C	1:A:95:PRO:N	14	0.25
(1,151)	1:A:149:GLU:C	1:A:150:ILE:N	1:A:150:ILE:CA	1:A:150:ILE:C	7	0.24
(1,129)	1:A:135:ALA:C	1:A:136:HIS:N	1:A:136:HIS:CA	1:A:136:HIS:C	3	0.23
(1,129)	1:A:135:ALA:C	1:A:136:HIS:N	1:A:136:HIS:CA	1:A:136:HIS:C	11	0.23
(1,277)	1:A:106:THR:N	1:A:106:THR:CA	1:A:106:THR:C	1:A:107:ALA:N	8	0.22
(1,113)	1:A:120:HIS:C	1:A:121:PHE:N	1:A:121:PHE:CA	1:A:121:PHE:C	17	0.22
(1,56)	1:A:44:GLU:N	1:A:44:GLU:CA	1:A:44:GLU:C	1:A:45:ASN:N	17	0.21
(1,92)	1:A:72:ILE:N	1:A:72:ILE:CA	1:A:72:ILE:C	1:A:73:HIS:N	11	0.2
(1,64)	1:A:48:ASN:N	1:A:48:ASN:CA	1:A:48:ASN:C	1:A:49:ALA:N	19	0.2
(1,245)	1:A:94:ALA:N	1:A:94:ALA:CA	1:A:94:ALA:C	1:A:95:PRO:N	18	0.2
(1,146)	1:A:146:LEU:N	1:A:146:LEU:CA	1:A:146:LEU:C	1:A:147:ALA:N	17	0.2
(1,129)	1:A:135:ALA:C	1:A:136:HIS:N	1:A:136:HIS:CA	1:A:136:HIS:C	4	0.2
(1,150)	1:A:148:VAL:N	1:A:148:VAL:CA	1:A:148:VAL:C	1:A:149:GLU:N	1	0.19
(1,128)	1:A:135:ALA:N	1:A:135:ALA:CA	1:A:135:ALA:C	1:A:136:HIS:N	5	0.18
(1,128)	1:A:135:ALA:N	1:A:135:ALA:CA	1:A:135:ALA:C	1:A:136:HIS:N	18	0.18
(1,142)	1:A:143:GLY:N	1:A:143:GLY:CA	1:A:143:GLY:C	1:A:144:PRO:N	12	0.17
(1,159)	1:A:154:ILE:C	1:A:155:GLN:N	1:A:155:GLN:CA	1:A:155:GLN:C	6	0.16
· · /				1		ed on nert nage



Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	$oxed{Violation} (\circ)$
(1,120)	1:A:125:TRP:N	1:A:125:TRP:CA	1:A:125:TRP:C	1:A:126:ALA:N	17	0.16
(1,67)	1:A:53:TRP:C	1:A:54:PHE:N	1:A:54:PHE:CA	1:A:54:PHE:C	18	0.14
(1,153)	1:A:151:PRO:C	1:A:152:ASP:N	1:A:152:ASP:CA	1:A:152:ASP:C	2	0.14
(1,140)	1:A:142:LEU:N	1:A:142:LEU:CA	1:A:142:LEU:C	1:A:143:GLY:N	8	0.14
(1,190)	1:A:22:PRO:N	1:A:22:PRO:CA	1:A:22:PRO:C	1:A:23:ARG:N	18	0.13
(1,150)	1:A:148:VAL:N	1:A:148:VAL:CA	1:A:148:VAL:C	1:A:149:GLU:N	7	0.13
(1,129)	1:A:135:ALA:C	1:A:136:HIS:N	1:A:136:HIS:CA	1:A:136:HIS:C	12	0.13
(1,98)	1:A:78:TYR:N	1:A:78:TYR:CA	1:A:78:TYR:C	1:A:79:GLU:N	20	0.12
(1,231)	1:A:85:ASP:C	1:A:86:ILE:N	1:A:86:ILE:CA	1:A:86:ILE:C	14	0.12
(1,146)	1:A:146:LEU:N	1:A:146:LEU:CA	1:A:146:LEU:C	1:A:147:ALA:N	11	0.12
(1,28)	1:A:30:GLN:N	1:A:30:GLN:CA	1:A:30:GLN:C	1:A:31:ARG:N	16	0.11
(1,104)	1:A:81:ASP:N	1:A:81:ASP:CA	1:A:81:ASP:C	1:A:82:ILE:N	11	0.09
(1,34)	1:A:33:LYS:N	1:A:33:LYS:CA	1:A:33:LYS:C	1:A:34:GLU:N	19	0.08
(1,245)	1:A:94:ALA:N	1:A:94:ALA:CA	1:A:94:ALA:C	1:A:95:PRO:N	5	0.08
(1,166)	1:A:12:GLU:C	1:A:13:ILE:N	1:A:13:ILE:CA	1:A:13:ILE:C	7	0.08
(1,151)	1:A:149:GLU:C	1:A:150:ILE:N	1:A:150:ILE:CA	1:A:150:ILE:C	17	0.08
(1,120)	1:A:125:TRP:N	1:A:125:TRP:CA	1:A:125:TRP:C	1:A:126:ALA:N	15	0.08
(1,142)	1:A:143:GLY:N	1:A:143:GLY:CA	1:A:143:GLY:C	1:A:144:PRO:N	5	0.07
(1,74)	1:A:57:GLU:N	1:A:57:GLU:CA	1:A:57:GLU:C	1:A:58:SER:N	19	0.06
(1,64)	1:A:48:ASN:N	1:A:48:ASN:CA	1:A:48:ASN:C	1:A:49:ALA:N	7	0.06
(1,35)	1:A:33:LYS:C	1:A:34:GLU:N	1:A:34:GLU:CA	1:A:34:GLU:C	16	0.06
(1,113)	1:A:120:HIS:C	1:A:121:PHE:N	1:A:121:PHE:CA	1:A:121:PHE:C	3	0.06
(1,84)	1:A:68:LYS:N	1:A:68:LYS:CA	1:A:68:LYS:C	1:A:69:CYS:N	10	0.05
(1,72)	1:A:56:LEU:N	1:A:56:LEU:CA	1:A:56:LEU:C	1:A:57:GLU:N	17	0.05
(1,151)	1:A:149:GLU:C	1:A:150:ILE:N	1:A:150:ILE:CA	1:A:150:ILE:C	15	0.04
(1,64)	1:A:48:ASN:N	1:A:48:ASN:CA	1:A:48:ASN:C	1:A:49:ALA:N	15	0.03
(1,130)	1:A:136:HIS:N	1:A:136:HIS:CA	1:A:136:HIS:C	1:A:137:LEU:N	18	0.02
(1,89)	1:A:70:TRP:C	1:A:71:TYR:N	1:A:71:TYR:CA	1:A:71:TYR:C	11	0.01
(1,151)	1:A:149:GLU:C	1:A:150:ILE:N	1:A:150:ILE:CA	1:A:150:ILE:C	14	0.01

